

バックエンド部会セッション

「ガラス固化体の実力は？—地層処分におけるガラス固化体性能評価の現状—」

(4) ガラス固化体の実力は？ —計算科学の観点から—

(4) In an aspect of computational modeling and simulation

*千葉 保¹¹ 日揮株式会社

1. はじめに

ガラスの原子配列構造、あるいはガラスの長期性能に係る諸現象において、近年の計算機能力の向上に伴い、従来は適用が困難であった計算負荷の大きいシミュレーションも試みられるようになってきている。本報告では、それらの手法について概説する。

2. ガラスの微視的構造とガラスの溶解

2-1. 第一原理計算

第一原理計算 (ab initio calculation) では、原子レベルで化学反応をシミュレートするものであり、非時間依存型のシュレディンガー方程式を解くことが求められる。ガラスの分野においては、Si-O-Si や Si-O-Al の結合を水、 H_3O^+ 、 OH^- が切断する際の活性化エネルギーの計算などへの適用事例が報告されている。

2-2. 分子動力学

分子動力学では、第一原理計算よりは大きな系を対象とし、通常、多体間のポテンシャルを相互作用の駆動力として設定する。ガラスの分野への適用例としては、熔融から冷却までの遷移過程をシミュレートすることで、ガラスの構造を再現するのに広く用いられている。シミュレーションからは、ホウ素 B の異なる配位 (3 配位 B と 4 配位 B) の存在比率など、主要元素の基本構造に関する情報を得ることができる。

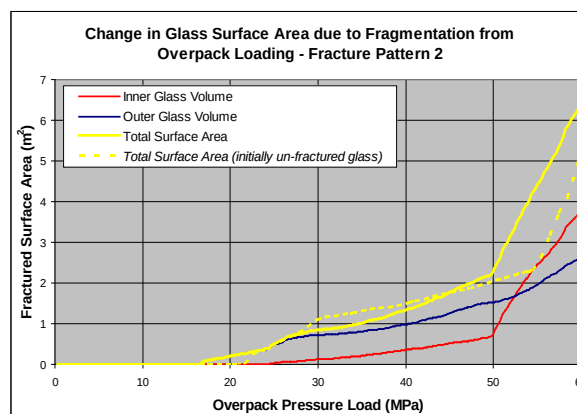
2-3. モンテカルロシミュレーション

ガラスの分野におけるモンテカルロシミュレーションへの適用例としては、以下が挙げられる。ガラスの初期構造を格子状に構築した上で、水分子との接触による Si-O-Si や B-O-B などの結合の解離 (及び再結合) を統計論的な確率過程としてとらえ、ガラスの溶解と変質層の形成過程をシミュレートするものである。

今後の課題としては、第一原理計算でマイクロ構造及び解離・再結合のエネルギーを算出、分子動力学で基本構造を決定した上でモンテカルロ法を適用する、といった上記手法の統合化が期待される。

3. ガラスの割れ

オーバーパックの腐食膨張による応力の増大で生じるガラス固化体の割れの進展は、FDEM (Finite and Discrete Element Method) 法によってシミュレートすることが出来る。割れによって新たに生じたガラス表面積の増大をガラスに加わる応力の大きさの関数として示したのが右図である。①表面積の増大は初期の表面積の数倍程度であること、②表面積の増大は初期の割れ (冷却時) を考慮した場合でも必ずしも顕著に変化する訳ではないこと、が示されている。

* Tamotsu Chiba¹, ¹JGC Corporation