

ベントナイト中における重水の拡散および活性化エネルギーに対する間隙構造の影響

Effects of pore structure on diffusivity of deuterated water and its activation energy in bentonite

鈴木 覚[1]

Satoru Suzuki[1]

[1] 産総研

[1] AIST

圧縮ベントナイト中における重水の実効拡散係数の活性化エネルギーを取得するために、温度 298-333 K の条件下で透過拡散試験を行った。クニピアFベントナイトを圧縮成型（乾燥密度 0.9 および 1.35 Mg/m³）すると、スメクタイト粒子が圧縮方向に垂直に選択的配向性を示す。そこで、配向方向に平行な方向と垂直な方向のそれぞれの拡散方向について拡散試験を行った。重水の実効拡散係数は異方的であり、その乾燥密度に対する変化はトリチウム水の結果と調和的であった。また、実効拡散係数の活性化エネルギーは、19-25 kJ/mol 程度であり、バルク水中の重水の拡散の活性化エネルギー（18 kJ/mol）よりもやや大きな値であった。スメクタイト-水混合物の分子動力学シミュレーションにより、水分子の活性化エネルギーの間隙水中における空間分布を計算したところ、スメクタイト表面近傍（2nm 以内）の水の活性化エネルギー（18-23 kJ/mol）は、沖合のそれ（16 kJ/mol）に比べ大きかった。拡散経路の乾燥密度に対する変化を考慮すると、シミュレーションの結果は、乾燥密度とともに活性化エネルギーが増加することを示しており、拡散試験の結果をよく再現していた。