

DOI: 10.11779/CJGE20230293

高压实膨润土多尺度膨胀力特性研究进展

李裕诚¹, 陈永贵^{*1}, 刘丽², 叶为民¹, 王琼¹

(1. 同济大学土木工程学院地下建筑与工程系, 上海 200092; 2. 上海师范大学建筑工程学院, 上海 201418)

摘要: 作为高放废物处置库的工程屏障, 高压实膨润土在服役过程中的膨胀力特性不仅受其多尺度结构影响, 还将长期受到近场环境中热-水-化多场耦合的作用。在阐述高压实膨润土多尺度结构的基础上, 系统总结了高压实膨润土多尺度结构单元膨胀力特性的最新研究进展。研究表明, 高压实膨润土在微观、细观、宏观尺度上分别存在蒙脱石层叠体、集合体以及单元体试样的结构单元。微观尺度上, 主要采用分子动力学模拟的方法, 探讨了蒙脱石层叠体层间水化膨胀特性, 揭示了蒙脱石膨胀力发展的微观机制; 细观尺度上, 采用颗粒粗化的方式对蒙脱石集合体的弹性模量进行计算, 构建了不同干密度下蒙脱石集合体的结构模型; 宏观尺度上, 对近场环境作用下的高压实膨润土开展恒体积膨胀力试验, 揭示了侧限条件下高压实膨润土膨胀力的演化规律。目前, 在各个尺度上对高压实膨润土膨胀力的研究工作相对独立, 各尺度之间的力学特性存在显著的尺度效应, 且膨胀力的多尺度传递机制尚不明确。因此, 对蒙脱石层叠体、集合体以及高压实膨润土在不同尺度上的膨胀力特性开展系统研究并建立膨胀力的多尺度模型, 将是今后研究的重点。

关键词: 高放射性废物; 高压实膨润土; 膨胀力; 微观-细观-宏观

中图分类号: TU41

文献标识码: A

文章编号: 1000-4548(2024)11-2457-08

作者简介: 李裕诚(1994—), 男, 河南驻马店人, 博士, 主要从事非饱和土力学方面的研究工作。E-mail: liyucheng@tongji.edu.cn。

Advances in studies of multi-scale swelling pressure of highly compacted bentonite

LI Yucheng¹, CHEN Yonggui¹, LIU Li², YE Weimin¹, WANG Qiong¹

(1. Department of Geotechnical Engineering, College of Civil Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China; 2. School of Civil Engineering, Shanghai Normal University, Shanghai 201418, China)

Abstract: The swelling pressure of highly compacted bentonite, as the engineering barrier in the deep geological repository, is affected by its multi-scale microstructure as well as the near-field coupled thermo-hydro-chemical environment during its service period. Based on the analyses of multi-scale structure of the highly compacted bentonite, a thorough review of the multi-scale swelling pressure of compacted bentonite is introduced. It is indicated that the highly compacted bentonite consists of montmorillonite tactoid, aggregate and the unit specimen at different scales. At the microscale level, the molecular dynamics simulation methods are used to simulate the hydration expansion of montmorillonite interlayers and to elucidate the micro-mechanism of the development of swelling pressure of montmorillonite. At the mesoscale level, the elastic modulus of the montmorillonite aggregates is calculated by particle coarsening, and the structural model for montmorillonite aggregates at different dry densities is established. At the macroscale level, the constant volume swelling pressure tests are conducted to reveal the development of the swelling pressure of the high-density compacted bentonite under confined conditions in the near-field environment. Currently, the researches on the swelling pressure of the highly compacted bentonite at different scales are relatively independent, and there is significant size effect on the swelling pressure among different scales. The multi-scale coevolution mechanism of swelling pressure is not yet clear. Therefore, the systematic studies of the swelling pressure characteristics of montmorillonite tactoid, aggregate and highly compacted bentonite and the establishment of a multi-scale swelling pressure model will be the focus of future researches.

Key words: high-level radioactive waste; highly compacted bentonite; swelling pressure; microscale-mesoscale-macroscale

基金项目: 国家杰出青年科学基金项目(42125701); 国家自然科学基金项目(41977232); 上海市教委科研创新计划项目(2023ZKZD26); 上海市科委科研创新项目(22DZ2201200)

收稿日期: 2023-04-06

***通信作者** (E-mail: cyg@tongji.edu.cn)

0 引言

作为中国“十三五”规划的百项重点工程之一，北山处置库地下实验室的开工建设标志着中国高放废物处置工作迈入了新阶段^[1]。目前中国已预选定内蒙古高庙子（GMZ）膨润土为缓冲材料，甘肃北山为处置库建设场地^[2-3]。以蒙脱石为主要成分的高压实膨润土由于具有高膨胀性、强吸附性、低渗透性以及自愈合性，被中外学者视为高放废物处置库的理想工程屏障^[4-5]。随着围岩地下水的入渗，高压实膨润土水化膨胀，起到封闭施工接缝、抵抗原位围岩应力、防止废物罐的倾斜和损坏以及保证工程屏障的完整性等作用^[6-8]。然而，在处置库运营期间，高压实膨润土的膨胀特性不但受到自身多尺度微观结构的影响，而且势必长期处于核素衰变热、围岩地下水入渗以及地下水化学成份所形成的热-水-化耦合作用的复杂环境中，其膨胀力性能也随之变化甚至退化，最终威胁处置库的安全运营^[7, 9-13]。

作为膨润土的主要矿物成分，蒙脱石的物理化学特性直接决定了高压实膨润土的膨胀力特性。然而，在高压实膨润土中，蒙脱石还形成了层叠体和集合体等多尺度结构单元^[14-16]，膨胀力呈现显著的尺度效应。研究表明，膨润土水化膨胀主要可以分为蒙脱石晶层膨胀、层叠体裂解以及扩散双电层膨胀3个阶段。在膨润土水化初始阶段，晶层膨胀占主导地位，体现在膨胀力的上升阶段；随着吸力降低，蒙脱石层叠体将发生裂解、集合体间孔隙坍塌，体现在膨胀力的回落；最后，当蒙脱石的双电层不断扩张，膨胀力也随之上升最后达到稳定状态^[17-19]。因此，高压实膨润土的膨胀力时程曲线呈现典型的“双峰”特征。针对近场环境作用下高压实膨润土的多尺度膨胀力特性，学者们开展了大量的研究工作，主要集中在两个方面：①利用分子动力学模拟对蒙脱石层叠体和集合体进行微观力学性能研究^[20-27]；②利用恒体积膨胀力测试仪对高压实膨润土在侧限条件下的膨胀力特性进行测试^[28-34]。大量的前期工作阐明了蒙脱石层叠体和高压实膨润土在不同尺度上的膨胀力特性，取得了丰富的研究成果。然而，当前的研究工作局限于独立探究单一尺度的性能，并且微观膨胀力模拟和宏观力学性能之间往往存在着巨大的差距，膨胀力的传递机制尚不清晰，缺乏有效的模型联系高压实膨润土不同尺度间的膨胀力特性。

本文在阐述高压实膨润土多尺度微观结构的基础上，系统总结了其多尺度膨胀力特性的研究工作，揭示多场作用下膨润土膨胀力变化的影响机制，分析现有研究工作的不足以及今后研究的主要方向，以期为中国高放废物处置库工程屏障的设计、建设和长期运

营提供理论基础和科学依据。

1 高压实膨润土的多尺度结构

如图1所示，目前普遍认为高压实膨润土的多尺度结构主要包括微观尺度上由多个蒙脱石片层（platelet）形成的蒙脱石层叠体（tactoid），细观尺度上多个蒙脱石层叠体形成的蒙脱石集合体（aggregate）以及宏观尺度上多个蒙脱石集合体和伴生矿物（如石英和长石等）组成的高压实膨润土^[14-16]。

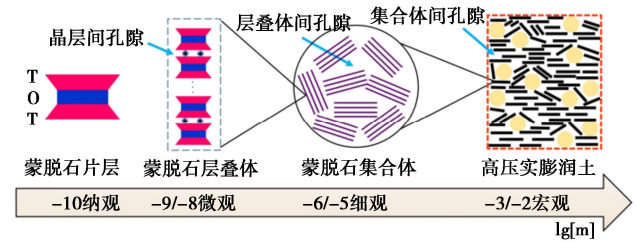


图1 高压实膨润土多尺度微观结构概念图

Fig. 1 Schematic illustration of multi-scale structure of highly compacted bentonite

通过对Champlain黏土开展压汞试验分析孔隙结构，Delage等^[15]指出黏土内部的孔隙分为：集合体内孔隙与集合体间孔隙两种（图2）。其中，集合体内部孔隙又包括层叠体间孔隙和晶层间孔隙。层叠体间孔隙和集合体间孔隙结构可由压汞试验测得，但是受晶层间孔隙大小的限制，常规的微观结构表征手段（如扫描电镜和压汞实验）无法对晶层间的孔隙进行定量分析^[35]。膨润土的压实度并不会引起集合体内的孔隙结构改变，只会对集合体间的孔隙结构造成影响，孔隙界限在120~150 nm^[15]。因此，在压汞试验结果中高压实膨润土的孔隙结构也呈“双峰”特征。

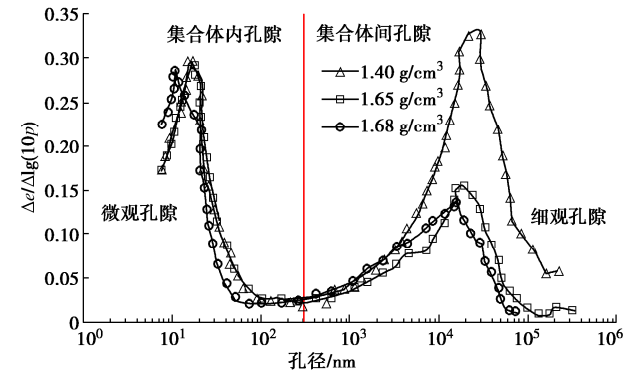


图2 高压实膨润土双孔结构特征^[35]

Fig. 2 Dual-pore structure of highly compacted bentonite^[35]

2 高压实膨润土的多尺度膨胀力特性

2.1 蒙脱石层叠体的膨胀力特性

如图3所示，蒙脱石晶体由两个硅氧四面体（tetrahedron）和一个铝氧八面体（octahedron）组成其最基本的单元晶层，其中硅氧四面体中的Si⁴⁺可被

Al^{3+} 置换, 铝氧八面体中的 Al^{3+} 可被 Mg^{2+} , Fe^{3+} , Fe^{2+} , Li^{+} 等置换, 导致晶层表面带负电, 需要吸附 Na^{+} , Ca^{2+} 等层间阳离子来平衡晶层中的负电荷^[36]。蒙脱石晶层之间通过范德华力和静电力连接, 这种结合较弱且容易被阳离子水化能分开, 因此水分子易于进入其层间域中, 并根据层间域中不同数量的水分子以及不同的层间阳离子种类, 在 Z 方向上形成不同大小的层间域。由于单个蒙脱石片层大小的限制 (9.6 Å), 目前的试验技术手段很难对蒙脱石层叠体的膨胀力特性直接开展相关研究。因此, 学者们通常利用分子动力学模拟对蒙脱石层叠体的膨胀力特性开展研究工作。

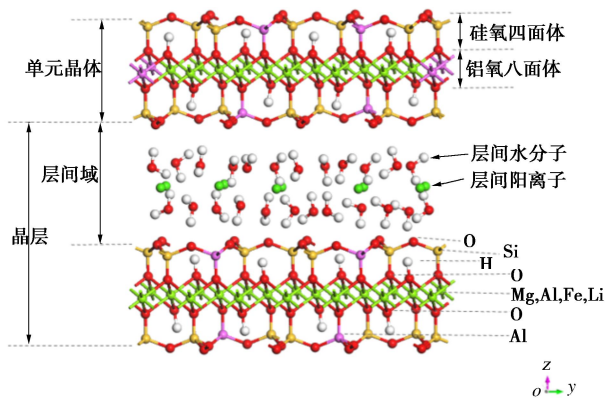


图 3 蒙脱石片层结构示意图

Fig. 3 Schematic illustration of montmorillonite platelet

(1) 温度的影响

温度是影响蒙脱石层叠体水化膨胀力的因素之一, 温度的变化将引起蒙脱石层间距的增加, 改变水分子在蒙脱石层间的运移特性。在 300~600 K, Akinwunmi 等^[37]指出水分子的运移速度和蒙脱石层叠体的膨胀力随着温度的升高而增加, 并且该现象在蒙脱石干密度较高时更为明显。然而, 也有学者持相反观点, Yang 等^[38]指出蒙脱石层叠体的膨胀力随着温度的升高而降低, 然而在不同的晶层间距时由不同的机理所主导。当晶层间距小于 1.8 nm 时, 膨胀力的减小主要是由于水分子密度的降低; 当晶层间距大于 2.2 nm 时, 则是由于双电层斥力的减弱所致。

(2) 化学条件的影响

地下水的化学成分对蒙脱石层叠体膨胀力的影响机理在于层间阳离子的交换以及双电层的抑制。其中, 层间阳离子对蒙脱石层叠体膨胀力的影响主要与其化合价和离子直径有关。

在分子动力学模拟中, 蒙脱石单元晶胞内所有原子的重量 (包括层间阳离子) 与它们所占体积之间的比值被定义为蒙脱石层叠体的干密度。对于常见的钠基和钙基蒙脱石, Akinwunmi 等^[39]指出在干密度较低时, 钠基蒙脱石层叠体的水化膨胀力大于钙基蒙脱石层叠体; 当干密度较高时, 则趋势相反 (图 4)。通过

进一步对 Li^{+} , Na^{+} , K^{+} , Rb^{+} , Cs^{+} 5 种不同层间阳离子的蒙脱石层叠体开展分子动力学模拟, Fayoyiwa 等^[40]发现蒙脱石的膨胀力随着层间阳离子半径的增加而减小。其中比较特殊的是 K^{+} 离子, 因其离子半径与硅氧四面体中六元环孔隙一致, 形成表面络合物, 抑制了蒙脱石的膨胀。

盐溶液对蒙脱石层叠体的影响在于蒙脱石层间阳离子的交换和对扩散双电层的抑制。通过研究不同干密度和不同浓度的 NaCl 和 CaCl_2 溶液中钠基和钙基蒙脱石层叠体的膨胀力变化规律, Akinwunmi 等^[39]发现蒙脱石层叠体的膨胀力随着离子浓度的升高而降低, 但在干密度较高时, 钙基蒙脱石层叠体膨胀力受离子浓度的影响较小。Sun 等^[41]发现当钠基蒙脱石存在于 CaCl_2 溶液中时, 层间的钠离子会被钙离子逐渐交换, 形成钙基蒙脱石, 因此膨胀力也随之下降。

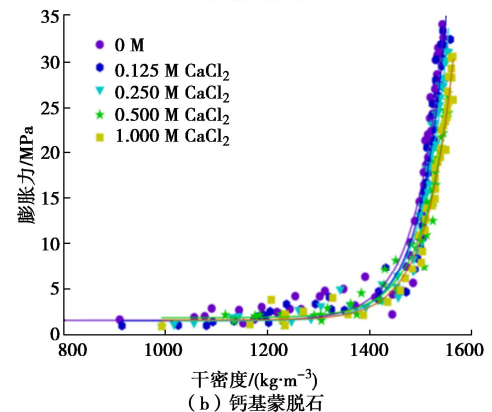
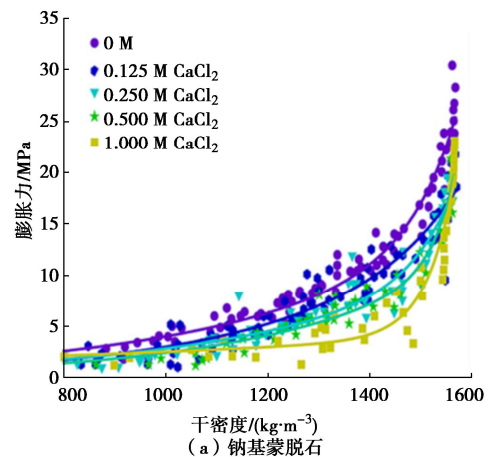


图 4 不同干密度下钠基和钙基蒙脱石的膨胀力^[39]

Fig. 4 Swelling pressures of Na- and Ca-montmorillonite at different dry densities^[39]

综上所述, 分子动力学模拟在研究蒙脱石层叠体膨胀力特性以及晶层结构方面取得了显著的成效, 但由于所使用的蒙脱石模型和力场 (force field) 等不同的参数, 蒙脱石层叠体的膨胀力离散性较大, 只能得到定性的机理分析而无法得到定量的实验结果。另外, 目前尚无描述蒙脱石晶体发生破坏的力场以及模型, 因此关于碱性环境对蒙脱石层叠体膨胀力特性的影响

机制尚处于空白阶段，是今后重要的研究方向。

2.2 蒙脱石集合体的细观力学特性

如图 1 所示，在天然土体或高压实膨润土当中，蒙脱石层叠体通常聚集在一起形成高压实膨润土的细观结构—蒙脱石集合体。作为高压实膨润土多尺度结构中连接微观与宏观结构的桥梁，蒙脱石集合体的水化膨胀特征对理解高压实膨润土水化膨胀时膨胀力的回落起着重要作用。然而，目前尚无学者对蒙脱石集合体的膨胀力特性开展研究工作，仅有少数关于蒙脱石集合体弹性刚度系数的研究工作。

利用分子动力学模拟蒙脱石层叠体的膨胀力特性目前取得了丰富的成果，然而对于蒙脱石集合体来说，分子动力学模拟的尺度显然不能满足对蒙脱石集合体力学性质探索的要求。因此，有学者提出通过利用“假原子”（pseudo-atoms）代表原子团，保持其本身性质不变的同时，将蒙脱石片层颗粒粗化（coarse-grained），对蒙脱石集合体的力学特性进行研究^[25-27, 42]。

如图 5 所示，每一个圆片代表着粗化之后的蒙脱石晶层，不同的颜色代表蒙脱石晶层在三维空间中不同的倾角。当不同大小的蒙脱石片层被随机的填充到正方体中并达到热力学稳定状态时，对其施加外力，并根据应力-应变关系变计算出蒙脱石集合体在不同压力下的弹性刚度系数。

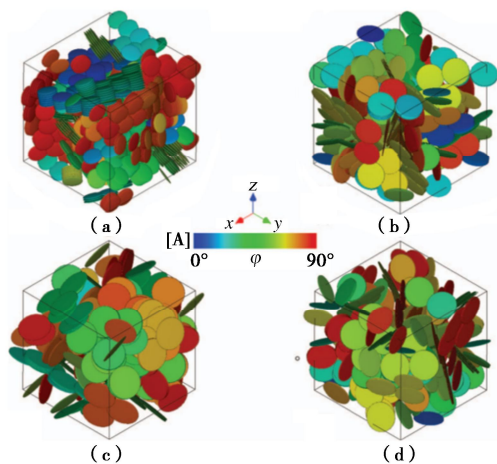


图 5 不同模拟条件下的平衡状态^[25]

Fig. 5 Equilibrated systems from different types of simulations^[25]

表 1 总结了蒙脱石集合体在不同压力状态下弹性刚度的变化规律。除 C_{11} 方向外，蒙脱石层叠体的弹性刚度与层叠体的直径关系较小，但随着外界压力的增加（即孔隙率的减小和干密度的增加），蒙脱石层叠体的弹性刚度显著增加。

综上所述，由于蒙脱石集合体微观结构的异质性以及晶层膨胀和渗透膨胀之间缺乏严格的界限，目前对于蒙脱石集合体膨胀力特性的研究工作局限于其弹性刚度系数的研究，尚无相关模拟或试验对蒙脱石集合体的水化、裂解以及膨胀等过程进行研究。因此，

对蒙脱石集合体细观膨胀力特性的研究工作是今后研究的重点方向。

表 1 蒙脱石集合体的弹性刚度系数^[25]

Table 1 Elastic constants of montmorillonite aggregates ^[25]						
直径/Å	500	1000	1000	1000	1000	1000
压力/atm	1	1	10	50	300	800
C_{11}	0.51	0.98	4.07	6.42	14.17	29.16
C_{12}	0.13	0.14	0.53	1.24	4.12	8.80
C_{44}	0.10	0.08	0.44	0.66	1.91	4.68

2.3 高压实膨润土的膨胀力特性

在宏观试验中，高压实膨润土的膨胀力测试已经是一项比较成熟的技术手段，通常将膨润土粉末压制不同干密度状态下的单元体试样，并借助恒体积膨胀力试验对其在侧限条件下的膨胀力特性开展研究。

(1) 温度场的影响

由于高放废物被封存后仍将持续衰变并放热，在工程屏障中形成温度场，引起高压实膨润土膨胀力的变化。温度升高将引起蒙脱石晶层间阳离子的脱水以及导致的晶层膨胀的收缩，但是促进了蒙脱石的渗透膨胀。这两种机制所叠加的净效应将体现在膨润土膨胀力的变化当中^[43]。

表 2 总结了不同种类膨润土膨胀力的温度效应。通过对高庙子膨润土开展膨胀力试验，Zhang 等^[44]发现高庙子膨润土的膨胀力随着温度的升高而降低。不同温度下，FEBEX^[43]、MX-80^[34]、Gyeongju^[45]膨润土的膨胀力亦随着温度的升高而降低。然而也有学者持相反观点，项国圣等^[46-47]，Xiang 等^[47]发现 GMZ 膨润土的膨胀力随着温度的升高而增加，且针对日本 Kunigel-V1^[48]和印度 Bikaner 膨润土^[49]的膨胀力试验也得到了相似的结论。

表 2 高压实膨润土膨胀力的温度效应

Table 2 Temperature effects on swelling pressure of compacted bentonite		
膨润土种类	膨胀力的温度效应	文献
GMZ	升高/降低	[44, 46, 47]
FEBEX	降低	[43]
MX-80	降低	[34]
Gyeongju	降低	[45]
Kunigel-V1	升高	[48]
Bikaner	升高	[49]

目前，温度对膨润土膨胀力的影响尚无定论，两种观点都有相关的理论作为支撑。因此，膨润土膨胀力的温度效应需要进一步开展系统性的研究工作。

(2) 化学场的影响

a) 地下水化学成分

研究表明，盐溶液将影响蒙脱石的层间阳离子和抑制双电层的扩张，但抑制程度与膨润土的干密度、层间阳离子以及化学溶液浓度有关。

图 6 总结了 4 种膨润土在不同浓度盐溶液作用下

膨胀力的变化规律。一般来说, 膨润土的膨胀力随着盐溶液浓度的升高而降低。但是当膨润土的干密度较高时, 盐溶液的浓度对膨胀力的影响较小, 尤其是钙基膨润土^[50]。盐溶液中阳离子的种类对膨胀力也有一定的影响。研究表明, 钠基蒙脱石在 NaCl 溶液中是稳定的, 而在 KCl 溶液中出现了蒙脱石的溶解和伊利石的沉淀, 且膨胀力损失较大^[51]。

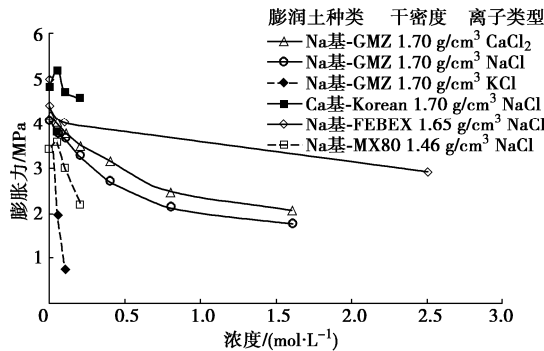


图 6 不同盐溶液作用下压实膨润土膨胀力特性^[29, 50-52]

Fig. 6 Influences of saline solutions on swelling pressure of compacted bentonite at different dry densities^[29, 50-52]

b) 碱性溶液及 pH 影响

实际上, 处置库建设中还会使用大量的混凝土及水泥基材料。因此, 高压实膨润土还会受到混凝土衰解产生高碱性溶液的侵蚀, 造成蒙脱石晶体结构的破坏和高压实膨润土微观结构的改变, 引起干密度的减小和膨胀力的衰减^[17, 31, 53-55]。如图 7 所示, 在不同阶段, 混凝土衰解液的成分有所不同。在衰解早期将形成 pH 高达 13.5 的碱性环境, 随着衰解的持续, 最终其 pH 值趋于中性^[54]。

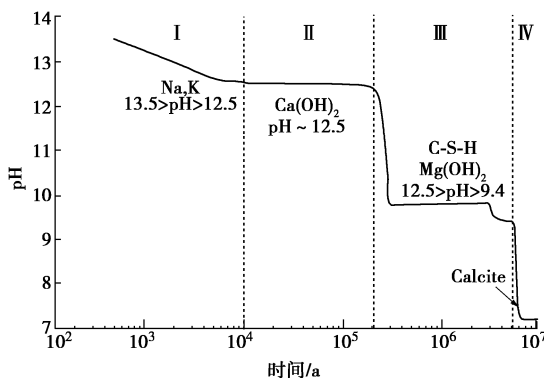


图 7 不同时期混凝土衰解液的化学成分^[54]

Fig. 7 Chemical compositions of concrete pore solution in different periods^[54]

Ye 等^[32]研究了不同浓度 NaOH 溶液对 GMZ 膨润土膨胀力的影响, 发现膨胀力随着 pH 升高而降低。不同碱溶液对膨润土膨胀力的影响机制也有所不同, Fernández 等^[56]指出即使当 Ca(OH)₂ 的 pH 值达到 14.4 时, 除了离子交换外, 膨润土并不会与其发生化学反应; 在 pH 值较高的 NaOH 溶液中, 蒙脱石将溶解产

生新的次生矿物(如伊利石等)。通过配置不同时期的混凝土孔隙析出液, Liu 等^[31, 53]发现在高碱性溶液入渗的情况下, 膨润土的水化膨胀还将出现第 4 个阶段: 即膨润土膨胀力到达第二个峰值之后, 随着高碱性溶液的入渗, 膨胀力呈现显著的弱化趋势。该现象的主要原因是由于蒙脱石在 OH⁻ 的作用下, 晶体结构发生破坏, 引起高压实膨润土微观结构的重新排列。

2.4 微观水化膨胀模型

目前关于膨润土的膨胀模型主要有晶层膨胀模型和扩散双电层模型。其中, 晶层膨胀模型主要考虑当水分子进入蒙脱石层间时, 会形成不同的水分子层状结构, 而扩散双电层模型主要考虑了带电表面与反离子的相互作用所形成的双电子层结构。

(1) 晶层膨胀模型

目前普遍认为膨润土水化膨胀初期, 晶层膨胀占主导机制, 水分子进入到蒙脱石晶层间将形成 1, 2, 3, 4 层水分子层, 分别对应着 12.5, 15.0, 17.5, 20.0 Å 的层间距。Laird^[57]从能量角度出发, 对晶层膨胀进行定量分析, 指出膨胀力 G_s 为排斥能和吸引能之间的差值:

$$G_s = G_{hi} + G_{hs} + G_b - G_{ai} - G_v \quad (1)$$

式中: G_{hi} 为阳离子水化能; G_{hs} 为晶层表面水化能; G_b 为 Born 斥能; G_{ai} 为库伦吸引能; G_v 为范德华吸引能。通常认为静电吸引力、范德华吸引力和水化斥力之间的动态平衡过程控制着晶层膨胀的过程。

(2) 扩散双电层模型

由于蒙脱石表面带负电, 当在溶液中时, 表面将吸引正电荷形成吸附层 (stern layer), 且正电荷的浓度随着与黏土表面距离的增加而减少, 并与阴离子一起形成扩散电子层 (diffuse layer)。假设反离子浓度服从 Boltzmann 分布, 则双电层厚度可由下式计算:

$$h = \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_0 R T}{2 F^2 c z^2}} \quad (2)$$

式中: h 为 Debye 长度, ϵ_1 为相对介电常数; F 为 Faraday 常数; R 为通用气体常数; T 为绝对温度; c 为离子体积浓度; z 为溶液中离子的化合价。

根据 DLVO 理论, 当两个蒙脱石片层靠近时, 由于扩散双电层的重叠将产生斥力:

$$P_{DDL} = 2 n h T (\cosh \mu - 1) \quad (3)$$

式中: n 为溶液中离子浓度; h 为双电层厚度。

蒙脱石片层在范德华力的作用下又会相互吸引:

$$P_v = \frac{H}{24\pi} \left[\frac{1}{2d^2} + \frac{1}{(2\lambda + 2d)^2} - \frac{2}{(\lambda + 2d)^2} \right] \quad (4)$$

式中: H 为 Hamaker 常数; λ 为晶层厚度; d 为晶层间距的一半。当力场平衡时, 膨润土膨胀力为

$$P_T = P_{DDL} - P_v \quad (5)$$

以上两种模型都较好的描述了蒙脱石的水化膨胀机理,然而晶层膨胀和扩散双电层膨胀之间的界限尚不清晰,无法对层叠体的裂解和集合体间孔隙的坍塌等现象进行定量表述,尚不能考虑温度和蒙脱石相变等影响因素。

3 结论及建议

(1)在微观尺度上,学者通过分子动力学模拟对蒙脱石层叠体在热-水-化作用下,微观结构和膨胀力特性的变化规律开展研究,揭示了多场作用下蒙脱石层叠体膨胀力的演化机理。然而,分子动力学模拟的结果很大程度上取决于所使用的力场,模拟结果存在较大的离散型,且无相关试验可以对分子动力学的模拟结果进行验证。

(2)在细观尺度上,颗粒粗化有效的解决了分子动力学模拟在尺度上的局限性,然而仅有少数学者对不同干密度下蒙脱石集合体的弹性刚度系数开展了研究工作,且由于模拟方法和试验手段上的局限性,目前尚无针对蒙脱石集合体膨胀力特性的相关研究工作。

(3)在宏观尺度上,针对高压实膨润土膨胀力特性的研究取得了丰富的成果,系统的阐明了多场环境作用下,高压实膨润土的膨胀力演化规律。然而目前的膨胀模型无法对高压实膨润土的膨胀力进行准确的预测,尚不能从微/细观尺度对蒙脱石集合体的裂解和孔隙的坍塌等微观结构的演化进行模拟。

综上所述,高压实膨润土多尺度结构单元的膨胀力特性存在着显著的尺寸效应,且现存研究相对独立,多尺度单元之间的膨胀力传递机制尚不清晰。因此,在多场耦合作用下,探究高压实膨润土多尺度膨胀力的演化机理、阐明膨胀力的传递机制、建立高压实膨润土的多尺度膨胀力模型是今后值得探索的方向。

参考文献:

- [1] 赵星光,王 驹,秦向辉,等.中国高放废物地质处置地下实验室场址深部岩体地应力测量及工程应用[J].中南大学学报(自然科学版),2021,52(8):2634-2645.(ZHAO Xingguang, WANG Ju, QIN Xianghui, et al. In-situ stress measurements at depth and engineering application at China's underground research laboratory site for high-level radioactive waste disposal[J]. Journal of Central South University (Science and Technology), 2021, 52(8): 2634-2645. (in Chinese))
- [2] 崔玉军,陈 宝.高放核废物地质处置中工程屏障研究新进展[J].岩石力学与工程学报,2006,25(4):842-847.(CUI Yujun, CHEN Bao. Recent advances in research on engineered barrier for geological disposal of high-level radioactive nuclear waste[J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2006, 25(4): 842-847. (in Chinese))
- [3] 王 驹,苏 锐,陈 亮,等.中国高放废物地质处置地下实验室场址筛选[J].世界核地质科学,2022,39(1):1-13.(WANG Ju, SU Rui, CHEN Liang, et al. Site selection of underground research laboratory for geological disposal of high-level radioactive waste in China[J]. World Nuclear Geoscience, 2022, 39(1): 1-13. (in Chinese))
- [4] 叶为民,刘樟荣,崔玉军,等.膨润土膨胀力时程曲线的形态特征及其模拟[J].岩土工程学报,2020,42(1):29-36.(YE Weimin, LIU Zhangrong, CUI Yujun, et al. Features and modelling of time-evolution curves of swelling pressure of bentonite[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2020, 42(1): 29-36. (in Chinese))
- [5] TANG A M, CUI Y J, LE T T. A study on the thermal conductivity of compacted bentonites[J]. Applied Clay Science, 2008, 41(3/4): 181-189.
- [6] BÖRGESSON L, CHIJIMATSU M, FUJITA T, et al. Thermo-hydro-mechanical characterisation of a bentonite-based buffer material by laboratory tests and numerical back analyses[J]. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 2001, 38(1): 95-104.
- [7] DONG X X, CHEN Y G, YE W M, et al. Effect of initial suction on the stiffness and strength of densely compacted Gaomiaozhi bentonite[J]. Applied Clay Science, 2020, 194: 105696.
- [8] AKGÜN H, KOÇKAR M K, AKTÜRK Ö. Evaluation of a compacted bentonite/sand seal for underground waste repository isolation[J]. Environmental Geology, 2006, 50(3): 331-337.
- [9] ZHAO J B, CHEN L, COLLIN F, et al. Numerical modeling of coupled thermal-hydro-mechanical behavior of GMZ bentonite in the China-Mock-up test[J]. Engineering Geology, 2016, 214: 116-126.
- [10] 王 驹,陈伟明,苏 锐,等.高放废物地质处置及其若干关键科学问题[J].岩石力学与工程学报,2006,25(4):801-812.(WANG Ju, CHEN Weiming, SU Rui, et al. Geological disposal of high-level radioactive waste and its key scientific issues[J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2006, 25(4): 801-812. (in Chinese))
- [11] 陈 宝,刘月妙,钱丽鑫,等.高压实高庙子膨润土缓冲/回填性能研究进展[C]//第二届核废物地下处置学术研讨会论文集,敦煌,2008.(CHEN Bao, LIU Yuemiao, QIAN Lixing, et al. Advances in study on densely compacted gaomiaozhi bentonite used as buffer/backfill materials[C]// Proceedings of the 2nd Symposium on Underground Disposal of Waste Technology, Dunhuang, 2008. (in Chinese))
- [12] VILLAR M V, LLORET A. Influence of dry density and water

- content on the swelling of a compacted bentonite[J]. *Applied Clay Science*, 2008, **39**(1/2): 38-49.
- [13] VILLAR M V, GUTIÉRREZ-ÁLVAREZ C, CAMPOS G. Bentonite swelling into a void under suction or water flow[J]. *Acta Geotechnica*, 2023, **18**(3): 1495-1513.
- [14] PUSCH R. Mineral-water interactions and their influence on the physical behavior of highly compacted Na bentonite[J]. *Canadian Geotechnical Journal*, 1982, **19**(3): 381-387.
- [15] DELAGE P, LEFEBVRE G. Study of the structure of a sensitive Champlain clay and of its evolution during consolidation[J]. *Canadian Geotechnical Journal*, 1984, **21**(1): 21-35.
- [16] SUURONEN J P, MATUSEWICZ M, OLIN M, et al. X-ray studies on the nano- and microscale anisotropy in compacted clays: comparison of bentonite and purified calcium montmorillonite[J]. *Applied Clay Science*, 2014, **101**: 401-408.
- [17] 陈永贵, 李昆鹏, 马 婧, 等. 化学作用下高庙子膨润土屏障性能演化行为[J]. *工程地质学报*, 2022, **30**(1): 71-82. (CHEN Yonggui, LI Kunpeng, MA Jing, et al. Evolution of barrier properties for gaomiaozi bentonite under chemical effects[J]. *Journal of Engineering Geology*, 2022, **30**(1): 71-82. (in Chinese))
- [18] 马 婧, 陈永贵, 刘 聪, 等. 化学作用下压实膨润土膨胀力响应机制研究进展[J]. *岩土工程学报*, 2023, **45**(10): 2042-2051. (MA Jing, CHEN Yonggui, LIU Cong, et al. Research progress in mechanisms of swelling pressures of compacted bentonite under chemical conditions[J]. *Chinese Journal of Geotechnical Engineering*, 2023, **45**(10): 2042-2051. (in Chinese))
- [19] 李昆鹏, 陈永贵, 叶为民, 等. 高压实膨润土孔隙结构特征研究进展[J]. *岩土工程学报*, 2022, **44**(3): 399-408. (LI Kunpeng, CHEN Yonggui, YE Weimin, et al. Advances in studies on pore structure of highly compacted bentonite[J]. *Chinese Journal of Geotechnical Engineering*, 2022, **44**(3): 399-408. (in Chinese))
- [20] AKINWUNMI B, KPORHAF E A, HIRVI J T, et al. Atomistic simulations of the swelling behaviour of Na-montmorillonite in mixed NaCl and CaCl₂ solutions[J]. *Chemical Physics*, 2020, **533**: 110712.
- [21] FAYOYIWA A D, SUN L L, HIRVI J T, et al. Effect of iron (III) on the swelling pressure of dioctahedral smectites: a molecular dynamics study[J]. *Chemical Physics Letters*, 2019, **736**: 136818.
- [22] NASRULLAH FAISAL H M, KATTI K S, KATTI D R. Molecular mechanics of the swelling clay tactoid under compression, tension and shear[J]. *Applied Clay Science*, 2021, **200**: 105908.
- [23] HAN Z F, CUI Y, MENG Q, et al. The effect of inorganic salt on the mechanical properties of montmorillonite and its mechanism: a molecular dynamics study[J]. *Chemical Physics Letters*, 2021, **781**: 138982.
- [24] HAN Z F, YANG H, BU M H, et al. A molecular dynamics study on the structural and mechanical properties of pyrophyllite and M-Montmorillonites (M = Na, K, Ca, and Ba)[J]. *Chemical Physics Letters*, 2022, **803**: 139848.
- [25] EBRAHIMI D M, PELLENQ R J, WHITTLE A J. Mesoscale simulation of clay aggregate formation and mechanical properties[J]. *Granular Matter*, 2016, **18**(3): 49.
- [26] EBRAHIMI D, WHITTLE A J, PELLENQ R J M. Mesoscale properties of clay aggregates from potential of mean force representation of interactions between nanoplatelets[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2014, **140**(15): 154309.
- [27] EBRAHIMI D, WHITTLE A J, PELLENQ R J M. Effect of polydispersity of clay platelets on the aggregation and mechanical properties of clay at the mesoscale[J]. *Clays and Clay Minerals*, 2016, **64**(4): 425-437.
- [28] CHEN Y G, CAI Y Q, PAN K, et al. Influence of dry density and water salinity on the swelling pressure and hydraulic conductivity of compacted GMZ01 bentonite-sand mixtures[J]. *Acta Geotechnica*, 2022, **17**(5): 1879-1896.
- [29] CHEN Y G, DONG X X, ZHANG X D, et al. Combined thermal and saline effects on the swelling pressure of densely compacted GMZ bentonite[J]. *Applied Clay Science*, 2018, **166**: 318-326.
- [30] CHEN Y G, SUN Z, CUI Y J, et al. Effect of cement solutions on the swelling pressure of compacted GMZ bentonite at different temperatures[J]. *Construction and Building Materials*, 2019, **229**: 116872.
- [31] LIU L N, CHEN Y G, YE W M, et al. Swelling pressure deterioration of compacted GMZ bentonite and its structural damage under heat combined with hyperalkaline conditions[J]. *Geomechanics and Geoengineering*, 2022, **17**(1): 297-308.
- [32] YE W M, ZHENG Z J, CHEN B, et al. Effects of pH and temperature on the swelling pressure and hydraulic conductivity of compacted GMZ01 bentonite[J]. *Applied Clay Science*, 2014, **101**: 192-198.
- [33] BAG R, JADDA K. Influence of water content and dry density on pore size distribution and swelling pressure of two Indian bentonites[J]. *Bulletin of Engineering Geology and the Environment*, 2021, **80**(11): 8597-8614.
- [34] TRIPATHY S, BAG R, THOMAS H R. Enhanced isothermal effect on swelling pressure of compacted MX80 bentonite[C]//

- Engineering Geology for Society and Territory-Volume 6. Cham: Springer, 2015.
- [35] LLORET A, VILLAR M V. Advances on the knowledge of the thermo-hydro-mechanical behaviour of heavily compacted "FEBEX" bentonite[J]. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, 2007, **32**(8/9/10/11/12/13/14): 701-715.
- [36] 彭同江, 孙红娟, 罗利明, 等. 膨润土的矿物学特征与可控改造技术研究[J]. *矿产保护与利用*, 2019, **39**(6): 93-100. (PENG Tongjiang, SUN Hongjuan, LUO Liming, et al. Mineralogy characteristic and controllable retrofit technology of bentonite[J]. *Conservation and Utilization of Mineral Resources*, 2019, **39**(6): 93-100. (in Chinese))
- [37] AKINWUNMI B, SUN L L, HIRVI J T, et al. Influence of temperature on the swelling pressure of bentonite clay[J]. *Chemical Physics*, 2019, **516**: 177-181.
- [38] YANG Y F, QIAO R, WANG Y F, et al. Swelling pressure of montmorillonite with multiple water layers at elevated temperatures and water pressures: a molecular dynamics study[J]. *Applied Clay Science*, 2021, **201**: 105924.
- [39] AKINWUNMI B, HIRVI J T, KASA S, et al. Swelling pressure of Na- and Ca-montmorillonites in saline environments: a molecular dynamics study[J]. *Chemical Physics*, 2020, **528**: 110511.
- [40] FAYOYIWA A D, HIRVI J T, PAKKANEN T A. Computational study of the roles of alkali cation species in the swelling pressure of smectites[J]. *Chemical Physics Letters*, 2020, **744**: 137200.
- [41] SUN L L, HIRVI J T, SCHATZ T, et al. Estimation of montmorillonite swelling pressure: a molecular dynamics approach[J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2015, **119**(34): 19863-19868.
- [42] SUTER J L, COVENEY P V, GREENWELL H C, et al. Large-scale molecular dynamics study of montmorillonite clay: emergence of undulatory fluctuations and determination of material properties[J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2007, **111**(23): 8248-8259.
- [43] VILLAR M V, LLORET A. Influence of temperature on the hydro-mechanical behaviour of a compacted bentonite[J]. *Applied Clay Science*, 2004, **26**(1/2/3/4): 337-350.
- [44] ZHANG J R, SUN D A, YU H H, et al. Swelling of unsaturated GMZ07 bentonite at different temperatures[J]. *Bulletin of Engineering Geology and the Environment*, 2020, **79**(2): 959-969.
- [45] KIM M, LEE S, CHEON E, et al. Thermochemical changes on swelling pressure of compacted bentonite[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2021, **151**: 107882.
- [46] 项国圣, 吕立勇, 葛磊, 等. 温度对 GMZ 膨润土的膨胀性能影响研究[J]. *岩土工程学报*, 2021, **43**(1): 77-84. (XIANG Guosheng, LÜ Liyong, GE Lei, et al. Effects of temperature on swelling characteristics of GMZ bentonite[J]. *Chinese Journal of Geotechnical Engineering*, 2021, **43**(1): 77-84. (in Chinese))
- [47] XIANG G S, YE W M, ZHOU Y K, et al. Combined effects of temperature and salt solution on swelling of GMZ01 bentonite-sand mixtures[J]. *Bulletin of Engineering Geology and the Environment*, 2021, **80**(9): 6677-6688.
- [48] KANAZAWA S I. The swelling behaviour of bentonite buffer material considering the effect of temperature[J]. *International Journal of GEOMATE*, 2020, **19**(74): 216-221.
- [49] BAG R, RABBANI A. Effect of temperature on swelling pressure and compressibility characteristics of soil[J]. *Applied Clay Science*, 2017, **136**: 1-7.
- [50] CASTELLANOS E, VILLAR M V, ROMERO E, et al. Chemical impact on the hydro-mechanical behaviour of high-density FEBEX bentonite[J]. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, 2008, **33**: S516-S526.
- [51] HE Y, YE W M, CHEN Y G, et al. Effects of K^+ solutions on swelling behavior of compacted GMZ bentonite[J]. *Engineering Geology*, 2019, **249**: 241-248.
- [52] LEE J O, LIM J G, KANG I M, et al. Swelling pressures of compacted Ca-bentonite[J]. *Engineering Geology*, 2012, **129/130**: 20-26.
- [53] LIU L N, CHEN Y G, YE W M, et al. Effects of hyperalkaline solutions on the swelling pressure of compacted Gaomiaozi (GMZ) bentonite from the viewpoint of Na^+ cations and OH^- anions[J]. *Applied Clay Science*, 2018, **161**: 334-342.
- [54] SUN Z, CHEN Y G, YE W M, et al. Swelling deformation of Gaomiaozi bentonite under alkaline chemical conditions in a repository[J]. *Engineering Geology*, 2020, **279**: 105891.
- [55] WANG L, JACQUES D, DE CANNIERE P. Effects of An Alkaline Plume on the Boom Clay as A Potential Host Formation for Geological Disposal of Radioactive Waste[R]. Belgium: SCK-CEK, 2010.
- [56] FERNÁNDEZ R, CUEVAS J, SÁNCHEZ L, et al. Reactivity of the cement-bentonite interface with alkaline solutions using transport cells[J]. *Applied Geochemistry*, 2006, **21**(6): 977-992.
- [57] LAIRD D A. Model for crystalline swelling of 2: 1 phyllosilicates[J]. *Clays and Clay Minerals*, 1996, **44**(4): 553-559.