

V-374

pHに着目したコンクリートの炭酸化反応に関するモデル解析

首都高速道路公団 東京第一保全部 設計課 正会員 長田 光正
 首都高速道路公団 東京第一保全部 設計課 正会員 植木 博
 日本セメント(株) 中央研究所 セメントコンクリート研究部 山崎 之典
 日本電子計算(株) 科学技術事業部 建設技術営業部 川口 和広

1. はじめに

炭酸化については、数多くの調査研究が行われているが、セメント水和生成物全体の炭酸化をモデル化し、解析的に取り扱った事例は少ない[1~4]。また、従来の炭酸化解析においては、炭酸化反応を炭酸の拡散および、水酸化カルシウムと炭酸との1次反応としてモデル化されていた。

本研究では、二酸化炭素(気相)がコンクリート細孔中を拡散し、拡散途中で細孔中の水分に溶解し、その場で解離、炭酸化反応が生じると仮定し、炭酸化反応をモデル化した。炭酸化によるpH変化について着目し、アルカリ成分の影響についても考慮してシミュレートすることを試みた。

2. 解析モデルの概要

拡散は式(1)に示す非定常1次元拡散方程式を、解析は有限要素法および2段階ラックスウエンドロフ法を用いた。

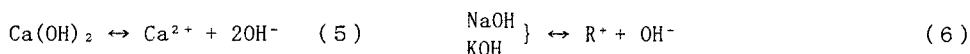
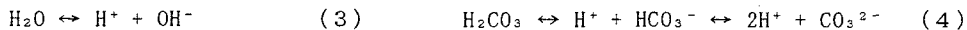
$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - R_1 [C] [C_a] \quad (1)$$

ここで、C: 二酸化炭素濃度, t: 時間, D: 二酸化炭素の拡散係数, x: コンクリート表面からの距離
 C_a: 水酸化カルシウム濃度, R₁: 反応速度定数

化学反応は、セメントの主要な成分である水酸化カルシウムに着目し、式(2)のようにモデル化する。



化学種の平衡については、以下の式(3)~(6)に示すものをモデル化した。なお、式(6)はセメント中のアルカリ成分の平衡のモデル化を行ったものである。



以上のように拡散(式(1))、平衡(式(3)~式(6))、反応(式(2))をモデル化し、それぞれの計算を時間方向に繰り返し行うことによって各化学種の濃度を計算し、炭酸化の進行を予測するモデルである。解析に用いたデータを表-1に示す。式(4)の炭酸の解離定数を表中の(4)-Aに、炭酸水素イオンの解離定数を(4)-Bに示している。ここで初期条件における鉱物種、化学種の濃度は、セメント硬化体の体積に対するmol量で表している。

表-1 シミュレーションデータ

解析領域	4.0 (cm) × 0.4 (cm)	初期条件			拡散係数		
メッシュ	0.1 (cm)	Ca(OH) ₂ (固相)	1.35	(mol/L)	式(1)	D (cm ² /day)	
解析時間	210 (day)	Ca(OH) ₂ (液相)	1.86 × 10 ⁻²	(mol/L)	解離定数		
解析時間間隔(Dt)	0.04 (day)	C-S-H (固相)	1.74	(mol/L)	式(3)	1.00 × 10 ⁻¹⁴	
反応速度定数		C-S-H (液相)	1.00 × 10 ⁻⁶	(mol/L)	式(4)-A	1.00 × 10 ^{-3.36}	
式(2)	Ri (1/(day・mol/L))	ROH (液相)	0.01, 0.10	(mol/L)	式(4)-B	1.00 × 10 ^{-10.32}	
		境界条件 (コンクリート表面)			式(6)	1.00 × 10 ^{-3.7}	
		CO ₂	3.90 × 10 ⁻²	(mol/L)	式(6)	1.00	

キーワード: 炭酸化反応、pH、化学平衡、アルカリ成分、シミュレーション

連絡先: 〒104 東京都中央区新富町1-1-3 TEL: 03-3552-1441 FAX: 03-5541-7734

3. シミュレーション結果と考察

二酸化炭素の拡散係数、水酸化カルシウムの反応速度定数を表-2に示すとおりに変化させて計算を行った結果を図-1～図-4に示す。

(1) 拡散係数の影響

図-1と図-2を比較すると、拡散係数が小さい場合、炭酸化領域の進行が遅くなり、またpH低下領域の進行が遅くなる。

(2) 反応速度定数の影響

図-1と図-3を比較すると、反応速度定数が小さい場合、炭酸カルシウム生成量の勾配が小さくなり、炭酸化反応領域の幅が広がる。これは、拡散してきた炭酸が反応により全て消費されず、より深い位置まで拡散するためと考えられる。また、pHの勾配が小さくなり、中性化領域の幅が広がる。これは、コンクリート表面からの距離が小さい位置では反応量が小さく水酸化カルシウムが存在しているためpHは高く、距離が大きい位置では反応量が少なく水酸化カルシウムの消費量は小さいが、反応により消費されなかった炭酸が拡散してpHの低下が起こるためであると考えられる。

(4) セメント中のアルカリ成分の平衡を考慮した場合

図-4に、アルカリ成分の平衡を考慮した場合の、計算結果を示す。アルカリ成分の存在量が大きいほど、pHは高く保たれるが、炭酸カルシウムの生成量は影響を受けない。このことは、解析により炭酸化深さを検討する際に、炭酸カルシウム生成量に着目した評価により炭酸化していると判断される場合でも、pHに着目した評価では、アルカリ成分を考慮すると、炭酸化していないと判断される場合があり得る、ということを示唆している。

以上のように、解析結果には解析条件の違いによる影響が妥当な傾向として表れているといえる。

4. まとめ

化学平衡を考慮した炭酸化シミュレーションモデルの検討を行った結果、本モデルについて次のようなことが分かった。

- (1) 炭酸化による炭酸カルシウムの増加およびpHの低下という一般的な傾向が表現できた。
- (2) pHに着目した炭酸化反応の解析においてはセメント中のアルカリ成分の影響を考慮する必要がある。

【参考文献】

- [1] 福島敏夫：コンクリートの中性化進行の理論的予測法と数値解析 鉄筋コンクリート造建築物外壁の耐久性予測法に関する研究（その1）：日本建築学会構造系論文報告集，第428号，1991年10月
- [2] 長瀧重義・大賀宏行・佐伯竜彦：コンクリート中性化深さの予測，セメント技術年報，41，pp. 343～346，1987
- [3] 福島敏夫：非定常速度論解析によるコンクリートの中性化進行予測法，セメント技術年報，42，pp. 267～270，1988
- [4] 百瀬明貴・植木博・山崎之典・村上正明：コンクリート部材の炭酸化反応に関するシミュレーション解析，コンクリート工学年次論文報告集，Vol.18，No.1，1996

表-2 各検討ケースの条件

	拡散係数D	反応速度定数R1
CASE1.1	0.05	1.00×10^3
CASE1.2	0.01	1.00×10^3
CASE1.3	0.05	1.00×10^1
CASE2 *	0.05	1.00×10^3

*：アルカリ成分を考慮して計算を行った検討ケース

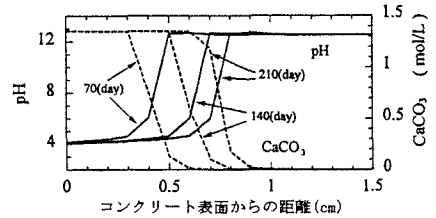


図-1 CASE1.1の結果

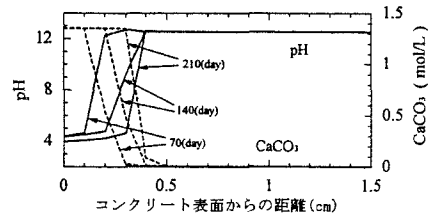


図-2 CASE1.2の結果

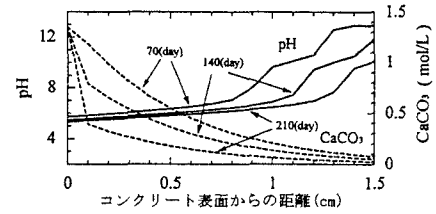


図-3 CASE1.3の結果

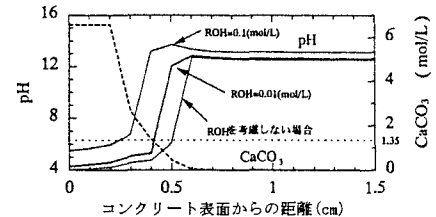


図-4 CASE2の結果