

空隙構造に依存したセメント系材料の水分拡散モデルの構築

中央大学 学生会員 ○横山 隼佑
中央大学 正会員 大下 英吉

1. はじめに

近年、既存の構造物において乾燥収縮に伴うひび割れの発生による耐久性の低下が深刻な問題となっている。この乾燥収縮によるコンクリートの体積変化を精度よく予測することは非常に重要であり、そのメカニズムは古くから議論が行われている。

既往の研究¹⁾では、セメント系材料内部の水分移動特性を示す指標である水分の拡散係数は、実験によって得られた材料特性を表わすマクロな値としている。しかしながら、図-1に示す小泉らの研究²⁾では、脱水量が平衡に至った後も、収縮ひずみが生じることを指摘している。これは、脱水量が平衡となった後も試験体内部では引き続き大小の細孔同士での水の移動が生じるため、収縮ひずみが生じるわけである。すなわち、マクロな材料特性である従来の拡散係数に加えて、細孔径に応じた拡散係数の導出が不可欠である。

本研究では、この点に着目しセメントペーストの微細空隙内における水分移動機構の検討から、気体の分子運動論を導入することによって、細孔径に応じた拡散モデルの構築を行なうとともに、空隙径分布からマクロな拡散係数を予測する手法を確立した。

2. 細孔径に依存した拡散モデルの構築

セメント材料は、nm~mm にわたるマルチスケールオーダーの細孔径を有する多孔体である。したがって、水分子が細孔内を通過する際、壁面のファンデルワールス力が非常に大きな影響を及ぼす細孔径もあれば、その限りではない細孔径も存在する。既往の研究においても、細孔径が小さくなるほど固体壁の影響が強くなり、流れが生じにくくなることが指摘されている³⁾が、確固たる拡散モデルの確立には至っていない。

本章では、まず長さ方向に同一の径を有する円筒内を移動する水分子の拡散モデルを構築する。その具体的な方法は、径に依存して壁面との衝突によって水分子が運動エネルギーを損失することと壁面距離によるエネルギー損失量を考慮することによるものである。

2.1 拡散係数モデル

壁面と水分子間のポテンシャル E は、Lennard-Jonesポテンシャルに従うものとして次式により定義した。

$$E = 4\epsilon \left\{ -\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 + \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} \right\} \quad (1)$$

ここで、 ϵ および σ は、それぞれ誘電率および分子直径であり、本研究では水分子固有の値として $\epsilon=4.323 \times 10^{-20} \text{J}$ 、 $\sigma=0.3 \text{nm}$ ⁴⁾とした。

次に壁面へ衝突した際の水分子のエネルギー損失は、

$$v(i) = \sqrt{\frac{u(i-1) - i\Delta e}{3.0 \times 10^{-26}}} \quad (2)$$

$$\Delta e = 4.31 \times 10^{-21} + k \times 10^{-21} \left\{ \frac{5.0 \times 10^{-9} \times 4(r - 5.0 \times 10^{-9})}{r^2} \right\}$$

ここで、 i :衝突回数、 r :細孔径(m)、 u :運動エネルギー(J)、 v :速度(m/s)、 k は壁面が分子に与えるエネルギー損失量の影響である。

拡散係数は、初速を与えた分子が壁面との衝突を繰り返して、運動エネルギーを失い壁面に吸着するまでに移動した距離とそれに要した時間により、三次元における次式に示す Einstein の式から算出した。

$$D = \frac{\langle x^2 \rangle}{6t} \quad (3)$$

2.2 構築したモデルの特性

図-2に5nm~100nmでの拡散係数を示す。全体的に傾向としては、細孔径が小さい領域では拡散係数が線形に伸びず、細孔径が大きくなるに従い線形に伸びていくように変化しており、固体壁の影響により細孔径が小さくなるほど、流れが生じにくくなっていることが表現できていると考察できる。

3. 既往の実験データとの比較

前章で得られた本モデルの適用性を検証するために、既往の実験⁵⁾との比較を行った。なお、算出に際しては

キーワード 空隙構造, 細孔径, 拡散係数

連絡先 〒112-8551 東京都文京区春日 1-13-27 中央大学 理工学部 都市環境学科 TEL 03-3817-1892

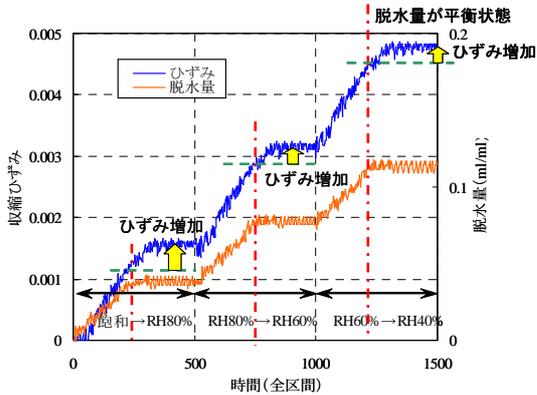


図-1 収縮ひずみと脱水量

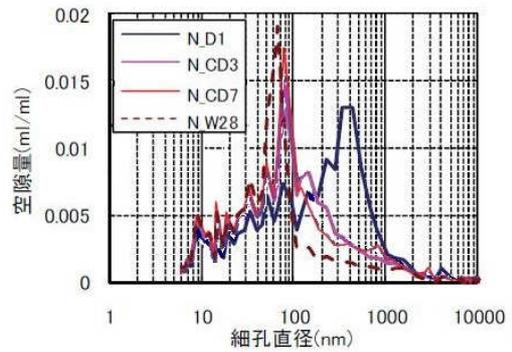


図-3 空隙構造の径時変化

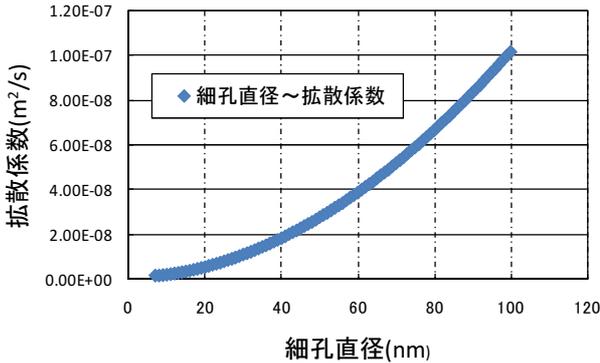


図-2 径に応じた拡散係数

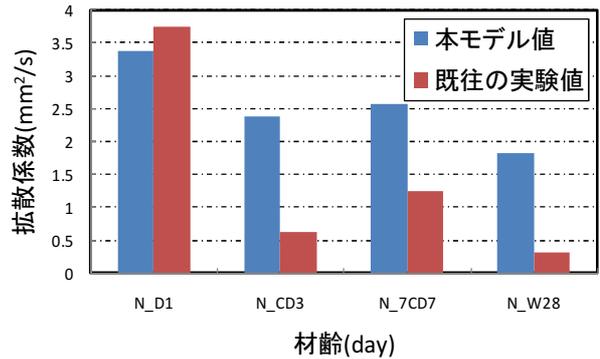


図-4 モデルと実験の比較

式(2)で得られた極小値の $-4.31 \times 10^{-21} \text{J}$ を衝突時に分子が失うエネルギー量とし、壁面のポテンシャルエネルギーが影響を与える距離は 5.0nm とした。また、初速は水分子の最も一般的な速度である 590m/s を与え、エネルギー損失係数 k は 100.0 とした。

図-3は、材齢 1, 3, 7, 28 日における細孔径分布の実測値であり、この細孔径分布に基づいて本モデルによる拡散係数を算出することとする。算出方法は、まず本モデルによって径毎に拡散係数を算出し、各径に応じた細孔径分布を重み関数として拡散係数に乗じることにより平均的な拡散係数を算出した。本モデルと既往の実験値の比較を図-4に示す。

本モデルにおける算定値は、実測と同様の傾向を示しており、比較的良好な結果を得られた。また、材齢の経過に伴う拡散係数の変動傾向も定性的には評価可能としている。しかしながら、材齢 1 日に比べ微細な細孔を含む材齢 3, 7, 28 日材齢においては、本モデルは実測値に比べて大きくなっており、より精度の高い定量化は今後の課題である。

4. まとめ

以下に本研究のまとめを示す。

- (1) 細孔径に依存した水分子の拡散モデルが構築された。
- (2) 構築したモデルは、セメント系材料の細孔径分

布が与えられれば、その平均的な拡散係数の算出が可能である。

- (3) 構築したモデルは、実験結果との比較により、ある程度の範囲内での精度を有している。
- (4) 本モデル値は実測値に比べて大きくなっており、より精度の高い定量化が今後の課題である。

参考文献

- 1) 氏家大介, 大下英吉: セメント系材料中の微細空隙壁面への水分の吸・脱着現象を考慮した拡散性状に関する研究, コンクリート工学年次論文集, Vol.22, No.2, 2000
- 2) 小泉諒, 大下英吉, 藤倉裕介: 湿度変化に伴うセメントペーストの長さ変化と脱水量の相関性に関する研究, 2010
- 3) 行天義幸, 齊藤賢一, 稲葉武彦: 固体壁の影響を強く受けるナノ空間での分子流動シミュレーション, 日本機械学会論文集, No.024-1, 2002
- 4) 分子シミュレーションによる微小空隙中の液状水挙動の検証, 土木学会論文集 E, Vol.65 No.3, 311-321, 2009
- 5) 壇康弘, 伊与田武史, 大塚勇介, 佐川康貴, 廣田秀則: 高炉スラグ微粉末を混入したコンクリートの養生条件と耐久性の関係, 土木学会論文集 E, Vol.65 No.4, 431-441, 2009