

気体分子運動論に立脚した水蒸気拡散による体積変化に関する解析的研究

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

コンクリート中の水分の拡散性状を把握するためには、微細空隙内における水分移動機構を評価する必要がある。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、小泉ら²⁾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、硬化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ものと考えられる。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。

そこで本研究では、気体の分子運動論を導入することによって、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。また、外部への脱水時および硬化体内部拡散時のそれぞれの体積変化機構のモデルを構築し、既往の実験データとの比較を行った。

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、壁面と分子間の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。したがって、細孔径ごとの拡散係数を決定する必要がある。

2. 1 細孔径に依存した拡散係数

(1)壁面の影響が支配的な拡散

壁面距離による水分子の受ける壁面と分子間の力の大きさを考慮することによって壁面の影響を考慮する。

壁面と水分子間のポテンシャル ϕ は、Lennard-JonesポテンシャルとCoulombポテンシャルを加え合わせたものに従うとして定義した。また、拡散係数 D_k は、初速を与えた分子が壁面のポテンシャルエネルギーによって、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 x とそれに要した時間 t により、次式に示す三次元におけるEinsteinの式から算出した。

$$D_k = \frac{\langle x^2 \rangle}{6t} \quad [1]$$

(2)分子同士の影響が支配的な拡散

比較的大きな径では、分子同士の影響が支配的な拡散となるため、壁面との距離が拡散に与える影響は小さく、細孔径に依存しない。拡散係数 D_n は、気体分子運動論および運動量変化から次式で表される。

$$D_n = \frac{vkT}{3\sqrt{2}ahP_0} \quad [2]$$

ここで v は分子の平均速度[m/s]、 a は衝突断面積[m²]、 P_0 は飽和蒸気圧[Pa]、 k はボルツマン定数[J/K]、 T は温度[K]、 h は相対湿度[%]である。

(3)拡散係数の合成

ある細孔径において、前述のどちらの影響が支配的となるかを検討することで、見かけの拡散係数を決定する。具体的には、拡散係数 D を逆数とした拡散抵抗を用いるものである。合成拡散係数 D_s の拡散抵抗は、 D_k および D_n の拡散抵抗の和に従うとして、次式により定義した。

$$\frac{1}{D_s} = \frac{1}{D_k} + \frac{1}{D_n} \quad [3]$$

2. 2 合成拡散係数モデルの適用性の検討

本章で構築した本モデルの適用性を検証するために、既往の実験¹⁾との比較を行うこととする。なお、算出に際して、初速には水分子の最も一般的な速度である590m/sを与え、相対湿度60%とした。

まず径ごとに拡散係数を算出し、実測の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。

解析値と実験値の比較を図-1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。

3. 体積変化機構のモデル化

内部拡散によるひずみの進行は、インクボトル型空隙の存在が大きく関連していると考えられる。硬化体

キーワード 乾燥収縮, 空隙構造, 拡散係数, 気体分子運動論

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

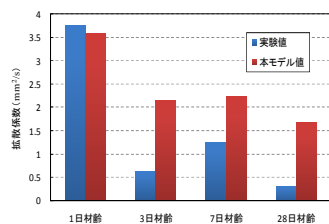


図-1 モデルと実験値の比較

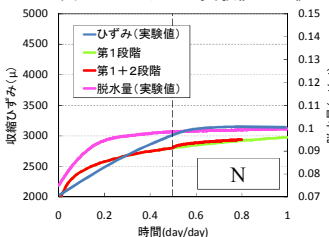
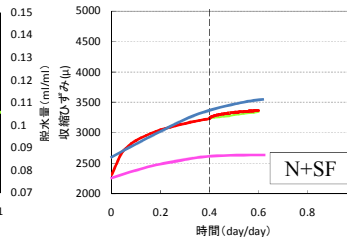
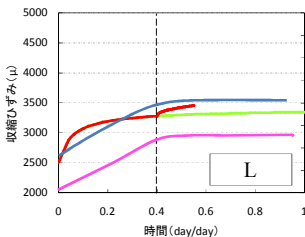
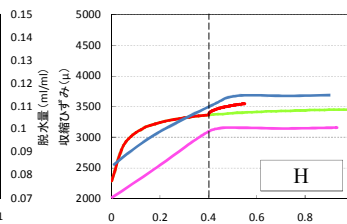
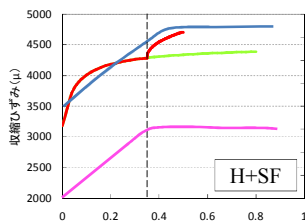


図-2 各試料における解析



第二段階 解析値	
N=120	N+SF=136
H=187	H+SF=423
L=175	

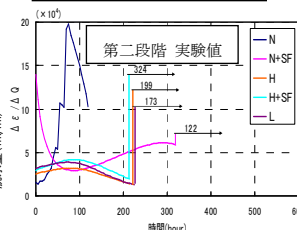


図-3 収縮ひずみと脱水量の

外部へのマクロな拡散による乾燥過程が終了した直後、水は安定した状態を求め、大きな径から小さい径へと拡散し、再凝縮する。その際、微小な空隙内でメニスカスが形成されるため、毛細管張力により収縮が生じる。以上の現象を内部拡散時における収縮のメカニズムと仮定した。

そこで本研究では、ある相対湿度下において、凝縮水を保持することができる最大の径 r_{max} を求め毛細管張力によって発生するひずみ ε_s と細孔径分布を用いることで、水分の内部拡散による硬化体全体のひずみを算出することとした。ここで、細孔径分布が必要となる。本研究では、次式に示す下村らが提案している細孔容積分布密度関数³⁾を用いることとした。

また、外部への脱水に伴う体積変化については、従来の熱力学に基づく表面エネルギー変化による体積変化に関する3次元支配方程式⁴⁾を用いて解析を行った。

4. 体積変化モデルの適用性の検討

前章で構築した本モデルの適用性の評価を行うために、既往の実験¹⁾との比較を行った。実験で使用したセメントは、普通ポルトランド(N)、早強ポルトランド(H)、低熱ポルトランド(L)の配合、および普通ポルトランドと早強ポルトランドの2種類にシリカフェームで20%置換した配合(N+SF、H+SF)の5種類である。

図-2に、各試料のRH60%からRH40%までの乾燥過程における乾燥収縮ひずみと脱水量の実測値とひずみの解析値を経時変化で示す。全体的にひずみの大きさは良好な一致を示している。

図-3は実測値の脱水量 ΔQ と乾燥収縮ひずみ $\Delta \varepsilon$ の割合を経時変化で表したものである。図中に示す値

は、内部拡散によるひずみの増分である。増加量の大小関係は実測値と同様であり、定量的に評価可能であると言える。

5. まとめ

本研究で得られた知見を以下に示す。

- (1) 細孔径に依存した水分子の拡散モデルが構築された。本モデルは、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。
- (2) 乾燥収縮に伴う体積変化のメカニズムを二段階に分けて、それぞれの体積変化機構のモデル化を行った。構築したモデルは、ある範囲内で精度を示しており、ひずみを定量的に評価可能である。

【参考文献】

- 1) 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、pp.431-441、2009
- 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、土木学会関東支部技術研究発表会講演概要集、2010
- 3) 下村匠：細孔容積分布密度関数に基づくコンクリートの乾燥収縮モデル、東京大学学位論文、1993
- 4) 角田洋、大下英吉：温度履歴を考慮した表面エネルギー理論に基づくセメントペーストの乾湿変化による体積変化に関する研究、コンクリート工学年次論文集、Vol.26、No.1、pp.525-531、2004