

分子動力学法を用いた C-S-H 微小空隙中の水分移動に関する基礎的検討

元名古屋工業大学 社会工学専攻 中田 諒
 名古屋工業大学大学院 物理学専攻 小林 亮
 名古屋工業大学大学院 社会工学専攻 ○吉田 亮

1. はじめに

セメント硬化体の固体容積の 5 割以上を占める C-S-H は、コンクリートの物性に大きく寄与していると考えられており、最も古いものでは、1958 年の Powers らによる C-S-H の空隙構造に関する研究がある。測定技術が進歩した現代においても、C-S-H の構造は明らかになっていない。

本研究では、分子動力学法を用いて、空隙壁面に、C-S-H の構造に類似していると言われているトバモライトの構造を使用することで、C-S-H 微小空隙中の水分移動を数値解析により検討する。

2. 解析概要

2.1 分子動力学法

本研究では分子動力学法を用いて分子の挙動を解析した。分子動力学法の基礎方程式は運動方程式のみであり、微分方程式を時間積分することで系の運動が記述可能になる。ポテンシャル関数の選定が重要であり、本研究では静電相互作用の Coulomb ポテンシャルと分子間力の L-J ポテンシャルを考える。

2.2 周期境界条件

周期境界条件とは中央に有限の長さを持った基本セルを配置し、これと全く相似なセルが空間に無限に広がっていると仮定するもので、計算コストを大幅に削減することができる。

2.3 使用する水分子モデル

本研究では TIP4P-2005 モデルを使用する。本研究では常温状態(300K)でのシミュレーションを行うために、300K において液体の状態が保証されているこのモデルを使用した。

2.4 使用する壁モデルのパラメータ

(1) 電荷の決定

電荷の決定には Adam の式を用いた。Richardson の

トバモライトモデルに修正を施したモデルにおいて電荷の決定を行なった。

(2) L-J ポテンシャルの σ , ϵ の値の決定

σ は各種イオン半径と係数を用いて算出し、 ϵ は各種電荷と係数を用いて算出した。

3. 解析結果

3.1 水分子の z 軸方向分布の解析

図-1 に壁間距離 d の変化に対する、水分子の原子数の分布を示す。 $d=10$ から 50 の 10 ごとに 5 つの間で、その原子数は中央に集まった状態から空隙全体に分散される様子が確認できた。そこで空隙を下端から長さの割合で、20%, 60%, 20%に区切り、それぞれ bottom, center, top と名付け、各エリアでの単位長さあたりの原子数を調べた。図-2 に壁間距離に対する、単位長さあたりの原子数の割合の値を表したグラフを示す。縦軸の値は、center の単位長さあたりの原子数を bottom と top のその平均で除した値である。グラフから $d=40$ あたりから両者の単位長さあたりの原子数が近くなるのがわかる。

3.2 水分子配向の z 軸方向分布の依存性の解析

図-3 に各壁間距離における水分子配向性を示す。グラフからわかるように、いずれの壁間距離においても壁付近では水分子が壁側を向く傾向があることが確認できた。空隙中央に比べると顕著にその特徴を確認できたため、壁付近において水分子の動きを制限していると考えられる。また、空隙中央においては、水分子が x, y 方向に向くことが多く、さらにその配向は x と y 方向が対称的になるように確認された。つまり空隙中央においても水分子の動きを制限する別の要素が存在する可能性があると考えられる。

以上より考えられることを記述する。本研究ではトバモライト壁-水分子間の相互作用が水分子-水分子間

キーワード：ケイ酸カルシウム水和物、ゲル、空隙構造、水分移動

連絡先：〒466-8555 名古屋市昭和区御器所町 名古屋工業大学大学院 TEL 052-735-5125

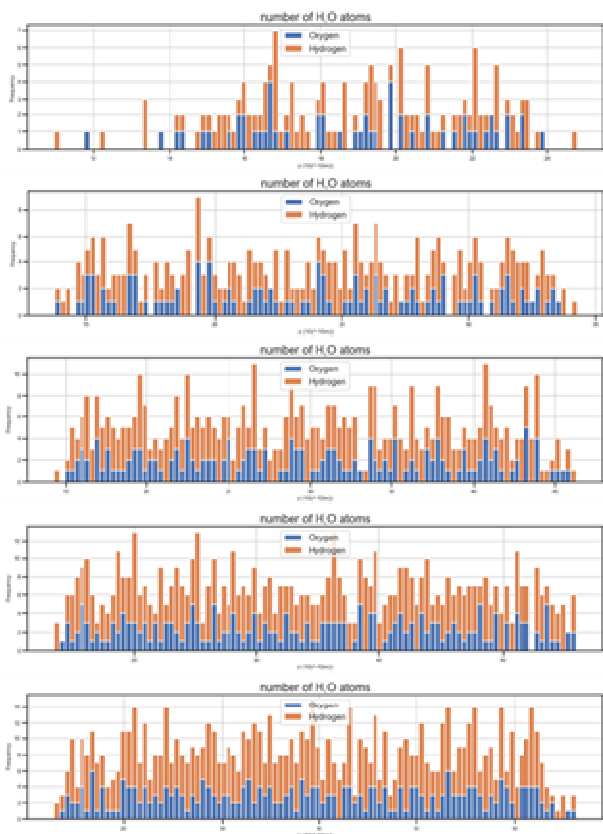


図-1 水分子を構成する原子数の分布

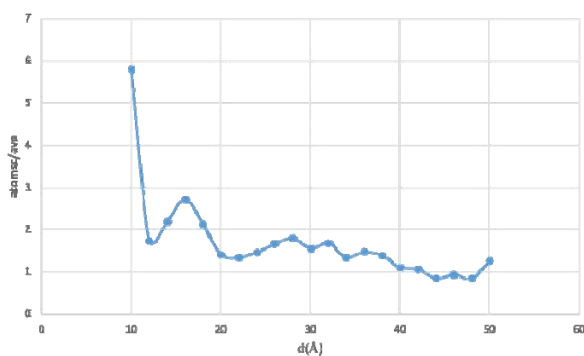


図-2 壁間距離と水分子の疎密度の関係

の相互作用に対して小さく設定されている。そのため、壁間距離が短いときは壁からの影響を比較的強く受け、中央に集まり、長いときはそれが比較的弱くなり、水分子が一樣に分散されたと考えられる。水分子の壁への入り込みに関しても、相互作用が小さいために、斥力が強く働く距離も短くなり、瞬間的に壁に入り込む現象が確認できたと考えることができる。水分子配向性に関しては、それ自身の原因やメカニズムに関しては、本相互作用の設定のみでは判断しかねるが、今後空隙中の水分子の流れを解析する際に、壁側で水分子の向く方向に傾向があることは、壁付近での水分子の流れに摩擦力のような抵抗する働きに繋がり、

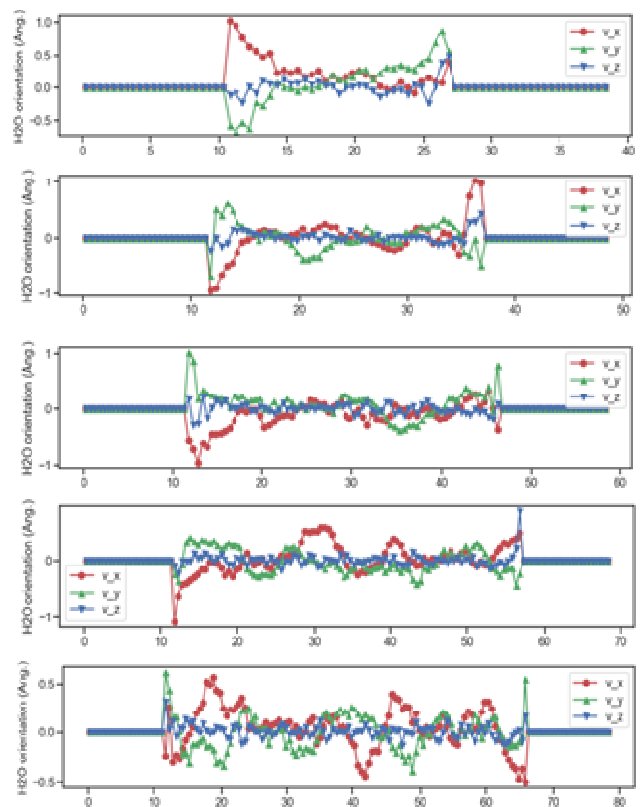


図-3 各壁間距離における水分子配向性

空隙内の水分子流れに影響を与えると考えることができる。また空隙中央では配向の x, y 方向が対称になることも、空隙内部での水分子流れに影響を与えると考えることができる。

4. まとめ

本研究により得られた知見を以下に示す。

- 1) 水分子を構成する原子数の分布において、壁間距離が長くなるにつれて、水分子は空隙全体に分散することが確認できた。しかしながら、この結果は相互作用の決定に左右されるものであると判断できるため、詳細に相互作用を設定した際に、同等の結果が得られるか確認する必要がある。
- 2) 水分子の配向性についても同様に相互作用の詳細な決定が求められるが、壁付近で水分子が外側を向くこと、空隙中央では x, y 方向に特徴的であることは水分子の流れを解析する際に影響を与えると考えることができる。

謝辞：本研究では名古屋工業大学 生命・応用化学専攻 岩田修一 教授にご助言を頂きました。ここに記し深く感謝致します。