

分子動力学法によるケイ酸カルシウム水和物(C-S-H)の微視的破壊シミュレーション

広島工業大学 学生会員 ○金舛 育実
 広島工業大学 正会員 大村 訓史
 広島工業大学 フェロー会員 竹田 宣典

1. 背景と目的

コンクリートの強度はセメント中に多く存在する C-S-H の力学特性によって決まると考えられている。この C-S-H に関して多くの研究がなされており、構造は天然鉱物のトバモライトに似ていると報告されている。¹⁾ また、結晶性トバモライトについてはコンクリートの長期耐久性や強度に寄与しているものと推測されている。これらの理由からトバモライトの力学特性の解明に向け、結晶構造や生成過程に関する研究がなされている。^{2) 3)} しかしながら、破壊などの動的な性質の微視的メカニズムについては、未解明な点が多く残されている。

そこで本研究では、C-S-H の微視的破壊メカニズムを明らかにするため、分子動力学法を用いて 11 Å トバモライトの破壊シミュレーションを行った。

2. 計算の方法

分子動力学法とは Newton の運動方程式を各粒子に適用し、任意時間毎での座標を求めることで、原子の動きを再現する手法である。この手法を用いて本研究では、11 Å トバモライトの応力-ひずみ関係を詳細に調べた。図 1 に本研究で使した 11 Å トバモライトの構造モデルを示す。

総原子数 17600 個の系を用い、 x , y , z のいずれの方向にも周期境界条件を適用した。計算には大規模計算用の LAMMPS を使用し、原子に作用する力は CLAYFF⁴⁾ から求めた。設定温度において 1 step あたり 0.5 fs で温度一定・圧力一定の分子動力学計算を 10 ps 行った後、一軸引張・圧縮シミュレーションを行った。

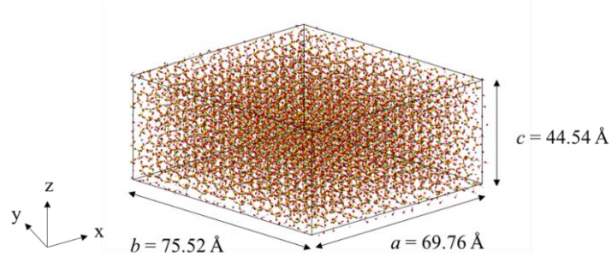


図 1 本研究で使した 11 Å トバモライトの構造モデル

3. 結果と考察

3.1 実験との比較

X線回折実験で得られている格子定数のデータと本研究で使用したパラメーターで得られた格子定数を以下の表 1 に示す。この表から、長さ、角度のいずれも実験結果をよく再現していることが分かる。

表 1 格子定数

	This study	Exp ⁵⁾
a [Å]	6.86	6.74
b [Å]	7.44	7.39
c [Å]	22.71	22.49
α [°]	90.58	90
β [°]	88.53	90
γ [°]	122.76	123.25

3.2 方向依存性

図 2 に 300 K における一軸引張の応力-ひずみ曲線を示す。引張強度が高い順に並べると y 方向, z 方向, x 方向である。この変形を原子スケールで見ると、 x 方向への引張では転位が起ることで応力が緩やかに開放され、 y 方向の引張ではボイドが形成し破断に至る。 z 方向への引張では CaO の層間の剥離が見られ、急激な応力低下が発生する。

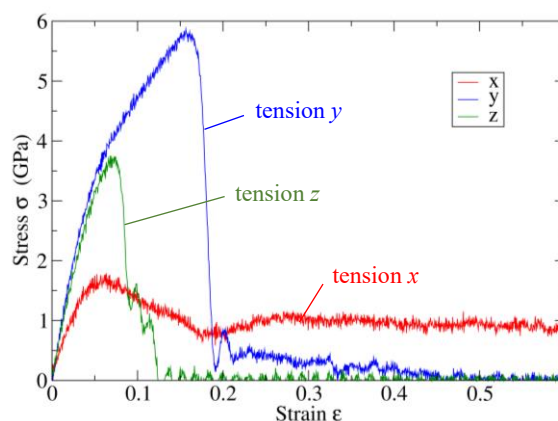


図 2 300 K における一軸引張の応力-ひずみ曲線(単結晶)

キーワード C-S-H, トバモライト, 分子動力学法, 応力-ひずみ曲線

連絡先 〒731-5193 広島市佐伯区三宅 2-1-1 広島工業大学大学院 TEL 082-921-4476

3.3 温度依存性

図3に応力-ひずみ曲線から求めた x 方向の圧縮強度と x 方向の引張強度の温度依存性を示す。すべての温度において、 x 方向への圧縮 $\sigma_{\max}$ (compression x)が最大の強度を示し、 x 方向への引張 $\sigma_{\min}$ (tension x)が最小の強度を示す。800 Kの温度上昇によって $\sigma_{\max}$ は1.6 GPa, $\sigma_{\min}$ は1.4 GPa低下する。

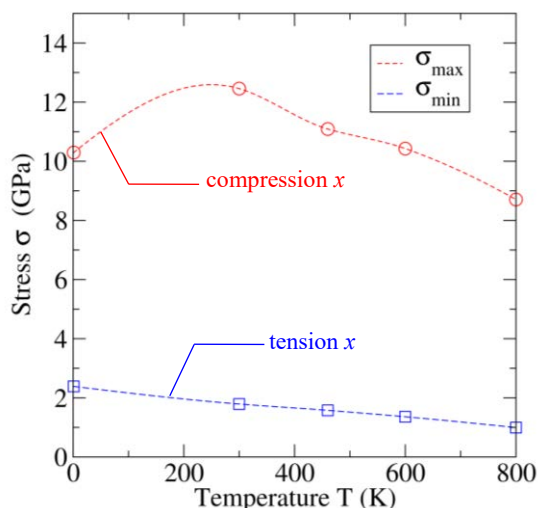


図3 x 方向の圧縮強度 (compression x)と x 方向の引張強度 (tension x)の温度変化

3.4 非晶質状態における応力-ひずみ曲線

11Åトバモライトを2000 Kで融解させた後、300 Kまで温度を落とし非晶質構造を作った。引張条件は単結晶での一軸引張と同様である。

図4に非晶質状態における一軸引張の応力-ひずみ曲線を示す。図2の単結晶の場合とは異なり、応力-ひずみ曲線に引張方向による大きな差は見られず、 $\epsilon = 0.1$ 付近まで直線的に応力が増加したのち、なだらかに推移している。

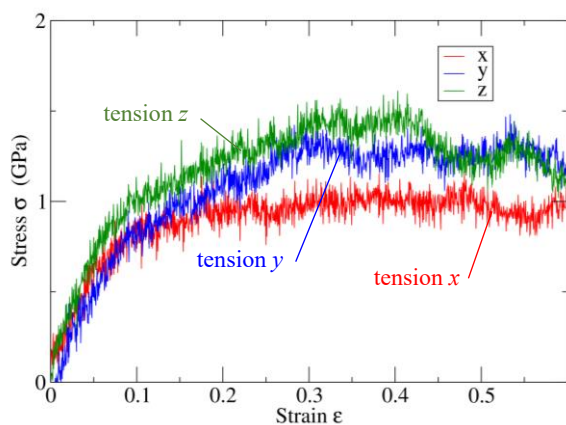


図4 300 Kにおける一軸引張の応力-ひずみ曲線(非晶質)

4. まとめ

本研究ではC-S-Hの微視的破壊メカニズムを明らかにするため、分子動力学法を用いて11Åトバモライトの応力-ひずみ関係を詳細に調べた。本研究で得られた結果は以下の通りである。

- ・荷重方向を変えた変形について、最も強度が高いものは x 方向への圧縮であり、最も強度が低いものは x 方向への引張である。

- ・変形を加える方向によらず、温度が高くなるにつれて弾性領域における応力-ひずみ曲線の傾きは小さくなり、最大応力も低下する。この結果は高温におけるコンクリートの実験結果⁹⁾と調和的である。

- ・非晶質状態においては応力-ひずみ曲線に引張方向による大きな差はみられない。単結晶の一軸引張と比較すると、 y , z 方向の最大応力は大きく低下する。

今後は単結晶、非晶質に加え、多結晶においても単結晶と同様のシミュレーションを行い、粒界を含むトバモライトの微視的な破壊メカニズムを明らかにする予定である。

参考文献

- (1) 荒井, 康. セメントの材料化学, 大日本図書, 2016.
- (2) 栗山, 友.; 斎藤, 豪.; 佐藤, 賢.; 佐伯, 竜. CaO-MgO-SiO₂系材料を大量使用しオートクレープ養生を施したセメント系材料におけるトバモライト生成機構に関する検討. 材料 **2017**, 66 (3), 199-204.
- (3) 三森, 耀.; 斎藤, 豪.; 加藤, 福.; 佐伯, 竜. トバモライトの生成および結晶構造にAlとMgが及ぼす影響. セメント・コンクリート論文集 **2019**, 73 (1), 2-9.
- (4) Cygan, R.; Liang, J.; Kalinichev, A. Molecular Models of Hydroxide, Oxyhydroxide, and Clay Phases and the Development of a General Force Field. *J. Phys. Chem. B* **2004**, 108, 1255-1266.
- (5) Merlino, S.; Bonaccorsi, E.; Armbruster, T. Tobermorites: Their real structure and order-disorder (OD) character. *American Mineralogist* **1999**, 84 (10), 1613-1621.
- (6) 安部, 武.; 古村, 福.; 戸祭, 邦.; 黒羽, 健.; 小久保, 勲. 高温における高強度コンクリートの力学的特性に関する基礎的研究. 日本建築学会構造系論文集 **1999**, 64 (515), 163-168.