

令和 2 年 9 月 7 日現在

機関番号：82101

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17H03292

研究課題名(和文)セメント水和物とアルカリの相互作用の計算科学によるコンクリートの超長期耐久性向上

研究課題名(英文)Improvement of the durability of concrete for very long-term by computational science for the interaction between cement hydrates and alkalis

研究代表者

山田 一夫 (YAMADA, KAZUO)

国立研究開発法人国立環境研究所・福島支部・主任研究員

研究者番号：30590658

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,200,000円

研究成果の概要(和文)：コンクリートの耐久性には、その空隙水中のアルカリイオン(Na, K, Cs)濃度が影響するものがある。その濃度はコンクリートの結合材であるセメント水和物への収着で決定され、そのモデル化が耐久性の超長期予想に必須である。本研究では、収着実験結果について、個体NMR分析、及び分子動力学・量子化学計算によりアルカリイオンの原子レベルの基本的挙動を明らかにしたうえで、アルカリの移動を超長期にわたり予測できる多元素物質移動計算に必要な基盤情報を得た。

研究成果の学術的意義や社会的意義

コンクリート中のアルカリの挙動の理解は、アルカリ骨材反応や遅延エトリンサイト生成など耐久性問題や放射性Csの処分施設設計などで重要であるが、長期的挙動を推定する基礎情報が不足していた。アルカリは液相からセメント水和物に一部が収着されるが、単なる実験では理解しえない固液間の分配の作用機構を、固体NMRによる収着状態解析、計算科学により原子レベルでの現象の解明さて、アルカリ収着に及ぼす種々の因子が明らかとなり、コンクリートの超長期耐久性に資する情報を得た。

研究成果の概要(英文)：For some type of concrete durability, the concentrations of alkali ions such as Na, K, and in its pore solution can affect. Those concentrations are determined by the sorption on cement hydrates (binder of concrete) and for very long-term estimation of durability, it is required to modelling them. In this study, based on sorption experiments, the fundamental behaviors of alkali ions were clarified in atomic level by solid-state NMR, and molecular dynamic/quantum chemistry simulation. And fundamental information required for multi-species transfer model enable to estimate the alkali movement for very long-term.

研究分野：土木材料・施工・建設マネジメント

キーワード：アルカリ セメント水和物 アルミノ珪酸カルシウム 分子動力学 量子化学 シミュレーション NMR 収着

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

## 1. 研究開始当初の背景

放射性物質に汚染された廃棄物（汚染廃棄物）のうち可燃物は焼却減容化され、さらに焼却灰の溶融により、溶融飛灰中に放射性セシウム（ $r\text{-Cs}$ ）は数 100 倍に濃縮される。この飛灰の主成分は可溶性塩類であり、 $r\text{-Cs}$  の溶出率も高い。また、放射性ストロンチウム（ $r\text{-Sr}$ ）についても、そのコンクリート中の挙動についても理解が求められる。

この飛灰やさらに濃縮・安定化した廃棄物は、鉄筋コンクリート構造物に処分されるが、100 年単位と通常の土木・建築構造物の長期耐久性を一桁超えた超長期間の性能予測が必要である。この問題に対し、国立環境研究所では、研究代表者が中心となって「汚染焼却飛灰廃棄物等の最終処分場のコンクリート技術適用に関する技術資料」を取りまとめ、300 年の超長期供用が求められる最終処分場のコンクリートの耐久性確保の考え方等が取りまとめられた。

一方、これらの技術資料の取りまとめからコンクリートの劣化現象に関する幾つかの問題が明らかになった。劣化現象には種々あるが、特にアルカリ骨材反応（ASR）はコンクリート材料や使用環境に依存する劣化であり、現在も十分に制御できていない。ASR の超長期的抑制には材料設計に配慮することが重要であるが、理論予測技術が不十分で、経験則で対策が決定されている。ASR 抑制対策の有効期間は分かっていない。

しかも、可溶性塩類の処分という前例のない過酷環境におけるコンクリートの超長期耐久性を明らかにし、コンクリートに求められるバリア機能を担保するためには、理論的なアプローチが不可欠である。

ASR は、コンクリートの空隙水に含まれる  $\text{Na}^+$  や  $\text{K}^+$  といったアルカリイオンが強く影響する。また、汚染焼却飛灰に含まれる  $r\text{-Cs}$  に対するコンクリートのバリア機能の観点からも、これらアルカリイオンとセメント水和物の相互作用を明らかにすることは基盤情報として重要である。

従来の研究では、コンクリート中でアルカリがどのような挙動を示すか、という本質的な点は明確になっておらず、純粋な系のマクロな実験（セメント水和物のアルカリ溶液浸漬）などからモデル化されている。

セメント水和物としては、特にアルミノ珪酸  $\text{Ca}$  水和物（ $\text{C}-(\text{A}-)\text{S}-\text{H}$ ）が重要であり、 $\text{Ca}/(\text{Si}+\text{Al})$  比がアルカリ収着に影響することは分かっている。しかし、 $\text{C}-\text{A}-\text{S}-\text{H}$  は非晶質であり、その構造とアルカリの相互作用評価には、固体 NMR 分析が必須である。

NMR 分析は原子配列の平均的な情報を与えるが、原子・分子レベルでのセメント水和物とアルカリイオンの相互作用については、明確な情報を与えない。近年、量子化学計算や分子動力学計算などの計算科学のセメント化学への応用が国外では急速に発達している。これらの計算科学をセメントコンクリートに適用することで、より本質的なメカニズムを解明することができる。

これらの原子レベルでの作用機構を理解したうえで、コンクリートの状態とアルカリの相互作用を理解し、実環境における物質移動と ASR 抑制の超長期予測を可能とする基盤情報が求められていた。

## 2. 研究の目的

以上の学術的背景を踏まえ、本研究は「セメント系水和物とアルカリイオンの相互作用に関する原子・分子レベルの計算科学と水和・吸着状態解析によるコンクリートの超長期耐久性の向上方策の提案」を行う。以下に具体的に本研究の要素研究を示す。

- (1) 環境影響による劣化を考慮したセメント水和物とアルカリイオンの相互作用の実験的検証
- (2) セメント水和物とアルカリイオンの相互作用のモデル基盤の構築
- (3) 過酷環境下でのコンクリートの超長期耐久性向上方策の考案

## 3. 研究の方法

本研究の方法は、以下の

- (1) 水和セメントとその変質物を用いた広範囲な濃度のアルカリとの相互作用の実験的検討、
  - (2) セメント水和物の固体 NMR による解析、
  - (3) 分子動力学計算によるモデル  $\text{C}-\text{A}-\text{S}-\text{H}$  上へのイオンの競争吸着の再現とイオン分配への応用、
  - (4)  $\text{C}-\text{S}-\text{H}$  表面のシラノール基とアルカリの相互作用の量子化学計算、
  - (5) アルカリ濃度を考慮した実環境での ASR 膨張の数値予測手法の開発、
- の 5 段階に分けて実施した。

## 4. 研究成果

(1) 水和セメントとその変質物を用いた広範囲な濃度のアルカリとの相互作用の実験的検討  
コンクリート中でアルカリと相互作用する主体となる水和セメントを用いて、水和セメントと Cs または Sr との相互作用を浸漬実験により検討した。イオン能濃度範囲は  $1\ \mu\text{M} \sim 0.1\text{M}$  とした。

Cs の吸着に対して、他のアルカリイオンが影響するため、水和セメントを粉碎後、200 倍の純粋で 2 回洗浄して収着試験を実施した。また、変質として、Ca を溶脱させた試料、炭酸化させた試料も用いた。

図 1 に Cs の収着挙動を、液固比間の分配の比率 (Rd) として示す。Rd は、固相濃度 (mol/kg) と液相濃度 (mol/L) の比である。Rd は原子力分野では「分配係数」と称されるが、濃度依存性と共存イオン効果を持った数値であり定数ではなく、ここでは分配比と称することとした。

洗浄試料に対して、Cs はほとんど吸着を示さなかったが、変質によって、特に低濃度において、Cs の Rd は大きくなった。Cs 収着に Sr は影響せず、両者は異なる機構でセメント水和物と相互作用すると推定された。Na, K は Cs の Rd を大幅に減少させたが、変質試料においては、Cs は選択的に収着されることが分かった。

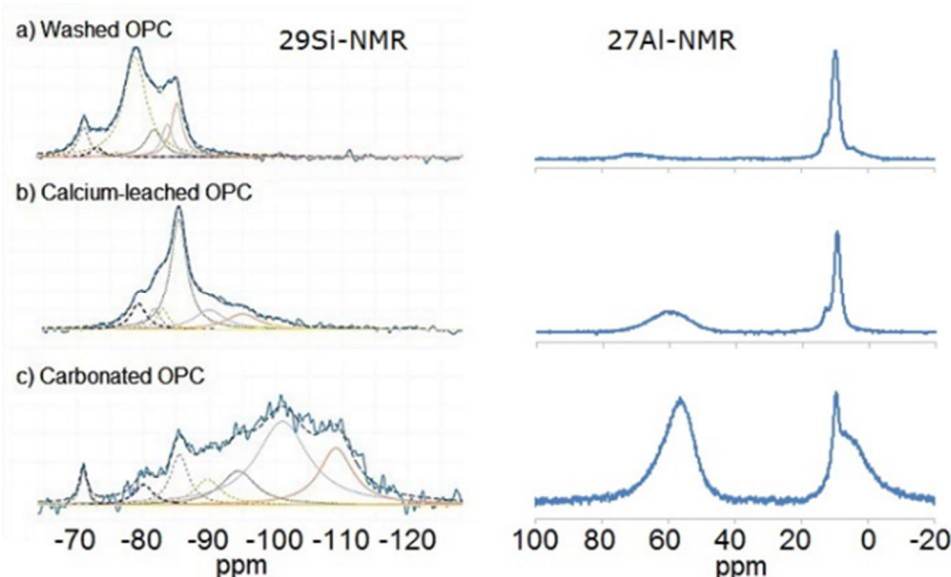


図 1 Cs の水和ペーストへの収着挙動

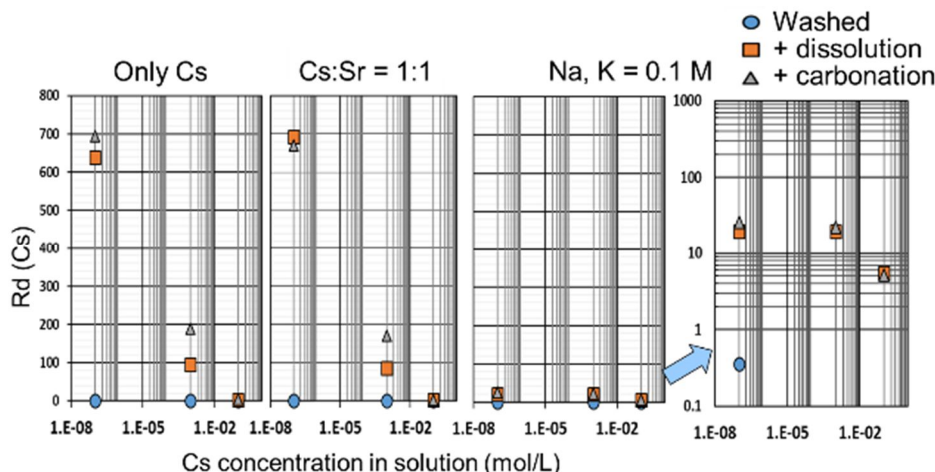


図 2 水和セメントペーストの変質による構造変化の固体 NMR 分析

## (2) セメント水和物の固体 NMR による解析

変質により Cs は多量に収着するようになった。この原因を固体 NMR により、Si と Al のケミカルシフトを測定し (原子構造との対応が既知) その原因を推定した。

測定結果を図 2 に示す。Si-29 の結果を見ると、洗浄セメント水和物は、-70ppm 付近の未水和物、-80ppm 付近の鎖状水和物末端、-85ppm 付近の鎖状水和物の鎖部分、からなることが分かる。

Al-27 の結果からは、種々のアルミン酸 Ca 塩が主体であることが分かる。

Ca を溶脱させると未水和物が無くなり、鎖状水和物末端が減少し、鎖が長くなり、-95ppm 付近の 3 方向に結合したシリケートが存在し、その骨格に取り込まれたと考えられる 4 配位の Al が増える。

炭酸化すると、未水和物は残存したまま、鎖状水和物が減少し、-110ppm 付近の 4 方向、3 元的に結合したシリケートが増加し、4 配位の Al が 6 配位の Al と同程度まで増加する。6 配位の Al もブロードなピークとなり多様な構造を持つようになっていると推定される。

セメント水和物の炭酸化というと、水酸化 Ca が炭酸 Ca になる反応が通常注目されるが、セメント水和物の主成分である C-A-S-H やアルミン酸 Ca 水和物も炭酸化し、CaCO<sub>3</sub> とアルミノシリカゲルが生成する。アルミノシリカゲルはいわゆるジオポリマと推定され、構造内の Al のサイトおよび 3 配位の Si のサイトは、アルカリ吸着点となる。さらに、ジオポリマはイオン交換性を有し、Cs を選択的に吸着する。収着実験で変質した場合に、Cs の Rd が増加し、Na や K が共存しても Rd が一定の値を示した原因は、この変質により生じたジオポリマに由来するものであ

ることが分かった。また、Al の 6 配位 (アルミナゲル) から 4 配位への変化は、アルカリイオンにより促進されるものであることも分かった。

### (3) 分子動力学計算によるモデル C-A-S-H 上へのイオンの競争吸着の再現とイオン分配係数評価への応用

固体 NMR による分析では、変質による構造変化がアルカリ吸着に重要な役割を果たしていることが分かったが、そもそも、健全な C-A-S-H への多種類のアルカリの競争吸着の様子についてはよく分かっていない。そこで、反応を考慮できる分子動力学 (MD) 計算により、層間 1nm の C-A-S-H 表面での、Na イオンと Cs イオンの挙動を解析した。

解析結果を図 3 に示す。この計算条件では、Na は C-A-S-H のより近傍に存在し、Cs は C-A-S-H の表面付近ではあるが、Na よりも外側に位置する結果となった。これは Na のイオン半径が Cs よりも小さいため、アニオンサイトのシリケートやアルミネートとより静電力的にイオン半径のより大きい Cs よりもより強い相互作用を示すためである。

しかし実験結果 (図 1 右など) では、Na よりも Cs がより吸着しやすい結果となり、計算結果と一見矛盾している。これは、アルカリの吸着挙動を考慮せずに、吸着後の状態だけを評価しているためである。イオン窮迫は液相中の水和状態から、脱水和してイオン交換体表面へのイオン吸着となる。

イオン選択係数 ( $K_{Ca/Na}$ ) は、式[1]により、系のエネルギー変化  $E$  と結び付けられる。

$$E = RT \ln(K_{Cs/Na})$$

ここに、 $R$ : 気体定数、 $T$ : 絶対温度

そこで、Na と Cs イオンについてそれぞれ、吸着前後の自由エネルギーを求め、その差を求めた。その結果、Na-Cs のイオン交換によるエネルギー差は、正の値となり、Na 吸着がより不安定となり、その計算値は、吸着実験のイオンの分配比から求めた値と近いものであった。

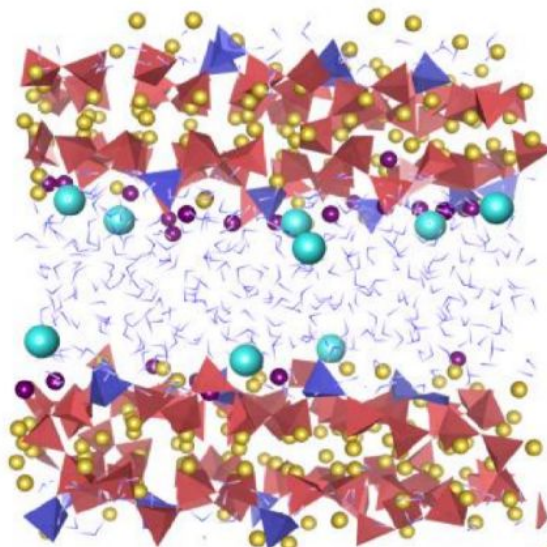


図 3 C-A-S-H への Na と Cs の競争的イオン交換の MD シミュレーション  
黄色の小球 : Ca、紫色の小球 : Na、水色の大球 : Cs、赤の四面体 : Si、青の四面体 : Al

### (4) C-S-H 表面のシラノール基とアルカリの相互作用の量子化学計算

アルカリイオン吸着には、C-A-S-H 場の吸着状態が重要であることが MD 計算から示唆されたため、量子化学計算によりより詳細に水和 Na の吸着構造を調べた。

モデル C-S-H 表面と水和 Na イオンの相互作用の計算結果を図 4 に示す。C-S-H 再表面では水分子 2 個が乖離し、吸着している。この状態のほか、6 個の水分子が吸着したまま、アニオンサイトと静電相互作用する状態も検出された。これらの吸着状態のエネルギー差は小さく、相互に入れ替わっていると推定された。この吸着した状態の Na のケミカルシフトを量子化学計算で求めたところ、固体 NMR による測定値を再現でき、量子化学計算による Na の C-S-H 表面への吸着状態の再現が正しいものであることを傍証する結果となった。

### (5) アルカリ濃度を考慮した実環境での ASR 膨張の数値予測手法の開発

ここまでアルカリと C-A-S-H との相互作用の実験的評価、NMR による構造解析、計算科学による詳細なイオン吸着について検討してきた。これらの結果は、Reaction Transfer Model と呼ばれる、コンクリートを構成する固液間の熱力学的相平衡計算多元素移動モデルによる物質移動予測に応用できるものであり、コンクリート中の物質移動を時間の経過とともに予測でき、超長期にわたる特性変化推定に応用できる。実験によると、C-A-S-H の  $Ca/(Si+Al)$  比や変質により、アルカリ吸着特性が変化するのはもとより、アルカリ濃度も考慮する必要がある。アルカリの吸着



サイトであるシラノール基とアルカリの溶解平衡定数を実験結果へのフィッティングにより求め、多様な条件で相平衡計算が可能となった。

また、本研究開始当初の背景として、ASR 問題を取り上げた。ASR については、直接アルカリ濃度変化を、吸着モデルを実装して長期予測ができるまでには至っていないが、温度と降雨影響を考慮し、暴露による膨張挙動を再現することに成功した(図 5)。ASR によりアルカリシリカゲルが生成するが、このゲルはアルカリ吸着を示し、コンクリート液相のアルカリ濃度は経時的に低下する。この現象をモデル化することで、アルカリ反応性が極めて高い骨材の複雑な挙動を数値モデルにより解析する手法の解析も進めている。

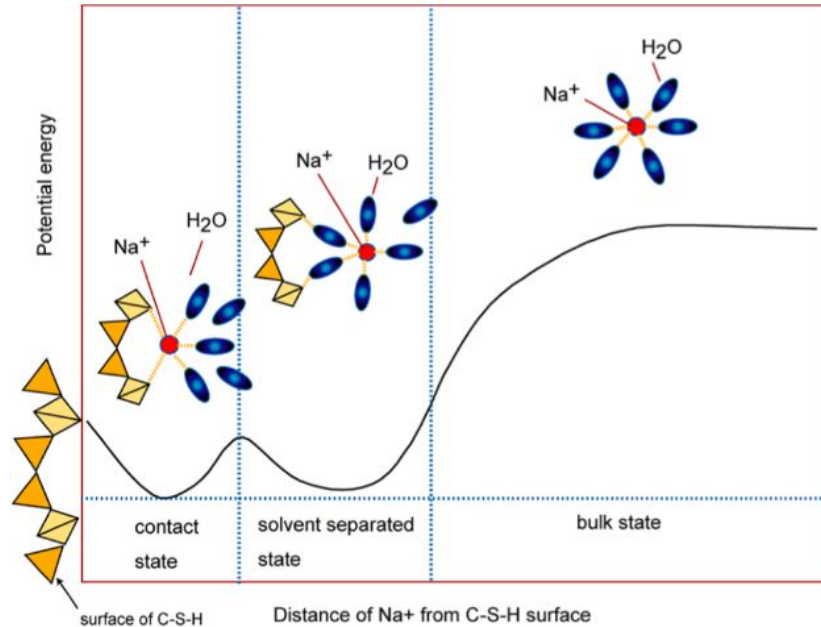


図 4 C-S-H と水和 Na イオンの相互作用

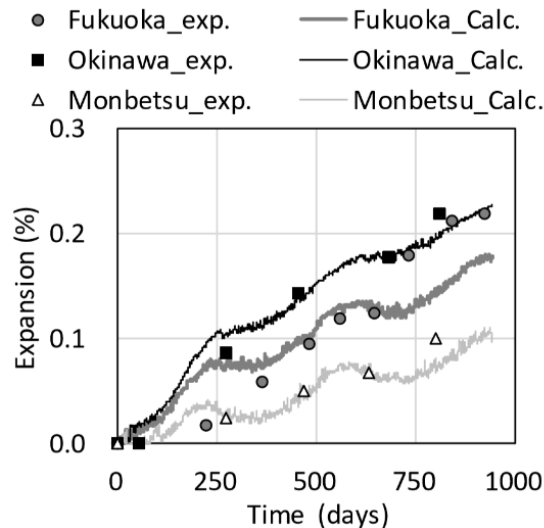


図 5 異なる環境条件への暴露試験体の ASR 膨張挙動と数値モデルによる予測

#### (6) まとめ

本研究では、セメント水和物とアルカリの相互作用について、種々の組成の端成分や変質を考慮した水和セメントを用いた収着実験を行うとともに、固体 NMR により吸着するセメント水和物の結晶構造を解析し、さらに実験では理解しえない微細な吸着の原始的挙動について分子動力学計算と量子化学計算により理解を深め、その結果を超長期の物質移動計算が可能で、熱力学的相平衡多元素移動モデルへ実装するまでに至った。

本研究が目指しているのは、事故により生じた放射性 Cs や Sr により汚染した廃棄物(塩化物塩からなり、コンクリートバリアは高塩濃度という過酷環境にさらされる)の処分施設の超長期にわたる健全性確保であり、バリア性能の評価として物質移動評価だけではなく、ASR によるコンクリートの劣化の時間的予測も含めた。ASR については、アルカリ濃度が予測のキーとなるが、本研究の範囲では、実環境における膨張を数値モデルにより予測できるところまでできた。今後はさらに、アルカリ濃度変化を明に考慮するモデルへの展開が求められる。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Tachikawa Hiroto, Haga Kazuko, Yamada Kazuo	4. 巻 1115
2. 論文標題 Mechanism of K + , Cs + ion exchange in nickel ferrocyanide: A density functional theory study	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Computational and Theoretical Chemistry	6. 最初と最後の頁 175 ~ 178
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) <a href="http://dx.doi.org/10.1016/j.comptc.2017.06.009">http://dx.doi.org/10.1016/j.comptc.2017.06.009</a>	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Duque-Redondo Eduardo, Kazuo Yamada, Lopez-Arbeloa I?igo, Manzano Hegoi	4. 巻 20
2. 論文標題 Cs-137 immobilization in C-S-H gel nanopores	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 9289 ~ 9297
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1039/c8cp00654g	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Yuichiro Kawabata, Kazuo Yamada, Go Igarashi, Yasutaka Sagawa	4. 巻 16
2. 論文標題 Effects of soak solution type on alkali release from volcanic aggregates - Is alkali release reality responsible for accelerating ASR expansion? -	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Advanced Concrete Technology	6. 最初と最後の頁 61 ~ 74
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi:10.3151/jact.16.61	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Hiroto Tachikawa, Kazuko Haga, Sadayuki Watanabe, Kazuo Yamada	4. 巻 124
2. 論文標題 Local Structures and Electronic States of C-S-H - Sodium - H2O Interface	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. C, 2020	6. 最初と最後の頁 5672-5680
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b11302	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計19件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 12件）

1. 発表者名 Duque-RedondoEduardo, Yamada Kazuo, Inigo Lopez-Arbeloaa, ManzanoHegoi
2. 発表標題 MD simulation of alkali meal ions with C-A-S-H
3. 学会等名 セメント技術大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 原澤 修一, 芳賀 和子, 渡邊 禎之, 山田 一夫
2. 発表標題 セメント水和物へのCs、Srイオンの収着に及ぼすアルカリイオンの影響
3. 学会等名 日本原子力学会秋の大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yamada, K., Haga, K., Watanabe, S, Harasawa, S
2. 発表標題 ALKALI UPTAKE EVALUATIONS OF C-A-S-H WITH STRUCTURE ANALYS BY NMR AND OF DEGRADATED OPC PASTE
3. 学会等名 2nd Workshop on C-S-H containing aluminium: C-A-S-H II (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Kawabata <sup>1</sup> , K. Yamada
2. 発表標題 UNDERSTANDING OF THE EXPANSION MECHANISM BY ASR AND ITS IMPACT ON TESTING METHOD AND EXPANSION ESTIMATION
3. 学会等名 Conference in honor of Centennial LMC (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sadayuki Watanabe, Kazuko Haga, Kazuo Yamada
2. 発表標題 The Effect of Ca/(Si+Al) of C-(A-)S-H Characterized by NMR on the Sorption of Alkali Metal Ions
3. 学会等名 NUWCEM, Cement-based Materials for Nuclear Wastes (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Yamada, Y. Kawabata, S. Ogawa, K. Shibuya, J. Etoh, A. Teramoto, Go. Igarashi, I. Maruyama
2. 発表標題 OPTIMIZATION OF CONCRETE PRISM TEST FOR ASR EXPANSION BY ALKALI-WRAPPING AND A NEW APPROACH ASSESSING THE ALKALI REACTIVITY OF CONCRETE FOR NECLEAR FACILITIES
3. 学会等名 Sustainable Materials, Systems and Structures, SMSS (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田地川浩人, 山田一夫
2. 発表標題 C-S-H モデル分子とNa+イオン-水との相互作用の 量子化学計算
3. 学会等名 セメント技術大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuo Yamada, Yuichiro Kawabata, Go Igarashi, Yasutaka Sagawa
2. 発表標題 Importance of the “ pH of concrete ” in various aspects of concrete durability and performance
3. 学会等名 15th International Congress on the Chemistry of Cement (国際学会)
4. 発表年 2019年



1. 発表者名 Kazuko Haga, Sadayuki Watanabe, Kazuo Yamada
2. 発表標題 Quantification of interaction between alkali metal ions and C-(A-)S-H/cement paste for a wide range of ion concentrations
3. 学会等名 15th International Congress on the Chemistry of Cement (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuo Yamada, Yuichiro Kawabata, Shoichi Ogawa, Kazuko Haga, Yasutaka Sagawa, Takamasa Ochiai
2. 発表標題 Importance of Alkali-Wrapping for CPT
3. 学会等名 Swelling Concrete in Dams and Hydraulic Structures: DSC 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Yuichiro Kawabata, Kazuo Yamada, Shoichi Ogawa
2. 発表標題 Modelling of environmental conditions and their impact on the expansion of concrete affected by the alkali-silica reaction
3. 学会等名 Swelling Concrete in Dams and Hydraulic Structures: DSC 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山田一夫
2. 発表標題 県外最終処分に向けた 減容化濃縮物の廃棄体化
3. 学会等名 環境放射能除染学会第13回講演会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kazuo Yamada, Kazuko Haga, Sadayuki Watanabe, Shuichi Harasawa
2. 発表標題 Alkali uptake evaluations of C-A-S-H with structure analysis by NMR and of degraded OPC paste
3. 学会等名 2nd Workshop on C-S-H containing aluminium: C-A-S-H II (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 村上光樹、山田一夫、川端雄一郎、佐川康貴
2. 発表標題 ASR 促進試験におけるアルカリラッピングの濃度の検討
3. 学会等名 第72回セメント技術大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sadayuki Watanabe, Kazuko Haga, Kazuo Yamada
2. 発表標題 The Effect of Ca/(Si+Al) of C-(A-)S-H Characterized by NMR on the Sorption of Alkali Metal Ions
3. 学会等名 NUWCEM, Cement-based Materials for Nuclear Wastes (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Eduardo Duque-Redondo, Kazuo Yamada, Hegoí Manzano
2. 発表標題 Radionuclides immobilization in cement matrix: capacity of C-(A)S-H to retain Cs
3. 学会等名 15th International Congress on the Chemistry of Cement (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 富田さゆり、小林佑太郎、芳賀和子、細川義文、山田一夫
2. 発表標題 放射性物質によるコンクリート汚染の機構解明と汚染分布推定に関する研究(6) 建屋地下コンクリートへのCs、Srの浸透挙動のモデル化
3. 学会等名 日本原子力学会秋の大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yuichiro Kawabata, Kazuo Yamada, Shoichi Ogawa, Yasutaka Sagawa
2. 発表標題 Numerical simulation of the expansion behavior of field-exposed concrete blocks based on a modified concrete prism test
3. 学会等名 Proceedings of the International Conference on Sustainable Materials, Systems and Structures (SMSS 2019), Durability, Monitoring and Repair of Structures (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山田一夫、Duque-Redondoa Eduardo、Hegoi Manzano、市川恒樹
2. 発表標題 珪酸 Ca 水和物のアルカリイオン交換反応の MD 計算による評価の試み
3. 学会等名 環境放射能除染学会第9回研究発表会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	田地川 浩人 (Tachikawa Hiroto)  (10207045)	北海道大学・工学研究院・助教   (10101)	

## 6. 研究組織（つづき）

	氏名 (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担者	渡邊 禎之 (Watanabe Sadayuki)  (70463065)	地方独立行政法人東京都立産業技術研究センター・事業化支援本部技術開発支援部先端材料開発セクター・主任研究員  (82670)	
研究 協力者	マンザノ ヒーゴイ (Manzano Hegoi)	バスク州立大学・濃縮物性物理学部・教授	