

研究種目：若手研究(スタートアップ)

研究期間：2008～2009

課題番号：20860061

研究課題名(和文) 微小空隙中の液状水の粘性挙動の解明とコンクリートの耐久性能評価

研究課題名(英文) Verification of the viscosity behavior of liquid water in micropores and evaluation of durability of concrete

研究代表者 岡崎 慎一郎 (OKAZAKI SHINICHIRO)

愛媛大学・理工学研究科・助教

研究者番号：30510507

研究成果の概要(和文)：本研究では、分子シミュレーションによる数値実験および透水実験の結果から微小空隙中の液状水粘性モデルを立脚し、その妥当性の検証を実施した。その結果、透水性および粘性は硬化体の化学組成に影響を受けること、分子シミュレーションによる液状水の粘性に関する数値実験により、空隙径および L-J ポテンシャルの相違が液状水の粘性に与える影響は大きいことが明らかとなった。また、微小空隙中の液状水の粘性に関する構成則の立脚することができた。

研究成果の概要(英文)：The present research reproduces the water behavior model in micropore by the result of water permeability test and molecular dynamics simulation. It is become clear that permeability of concrete and water viscosity in micropore are affected the difference of chemical composition or L-J potential of pore wall. Furthermore, constitutive law of viscosity in micropore is built by the result of this research.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008 年度	1,320,000	396,000	1,716,000
2009 年度	1,200,000	360,000	1,560,000
総計	2,520,000	756,000	3,276,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：土木工学，土木材料・施工・建設マネジメント

キーワード：コンクリート，液状水，粘性，分子シミュレーション，透水試験，耐久性

1. 研究開始当初の背景

現在、コンクリート構造物の設計において世界的に体系化が図られている性能照査型設計では、構造物の性能を直接的にかつ定量的に評価することが求められている。鉄筋コンクリート構造物において、供用中の性能劣化は決して避けることはできないが、劣化現象のほとんどすべてに水分が関与しているため、構造物の寿命の算定や効率的な維持管理の策定には精緻な水分移動モデルの構築

が必要である。しかし、コンクリートのような微小空隙中の水分挙動を実験によって直接的に同定するのは極めて難しく、現在にいたるまで水分移動則の改良がなされていないために、特に数年～数十年にわたる有限構造体コンクリートの長期的劣化挙動が解析による高精度な追跡ができていないのが現状である。

2. 研究の目的

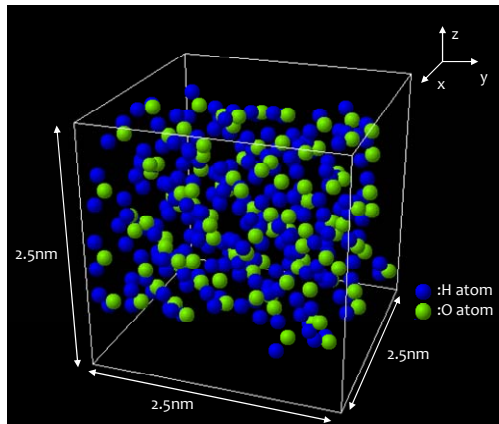


図1 バルクにおける液状水

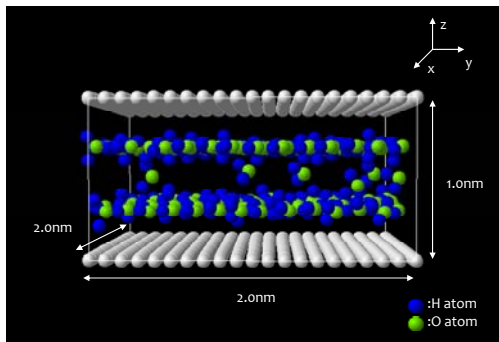


図2 微小空隙における液状水

本研究では、いまだ十分な解明に至っていない微小空隙中の液状水の粘性挙動に着目し、分子動力学シミュレーションによってその挙動の解明し、構成則を立脚することによって水分移動モデルの高度化を行う。

3. 研究の方法

- (1)分子動力学シミュレーションコードの妥当性の検証を実施するとともに、微小空隙の空隙径の相違が粘性挙動に与える関係を数値実験により明らかにする。
- (2)コンクリート中の液状水の粘性を定量化するため、コンクリートを対象とした透水試験および空隙構造を同定し、既存の透水モデルと比較することによって粘性の具体値を算出する。さらに、微小空隙中の液状水挙動の構成則の立脚を行う。
- (3)立脚した構成則の妥当性の検証として、1m厚のコンクリート供試体の透水試験結果との比較を行う。

4. 研究成果

- (1)コンクリート中の粘性の定量化
 - ①分子動力学シミュレーションの信頼性の検証

研究に用いる分子動力学シミュレーションコードの信頼性の検証を行う。バルク状態(図1)において、液状水の粘性は $1.002\text{mPa}\cdot\text{s}$

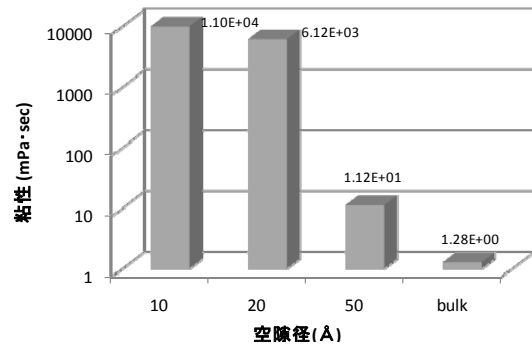


図3 空隙径と粘性の関係

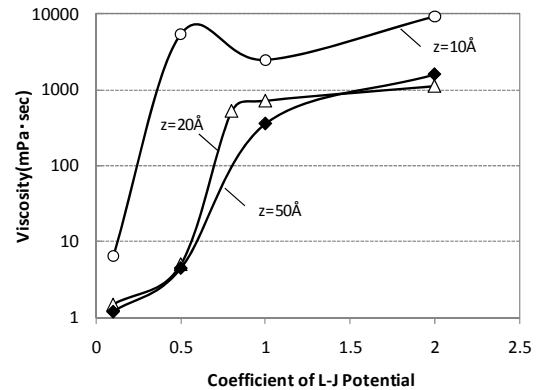


図4 L-Jポテンシャルの相違と粘性の関係

$\text{sec}(20^\circ\text{C})$ であることを検証材料とし、分子動力学による粘性の計算結果から信頼性の検証を行う。分子の粘性式を統計力学的に導いたアインシュタインによる提案式を用いて計算した結果、バルク空間においては、粘性が $1.260\text{mPa}\cdot\text{sec}$ と算出され、およそ20%程度の誤差はあるものの、十分な精度を有するとみなし、本計算コードを研究では用いることとする。次に液状水の粘性の空隙依存性について検討する。図2に空間内に壁面が存在する場合のスナップショットを示す。壁面のL-Jポテンシャルを白雲母と同じ値とし、さらに $+1e$ の電荷を壁面に付与させることによってクーロンポテンシャルを考慮した計算結果を図3に示す。10Åにおいて粘性はバルク空間のおよそ10000倍を示し、空隙径の増加に伴い粘性は減少する傾向がみられ、既往の知見と同様、粘性の空隙径依存性を本数値実験によっても確認することができた。

②壁面のポテンシャルが粘性に与える影響

壁面のL-Jポテンシャルおよびクーロンポテンシャルが液状水の粘性に与える影響を検討する。感度解析の結果、本シミュレーションが対象とする微小空隙においては、クーロンポテンシャルの相違が粘性に与える影響は極めて小さく、L-Jポテンシャルの影響が支配的となることが判明した。以下、L-Jポテンシャルと粘性変化についての検討結果を述べる。図4にL-Jポテンシャル係数、

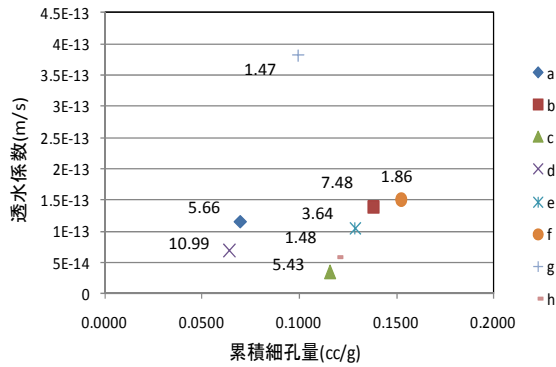


図 5 累積細孔量と透水係数および Ca/Si 比の関係

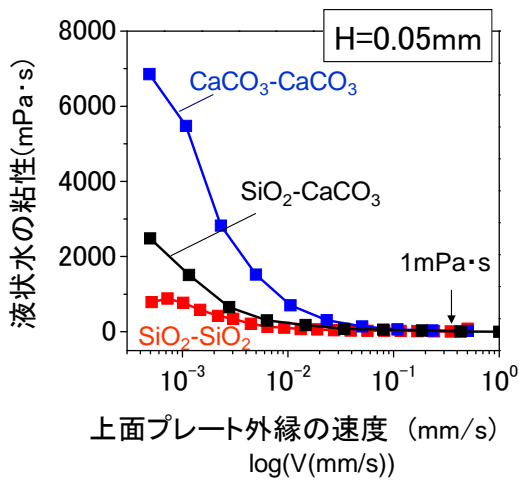


図 6 狭小空間を形成するプレートの組成および回転粘度計の上面プレートの回転速度と液状水の粘性の関係

空隙径と粘性の関係を示す。なお、L-J ポテンシャル係数とは、白雲母のポテンシャル関数のすべての項に乘じる係数を示す。係数を 0.1~2 まで変化させると、どの空隙径においてもおよそ 1000 倍程度の相違が確認された。また、この感度解析結果により、以下の粘性に関する構成則を見出すことができた。

$$\eta = \ln \alpha \times \exp(\beta H)$$

ここに、 η ：液状水の粘性、 α ：L-J ポテンシャルに関する係数、 β ：空隙径に関する係数、 H ：空隙径である。

この感度解析結果を用いてコンクリート中の粘性を同定する。

(2) 硬化体の組成が透水性に与える影響

硬化体の組成、つまり壁面ポテンシャルの相違が透水に与える影響を検討するために、種々の混和材を加えたセメントペースト供試体の透水性、化学組成および岸・吉田法にもとづく連続空隙量を測定した。図 5 に結果を示す。なお各プロットの添字はセメントの

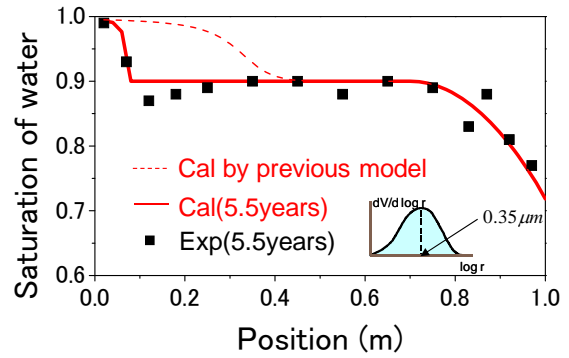


図 7 一面透水実験による飽和度分布結果と解析結果

科学的組成の指標とされる Ca/Si 比を示している。40nm までの累積細孔量が 0.1cc/g 以上の比較的空隙の多く粗大な空隙が多く存在する場合においては、Ca/Si 比の変化に関係なく、累積細孔量の増加に伴い透水係数が増加しているのに対し、それ以下の累積細孔量においては、僅かな累積細孔量の相違で極めて大きな透水量変化が見られた。累積細孔量が小さい場合においては、Ca/Si 比を確認すると、この値の減少に伴って透水係数が増加する傾向が確認された。さらに、レオメータによる狭小空間中の液状水の粘性を測定した結果、空隙径 $H=0.05\text{mm}$ における狭小空間中の液状水の粘性は、流体の速度および硬化体の組成に支配され、壁面組成が Ca で支配的となる場合においては、Si の場合よりも空隙中の液状水の粘性は大きくなることを回転粘度計による試験によって確認しており(図 6)、この実験事実とも矛盾しないことが確認された。この関係の構成則への導入は、粘性式における α の値に Ca/Si 比を反映させることで可能となる。

空隙すべてにハーゲンポアズイユ流れを仮定した透水モデルと、透水係数の実験値との比較により、粘性式的具体値は得られたものの、図 5 において特に細孔量の多いものについての再現性が乏しいため、モデルの改良が必要ではあるが、粘性式に関する具体形を提示することができたのが、本研究の成果である。

(3) 妥当性の検証

妥当性の検証として、1m 厚のコンクリート供試体の一面から 0.25MPa の水圧を作用させたときの水分飽和度の測定結果を用いる。空隙分布は、コンクリート供試体から採取した碎片を水銀圧入法によって測定された結果を使用し、空隙のすべてにハーゲンポアズイユ流れに提案する粘性の構成則を適用した。なお、使用したコンクリートには低熱ポルトランドセメントが使用されており、この Si/Ca 比を構成則のパラメータに適用してい

る。図7に実験結果と、解析結果を示す。また、粘性をバルクに等しい一定としたこれまでのモデルによる解析結果を比較のために併載する。粘性を一定とした場合において過大評価となることに対して、提案モデルの使用によって水分浸透の精緻な解析が実現できた。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計0件)

〔学会発表〕(計1件)

杉本淳, 岡崎慎一郎, 氏家勲 “硬化体の化学組成がコンクリートの透水に与える影響に関する基礎的研究” 土木学会平成22年度全国大会第65回年次学術講演会, 平成22年9月発表決定

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

○出願状況(計0件)

○取得状況(計0件)

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.cee.ehime-u.ac.jp/~zairyou/research.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

岡崎 慎一郎 (OKAZAKI SHINICHIRO)

愛媛大学・理工学研究科・助教

研究者番号: 30510507