

実コンクリート構造物の長期耐久性評価

-高分子バリア層を表面に有するコンクリート中の確率的低分子拡散シミュレーション-

Long-Term Durability Evaluation of Reinforced Concrete Structures

-Stochastic Diffusion Simulation in Concrete with Polymeric Coatings on Surface-

研究代表者：石田崇人（名古屋大学）

研究協力者：仲井文明（名古屋大学）

鉄筋コンクリート構造物中を拡散する低分子（塩化物イオン、CO₂、O₂ など）が内包された鉄筋に到達すると鉄筋腐食を起こす。腐食現象は鉄筋腐食は構造物の耐荷性能に大きく影響するため、腐食開始時期が実質的な構造物寿命と言える。多くの建築物は高分子を構成要素とするバリア塗膜を有するが、そのバリア層とかぶりコンクリートを通過し、鉄筋表面に到達した低分子が腐食反応を駆動する。鉄筋腐食時期を適切に予測するには、長期暴露による高分子バリア層の劣化を考慮に入れて拡散現象をモデル化する必要がある。本研究課題では粗視化分子動力学や Kinetic Monte Carlo 法のような計算物理学的手法を駆使して、表面保護塗膜を有する RC 構造物の真に実効的な寿命の推定に挑んでいる。当該研究課題を具体的に細分化すると、1) RC 構造物表面の高分子塗膜の非平衡劣化計算、2)不均質 media であるセメント系材料中の低分子拡散現象の計算の 2 本立てで研究を実施しており、それぞれについて本年度に得られた成果を下記に整理する。

1) 高分子の非平衡劣化計算手法の確立

樹脂材料の劣化シミュレーションには本プロジェクトにて昨年度に開発した、分子動力学ソフトウェア LAMMPS をベースに熱酸化劣化の反応速度論を連成した粗視化劣化計算モデルを用いる。手法構築を達成した前年度に続き、本年度は劣化過程で生じるフリーラジカルの拡散性が劣化進展に与える影響について調査した[1] (図 1)。その結果、フリーラジカルの拡散性が低いと不均一劣化をわずかに増強するものの、全体の劣化シナリオへの影響は限定的であることが明らかになった。

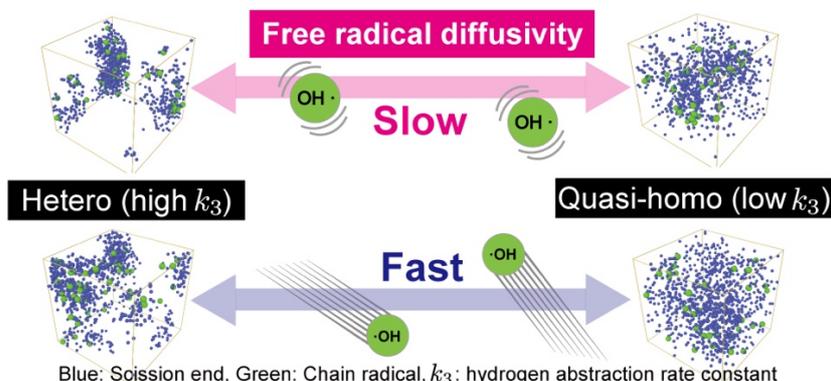


図 1 高分子材料の非平衡劣化計算の概念図（粗視化、不均一劣化基準）

また、劣化領域の空間分布がガウス分布に近いことが明らかになり、これは劣化領域が進展していく振る舞いを反応拡散方程式のフレームワークで記述することができる可能性を示唆するものであった。本成果は Polymer Journal 誌の若手研究者特集号に掲載され, Rising Stars in Polymer Science 2024 に選出された (論文業績[1])。加えて、関連成果が 1 報掲載 [2], 1 報投稿中[3]である。

2) 不均質 media であるセメント系材料中の低分子拡散現象モデリング

コンクリートは種々の大きさの不均一構造を有している。本年度はセメントペースト中の水素分子と酸素分子の拡散を取り扱った (論文業績[4])。手法は、申請者らが昨年度本プロジェクトの支援のもと確立した揺らぐ拡散モデルを用いた。この手法による計算によって、ある一定の短時間領域では気体分子の変位分布がガウス分布に従わず、裾が重い非ガウスな分布であり、その非ガウス性の持続時間はガス種および空隙率によって異なることを見出した。本解析手法の新規性が評価され、Nihon Reoraji Gakkaishi の「表面・界面のレオロジー特集号」に invited paper として、本プロジェクトにて実施した内容が掲載された [4]。

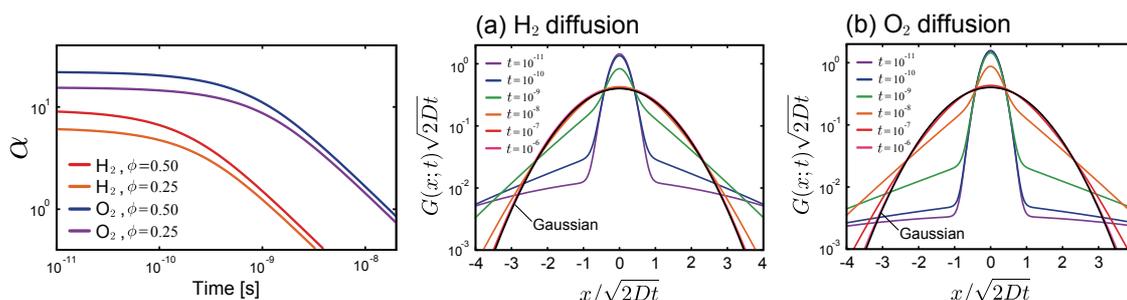


図 2 (左) 非ガウス性パラメータ(α)の持続時間, (中, 右) 各ガス種の拡散変位分布関数

図 2 セメント系材料中の揺らぐ拡散の概念図と拡散の軌跡 (提案モデルと従来法の比較)
本プロジェクトにて実施した研究論文 (本年度)

[1] **T. Ishida***, Y. Doi, T. Uneyama, Y. Masubuchi, Coarse-grained Molecular Dynamics Simulation of Oxidative Aging of Polymers - Effect of free radical diffusivity -, *Polymer Journal*, 56, 1069–1078, 2024, invited as Rising Stars in Polymer Science 2024, **【プロジェクト謝辞記載あり】** .

[2] **T. Ishida***, E. Richaud, H. Hagihara, R. Kitagaki, Estimating Network Lifetime of AUN in Photo-aging by Kinetic modeling and “Degelation” model, *Macromolecular Symposia*, 413, 4, 2300247, 2024, **【プロジェクト謝辞記載あり】** .

[3] **T. Ishida***, K. Haremake, Y. Koide, T. Uneyama, Y. Masubuchi, Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations for Oxidative Aging of Polymers under Various O2 Concentration, submitted to *Polymer Degradation and Stability* and available at <https://arxiv.org/abs/2501.02898>, **【プロジェクト謝辞記載あり】** .

[4] **F. Nakai, T. Ishida***, Analysis of non-Gaussian diffusion of Hydrogen and Oxygen in Cement Paste Using a Two-State Fluctuating Diffusivity Model, *Nihon Reoraji Gakkaishi (J Soc Rheol Jpn)*, 52(2), 83-89, 2024, invited paper, **【プロジェクト謝辞記載あり】** .