



„Modellierung der Dauerhaftigkeit von Baustoffen“

Frank Schmidt-Döhl

Es ist ärgerlich und zum Teil auch gefährlich, wenn Baustoffe unter Gebrauch Festigkeit einbüßen, ein korrosiver Abtrag der Oberfläche einsetzt, Verfärbungen das Aussehen verändern, eine ungewollte Rissbildung auftritt, die Haftung von Baustoffen auf ihrem Untergrund verloren geht, Baustoffe mit abdichtender Funktion undicht werden oder sonstige Schäden die Gebrauchstauglichkeit oder die Tragfähigkeit eines Bauteils gefährden. All dies sind Aspekte der Dauerhaftigkeit von Baustoffen und Bauteilen. Auch ist die Dauerhaftigkeit ein nicht zu unterschätzender Aspekt der Ressourcenschonung. Baustoffe sind die technischen Produkte, die weltweit in den größten Mengen hergestellt werden und die größten Massenströme verursachen. Wenn die geplante Lebensdauer eines Bauwerks erreicht und diese ggf. sogar verlängert werden kann, schont dies nicht nur den Geldbeutel des Besitzers oder Betreibers, sondern verringert in erheblichem Maße den Einsatz von Rohstoffen und Energie für den Neubau. Weil der Verlust an Dauerhaftigkeit häufig auf chemische Prozesse zurückzuführen ist, beschäftigen sich Bauchemiker mit diesem Thema.



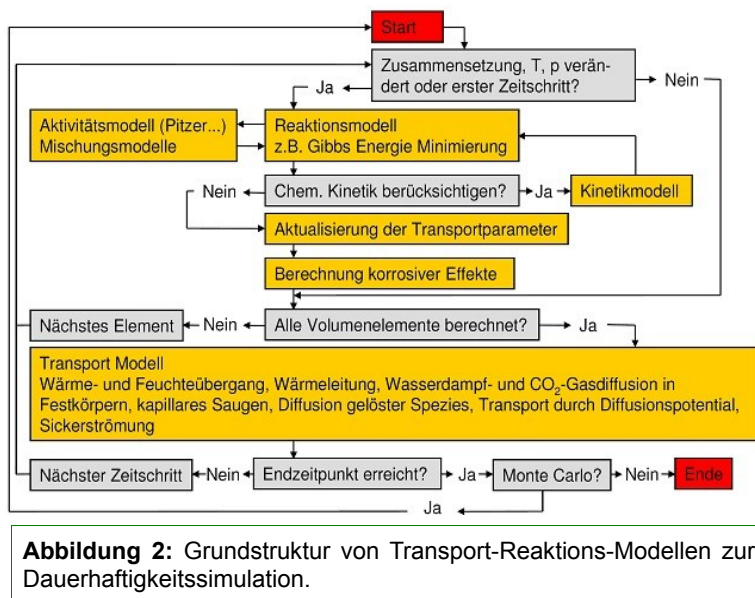
Abbildung 1: Austritt von Gel aus Beton bei der schädigenden Alkali-Kieselsäure-Reaktion. (Foto: F. Tralow, TUHH)

Natürlich kann man Dauerhaftigkeitseigenschaften von Baustoffen im Labor untersuchen und dies erfolgt auch in starkem Maße. Experimentelle Versuche im Labor kommen jedoch an ihre Grenzen, wenn Aussagen über sehr dichte Materialien oder langsame Prozesse benötigt werden, bei denen entsprechende Versuche zu lange dauern, wenn Aussagen über lange Zeiträume benötigt werden, wie bei Bauwerken zur Entsorgung radioaktiver bzw. chemotoxischer Abfälle, oder wenn die möglichen Wechselwirkungen zwischen angreifendem Medium und Baustoff so komplex werden, dass sie rein experimentell kaum mehr erfasst werden können, wie beim Angriff von Deponiesickerwässern. Insbesondere in diesen Fällen kommt die rechnerische Simulation der Dauerhaftigkeit ins Spiel.

Baustoffe sind in der Regel poröse Stoffe. Dies bedeutet, dass sich die chemischen Reaktionen zwischen einem angreifenden Medium und dem Baustoff nicht nur an der äußeren Oberfläche des Festkörpers abspielen, sondern überwiegend an der inneren Porenoberfläche. Wenn man die Dauerhaftigkeitseigenschaften eines Bauteils auf einer allgemeingültigen Basis rechnerisch simulieren will, so bedeutet dies, dass man Module miteinander kombinieren muss, die in der Lage sind, zum einen chemische Reaktionen zu simulieren und zum anderen Transportprozesse in porösen Festkörpern zu berechnen. Diese beiden Grundmodule werden in einer zeit- und ortsabhängigen Simulationsberechnung miteinander gekoppelt, wozu das Bauteil vorab in einzelne Volumenelemente zerlegt werden muss. Abb. 2 zeigt die Grundstruktur solcher Modelle.

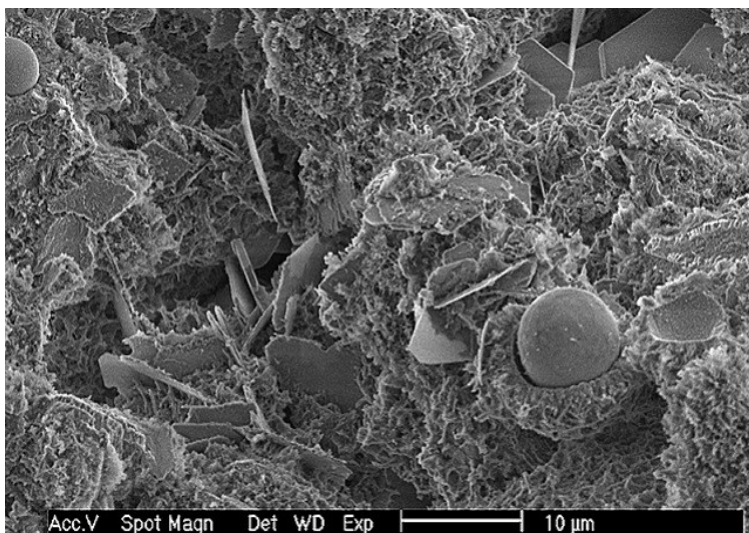
Ein eindringendes korrosives Medium, z.B. eine Lösung, verändert die chemische Zusammensetzung an den einzelnen Volumenelementen. Als Folge davon, oder auch von

Druck- (p) oder Temperaturänderungen (T) werden manche Feststoffphasen abgebaut, andere entstehen ggf. neu. Auch die Lösung verändert sich, nachdem sie mit dem Baustoff reagiert hat. Solche Prozesse lassen sich z.B. beschreiben, indem man die Gibbs'sche Energie des chemischen Systems optimiert. Ein Volumenelement stellt in dieser Betrachtungsweise ein chemisches System dar. Solch ein Reaktionsmodell benötigt außerdem Mischungsmodelle für die festen Mischphasen und die Lösungsphase (z.B. Pitzer-Modell zur Bestimmung von Aktivitätskoeffizienten). Begrenzte Reaktionsgeschwindigkeiten zwischen der festen Porenwandung und der angreifenden Lösung in den Poren können über ein Kinetikmodell berücksichtigt werden.



Die bei solchen Simulationen zu berücksichtigenden Transportprozesse können vielfältig sein: die verschiedenen Teilprozesse des Feuchte- und Wärmetransports stellen eine Verbindung zur Bauphysik her, Feuchte-transport läßt sich in der Regel nicht unabhängig vom Wärmetransport berechnen, mit strömendem und kapillar bewegtem Wasser werden gelöste Teilchen mitgeschleppt, diese werden außerdem noch durch Diffusion transportiert, im Porenraum können Gase transportiert werden usw. Die Transportkoeffizienten sind außerdem in der Regel feuchteabhängig, was auch mit der Alltagserfahrung übereinstimmt:

ein kochentrockenes Wischtuch saugt nicht so gut Wasser auf wie ein Tuch, das leicht vorbefeuchtet ist – der kapillare Transportkoeffizient steigt mit größer werdender Feuchte an.



Ein kleiner, aber ganz wesentlicher Bestandteil solcher Simulationen ist die Aktualisierung der Transportkoeffizienten in der korrodierten Randschicht von Bauteilen. Wird der Porenraum durch die Korrosion aufgeweitet, vergrößern sich Transportparameter, wird er durch neu gebildete Substanzen verstopft, verkleinern sich diese. Dieses Zusammenwirken von Transport und Reaktion macht die Durchführung solcher Simulationen wesentlich komplizierter als reine Reaktionssimulationen bzw. reine Transportsimulationen. Die Korrektur der Transportkoeffizienten in der korrodierten Randschicht ist deshalb ein wesentliches Modul innerhalb solcher Simulationen, mit erheblichem Einfluss auf das Gesamtergebnis.

Abbildung 3: Porenstruktur eines Spezialbetons mit Friedelschem Salz (Plättchen) und Flugasche (Kugeln) eingebettet in Calcium-Silikat-Hydrat-Phase.
(Quelle: siehe hier)
http://www.bfs.de/de/endlager/endlager_morsleben/stilllegung/lfdnr042_180_00_v01_p180.pdf

Schließlich kann man aus den Berechnungsergebnissen korrosive Effekte ableiten, wie z.B. einen Festigkeitsverlust. Auch ist es heute möglich, über die Einbettung eines solchen Simulationsverfahrens in eine Monte-Carlo-Simulation die Streuung der Ergebnisse zu berechnen, wenn man die Simulation auch mit streuenden Eingangsgrößen startet.

Aus dem zuvor Gesagten kann man erkennen, dass die Bauchemie mehr und mehr auch mit rechnerischen Simulationsmodellen arbeitet. Diese sind für das Verständnis der ablaufenden Prozesse wichtig. Erst wenn es gelingt, einen Prozess auf der Basis grundlegender chemisch-physikalischer Modelle zu simulieren, kann man sich sicher sein, ihn auch verstanden zu haben. Entsprechende Prognoseberechnungen sind jedoch auch Bestandteil wichtiger Entscheidungsprozesse. Ein Beispiel ist die Unterlage P180 „Endlager Morsleben - Korrosion von Salzbeton durch saline Lösungen“ im Rahmen des Planfeststellungsverfahrens zur Stilllegung des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben in Sachsen-Anhalt.

(siehe http://www.bfs.de/de/endlager/endlager_morsleben/stilllegung/lfidnr042_180_00_v01_p180.pdf)

Abschließend soll darauf hingewiesen werden, dass es notwendig ist, vor der Durchführung von Dauerhaftigkeitssimulationen auf unbekanntem Terrain (bislang nicht simulierte Baustoffe oder Beanspruchungen) eine Reihe von Tests durchzuführen. Diese prüfen die korrekte Simulation des unkorrodierten Baustoffs, des Reaktionspfades in Kontakt mit dem angreifenden Medium und den zeitlichen Verlauf einer Korrosion. Erst wenn diese Tests erfolgreich sind, kann man rechnerische Prognosen durchführen. Rechnerische Simulationstechnik und experimentelle Korrosionsversuche gehen also auch heute noch und auf absehbare Zeit Hand in Hand.

Kontakt:	Schlauer Fuchs
 <p>Prof. Dr.-Ing. Frank Schmidt-Döhl Technische Universität Hamburg-Harburg Institut für Baustoffe, Bauphysik und Bauchemie Eißendorfer Straße 42 21073 Hamburg Tel.: +49 (0)40 42878-3021 E-Mail: schmidt-doehl@tuhh.de</p>	<p>Unsere Schlaue-Fuchs-Frage zu diesem Beitrag lautete:</p> <p>Wo spielen sich in der Regel die chemischen Reaktionen zwischen dem angreifenden Medium und dem Baustoff ab?</p>
 <p>Technische Universität Hamburg-Harburg</p>	<p>http://www.tu-harburg.de/bp</p>