

**INHALTSVERZEICHNIS**

<b>1.</b>	<b>EINLEITUNG</b>	<b>1</b>
1.1	Problemstellung und Ziel	1
1.2	Gliederung der Arbeit	3
<b>2.</b>	<b>ÜBERBLICK ÜBER DEN STAND DER FORSCHUNG DER RELEVANTEN KORROSIONSPROZESSE</b>	<b>5</b>
2.1	Einleitung	5
2.2	Sulfattreiben von zementgebundenen Baustoffen	6
2.3	Lösender Angriff durch Säuren	7
2.4	Lösender Angriff durch ammoniumhaltige Wässer	8
2.5	Gipskrustenbildung	9
2.6	Ansätze zur Berechnung von Korrosionsvorgängen mineralischer Baustoffe	9
<b>3.</b>	<b>MODELL ZUR SIMULATION VON KORROSIONSVORGÄNGEN MINERALISCHER BAUSTOFFE</b>	<b>11</b>
3.1	Einleitung	11
3.1.1	Teilprozesse eines Korrosionsvorganges	11
3.1.2	Lösungsansätze für die verschiedenen Teilprozesse	11
3.1.3	Charakteristika des Simulationsmodells	12
3.1.4	Interne Struktur des Simulationsverfahrens - Flußdiagramm	14
3.1.5	Programmtechnische Bemerkungen	15
3.1.6	Der Begriff "Spezies"	15
3.2	Ausgangsdaten der Simulation - Präprozessor	16
3.3	Berechnung des Phasenbestandes	17
3.3.1	Berechnung der Gibbs'schen Energie $G$ und des chemischen Potentials $\mu$	18
3.3.2	Literaturquellen thermodynamischer Größen und verwendete Daten für die Simulationsberechnungen	21
3.3.3	Auswahl, Funktion und Verbesserung des Algorithmus	25
3.3.4	Algorithmus zur Berechnung der Konzentrationen der in der Porenflüssigkeit gelösten Teilchen	33

3.3.5	Berechnung der Aktivitätskoeffizienten der gelösten Spezies und des Lösungsmittels mit Hilfe der Pitzer-Theorie	38
3.3.6	Reaktionen an der Grenzfläche zwischen zwei Ortselementen	41
3.3.7	Berücksichtigung der chemischen Kinetik	42
3.3.8	Bestimmung von Geschwindigkeitskonstanten	47
3.4	<b>Berechnung der Transportprozesse im Porenraum des Materials</b>	54
3.4.1	Mögliche Stofftransportprozesse, Makroskopische Theorie des Feuchtetransportes und Literaturquellen für Stofftransportparameter	54
3.4.2	Bedeutung der chemischen Zusammensetzung der Porenflüssigkeit für die Transportprozesse	56
3.4.3	Lösungsalgorithmus	56
3.4.4	Wasserdampfdiffusion	60
3.4.5	Kapillares Saugen und "Huckepacktransport" gelöster Teilchen	61
3.4.6	Diffusion von gelösten Teilchen	64
3.4.7	Feuchte-Sorptionsisotherme	68
3.4.8	Druckabhängigkeit der Transportparameter	68
3.4.9	Veränderungen der Transportparameter durch den korrosiven Prozeß	68
3.5	<b>Aktualisierung der Materialfestigkeit während des Korrosionsprozesses</b>	74
3.5.1	Bekannte Ansätze zur Berechnung der Festigkeit von porösen Stoffen	75
3.5.2	Zur Festigkeitsberechnung im Simulationsmodell	76
3.5.3	Vorhandene Daten zur charakteristischen Festigkeit	77
3.6	<b>Berechnung der Materialschädigung durch treibende Prozesse</b>	79
3.6.1	Berechnung der durch Treibprozesse hervorgerufenen Spannungen	79
3.6.2	Zum Problem der Treibdehnungen	83
3.6.3	Ausführung der Dehnungsberechnung im Simulationsprogramm	88
3.7	<b>Berechnung der korrosiven Effekte</b>	91
3.8	<b>Ausgabe der Ergebnisse (Postprozessor)</b>	92
3.9	<b>Bemerkungen zur Rechengeschwindigkeit der Simulation</b>	92
3.10	<b>Zusammenfassung</b>	94

<b>4.</b>	<b>PROBENHERSTELLUNG, CHARAKTERISIERUNG DER UNKORRODIERTEN MATERIALIEN, VORGEHENSWEISE BEI DER DURCHFÜHRUNG UND DER AUSWERTUNG DER KORROSIONSVERSUCHE</b>	<b>95</b>
<b>4.1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>95</b>
<b>4.2</b>	<b>Ausgangsmaterialien, Präparation und Vorlagerung der Proben</b>	<b>95</b>
4.2.1	Mörtel	95
4.2.2	Sandstein	96
4.2.3	Präparation der Proben	97
4.2.4	Vorlagerung und Ausgangsfeuchtezustand der Proben	97
<b>4.3</b>	<b>Ausgangs-Phasenbestand des Mörtels</b>	<b>98</b>
4.3.1	Quarz	101
4.3.2	Phasenanalyse des Klinkers	101
4.3.3	CO <sub>2</sub> -Gehalt	109
4.3.4	Portlandit	109
4.3.5	C-S-H	110
4.3.6	AFt	111
4.3.7	AFm	116
4.3.8	Zusammensetzung der Porenflüssigkeit	117
4.3.9	Berücksichtigung der Gasphase	120
<b>4.4</b>	<b>Ausgangs-Phasenbestand des Sandsteins</b>	<b>120</b>
<b>4.5</b>	<b>Festigkeitskennwerte der Materialien</b>	<b>121</b>
<b>4.6</b>	<b>Ermittlung von Transportkoeffizienten</b>	<b>122</b>
4.6.1	Ermittlung des Feuchtetransportkoeffizienten FDP	122
4.6.2	Ermittlung der Feuchte-Sorptionsisothermen	125
4.6.3	Ermittlung der kapillaren Flüssigkeitsaufnahmekoeffizienten	127
4.6.4	Bestimmung von Diffusionskoeffizienten gelöster Teilchen	128
4.6.5	Messung der Sauerstoffpermeabilität	132
<b>4.7</b>	<b>Bestimmung der offenen Porosität, der mit dem Quecksilberdruckporosimeter meßbaren Porosität, der Trockenrohddichte und der maximalen freien Wasseraufnahme</b>	<b>133</b>
<b>4.8</b>	<b>Messung der Porenradienverteilung und der inneren Oberfläche</b>	<b>134</b>

<b>4.9</b>	<b>Vorgehensweise bei der Durchführung und Auswertung der Korrosionsversuche</b>	<b>137</b>
4.9.1	Aufbau der Korrosionsversuche	137
4.9.2	Messung der Probendehnungen und des Probengewichtes während der Versuche	139
4.9.3	Präparation der Proben nach Beendigung der Korrosionsversuche	139
4.9.4	Vorgehensweise bei der weiteren Untersuchung der korrodierten Proben	142
4.9.5	Vorgehensweise bei der Untersuchung des Phasenbestandes der korrodierten Proben	145
<b>4.10</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>148</b>
<b>5.</b>	<b>VERIFIKATION DES SIMULATIONSMODELLS DURCH KORROSIONSVERSUCHE AN MÖRTEL- UND BETONPROBEN</b>	<b>149</b>
<b>5.1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>149</b>
<b>5.2</b>	<b>Korrosion von Mörtelproben im Kontakt mit einer sauren Pufferlösung</b>	<b>149</b>
5.2.1	Abtragungsraten und Gewichtsveränderungen	151
5.2.2	Veränderungen des Phasenbestandes	152
5.2.3	Spaltzugfestigkeit	157
5.2.4	Porosität und Trockenrohddichte im Quecksilberdruckversuch	158
5.2.5	Wasseraufnahmekoeffizient und maximale freie Wasseraufnahme	160
5.2.6	Feuchtetransportkoeffizient FDP	162
5.2.7	Porenradienverteilung	162
<b>5.3</b>	<b>Korrosion von Mörtelproben im Kontakt mit einer Natriumsulfatlösung mit 44 g/l <math>\text{Na}_2\text{SO}_4</math></b>	<b>163</b>
5.3.1	Abtragungsrate und Gewichtsveränderungen	163
5.3.2	Veränderungen des Phasenbestandes	165
5.3.3	Dehnungen	170
5.3.4	Spaltzugfestigkeit	174
5.3.5	Kaliumdiffusionskoeffizient	175
5.3.6	Porosität und Trockenrohddichte im Quecksilberdruckversuch	176
5.3.7	Wasseraufnahmekoeffizient und maximale freie Wasseraufnahme	178

5.3.8	Feuchtetransportkoeffizient FDP	180
5.3.9	Porenradienverteilung	180
5.4	<b>Korrosion von Mörtelproben im Kontakt mit einer Natriumsulfatlösung mit 0,44 g/l Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub></b>	<b>181</b>
5.4.1	Abtragungsrate und Gewichtsveränderungen	181
5.4.2	Veränderungen des Phasenbestandes	182
5.4.3	Veränderungen weiterer Materialparameter	187
5.5	<b>Korrosion von Mörtel- und Betonproben in der Deponie-Sickerwasserkläranlage Braunschweig</b>	<b>188</b>
5.5.1	Korrosionsversuche mit Betonproben	191
5.5.2	Korrosionsversuche mit Mörtelproben	196
5.6	<b>Anwendung der Simulation auf Betonkorrosion bei gleichzeitig anliegender mechanischer Spannung</b>	<b>201</b>
5.7	<b>Zusammenfassung</b>	<b>205</b>
6.	<b>VERIFIKATION DES SIMULATIONSMODELLS DURCH KORROSIONSVERSUCHE AN SANDSTEINPROBEN</b>	<b>206</b>
6.1	<b>Einleitung</b>	<b>206</b>
6.2	<b>Korrosion von Sandsteinproben im Kontakt mit einer sauren Pufferlösung</b>	<b>206</b>
6.2.1	Abtragungsrate und Gewichtsveränderungen	208
6.2.2	Veränderungen des Phasenbestandes	209
6.2.3	Veränderungen weiterer Materialparameter	210
6.3	<b>Korrosion von Sandsteinproben im Kontakt mit einer sauren Pufferlösung, angereichert mit Natriumsulfat</b>	<b>210</b>
6.3.1	Probenabmessungen und Gewichtsveränderungen	211
6.3.2	Veränderungen des Phasenbestandes	212
6.3.3	Veränderungen weiterer Materialparameter	213
6.4	<b>Zusammenfassung</b>	<b>213</b>

7.	DISKUSSION DER ERGEBNISSE	215
8.	WEITERENTWICKLUNG DES SIMULATIONSVERFAHRENS FÜR DEN BEREICH DER BAUSTOFFKORROSION	222
9.	ANWENDUNGSMÖGLICHKEITEN DES VERFAHRENS IN ANDEREN FORSCHUNGSGEBIETEN	226
9.1	Petrologische Prozesse	226
9.2	Orts- und zeitabhängige Reaktionsprozesse in anderen Systemen	227
9.3	Sorptionsprozesse	227
10.	ZUSAMMENFASSUNG	228
11.	LITERATUR	233