

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Zementhydratation</b>	<b>5</b>
2.1	Grundlagen . . . . .	5
2.1.1	Bestandteile des Portlandzementes . . . . .	5
2.1.2	Hydratation der Klinkerphasen . . . . .	6
2.1.3	Verlauf der Hydratation . . . . .	7
2.1.4	Hydratationsgrad . . . . .	9
2.2	Volumetrische Betrachtung der Hydratation . . . . .	11
2.2.1	Modell von Powers und Brownyard . . . . .	11
2.2.2	Chemisch gebundenes Wasser . . . . .	12
2.2.3	Physikalisch gebundenes Wasser . . . . .	17
2.2.4	Chemisches Schwinden . . . . .	22
2.2.5	Gelporosität und Kapillarporosität . . . . .	25
2.2.6	Hydratationsgradabhängige Beschreibung der Volumenanteile . . . . .	29
2.3	Reaktionsmechanismus der Hydratation . . . . .	30
2.3.1	Mechanismen . . . . .	30
2.3.2	Einfluss der Mahlfeinheit des Zementes . . . . .	33
2.3.3	Einfluss von Temperatur und Feuchte . . . . .	33
2.4	Porenstruktur und Modelle . . . . .	37
2.4.1	Porengrößen . . . . .	37
2.4.2	Gelporosität . . . . .	38
2.4.3	Kapillarporen . . . . .	41
2.4.4	Porenmodelle . . . . .	42
<b>3</b>	<b>Strukturmodelle für Zementstein</b>	<b>43</b>
3.1	Der zelluläre Automat CEMHYD3D . . . . .	44
3.2	Kern-Schalen-Modelle . . . . .	45
3.3	Vergleich der Modelle . . . . .	48
<b>4</b>	<b>Hydratations- und Strukturmodell auf der Basis finiter Elemente</b>	<b>51</b>
4.1	Ziel und Modellansatz . . . . .	51
4.2	Teilmodelle . . . . .	52

4.2.1	Beschreibung der Ausgangssituation . . . . .	52
4.2.1.1	Partikelgrößen und Volumen . . . . .	52
4.2.1.2	Partikelanordnung in der Kontaktzone . . . . .	55
4.2.1.3	Partikelanordnung infolge Agglomeration . . . . .	56
4.2.1.4	Transformation der Partikel in ein räumliches Gitter . . . . .	62
4.2.2	Hydratationsmodell . . . . .	65
4.2.2.1	Die Lösung und somit Mobilisierung von Zement . . . . .	66
4.2.2.2	Der Transport von gelöstem Zement . . . . .	68
4.2.2.3	Die Bildung von Produkten . . . . .	71
4.2.3	Die Kopplung der Teilprozesse . . . . .	74
4.3	Umsetzung in der FEM . . . . .	75
4.3.1	Aufstellen der Finiten-Elemente-Lösung . . . . .	76
4.3.2	Zeitliche Lösung des Gleichungssystems . . . . .	78
4.4	Numerische Umsetzung . . . . .	79
4.4.1	Abfolge und Struktur des Programmkerns . . . . .	79
4.4.2	Berechnung der reaktiven Oberfläche . . . . .	81
<b>5</b>	<b>Experimentelle Untersuchungen und Simulationsergebnisse</b>	<b>83</b>
5.1	Zeitliche Entwicklung des Hydratationsgrades . . . . .	84
5.1.1	Wärmefreisetzung . . . . .	85
5.1.1.1	Versuchsaufbau und Vorgehensweise . . . . .	85
5.1.1.2	Versuchsauswertung und Ergebnisse . . . . .	86
5.1.2	Chemisch gebundene Wassermenge . . . . .	90
5.1.3	Vergleich der Messmethoden . . . . .	92
5.2	Anpassung der Modellfreiwerte . . . . .	93
5.2.1	Parameter zur Beschreibung der Ruhephase . . . . .	94
5.2.2	Parameter zur Beschreibung der Modellprozesse . . . . .	95
5.3	Chemisches Schwinden . . . . .	98
5.4	Quecksilberdruckporosimetrie . . . . .	101
5.4.1	Einschränkungen und Vorteile der Methode . . . . .	101
5.4.2	Probenherstellung . . . . .	103
5.4.3	Ergebnisse – Gesamtporosität . . . . .	103
5.4.4	Ergebnisse – Porenradienverteilung . . . . .	108
5.4.5	Hydratationsgradabhängige Beschreibung der MIP-Ergebnisse . . . . .	112
<b>6</b>	<b>Gemessene und berechnete Strukturen</b>	<b>121</b>
6.1	Porositäten und Porenradienverteilung . . . . .	122
6.1.1	Geometrische und fraktale Ansätze . . . . .	123
6.1.2	Ansatz porositätsspezifischer Porenradienverteilungen . . . . .	124
6.2	Virtuelle Quecksilberdruckporosimetrie . . . . .	128
6.2.1	Methode und Vorgehensweise . . . . .	129

6.2.2	Einfluss der Größe des RVE . . . . .	131
6.3	Kombination der VMIP und des Ansatzes porositätsspezifischer RV . . .	135
6.3.1	Bestimmung des Einflusses der Flaschenhalsporen . . . . .	135
6.3.2	Umsetzung der Transformation . . . . .	137
6.3.3	Ergebnisse der Transformation . . . . .	139
6.4	Übertragbarkeit der Transformation . . . . .	143
<b>7</b>	<b>Erweiterungen und Anwendungen</b>	<b>149</b>
7.1	Versiegelte Lagerung . . . . .	149
7.1.1	Ansatz . . . . .	150
7.1.2	Modellierung und Berechnung des Hydratationsgrades . . . . .	153
7.1.3	Ergebnisse . . . . .	155
7.2	Struktur der Kontaktzone . . . . .	162
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>171</b>
8.1	Zusammenfassung . . . . .	171
8.2	Ausblick . . . . .	174