

## Ausgangssituation

Durch die Behandlung mit Alkyltriethoxysilanen, ATES, werden zementgebundene Werkstoffe vor dem Eindringen von Wasser und darin gelösten Substanzen geschützt. I. a. werden die ATES auf die Oberfläche appliziert und durch kapillares Saugen transportiert. Dabei findet die Polykondensation der ATES zum hydrophob wirkenden Polymer statt. Die während der Reaktion auftretenden Oligomere treten dabei, abhängig von der chemischen Struktur des ATES, in Wechselwirkung mit der mineralischen Oberfläche. Allerdings ist kaum etwas über das Aussehen und die Verteilung der Oligomere auf der Porenoberfläche des Werkstoffes bekannt.

Eine Möglichkeit, den Porenraum verschiedener Materialien zu untersuchen, besteht in der Aufnahme von Stickstoffsorptions-Isothermen. Dabei wird das sorbierte N<sub>2</sub>-Volumen bei einem relativen Druck  $p/p_0$  gemessen. Aus den Isothermen lassen sich durch verschiedene Auswertemethoden Aussagen zur spez. Oberfläche, Vergleiche des Sorptionsverhaltens und Porenweiteverteilungen unter Berücksichtigung verschiedener Oberflächen erhalten. Aus der Kombination dieser Aussagen wird ein Modell zur Verteilung und Größe von Propyl- und iOctylsilanoligomeren auf einer mineralischen Porenoberfläche erstellt

## Experimentelle Beobachtungen

Die **spezifische Oberfläche** für teilkrist. Tobermorit, CSH-Gel und Zementstein in unbehandeltem, mit PTES und iOTES behandeltem Zustand ist in Abb. 1 dargestellt:

- mit PTES behandeltes Material zeigt die größte spez. Oberfläche
- für unbehandelte und mit iOTES behandelte Materialien liegt die spez. Oberfläche im gleichen Bereich
- der Zementstein hat im Vergleich zum CSH-Gel und Tobermorit im unbehandelten und im mit PTES und iOTES behandelten Zustand die kleinste Oberfläche.

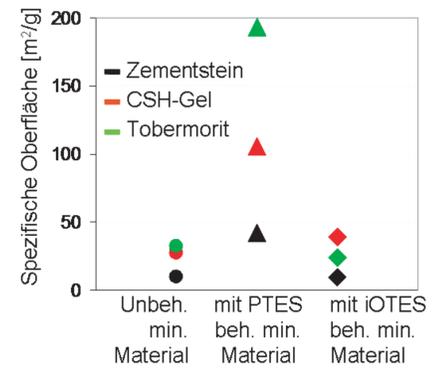


Abbildung 1: Spez. Oberfläche

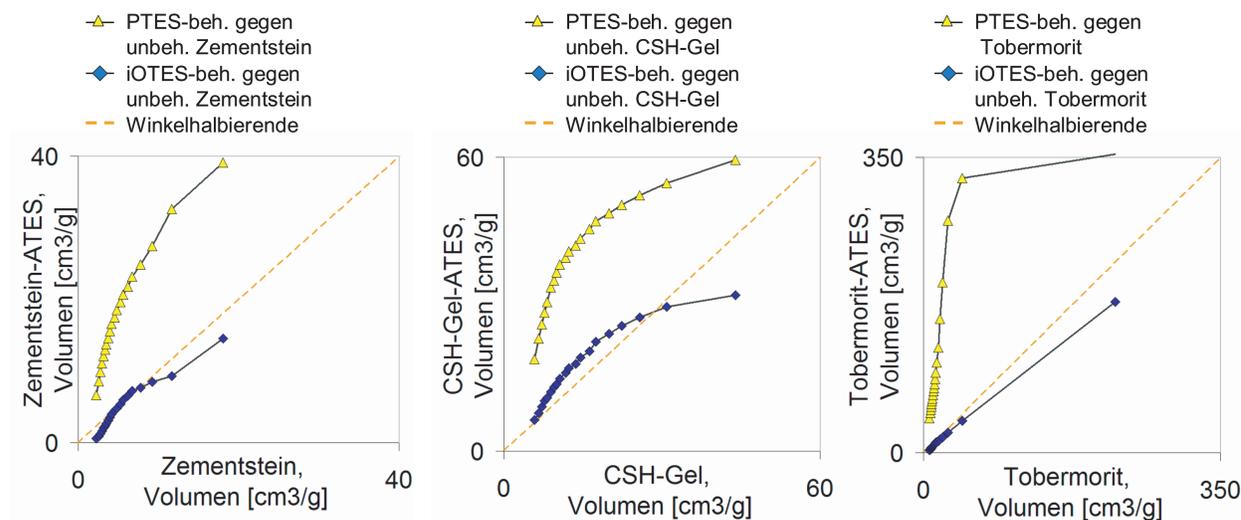


Abbildung 2: Vergleich des Sorptionsverhaltens der jeweils unbehandelten und mit ATES behandelten Proben

## Porenweiteverteilung und fitting error

Klassisch: BJH-Auswertung; **ABER**: keine Oberflächeneinflüsse der Proben.

Auswertungen auf Basis der Non-Local-Density-Functional-Theory-, NLDFT-Modellierungen: N<sub>2</sub>-Sorption auf SiO<sub>2</sub>-bzw. Carbon-Porenoberflächen wird theoretisch berechnet, mit gemessener (vom Desorptionsast) verglichen: *fitting error*. Je kleiner der *fitting error* ist, desto besser passen berechnete und gemessene Daten zusammen. In Abb. 3 ist folgendes zu sehen:

- Größte Streuung bei den Tobermoritproben, kleinste bei den CSH-Gel-Proben
- Beim CSH-Gel und Zementstein ist der *fitting error* der carbon-Auswertungen der mit iOTES behandelten Proben kleiner als der der silica-Auswertung
- Für alle Tobermoritproben sind die *fitting errors* der silica-Auswertungen kleiner als die der carbon-Auswertungen.

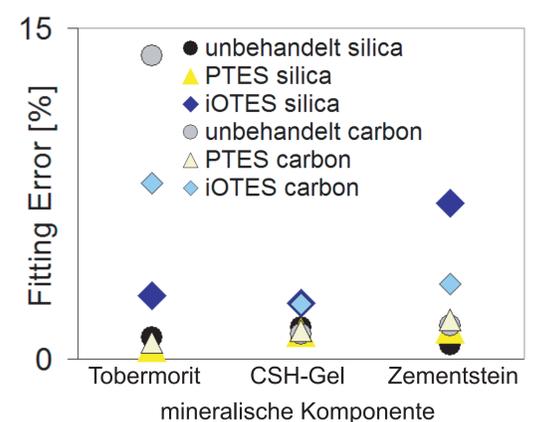


Abbildung 3: Fitting error aus den silica- und carbon-Auswertungen

## Schlussfolgerungen

Aus den vorgestellten Ergebnissen lässt sich das in Abb. 4 dargestellte Modell der Größe und Verteilung von Silanoligomeren auf einer mineralischen Oberfläche entwickeln:

- Die mit PTES behandelten Proben weisen eine höhere spezifische Oberfläche und ein größeres Porenvolumen auf, der kleinere *fitting error* der silica-Auswertung weist auf einen silikatischen Charakter der Proben hin. Diese Beobachtungen lassen sich mit der in Abb. 4 a dargestellten Verteilung der Propylsilanoligomere in Einklang bringen.
- Die mit iOTES behandelten Proben zeigen eine ähnlich große spez. Oberfläche und nur leichte Veränderungen des Porenvolumens wie die unbehandelten. Der kleinere *fitting error* der carbon-Auswertungen weist auf einen gewissen Kohlenstoffcharakter der Oberflächen hin. Mit der in Abb 4b) vorgestellten Verteilung der iOctylsilanoligomere lassen sich diese Beobachtungen erklären.

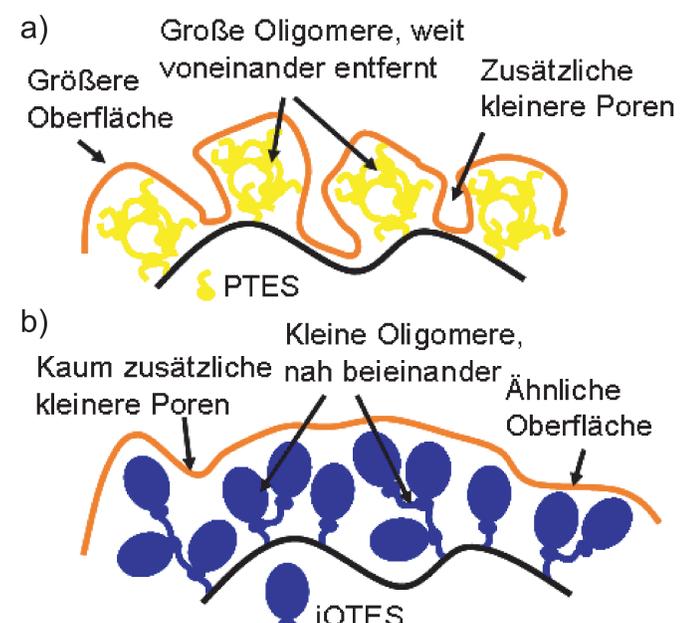


Abbildung 4: Modell der Verteilung und Größe der ATES Oligomere auf einer mineralischen Oberfläche