

ỨNG DỤNG MÔ HÌNH NHIỆT ĐỘNG LỰC HỌC ĐỂ THIẾT KẾ HỖN HỢP ĐẤT GIA CỐ

Nguyễn Hữu Năm

Viện Thủy điện và Năng lượng tái tạo

Tóm tắt: Mục đích tìm kiếm hỗn hợp thích hợp để thi công, thí nghiệm mẫu của từng thiết kế cấp phối của đất ổn định. Tuy nhiên để nâng cao độ chính xác của thí nghiệm thì số lượng mẫu phải tiến hành nhiều dẫn đến kết quả thí nghiệm có độ chính xác cao. Các cơ chế cơ bản còn chung chung nên chưa thực sự phân tích chi tiết cơ chế cải tạo của đất bazan. Cơ chế khoáng chưa xác định sẽ tham gia vào quá trình ổn định đất. Dựa trên mô hình nhiệt động lực học, bài báo tập trung giải thích chi tiết vai trò của từng thành phần khoáng trong đất đối với việc cải thiện các chỉ tiêu cơ học của đất ổn định. Cũng như cơ chế phản ứng của chất kết dính với các thành phần khoáng chất của đất. Kết quả của mô hình được so sánh tương đối với kết quả thí nghiệm để xác định tính đúng đắn của mô hình nhiệt động lực học cũng như kết quả của thí nghiệm, chứng minh tính khả thi của việc gia cố đất bazan bằng hỗn hợp pozzolan tự nhiên, tro bay và xi măng. Hàm lượng khoáng trong các thiết kế hỗn hợp khác nhau được dự đoán bằng mô hình nhiệt động lực học, từ đó dự đoán khả năng cơ học của từng thiết kế hỗn hợp.

Từ khóa: Mô hình nhiệt động lực học, đất gia cố, thiết kế hỗn hợp, pozzolan / vôi / xi măng.

Summery: The purpose of finding suitable mixes for construction, sample experiments of each mix design of stabilized soils should be tested. However, in order to improve the accuracy of the experiment, the number of samples to be conducted is high, leading to high accuracy of the test results. The basic mechanisms are general so they have not really analyzed in detail the reclamation mechanism of basalt soil. The unspecified mineral mechanism will participate in the soil stabilization process. Based on the thermodynamic model, the paper focuses on explaining in detail the role of each mineral component of the soil for improving the mechanical properties of stabilized in soil. As well as the reaction mechanism of the binder mixture with the mineral components of the soil. The results of the model are compared relative to the experimental results to determine the correctness of the thermodynamic model as well as the results of the experiment, proving the feasibility of reinforcing basalt soil by mixture natural pozzolan, fly ash and cement. Mineral content of different mix designs predicted by thermodynamic model thereby predicting the mechanical capacity of each mix design.

Keywords: Thermodynamic model, stabilized soils, mix design, natural pozzolan/lime/cement

1. GIỚI THIỆU

Nhiệt động lực học rất cần thiết cho sự hiểu biết của chúng ta về các phản ứng hóa học. Với 3 biến quan trọng nhất là nhiệt độ, áp suất và thành phần hóa học, chúng ta có thể dự đoán được phản ứng có xảy ra hay không và trạng

thái cuối cùng sau khi phản ứng kết thúc. Các định luật chung về điều hòa nhiệt động lực học đã được biết đến từ lâu và lần đầu tiên được áp dụng vào hóa học xi măng vào cuối thế kỷ 19 bởi Le Chatelier để chứng minh rằng quá trình thủy hóa xi măng thu được thông qua sự hòa tan clinker ban đầu dẫn đến nước luôn bão hòa pha

Ngày nhận bài: 26/02/2021

Ngày thông qua phản biện: 19/3/2021

Ngày duyệt đăng: 02/4/2021

cho các phản ứng hydrat hóa, dẫn đến sự kết tủa của các pha rắn. Cuối cùng, sự cân bằng pha rắn lỏng còn lại đạt được trong hệ thống lỗ xốp của pha rắn xi măng. Từ những năm 1940, thời kỳ nghiên cứu về nhiệt động lực học ứng dụng được phát triển mạnh mẽ. Một số điều để khai sinh ra sự phát triển của các ứng dụng nhiệt động lực học là sự ra đời của nhiều định luật cơ bản, ví dụ về đặc điểm nhiệt động lực học của các pha khác nhau: nóng chảy, keo tụ, thủy tinh. Phản ánh mối quan hệ giữa cân bằng và tốc độ phản ứng của các chất.

Mô hình nhiệt động lực học được phát triển và áp dụng bởi các nhà địa hóa học để tính toán hệ phương trình phức tạp của các hệ đa hình xảy ra trong tự nhiên. Mô hình nhiệt động đã được ứng dụng trong nhiều lĩnh vực. Ví dụ, dự đoán độ bền của công trình ngầm chất thải phóng xạ với xi măng / đất sét / tương tác phóng xạ [1], [2], mô hình hóa tương tác với đất sét hoặc bentonit, và chất kết dính pozzolan [3], [4].

Có thể thấy rằng ứng dụng của mô hình nhiệt động tương tác trong môi trường pozzolan là rất phong phú. Vì vậy, có thể áp dụng mô hình nhiệt động lực học để nghiên cứu cơ chế phản ứng giữa đất bazan - pozzolan tự nhiên - pozzolan nhân tạo như tro bay, xi măng.

Mục đích tìm cấp phối thích hợp để thi công, thí nghiệm mẫu của từng cấp phối thiết kế đất ổn định. Tuy nhiên để nâng cao độ chính xác của thí nghiệm thì số lượng mẫu phải tiến hành nhiều dẫn đến kết quả thí nghiệm có độ chính xác cao. Các cơ chế cơ bản còn chung chung nên chưa thực sự phân tích chi tiết cơ chế cải tạo của đất bazan. Cơ chế khoáng chưa xác định sẽ tham gia vào quá trình ổn định đất. Dựa trên mô hình nhiệt động lực học, bài báo tập trung giải thích chi tiết vai trò của từng thành phần khoáng trong đất đối với việc cải thiện các chỉ tiêu cơ học của đất ổn định. Cũng như cơ chế phản ứng của chất kết dính với các thành phần khoáng chất của đất. Kết quả của mô hình được so sánh tương đối với kết quả thí

nghiệm để xác định tính đúng đắn của mô hình nhiệt động lực học cũng như kết quả của thí nghiệm, chứng minh tính khả thi của việc gia cố đất bazan bằng hỗn hợp pozzolan tự nhiên, tro bay, xi măng. Hàm lượng khoáng của các thiết kế hỗn hợp khác nhau được dự đoán bằng mô hình nhiệt động lực học, từ đó dự đoán khả năng cơ học của từng thiết kế hỗn hợp.

2. CÁCH TIẾP CẬN MÔ HÌNH

A. Cân bằng nhiệt động lực học

Sự tương tác giữa các ion và các loài khoáng dẫn đến sự kết tủa / hòa tan của các khoáng chất. Tỷ lệ bão hòa khoáng Ω_m có thể được biểu thị bằng:

$$\Omega_m = K_{s,m}^{-1} \prod_{j=1}^{N_c} (\gamma_j C_j)^{\nu_{mj}} \quad (1)$$

$$m = 1, \dots, N_p$$

Trong đó m là chỉ số của các loài khoáng, $K_{s,m}$ là hằng số cân bằng C_j là nồng độ mol của các loài nguyên sinh trong dung dịch (mol.kg⁻¹) tức là các loài được cho là di chuyển trong dung dịch / Các ion khác (thường phức tạp hơn) được tính đến khi tính toán độ phức của ion (xem phương trình 3). ν_{mj} là hệ số phân cực của loài nguyên sinh, γ_j là hệ số hoạt độ của ion j , N_c , N_p là số loài nguyên sinh và loài khoáng tương ứng. Trạng thái cân bằng (hoặc không cân bằng) của các loại khoáng trong dung dịch được kiểm soát bởi chỉ số bão hòa khoáng IS_m , như sau:

$$IS_m = \log \Omega_m \quad (2)$$

Đối với một loại khoáng đã cho, dung dịch cân bằng với loại khoáng nếu $IS_m = 0$. Dung dịch chưa bão hòa và các loại khoáng chất vẫn có thể hòa tan nếu $IS_m < 0$. Cuối cùng, dung dịch là siêu bão hòa và các loại khoáng chất có thể bị kết tủa nếu $IS_m > 0$. Các phức chất nước được hình thành do tương tác giữa các loài nguyên sinh trong dung dịch. Các phản ứng này được giả định là ở trạng thái cân bằng cục bộ. Bằng cách sử dụng định luật tác dụng khối lượng, nồng độ của phức chất trong nước có thể được biểu thị

dưới dạng hàm số của nồng độ của các loài nguyên sinh, như sau:

$$C_i = K_{c,i}^{-1} \gamma_i^{-1} \prod_{j=1}^{N_c} (\gamma_j C_j)^{\nu_{ij}} \quad (3)$$

$i = 1, \dots, N_x$

trong đó: C_i là nồng độ mol của phức chất trong i ($\text{mol} \cdot \text{kg}^{-1}$). γ_i, γ_j là các hệ số hoạt động. $K_{c,i}$ là hằng số cân bằng của tạo phức nước. N_x là số phức chất nước được xem xét trong dung dịch.

Cơ sở dữ liệu nhiệt động lực học bao gồm các thông số này, cơ sở dữ liệu nhiệt động học THERMODDEM của Blanc và cộng sự [5] được áp dụng trong bài báo này.

B. Phản ứng hóa học và dữ liệu đầu vào cần thiết

Mineralogical composition of the initial materials: Soil, lime, volcanic ash was identified by powder X-ray diffraction (XRD). The Bogue calculat Thành phần khoáng vật của vật liệu ban đầu: Đất, vôi, tro núi lửa được xác định bằng phương pháp nhiễu xạ tia X dạng bột (XRD). Tính toán Bogue để xác định các giai đoạn clinker không được làm khan trong xi măng poóc lăng thông thường (OPC) được trình bày chi tiết hơn trong công trình của Tran [6]. Thành phần khoáng vật ban đầu của hỗn hợp được cho trong bảng 1.

Bảng 1: Thành phần khoáng vật của các vật liệu ban đầu

Vật liệu	Pha	Công thức	Thành phần (g/100g)
Đất	Quartz	SiO ₂	4
	Kaolinite	Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄	23
	Gibbsite	Al(OH) ₃	61
Vôi	Lime	CaO	66
	Portlandite	Ca(OH) ₂	16
	Calcite	CaCO ₃	9
	Periclas	MgO	3
	Quartz	SiO ₂	1
Pozzolan tự nhiên Daknong	Diopside	CaMg(SiO ₃) ₂	29
	Forsterite	Mg ₂ SiO ₄	23
	Cristobalite	SiO ₂	1
	Albite	NaAlSi ₃ O ₈	27
	Quartz	SiO ₂	4
Xi măng Portland Unhydrated	Alite (C3S)	Ca ₃ SiO ₅ or (3CaO.SiO ₂)	16.75

Vật liệu	Pha	Công thức	Thành phần (g/100g)
	Belite (C2S)	Ca_2SiO_4 or $(2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2)$	54.45
	Aluminate (C3A)	$\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ or $(3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3)$	14.08
	Ferrites (C4AF)	$\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{Fe}_2\text{O}_{10}$ or $(4\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3)$	8.52
	Gypsum	$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	1.40

Hệ thống phản ứng hóa học của quá trình ổn định hằng số cân bằng ở môi trường xung quanh định đất được trình bày trong bảng 2, cũng như ở 25°C, 1 atm.

Bảng 2: Phản ứng hóa học và hằng số cân bằng ở 25 ° C, 1 atm.

Phản ứng hóa học	log K
$\text{Quartz} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{H}_4\text{SiO}_4$	-3.74
$\text{Kaolinite} + 6\text{H}^+ = 2\text{Al}^{3+} + 2\text{H}_4\text{SiO}_4 + \text{H}_2\text{O}$	6.47
$\text{Gibbsite} + 3\text{H}^+ = \text{Al}^{3+} + 3\text{H}_2\text{O}$	7.74
$\text{Hematite} + 6\text{H}^+ = 2\text{Fe}^{3+} + 3\text{H}_2\text{O}$	-0.04
$\text{Goethite} + 3\text{H}^+ = \text{Fe}^{3+} + 2\text{H}_2\text{O}$	0.36
$\text{Lime} + 2\text{H}^+ = \text{Ca}^{2+} + \text{H}_2\text{O}$	32.70
$\text{Portlandite} + 2\text{H}^+ = \text{Ca}^{2+} + 2\text{H}_2\text{O}$	22.81
$\text{Calcite} + \text{H}^+ = \text{Ca}^{2+} + \text{HCO}_3^-$	1.85
$\text{Periclas} + 2\text{H}^+ = \text{Mg}^{2+} + \text{H}_2\text{O}$	21.59
$\text{Diopside} + 4\text{H}^+ + 2\text{H}_2\text{O} = \text{Ca}^{2+} + \text{Mg}^{2+} + 2\text{H}_4\text{SiO}_4$	21.73
$\text{Forsterite} + 4\text{H}^+ = 2\text{Mg}^{2+} + \text{H}_4\text{SiO}_4$	28.60
$\text{Cristobalite} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{H}_4\text{SiO}_4$	-3.16
$\text{Albite} + 4\text{H}^+ + 4\text{H}_2\text{O} = \text{Al}^{3+} + \text{Na}^+ + 3\text{H}_4\text{SiO}_4$	4.14
$\text{C-S-H 1.6} + 3.2\text{H}^+ = 1.6\text{Ca}^{2+} + \text{H}_4\text{SiO}_4 + 2.18\text{H}_2\text{O}$	28.00
$\text{C-S-H 1.2} + 2.4\text{H}^+ = 1.2\text{Ca}^{2+} + \text{H}_4\text{SiO}_4 + 1.26\text{H}_2\text{O}$	19.30
$\text{C-S-H 0.8} + 1.6\text{H}^+ = 0.8\text{Ca}^{2+} + \text{H}_4\text{SiO}_4 + 0.34\text{H}_2\text{O}$	11.05
$\text{Monosulfoaliminate} + 12\text{H}^+ = 2\text{Al}^{3+} + 4\text{Ca}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} + 18\text{H}_2\text{O}$	73.09
$\text{Ettringite} + 12\text{H}^+ = 2\text{Al}^{3+} + 6\text{Ca}^{2+} + 3\text{SO}_4^{2-} + 38\text{H}_2\text{O}$	57.01
$\text{Strätlingite} + 10\text{H}^+ = 2\text{Al}^{3+} + 2\text{Ca}^{2+} + \text{H}_4\text{SiO}_4 + 10.5\text{H}_2\text{O}$	49.67
$\text{Hydrotalcite} + 14\text{H}^+ = 2\text{Al}^{3+} + 4\text{Mg}^{2+} + 17\text{H}_2\text{O}$	73.76

Phản ứng hóa học	log K
$\text{Hydrogarnet} + 12\text{H}^+ = 2\text{Al}^{3+} + 3\text{Ca}^{2+} + 12\text{H}_2\text{O}$	49.67
$\text{Brucite} + 2\text{H}^+ = \text{Mg}^{2+} + 2\text{H}_2\text{O}$	17.11
$\text{Monocarboaluminate} + 13\text{H}^+ = 2\text{Al}^{3+} + 4\text{Ca}^{2+} + \text{HCO}_3^- + 16.68\text{H}_2\text{O}$	80.54

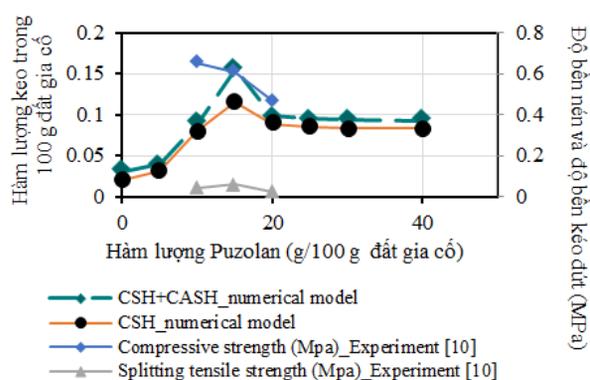
C. Mã hóa địa hóa học

Các phương trình phản ứng trên được lưu trữ trong cơ sở dữ liệu phản ứng. Có rất nhiều cơ sở dữ liệu phản ứng được xây dựng để mô phỏng cân bằng nhiệt động như Phreeqc [7], Cemdata, và Nagra-psi Kernel [8],... Tuy nhiên, cơ sở dữ liệu có thể được xây dựng. Đầy đủ nhất là cơ sở dữ liệu Thermodem do Phòng thí nghiệm Nghiên cứu Địa chất Cộng hòa Pháp (BRGM) [5] xây dựng, bao gồm một hệ thống khoáng vật hoàn chỉnh về hydrat hóa và các khoáng chất của phần lớn các loại đất tồn tại trong tự nhiên. Cân bằng các phương trình trong cơ sở dữ liệu yêu cầu phân mềm hoặc mã để đọc và chạy mô phỏng. Có rất nhiều phần mềm miễn phí được phổ biến rộng rãi trong thực tế như GEMS-PSI của cơ quan địa chất Thụy Sĩ, mã phần mềm Cờ vua do Đại học Paris phát triển. Tuy nhiên, có thể nói phần mềm phổ biến và dễ sử dụng nhất là Phreeqc do cơ quan địa chất Hoa Kỳ Parkhurst và Appelo xây dựng [7]. Do đó tất cả các trạng thái cân bằng nhiệt động của tờ giấy được thực hiện bởi mã Phreeqc.

3. MÔ HÌNH ĐỘNG HỌC ĐÃ ĐƯỢC HIỆU CHỈNH

Trong phần này, hàm lượng vôi và xi măng được chọn làm giá trị không đổi, lần lượt là 4% và 3% khối lượng đất ổn định trong tất cả các mô phỏng. Thiết kế hỗn hợp của đất tự nhiên / pozzolan được mô phỏng. Lượng đất ổn định là 100 g, tỷ lệ đất tự nhiên / pozzolan tự nhiên được thay đổi theo khối lượng tự nhiên của pozzolan từ 0 g, 5 g, 10 g, 15 g, 20 g, 25 g, 30 g và 40 g. Kết quả số được so sánh với kết quả thực nghiệm được trích từ Vu et al. [10]. So

sánh được trình bày trong Hình 1.



Hình 1: Lượng C-S-H, C-S-H + C-A-S-H vs Độ bền nén và độ bền kéo đứt [10]

Qua kết quả mô hình có thể mô tả hàm lượng canxi silicat (C-S-H) và tổng hàm lượng C-S-H + C-A-S-H theo lượng pozzolan tự nhiên dùng để ổn định đất qua hai vùng. Vùng một, hàm lượng C-S-H hoặc C-S-H + C-A-S-H tăng tương ứng với sự gia tăng lượng pozzolan được sử dụng. Hàm lượng canxi silicat C-S-H, C-S-H + C-A-S-H được hình thành nhiều nhất trong đất ổn định khi lượng pozzolan tự nhiên được sử dụng là 15% (hoặc 15 g trên 100 g đất ổn định) với 83% đất tự nhiên, 4% vôi và 3% xi măng. Sau khi đạt được hàm lượng cao nhất, hàm lượng C-S-H, C-S-H + C-A-S-H hình thành dần dần, mặc dù hàm lượng pozzolan tự nhiên tiếp tục tăng ở vùng thứ hai. Đồng thời, kết quả thí nghiệm cho thấy biểu hiện cường độ chia cắt của đất ổn định phụ thuộc vào lượng pozzolan tự nhiên được sử dụng, ứng xử này tương ứng với sự thay đổi của hàm lượng canxi silicat C-S-H, hay C-S-H + C-A-S-H. Sự phát triển của cường độ nén chưa thực sự tương ứng

với sự phát triển của hàm lượng C-S-H, hay C-S-H + C-A-S-H theo lượng pozzolan tự nhiên được sử dụng, nhưng có thể thấy rằng lượng keo này cùng với cường độ nén kéo bị giảm khi hàm lượng pozzolan tự nhiên lớn hơn 15%. Được biết, khoáng canxi silicat C-S-H là khoáng chất lớn nhất góp phần tạo nên cường độ của vật liệu xi măng (cường độ nén, cường độ chia cắt ...) [11]. Do đó, sự phát triển các chỉ tiêu cơ học của đất ổn định phụ thuộc phần lớn vào hàm lượng C-S-H. Kết quả của mô hình cho thấy rằng mô hình nhiệt động lực học dường như tương đối gần đúng với sự phát triển cường độ của đất ổn

định theo lượng pozzolan được sử dụng, do đó mô hình nhiệt động lực học có thể được sử dụng như một công cụ thiết kế ban đầu để tìm ra hỗn hợp tối ưu. khi sử dụng pozzolan tự nhiên cho đất ổn định.

Phân tích sâu hơn thành phần của các khoáng chất còn lại sau khi đạt được trạng thái cân bằng của hỗn hợp vật liệu đất ổn định với mác "đất tự nhiên / pozzolan / xi măng / vôi = 78/15/3/4" bằng kết quả của mô hình nhiệt động hóa học chuẩn hóa của khoáng chất theo tỷ lệ phần trăm được thể hiện trong bảng sau Bảng 3:

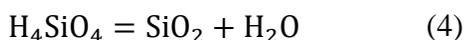
Bảng 3: Hàm lượng tiêu chuẩn của các chất khoáng trong đất ổn định sau khi đạt đến trạng thái cân bằng

Vật liệu	Pha	Công thức	Lượng khoáng tiêu chuẩn (%)
Đất	Quartz	SiO ₂	100
	Kaolinite	Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄	100
	Gibbsite	Al(OH) ₃	56
Vôi	Vôi	CaO	0
	Portlandite	Ca(OH) ₂	100
	Calcite	CaCO ₃	100
	Periclas	MgO	0
	Quartz	SiO ₂	100
Pozzolan tự nhiên	Diopside	CaMg(SiO ₃) ₂	100
	Forsterite	Mg ₂ SiO ₄	0
	Cristobalite	SiO ₂	0
	Albite	NaAlSi ₃ O ₈	100
	Quartz	SiO ₂	100
Xi măng Portland Unhydrated	Alite	Ca ₃ SiO ₅ or (3CaO.SiO ₂)	0
	Belite	Ca ₂ SiO ₄ or (2CaO. SiO ₂)	0
	Aluminate	Ca ₃ Al ₂ O ₆ or (3CaO.Al ₂ O ₃)	0
	Ferrites	Ca ₄ Al ₂ Fe ₂ O ₁₀ or (4CaO.Al ₂ O ₃ .Fe ₂ O ₃)	0

Qua kết quả ở bảng 3 có thể thấy vôi, pozzolan và xi măng tự nhiên có hoạt tính rất lớn khi các khoáng chất vôi và xi măng tự do phản ứng

hoàn toàn tạo ra thành phần chính là C-S-H và C-A-S-H. Với pozzolan tự nhiên, chúng ta dễ dàng nhận thấy rằng hoạt tính tự nhiên của

pozzolan phụ thuộc vào hàm lượng Forsterit và Cristobalit, khi hai khoáng chất này phản ứng hoàn toàn sẽ tạo ra các phân tử hòa tan H_4SiO_4 (nước) trong dung dịch. Phân tử chất tan H_4SiO_4 (nước) có thể được viết dưới dạng phương trình sau:



Đất tự nhiên tham gia vào quá trình ổn định bằng cách phân giải khoáng chất gibbsite để tạo ra các ion Al^{+3} tham gia vào quá trình tạo C-A-S-H (Strätlingite). Các ion Ca^{+2} tự do được cung cấp bởi các khoáng chất vôi và xi măng CaO tự do.

Ngoài việc kiểm tra tính đúng đắn của mô hình, kết quả mô hình và kết quả thí nghiệm trong trường hợp so sánh vai trò của vôi trong ổn định đất, phân bố sử dụng 10% pozzolan tự nhiên, 3% xi măng và 4% vôi được so sánh với các hỗn hợp đất tương tự. , pozzolan tự nhiên, xi măng và không vôi.

Bảng 4: Cường độ nén thí nghiệm của mẫu sau 14 ngày ở điều kiện bão hòa và hàm lượng khoáng C-S-H và C-A-S-H được mô phỏng trong hai thiết kế hỗn hợp đất ổn định sử dụng vôi và không sử dụng vôi

Trọng lượng vôi (g/100g)	Thí nghiệm	Phương pháp số (Khối lượng)		
	Cường độ nén trung bình của 3 mẫu (MPa)	C-S-H	C-A-S-H	C-S-H+ C-A-S-H
0	0.33667	0.04371	0.00954	0.05325
4	0.65000	0.08004	0.00954	0.08958

Kết quả trình bày trong bảng 4 cho thấy sử dụng 10% pozzolan tự nhiên và 3% xi măng, hàm lượng vôi có ảnh hưởng đến cường độ nén của thử nghiệm. Với hàm lượng vôi 4% được sử dụng, cường độ nén của đất ổn định gần như tăng gấp đôi. Kết quả cường độ nén thí nghiệm được đối chứng với kết quả của mô hình số. Mô hình số cho thấy hàm lượng khoáng C-A-S-H không đổi, tuy nhiên, C-S-H và hàm lượng khoáng cung cấp cường độ chính cho vật liệu xi măng, gần như tăng gấp đôi tương ứng với cường độ nén kép. Hàm lượng C-S-H tăng do vôi CaO tự do trong vôi sống hòa tan tạo Ca^{+2} làm mất cân bằng hệ phản ứng và Forsterit hòa tan hoàn toàn tạo ra các phân tử hòa tan H_4SiO_4 (nước) (SiO_2 (nước)) kết hợp ion Ca^{+2} tạo ra C-S-H (CS-H1.6, CS-H1.2 và CS-H0.8), cơ chế này không xuất hiện trong trường. Sự kết hợp

không sử dụng vôi dẫn đến lượng khoáng Forsterit bị hòa tan rất nhỏ. Vì hoạt động của pozzolan tự nhiên không được tối đa hóa. Qua đó có thể thấy vai trò quan trọng của vôi trong việc kích hoạt hoạt động của pozzolan tự nhiên trong quá trình ổn định đất.

Kết quả thí nghiệm và mô hình số lại được đối chứng cho thấy tính đúng đắn của mô hình nhiệt động được thiết kế để nghiên cứu cơ chế phản ứng của các chất trong hỗn hợp vật liệu ổn định đất. Để hiểu và so sánh vai trò của các chất trong hỗn hợp nếu đất ổn định, bài báo mô phỏng và so sánh với kết quả thí nghiệm của hai thiết kế hỗn hợp: đất-xi măng-pozzolan tự nhiên và đất-xi măng. trong phần tiếp theo.

4. NHIỆT ĐỘNG LỰC HỌC CỦA XI MĂNG ĐẤT- THIÊN NHIÊN POZZOLAN

Trong phần này, mô hình nhiệt động sẽ nghiên cứu khả năng hoạt hóa của xi măng đối với pozzolan tự nhiên Daknong trong quá trình gia cố vôi chưa sử dụng. Kết quả của mô hình, là hàm lượng khoáng mang lại khả năng cơ học cho vật liệu C-S-H và C-A-S-H, sẽ được kiểm soát với kết quả của thử nghiệm: độ bền nén và

độ bền kéo đứt của mẫu thử được bảo dưỡng trong điều kiện bão hòa sau 14 ngày tuổi. Hai thiết kế hỗn hợp được sử dụng cho nghiên cứu là "đất / pozzolan tự nhiên / xi măng = 90/0/10 và 80/10/10". Kết quả thí nghiệm cường độ nén của mẫu sau 14 ngày ở điều kiện bão hòa và hàm lượng khoáng C-S-H và C-A-S-H của hai hỗn hợp thiết kế đất ổn định sử dụng pozzolan tự nhiên và không sử dụng pozzolan tự nhiên được trình bày trong bảng 5.

Bảng 5: Cường độ nén thí nghiệm của mẫu sau 14 ngày ở điều kiện bão hòa và hàm lượng khoáng mô phỏng C-S-H và C-A-S-H của hai hỗn hợp thiết kế đất ổn định sử dụng pozzolan tự nhiên và không sử dụng pozzolan tự nhiên

Hỗn hợp thiết kế	P/C=0/10	P/C=10/10
Cường độ nén (MPa)	1.1	1.07
Cường độ chịu kéo (MPa)	0.085	0.086
C-S-H (khối lượng thể tích)	0.0725	0.0735
C-A-S-H (khối lượng thể tích)	0.0239	0.0239
C-S-H+C-A-S-H (khối lượng thể tích)	0.0964	0.0973

Qua kết quả ở bảng trên có thể thấy hàm lượng khoáng C-S-H và C-A-S-H tương đối tương đương trong hai trường hợp pozzolan tự nhiên và không pozzolan tự nhiên có xi măng làm chất hoạt hóa. Điều này có thể giải thích rằng các chất hoạt hóa như CaO không có trong xi măng chỉ được sử dụng đủ chủ yếu cho các phản ứng hydrat hóa của xi măng, điều này thể hiện rõ khi các oxit CaO tồn tại dưới các đặc tính. sản phẩm khoáng C_3S , C_2S , C_3A , C_4AF . Do đó, thành phần khoáng pozzolan tự nhiên Forsterit và Cristobalit giúp phản ứng pozzolan hóa diễn ra, nhưng trong trường hợp sử dụng xi măng làm chất hoạt hóa thì chỉ hòa tan Cristobalit với hàm lượng rất nhỏ nên hàm lượng khoáng C-S-H khác nhau trong trường hợp sử dụng pozzolan tự nhiên và không sử dụng pozzolan tự nhiên là tương đối nhỏ. Vì vậy, khi sử dụng xi măng không có vôi làm chất kích thích tạo thành pozzolan tự nhiên

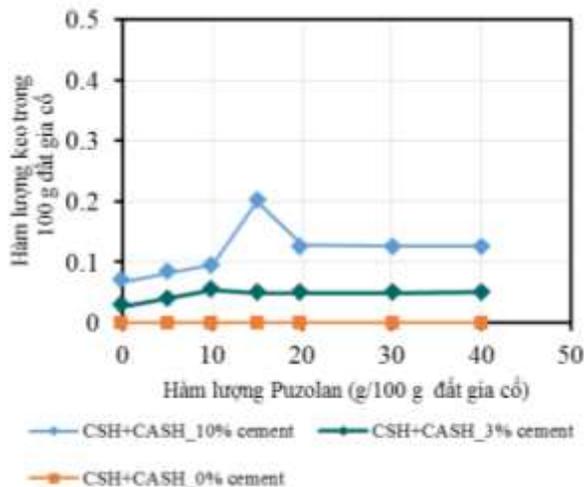
của Daknong, không có tác dụng gia cố đất. Đồng thời, kết quả hàm lượng khoáng C-S-H và C-A-S-H của mô hình tương đối phù hợp với độ bền cơ học của mẫu đất ổn định.

Qua hai phần III và IV nêu trên, đã khẳng định được độ chính xác tương đối của mô hình nhiệt động lực học nhằm nghiên cứu sâu hơn cơ chế của quá trình ổn định đất sử dụng pozzolan tự nhiên, xi măng và vôi của Đan Mạch.

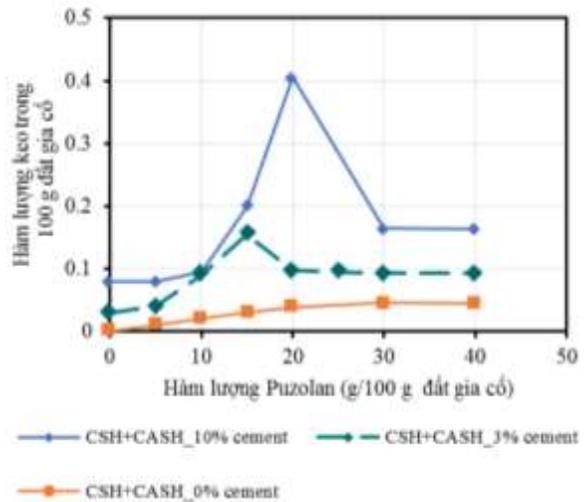
5. ỨNG DỤNG MÔ HÌNH NHIỆT ĐỘNG HỌC ĐỂ TỐI ƯU HÓA THIẾT KẾ HỖN HỢP

Để tìm ra hỗn hợp tối ưu của đất tự nhiên / vôi / xi măng / pozzolan, hàm lượng của từng thành phần sẽ được thay đổi. Vôi có ba hàm lượng 0%, 4% và 10% khối lượng của hỗn hợp. Xi măng cũng có ba mức 0%, 3% và 10%. Pozzolan tự nhiên có tám hàm lượng 0%, 5%,

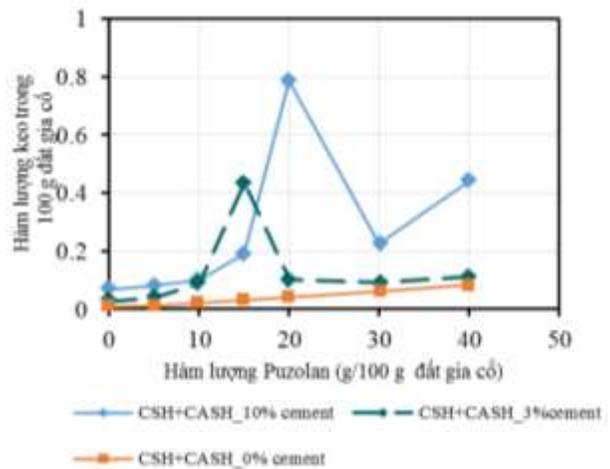
10%, 15%, 20%, 30% và 40%. Thành phần phần trăm của khối lượng đất đã sử dụng được thay đổi để tổng khối lượng vật liệu đã trộn đạt 100 gam. Các vật liệu hỗn hợp này lần lượt được cân bằng bằng các mô hình nhiệt động lực học để xác định hàm lượng khoáng canxi silicat C-S-H và silicat canxi aluminat C-A-S-H. Do đó, thiết kế số lượng hỗn hợp được mô phỏng theo mô hình nhiệt động lực học là $3 \times 3 \times 7 = 63$ hỗn hợp. Kết quả của mô hình được thể hiện trong Hình 2, Hình 3 và Hình 4 dưới đây. Kết quả là, hàm lượng C-S-H và C-A-S-H có trong 100 g hỗn hợp ổn định đất. Hàm lượng này phụ thuộc vào hàm lượng phần trăm của pozzolan tự nhiên, vôi và xi măng. Hỗn hợp tối ưu với vôi sử dụng 0%, 4% và 10% tương ứng "xi măng tự nhiên / pozzolan = 10/15; 10/20 và 10/20". Hàm lượng C-S-H + C-A-S-H lớn nhất khi tỷ lệ vôi tự nhiên / xi măng / pozzolan ổn định là 10/10/20. Khi không sử dụng vôi và xi măng, hỗn hợp đất ổn định không tạo ra C-S-H + C-A-S-H mặc dù có sự hiện diện của pozzolan tự nhiên.



Hình 2: Kết quả số lượng hàm lượng khoáng C-S-H + C-A-S-H trong 100 g đất ổn định theo phần trăm pozzolan tự nhiên, xi măng và 0% vôi



Hình 3: Kết quả số lượng hàm lượng khoáng C-S-H + C-A-S-H trong 100 g đất ổn định theo phần trăm pozzolan tự nhiên, xi măng và 4% vôi



Hình 4: Kết quả số lượng hàm lượng khoáng C-S-H + C-A-S-H trong 100 g đất ổn định theo phần trăm pozzolan tự nhiên, xi măng và 10% vôi

Khi xi măng không được sử dụng trong hỗn hợp ổn định, hàm lượng C-S-H + C-A-S-H hoặc liên kết tăng tương ứng theo hàm lượng pozzolan tự nhiên. Đồng thời, kết quả cũng cho thấy nếu sử dụng vôi tự nhiên và pozzolan làm vật liệu duy nhất để gia cố đất thì hàm lượng C-S-H + C-A-S-H tương đối nhỏ ở mức 4% vôi hoặc 10% vôi,

nên nếu chỉ sử dụng vôi làm kích hoạt phản ứng pozzolan, cường độ của đất ổn định không phát triển mạnh mặc dù sử dụng nhiều vôi, điều này phù hợp với thiết kế ổn định đất của trung tâm địa kỹ thuật bang Indiana của Hoa Kỳ [12].

4. KẾT LUẬN VÀ BÌNH LUẬN

Bài báo đã xây dựng thành công mô hình nhiệt động học để giải thích cơ chế ổn định đất bằng chất kết dính: vôi tự nhiên, xi măng, pozzolan tự nhiên. Lý thuyết về cơ chế ổn định đất đã được xem xét một cách khái quát từ đó mô hình nhiệt động lực học đã được đề xuất để nghiên cứu sâu hơn về cơ chế ổn định đất. Lý thuyết cơ bản của các mô hình nhiệt động lực học cân bằng, cũng như khả năng ứng dụng của các mô hình trong khoa học vật liệu, đã được trình bày. Bằng cách kiểm soát kết quả thí nghiệm cường độ của hỗn hợp thiết kế “đất / pozzolan tự nhiên / vôi / xi măng”, “đất / pozzolan tự nhiên / xi măng”, và “đất / xi măng”, kết quả thí nghiệm đã xác

minh tính đúng đắn của mô hình.

Mô hình có độ chính xác tương đối cao, có thể ứng dụng làm công cụ hỗ trợ thiết kế ổn định đất bằng pozzolan tự nhiên, vôi, xi măng. Từ đó giảm chi phí thiết kế bằng cách giảm số lượng mẫu, và kiểm tra lẫn nhau về độ chính xác của kết quả thử nghiệm và mô hình, do đó cải thiện mô hình kỹ thuật số.

Do hạn chế của bài báo, nhiều vấn đề nghiên cứu của cơ chế ổn định đất chưa được làm rõ, tích hợp các mô hình nhiệt động lực học như ảnh hưởng của nhiệt độ, ảnh hưởng của pH, vai trò của xi măng. Trong quá trình phản ứng với hàm lượng vôi khác nhau. Đồng thời, thời điểm xảy ra phản ứng dự đoán sự phát triển của cường độ theo thời gian. Những vấn đề này đề xuất bài báo cần có những nghiên cứu mô phỏng kết hợp với thí nghiệm để nâng cao độ chính xác và mở rộng khả năng mô phỏng của các mô hình nhiệt động lực học trong các nghiên cứu khác trong tương lai.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] L. Trotignon, V. Devallois, H. Peycelon, C. Tiffreau, and X. Bourbon, “Predicting the long term durability of concrete engineered barriers in a geological repository for radioactive waste,” *Phys. Chem. Earth*, vol. 32, pp. 259–274, 2007.
- [2] N. C. M. Marty, C. Tournassat, A. Burnol, E. Giffaut, and E. C. Gaucher, “Influence of reaction kinetics and mesh refinement on the numerical modelling of concrete/clay interactions,” *J. Hydrol.*, vol. 364, no. 1–2, pp. 58–72, 2009.
- [3] L. De Windt, D. Pellegrini, and J. Van Der Lee, “Reactive transport modeling of interaction processes between claystone and cement.”
- [4] L. De Windt, D. Deneele, and N. Maubec, “Kinetics of lime/bentonite pozzolanic reactions at 20 and 50 C: Batch tests and modeling,” *Cem. Concr. Res.*, vol. 59, pp. 34–42, 2014.
- [5] P. Blanc et al., “Thermodem: A geochemical database focused on low temperature water/rock interactions and waste materials,” *Appl. Geochemistry*, 2012.
- [6] Van Quan Tran, “Contribution à la compréhension des mécanismes de dépassivation des armatures d’un béton exposé à l’eau de mer : théorie et modélisation thermochimique,” Ecole Centrale de Nantes, France, 2016.
- [7] D. L. Parkhurst and C. A. J. Appelo, “Description of input and examples for PHREEQC

Version 3 - A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations,” U.S. Geol. Surv. Tech. Methods, B. 6, chapter A43, 2013.

- [8] W. Hummel, U. Berner, E. Curti, F. J. Pearson, and T. Thoenen, “Nagra/PSI chemical thermodynamic data base 01/01,” in *Radiochimica Acta*, 2002.
- [9] D. L. Parkhurst and C. A. J. Appelo, “User’s Guide To PHREEQC (version 2) - a Computer Program for Speciation, and Inverse Geochemical Calculations,” U.S. Geol. Surv. Water-Resources Investig. Rep., 1999.
- [10] B. T. Vu et al., “A Geochemical Model for Analyzing the Mechanism of Stabilized Soil Incorporating Natural Pozzolan, Cement and Lime BT - Proceedings of China-Europe Conference on Geotechnical Engineering,” 2018, pp. 852–857.
- [11] A. A. Amer, T. M. El-Sokkary, and N. I. Abdullah, “Thermal durability of OPC pastes admixed with nano iron oxide,” *HBRC J.*, vol. 11, no. 2, pp. 299–305, 2015.
- [12] Office of Geotechnical Engineering, “Design Procedures for Soil Modification or Stabilization,” Indiana, 2008.