

SỬ DỤNG MÔ HÌNH SỐ ĐỂ ĐÁNH GIÁ HOẠT TÍNH CỦA POZZOLAN TỰ NHIÊN TRONG QUÁ TRÌNH GIA CỐ ĐẤT

Nguyễn Hữu Năm

Viện Thủy điện và Năng lượng tái tạo

Tóm tắt: Pozzolan tự nhiên là một trong những nguyên liệu thô thường xuyên được sử dụng trong quá trình ổn định đất. Bài báo sử dụng mô hình nhiệt động lực học để đánh giá hoạt động pozzolan của pozzolan tự nhiên. Dựa trên thành phần khoáng vật của hai loại pozzolan tự nhiên: một của Daknong-Việt Nam và một ở Bigadiç-Thổ Nhĩ Kỳ, mô hình nhiệt động lực học có thể mô phỏng thành phần hóa học của dung dịch lỗ rỗng, lượng kết tủa khoáng. Từ mô phỏng này, có thể tính được số lượng canxi silicat ngậm nước C-S-H và canxi silicat silicat ngậm nước C-A-S-H. Các trường hợp thiết kế hỗn hợp khác nhau: đất / pozzolan / vôi được thiết lập. Trong tất cả các trường hợp, việc so sánh số lượng C-S-H và C-A-S-H giữa hai pozzolan tự nhiên được thực hiện để đánh giá hoạt động pozzolan của từng pozzolan tự nhiên. Mô hình nhiệt động lực học dường như được coi là một công cụ để đánh giá hoạt động pozzolan của pozzolan tự nhiên.

Từ khóa: Mô hình số, Hoạt động của pozzolan tự nhiên, Quá trình ổn định đất, Đăknông, Việt Nam.

Summary: Natural pozzolan is one of raw materials that is regularly used in the soil stabilization process. The paper uses thermodynamic model to evaluate pozzolan activity of natural pozzolan. Based on mineralogical composition of two types natural pozzolan: one of Daknong-Vietnam and another one of Bigadiç-Turkey, the thermodynamic model can simulate chemical composition of pore solution, mineral precipitation quantity. From this simulation, numerical quantity calcium silicate hydrated C-S-H and calcium aluminate silicate hydrated C-A-S-H can be calculated. Different cases of mix design: soil/pozzolan/lime are set up. In all of the cases, a comparison of quantity C-S-H and C-A-S-H between of two natural pozzolan is carried out to evaluate the pozzolan activity of the each natural pozzolan. Thermodynamic model seems to be considered as a tool to evaluate pozzolan activity of natural pozzolan.

Keywords: Numerical model, Activity of natural pozzolan, Soil stabilization process, Daknong Vietnam

1. GIỚI THIỆU

Kinh tế phát triển đòi hỏi phải xây dựng cơ sở hạ tầng mới. Điều đó dẫn đến việc sử dụng vật liệu xây dựng ngày càng nhiều. Tuy nhiên, với mục đích giảm thiểu tác động của hiệu ứng nhà kính khí CO₂ từ quá trình sản xuất vật liệu xây dựng, do đó, việc sử dụng nguyên liệu thay thế nguyên liệu công nghiệp là cần thiết để bảo vệ môi trường. Pozzolan tự nhiên là một trong

những nguyên liệu thô được sử dụng nhiều nhất để làm chất kết dính trong quá trình ổn định đất trong xây dựng. Trên thực tế, tồn tại nhiều loại pozzolan tự nhiên với mức độ hoạt động khác nhau. Mỗi loại pozzolan được sử dụng dẫn đến tính chất của đất ổn định khác nhau, ảnh hưởng đến chất lượng công trình. Vì vậy, việc lựa chọn pozzolan là rất quan trọng. Mô hình địa hóa đã được đề xuất [1] và được xác nhận để tìm ra một

Ngày nhận bài: 19/02/2021

Ngày thông qua phản biện: 22/3/2021

Ngày duyệt đăng: 02/4/2021

thiết kế hỗn hợp của đất ổn định bằng cách sử dụng pozzolan tự nhiên. Do đó, mô hình địa hóa được khuyến nghị để đánh giá hoạt động pozzolan của pozzolan tự nhiên. Dựa trên đánh giá, việc lựa chọn pozzolan thích hợp là khả thi. Trong phần đầu tiên, một số phương trình chính của mô hình địa hóa được trình bày. Trong phần tiếp theo sẽ giới thiệu phương trình hệ phản ứng hóa học của đất ổn định sử dụng pozzolan, xi măng và vôi cũng như các thông số đầu vào của mô hình địa hóa như thành phần khoáng của đất tự nhiên, thành phần khoáng của pozzolan tự nhiên Daknong [1] và Bigadiç [2], cũng như các thiết kế kết hợp. Kết quả so sánh của hai loại pozzolan được thực hiện trong phần tiếp theo. Kết luận và góc nhìn cũng được đưa ra trong phần cuối của bài viết.

2. 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:

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

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). v_{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:

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

trong đó C_i là nồng độ mol của phức chất trong nước i (mol.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 [3] được áp dụng trong bài báo này.

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

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 [4]. 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	$\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	23
	Gibbsite	$\text{Al}(\text{OH})_3$	61
Vôi	Lime	CaO	66
	Portlandite	$\text{Ca}(\text{OH})_2$	16
	Calcite	CaCO_3	9
	Periclas	MgO	3
	Quartz	SiO_2	1
Pozzolan Tự nhiên Dǎknông	Diopside	$\text{CaMg}(\text{SiO}_3)_2$	29
	Forsterite	Mg_2SiO_4	23
	Cristobalite	SiO_2	1
	Albite	$\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$	27
	Quartz	SiO_2	4
Pozzolan tự nhiên Bigadiç	Quartz	SiO_2	0.5
	Clinoptilolite	$\text{Ca}_{0.55}(\text{Si}_{4.9}\text{Al}_{1.1})\text{O}_{12}.3.9\text{H}_2\text{O}$	82.9
	Opal	$\text{SiO}_2.n\text{H}_2\text{O}$	6.1
	Biotite	$\text{Fe}_3(\text{OH})_2(\text{Si}_3\text{AlO}_{10})$	2.1
	Albite	Ca_3SiO_5	6.5
Xi măng Portland Unhydrated	Alite (C3S)	Ca_3SiO_5 or $(3\text{CaO}.\text{SiO}_2)$	16.75
	Belite (C2S)	Ca_2SiO_4 or $(2\text{CaO}.\text{SiO}_2)$	54.45
	Aluminate (C3A)	$\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ or $(3\text{CaO}.\text{Al}_2\text{O}_3)$	14.08
	Ferrites (C4AF)	$\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{Fe}_2\text{O}_{10}$ or $(4\text{CaO}.\text{Al}_2\text{O}_3.\text{Fe}_2\text{O}_3)$	8.52
	Gypsum	$\text{CaSO}_4.2\text{H}_2\text{O}$	1.40

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

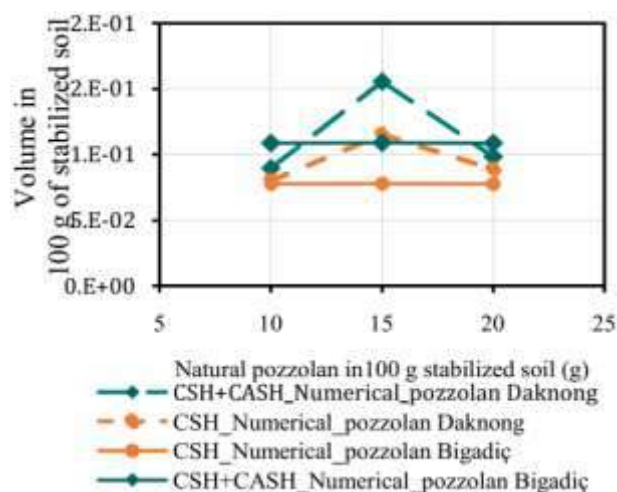
Bảng 2: Phản ứng hóa học và hằng số cân bằng ở 25 ° C, 1 atm.

Phương trình phản ứng hóa học	log K
Quartz + 2H ₂ O = H ₄ SiO ₄	-3.74
Kaolinite + 6H ⁺ = 2Al ³⁺ + 2H ₄ SiO ₄ + H ₂ O	6.47
Gibbsite + 3H ⁺ = Al ³⁺ + 3 H ₂ O	7.74
Hematite + 6H ⁺ = 2Fe ³⁺ + 3 H ₂ O	-0.04
Goethite + 3H ⁺ = Fe ³⁺ + 2 H ₂ O	0.36
Lime + 2H ⁺ = Ca ²⁺ + H ₂ O	32.70
Portlandite + 2H ⁺ = Ca ²⁺ + 2H ₂ O	22.81
Calcite + H ⁺ = Ca ²⁺ + HCO ₃ ⁻	1.85
Periclas + 2H ⁺ = Mg ²⁺ + H ₂ O	21.59
Diopside + 4H ⁺ + 2H ₂ O = Ca ²⁺ + Mg ²⁺ + 2H ₄ SiO ₄	21.73
Forsterite + 4H ⁺ = 2Mg ²⁺ + H ₄ SiO ₄	28.60
Cristobalite + 2H ₂ O = H ₄ SiO ₄	-3.16
Albite + 4H ⁺ + 4H ₂ O = Al ³⁺ + Na ⁺ + 3H ₄ SiO ₄	4.14
C – S – H 1.6 + 3.2H ⁺ = 1.6Ca ²⁺ + H ₄ SiO ₄ + 2.18H ₂ O	28.00
C – S – H 1.2 + 2.4H ⁺ = 1.2Ca ²⁺ + H ₄ SiO ₄ + 1.26H ₂ O	19.30
C – S – H 0.8 + 1.6H ⁺ = 0.8Ca ²⁺ + H ₄ SiO ₄ + 0.34H ₂ O	11.05
Monosulfoaluminate + 12H ⁺ = 2Al ³⁺ + 4Ca ²⁺ + SO ₄ ²⁻ + 18H ₂ O	73.09
Ettringite + 12H ⁺ = 2Al ³⁺ + 6Ca ²⁺ + 3SO ₄ ²⁻ + 38H ₂ O	57.01
Strätlingite + 10H ⁺ = 2Al ³⁺ + 2Ca ²⁺ + H ₄ SiO ₄ + 10.5H ₂ O	49.67
Hydrotalcite + 14H ⁺ = 2Al ³⁺ + 4Mg ²⁺ + 17H ₂ O	73.76
Hydrogarnet + 12H ⁺ = 2Al ³⁺ + 3Ca ²⁺ + 12H ₂ O	49.67
Brucite + 2H ⁺ = Mg ²⁺ + 2H ₂ O	17.11
Monocarboaluminate + 13H ⁺ = 2Al ³⁺ + 4Ca ²⁺ + HCO ₃ ⁻ + 16.68H ₂ O	80.54

3. KẾT QUẢ

Thiết kế hỗn hợp được sử dụng để mô phỏng với 3 hàm lượng pozzolan tự nhiên là 10%, 15% và 20% khối lượng, hàm lượng xi măng và vôi

được cố định lần lượt là 3% và 4%. Lượng C-S-H và C-A-S-H của mô hình trong hai trường hợp pozzolan khác nhau được thể hiện trong Hình 3.



Hình 3: So sánh hàm lượng khoáng C-S-H + C-A-S-H trong đất ổn định khi sử dụng pozzolan tự nhiên khai thác tại Daknong-Việt Nam và Bigadiç, Thổ Nhĩ Kỳ

Qua hình 3, có thể dễ dàng nhận thấy nếu với pozzolan tự nhiên Daknong, thiết kế hỗn hợp đất / pozzolan / xi măng / vôi cho thiết kế hỗn hợp tối ưu với 15% pozzolan được sử dụng, ngược lại điều này không xảy ra với thiết kế hỗn hợp sử dụng pozzolan tự nhiên Bigadiç. Với hàm lượng 10%, 15% và 20% của pozzolan Bigadiç tự nhiên được sử dụng, hàm lượng khoáng cơ học của C-S-H và C-A-S-H là tương đương, không có sự khác biệt giữa các hàm lượng khác nhau, do đó dẫn đến độ bền cơ học trong các trường hợp này là tương đương.

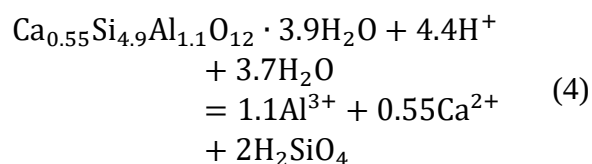
Bảng 3: Kết quả số lượng tỷ lệ hàm lượng khoáng C-S-H và C-A-S-H được hình thành khi sử dụng pozzolan tự nhiên Bigadiç và Đăknông với các lượng khác nhau

Trọng lượng pozzolan tự nhiên được sử dụng	C-S-H Pozzolan Bigadiç/pozzolan Daknong	C-A-S-H Pozzolan Bigadiç/pozzolan Daknong

(g/100g đất)		
10	0.97	3.25
15	0.68	0.77
20	0.88	3.25

Bảng 3 tóm tắt sự khác biệt về hàm lượng khoáng C-S-H và C-A-S-H trong trường hợp sử dụng pozzolan tự nhiên Bigadiç trên pozzolan tự nhiên ở Daknong. Khi hàm lượng pozzolan tự nhiên được sử dụng là 10%, có thể thấy rằng hàm lượng khoáng C-S-H được tạo ra là tương đương nhau bất kể pozzolan tự nhiên, tỷ lệ chênh lệch là 0,97. Với hàm lượng 20% pozzolan tự nhiên, pozzolan tự nhiên của Daknong cho hàm lượng C-S-H lớn hơn. Tuy nhiên, sự khác biệt này nhỏ hơn sự khác biệt khi sử dụng 15% hàm lượng pozzolan tự nhiên, với hàm lượng này, Daknong pozzolan cho hàm lượng C-S-H cao nhất và pozzolan tự nhiên Bigadiç cho hàm lượng C-S-H không đổi như đã phân tích ở trên.

Pozzolan tự nhiên Bigadiç tạo ra hàm lượng C-A-S-H lớn hơn, gấp 3 lần, khi sử dụng pozzolan tự nhiên 10% và 20%, khi so sánh với việc sử dụng Daknong pozzolan. Nhưng với hàm lượng tối ưu, pozzolan tự nhiên của Daknong tạo ra hàm lượng C-A-S-H cao hơn, khi tỷ lệ hàm lượng C-A-S-H trong trường hợp sử dụng pozzolan Bigadiç / Daknong nhỏ hơn 0,77. Pozzolan tự nhiên Bigadiç tạo ra một lượng lớn hơn C-A-S-H trong phần lớn sự phân bố do sự hòa tan của thành phần khoáng Clinoptilolite, chiếm một lượng lớn trong pozzolan tự nhiên Bigadiç, theo phương trình phản ứng (4):



Clinoptilolit bị phân giải đồng thời tạo ra các ion Al^{3+} , Ca^{2+} và phân tử hòa tan H_2SiO_4 (nước) là 3 nguyên tố đồng thời của C-A-S-H, tạo ra nhiều ion Al^{3+} tạo sự cân bằng cho gibbsite $\text{Al}(\text{OH})_3$ trong đất không bị hòa tan như trường hợp sử dụng pozzolan tự nhiên Daknong vì

khoáng chất hòa tan Forsterit và Cristobalit không tạo ra ion Al^{3+} khiến hệ thống phản ứng không cân bằng và hòa tan gibbsite $Al(OH)_3$ để tạo ra một lượng nhỏ C-A-S-H cho đến khi đạt được hàm lượng pozzolan tối ưu.

Sự khác biệt về hàm lượng khoáng cung cấp các đặc tính cơ học cho hỗn hợp đất ổn định C-S-H + C-A-S-H giữa hai loại pozzolan tự nhiên phụ thuộc vào hàm lượng pozzolan tự nhiên được sử dụng cũng như ảnh hưởng của hàm lượng chất hoạt hóa. Dùng làm vôi và xi măng. Tuy nhiên, trong giới hạn của luận văn chỉ có một nội dung sử dụng vôi và xi măng để tìm hiểu hoạt tính của pozzolan tự nhiên. Trên cơ sở so sánh mô hình số với pozzolan tự nhiên được khai thác tại Bigadiç - Thổ Nhĩ Kỳ, có thể kết luận rằng pozzolan tự nhiên được khai thác tại Daknong có thành phần khoáng tương đối tốt, tuy nhiên rất khó cho quá trình sử dụng vì để đạt được chất lượng cao, thiết kế phải được tối ưu hóa.

Hàm lượng tối ưu trong trường hợp Daknong pozzolan và không với pozzolan Bigadiç là quá trình cân bằng của một loạt các phản ứng được trình bày trong Bảng 2, cũng như phương trình cân bằng của Clinoptilolit (4). Vì vậy, cơ chế gia cố đất nói chung chỉ mang tính chất tương đối, để hiểu rõ hơn tác dụng của việc sử dụng pozzolan tự nhiên đến ổn định đất thì cần có mô hình nhiệt động lực học để giải. Các phương trình của trình tự phản ứng diễn ra không chỉ đơn thuần là các phản ứng pozzolanic đơn lẻ.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] 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.
 - [2] S. Özen, "Pozzolanic activity of natural zeolites: mineralogical, chemical and physical characterization and examination of hydration products," Middle East Technical, 2013.
 - [3] P. Blanc et al., "Thermoddem: A geochemical database focused on low temperature water/rock interactions and waste materials," Appl. Geochemistry, 2012.
- Van Quan Tran, "Contribution à la compréhension des mécanismes de dépassement des armatures d'un béton exposé à l'eau de mer : théorie et modélisation thermochimique," Ecole Centrale de Nantes, France, 2016.

4. KẾT LUẬN

Trong bài báo này, mô hình địa hóa được đề xuất để đánh giá hoạt động pozzolan của pozzolan tự nhiên. Đánh giá khả năng hoạt động của pozzolan tự nhiên Daknong, mô hình cho thấy đây là pozzolan tự nhiên tương đối tốt với hàm lượng Forsterite và Cristobalite trong pozzolan lên đến 24% so với pozzolan tự nhiên. Bigadiç - Thổ Nhĩ Kỳ. Tuy nhiên, khi sử dụng các chất hoạt hóa như vôi và xi măng, việc thiết kế hàm lượng pozzolan tự nhiên của Daknong là tương đối khó vì cần phải tìm ra hàm lượng tối ưu. Sự cần thiết của mô hình nhiệt động lực học một lần nữa được khẳng định bằng cách so sánh hoạt động của pozzolan tự nhiên khai thác tại Daknong - Việt Nam và tại Bigadiç - Thổ Nhĩ Kỳ. Do hạn chế về thời gian, nhiều vấn đề nghiên cứu về cơ chế ổn định của đất chưa được làm rõ và tích hợp mô hình địa hóa 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 gian của các phản ứng từ đó dự đoán sự phát triển của cường độ theo thời gian. Những vấn đề này cho thấy các nghiên cứu trong tương lai cần có các nghiên cứu mô phỏng kết hợp thí nghiệm để nâng cao độ chính xác và mở rộng khả năng mô phỏng của các mô hình địa hóa trong các nghiên cứu khác.