

SỬ DỤNG MÔ HÌNH ĐỊA HÓA HỌC ĐỂ MÔ PHỎNG MÔ HÌNH TẠO PHỨC BỀ MẶT TƯƠNG TÁC GIỮA BÊ TÔNG VÀ LỚP MÀNG CHỐNG THẤM BENTONITE

Trần Văn Quân¹

TÓM TẮT

Các công trình ngầm bê tông, như hầm ngầm metro, tầng ngầm nhà cao tầng thường sử dụng màng bentonite để xử lý chống thấm cho công trình. Với môi trường kiểm cao của bê tông có thể làm thay đổi tính chất bentonite, ảnh hưởng đến độ bền của hệ thống rào cản nhiều lớp. Trong nghiên cứu này, tương tác giữa bê tông/bentonite được thực hiện, cũng như ảnh hưởng của nhiệt độ đến tương tác này. Độ kiểm cao của bê tông làm tăng pH của môi trường bentonite gây ra kết tủa khoáng analcime ở 25°C, tuy nhiên điều này không được quan sát thấy trong kết quả mô phỏng ở 50°C. Độ ổn định của khoáng chất ở 50°C cao hơn ở nhiệt độ thường 25°C.

Từ khóa: Công trình ngầm, bê tông, bentonite, mô hình địa hóa học, ảnh hưởng nhiệt độ, chống thấm.

1. MỞ ĐẦU

Sự phát triển hạ tầng mạnh mẽ như hiện nay ở các thành phố lớn đòi hỏi việc tận dụng tối đa diện tích không gian, do đó các không gian ngầm được sử dụng rất nhiều trong các công trình xây dựng từ các công trình nhà cao tầng dân dụng, cũng như các công trình ngầm như tàu điện ngầm [1]. Kết cấu bê tông được sử dụng chủ yếu cho các công trình này, do đó, các kết cấu bê tông thường phải đối mặt với vấn đề thấm từ nước dưới đất. Để chống thấm cho các kết cấu bê tông, màng chống thấm bentonite thường được sử dụng làm lớp đệm chống thấm cho kết cấu bê tông. Tuy nhiên, dung dịch lỗ rỗng bê tông xi măng có tính kiềm cao ($\text{pH} = 13.5$) gây ra các phản ứng phong hóa mảng chống thấm bentonite [2-5]. Bê tông khi tiếp xúc với môi trường có pH thấp như trong bentonite ($\text{pH} = 7$) gây ra việc xuống cấp lớp bê tông. Hai cơ chế chính xảy ra khi phả hủy lớp bê tông là (1): rửa trôi ion Ca^{2+} và (2): phản ứng với dung dịch bên ngoài xâm nhập tạo ra một chuỗi các phản ứng hòa tan các khoáng thủy hóa xi măng. Đối với hệ thống rào cản nhiều lớp: bê tông/lớp màng chống thấm bentonite, giai đoạn đầu tiên của sự phả hủy gây ra bởi tính kiềm pH cao của bê tông đặc trưng bởi sự hòa tan montmorillonite trong lớp màng chống thấm bentonite. Trong dài hạn các khoáng portlandite trong bê tông sẽ bị hòa tan kéo theo việc rửa trôi ion Ca^{2+} . Việc phả hủy bê tông và mảng

chống thấm về lâu dài sẽ gây ảnh hưởng đến khả năng chống thấm và làm việc của công trình, do đó nghiên cứu tương tác giữa bê tông và lớp màng chống thấm bentonite giúp lựa chọn các điều kiện vật liệu thiết kế bê tông, từ đó cải thiện khả năng làm việc của hệ thống bê tông và lớp màng chống thấm bentonite.

Tương tác giữa bê tông và màng chống thấm bentonite đã được thực hiện bằng các mô hình số trong một số nghiên cứu [2-5]. Tuy nhiên, các mô hình này đã không tinh đến sự tương tác các ion với bề mặt khoáng C-S-H là khoáng chủ yếu của xi măng thủy hóa, có thể ảnh hưởng đến kết quả số của mô hình. Tương tác giữa các ion và bề mặt khoáng C-S-H đã được giới thiệu thành công trong nghiên cứu của Tran và nnk. [6-14]. Do đó, trong nghiên cứu này mô hình địa hóa học sẽ được phát triển từ các mô hình trước đó bằng việc kết hợp mô hình tạo phức bê mặt để mô phỏng quá trình phản ứng giữa các ion và bề mặt khoáng C-S-H. Cơ sở lý thuyết của mô hình bao gồm cơ sở dữ liệu nhiệt động, thông số động học, khả năng trao đổi cation và mô hình tạo phức ion bề mặt C-S-H sẽ được trình bày trong các phần đầu tiên. Đồng thời, các tương tác bê tông/bentonite ở hai nhiệt độ 25°C và 50°C trong một năm và ảnh hưởng của thay đổi hệ số rỗng đến quá trình tương tác bê tông/bentonite sẽ được trình bày trong bài báo này.

¹ Trường Đại học Công nghệ Giao thông vận tải
Email: quantv@utl.edu.vn

2. GIỚI THIỆU CÔNG CỤ MÔ PHỎNG VÀ CÁC GIẢ THIẾT CỦA MÔ HÌNH

Mô hình địa hóa được áp dụng thành công trong các nghiên cứu khác nhau về độ bền bê tông [6-14]. Bài toán tương tác bê tông/bentonite được mô phỏng dựa vào phần mềm Toughreact [15]. Đây là bài toán mô chiểu và trong điều kiện bão hòa nước. Chỉ có sự khuếch tán được tính đến việc vận chuyển các ion.

Các cơ chế chính trong quá trình mô phỏng tương tác giữa bê tông và bentonite được sử dụng là: trao đổi cation giữa bề mặt khoáng montmorillonite có trong bentonite, cân bằng nhiệt động học và tốc độ phản ứng theo lý thuyết động học.

3. CƠ SỞ LÝ THUYẾT MÔ HÌNH ĐỊA HÓA HỌC

3.1. Cơ sở dữ liệu nhiệt động học cân bằng

Bảng 1. Hệ số cân bằng của các phản ứng ở $T = 25^\circ\text{C}$ và 50°C

Mineral	$\log K_{25^\circ\text{C}}$	$\log K_{50^\circ\text{C}}$
$\text{Jennite} + 2.33H^+ \rightarrow 1.67Ca^{2+} + HSiO_3^- + 2.76H_2O$	19,53	17,32
$\text{Tobermorite} + 0.66H^+ \rightarrow 0.83Ca^{2+} + HSiO_3^- + 1.16H_2O$	0,63	0,38
$\text{Ettringite} + 12H^+ \rightarrow 2Al^{3+} + 6Ca^{2+} + 3SO_4^{2-} + 38H_2O$	56,67	50,26
$\text{Hydrotalcite} + 14H^+ \rightarrow 4Mg^{2+} + 2Al^{3+} + 17H_2O$	74,68	63,77
$\text{Portlandite} + 2H^+ \rightarrow Ca^{2+} + 2H_2O$	22,76	20,40
$\text{Goethite} + 3H^+ \rightarrow Fe^{3+} + 2H_2O$	0,36	-0,77
$\text{Monosulphate} + 12H^+ \rightarrow 4Ca^{2+} + 2Al^{3+} + SO_4^{2-} + 18H_2O$	72,44	62,64
$\text{Si-hydrogarnet} + 11H^+ \rightarrow 3Ca^{2+} + 2Al^{3+} + HSiO_3^- + 8H_2O$	60,61	51,46
$\text{Friedel-salt} + 12.05H^+ \rightarrow 2Al^{3+} + 4Ca^{2+} + 1.95Cl^- + 16.05H_2O$	74,75	55,51
$\text{Kuzel-salt} + 12H^+ \rightarrow 2Al^{3+} + 4Ca^{2+} + Cl^- + 0.5SO_4^{2-} + 18H_2O$	73,24	54,37
$\text{Calcite} + H^+ \rightarrow Ca^{2+} + HCO_3^-$	1,8470	0,7856
$\text{Cristobalite}(\text{alpha}) + 2H_2O \rightarrow H_4SiO_4$	-3,1604	-2,5340
$\text{Albite} + 4H^+ + 4H_2O \rightarrow Al^{3+} + Na^+ + 3H_4SiO_4$	2,9962	0,1756
$\text{Montmorillonite}(MgK) + 6H^+ + 4H_2O \rightarrow 1.66Al^{3+} + 0.34K^+ + 0.34Mg^{2+} + 4H_4SiO_4$	2,8141	-1,8289
$\text{Analcime} + 3.96H^+ + 1.04H_2O \rightarrow 0.99Al^{3+} + 0.99Na^+ + 2.01H_4SiO_4$	6,6444	3,1516
$\text{Brucite} + 2H^+ \rightarrow Mg^{2+} + 2H_2O$	17,1094	13,1486
$\text{Saponite} - Mg + 7.36H^+ + 2.64H_2O \rightarrow 0.34Al^{3+} + 3.17Mg^{2+} + 3.66H_4SiO_4$	28,7937	19,5146
$\text{Quartz} + 2H_2O \rightarrow H_4SiO_4$	-3,7372	-2,9473

Cơ sở dữ liệu nhiệt động lực học được tạo bởi Viện Khảo sát Địa chất Pháp BRGM [16] được chọn để sử dụng trong mô hình địa hóa học. Bảng 1 cung cấp tất cả các chi tiết liên quan đến dữ liệu nhiệt động học của các khoáng được sử dụng trong mô hình. Canxi silicat thủy hóa bao gồm hai khoáng với tỷ lệ Ca/Si khác nhau là Jennite Ca/Si = 1,67 và Tobermorite 0,83, được sử dụng để mô phỏng độ bền hóa học ở giai đoạn đầu của bê tông. Các khoáng thủy hóa khác có trong bê tông là Ettringite,

Hydrotalcite, Portlandite và Monosulfoaluminat. Các hợp chất sét bentonite thành phần chính Montmorillonite 92% trong lượng, Cristobalite (alpha) 2%, Albite 2%, Calcite 2% và Quartz (thạch anh) 1%.

3.2. Tham số tốc độ phản ứng

Các tham số tốc độ phản ứng được mô tả theo lý thuyết của Lasaga [17]. Tốc độ phản ứng phụ thuộc vào các điều kiện phản ứng: trạng thái cân bằng, áp suất, nhiệt độ, pH hoặc nồng độ các ion. Tốc độ phản

ứng được giả sử là tương tự nhau trong cả hai trường hợp hòa tan và kết tủa. Các tham số của tốc độ phản ứng được trình bày trong bảng 2.

Bảng 2. Tốc độ phản ứng k (mol/m²/s), diện tích bê mặt phản ứng A_{ms} (m²/g) và năng lượng hoạt động (kJ/mol)

Khoáng	A_{ms}	k	E_a
Jennite	41,0	$2,75 \times 10^{-12}$	39,6
Tobermorite	41,0	$2,75 \times 10^{-12}$	39,6
Ettringite	9,8	$7,08 \times 10^{-13}$	39,6
Hydrotalcite		Instantaneous	
Portlandite	16,5	$2,24 \times 10^{-8}$	
Goethite		Instantaneous	
Monosulphate	5,7	$6,76 \times 10^{-12}$	
Si-Hydrogarnet		Instantaneous	
Kuzel's salt		Instantaneous	
Friedel's salt		Instantaneous	
Quartz		$4,520 \times 10^{-14}$	90,1
Calcite		Instantaneous	
Cristobalite(alpha)	0,0098	$3,4491 \times 10^{-13}$	68,9
Albite	0,0098	$2,754 \times 10^{-13}$	69,8
Montmorillonite		$2,138 \times 10^{-13}$	22,68
Analcime		$6,310 \times 10^{-10}$	10,8
Brucite		$1,00 \times 10^{-6}$	58,58
Saponite-Mg		$1,00 \times 10^{-10}$	41,84

3.3. Mô hình tạo phức bê mặt

Bảng 3. Phương trình hấp phụ trên bê mặt C-S-H và hệ số cân bằng

Phương trình tạo phức bê mặt	$\log(K_e)$
$\equiv\text{SiOH} \leftrightarrow \equiv\text{SiO}^\bullet + \text{H}^\bullet$	-12,7
$\equiv\text{SiOH} + \text{Ca}^{2+} \leftrightarrow \equiv\text{SiOCa}^\bullet + \text{H}^\bullet$	-9,4
$\equiv\text{SiOH} + \text{Cl}^- \leftrightarrow \text{SiOHC}\text{l}^\bullet$	-0,35
$\equiv\text{SiOH} + \text{Ca}^{2+} + \text{Cl}^- \leftrightarrow \equiv\text{SiOCaCl}^\bullet + \text{H}^\bullet$	-9,8
$\equiv\text{SiOH} + \text{Ca}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} \leftrightarrow \equiv\text{SiOCaSO}_4^\bullet + \text{H}^\bullet$	-8,5
$\equiv\text{SiOH}_{\text{Jennite}} + \text{Na}^\bullet(\text{K}^\bullet) \leftrightarrow \equiv\text{SiONa}(\text{K}) + \text{H}^\bullet$	-13,75
$\equiv\text{SiOH}_{\text{Tobermorite}} + \text{Na}^\bullet(\text{K}^\bullet) \leftrightarrow \equiv\text{SiONa}(\text{K}) + \text{H}^\bullet$	-12,66
Diện tích phản ứng bê mặt C-S-H $A_{ms}=500 \text{ m}^2/\text{g}$	
Mật độ hấp thụ của C-S-H $\delta_{CSH}=8 \times 10^{-6} \text{ mol/m}^2$	
Giá thiết hệ số cân bằng $\log K_{25^\circ\text{C}}=\log K_{50^\circ\text{C}}-\log K_{10^\circ\text{C}}$	

Trong vật liệu xi măng, phản ứng vật lý và hóa học giữa các ion và bê mặt khoáng có thể xảy ra, do là quá trình hấp thụ trên bê mặt khoáng. Những phản ứng này chủ yếu diễn ra trên bê mặt C-S-H trong môi trường bê tông. Khi khoáng của xi măng thủy hóa tương tác với các dung dịch đến từ môi trường bentonite, các anion và cation di chuyển qua

vật liệu và các phản ứng giữa các ion này và bề mặt khoáng C-S-H được diễn ra (silanol $\equiv\text{SiOH}$) xuất hiện. Sự hấp phụ các cation Ca^{2+} ; Na^\bullet ; K^\bullet ; các anion Cl^- và SO_4^{2-} trên lớp bề mặt C-S-H đã được tích hợp trong cơ sở dữ liệu của nhiệt động học phản ứng. Chúng có thể được biểu diễn bằng các phản ứng hấp phụ (Bảng 3). Các hằng số cân bằng được lấy từ cơ sở dữ liệu được phát triển bởi Tran và nnnk. [7, 9, 11, 13].

3.4. Trao đổi cation trên bê mặt khoáng montmorillonite

Khả năng trao đổi cation là thể hiện khả năng một số cation có thể được giữ lại trên bề mặt hạt đất. Các nguyên tử tích điện dương được giữ lại trên bề mặt diện tích âm, nhưng cho phép các ion tích điện dương trao đổi với các hạt diện tích dương khác nhau trong nước có trong lỗ rỗng của môi trường đất xung quanh. Khả năng trao đổi cation là một trong những hiện tượng hóa học làm thay đổi tính chất của đất. Bentonite có chứa đến 92% khoáng montmorillonite do đó sự trao đổi cation của bentonite được thể hiện qua sự trao đổi cation của montmorillonite được trình bày trong bảng 4.

Bảng 4. Hệ số cân bằng của phản ứng trao đổi cation của Montmorillonite

Cation exchange of Montmorillonite	$\log K_{25^\circ\text{C}}$
$\text{K}^\bullet + \text{Na} \rightarrow \text{K} + \text{Na}^\bullet$	0,8
$\text{Ca}^{2+} + 2\text{Na} \rightarrow \text{Ca} + 2\text{Na}^\bullet$	0,7
$\text{Mg}^{2+} + 2\text{Na} \rightarrow \text{Mg} + 2\text{Na}^\bullet$	0,5
Khả năng trao đổi cation của Montmorillonite = 90 meq/100 g	

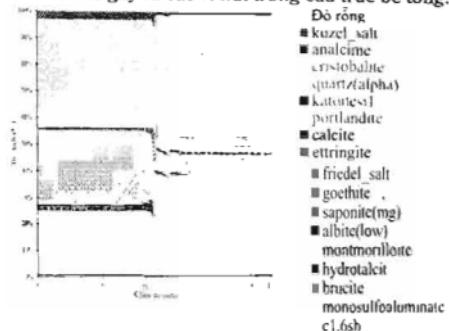
4. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

4.1. Tương tác bê tông/bentonite tại 25°C

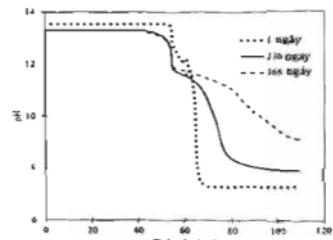
Hình 1, 2 và 3 lần lượt cho thấy kết quả mõ phỏng: thành phần khoáng của bê tông/bentonite ở 25°C sau một năm, sự thay đổi pH theo chiều sâu sau một năm và sự thay đổi của thành phần khoáng bê tông tại giao diện tiếp xúc với bentonite sau một năm.

Hình 2 cho thấy pH của bê tông/bentonite trong các thời điểm khác nhau: 1 ngày, 230 ngày và 365 ngày. Do pH cao của bê tông, pH của bentonite tăng từ 7,2 đến xấp xỉ 9,0. Sự điều chỉnh pH của bentonite gây ra sự kết tủa khác nhau của khoáng chất mangan như analcime và hình thành kết tủa calcite. Hơn nữa, hình 1 và 3 cho thấy lượng khoáng ettringite trên bê mặt bê tông được kết tủa. Với thể tích mol lớn,

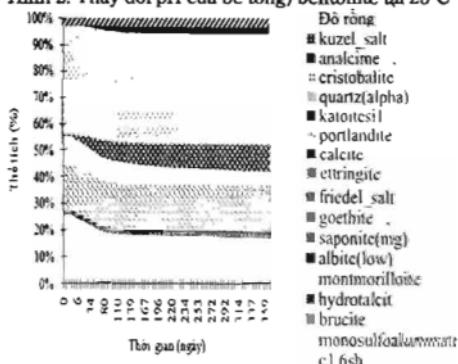
Ettringite trong nò làm giảm độ xốp của bê tông tuy nhiên có thể gây ra các vi nứt trong cấu trúc bê tông.



Hình 1. Thành phần khoáng của bê tông bentonite ở 25°C sau một năm



Hình 2. Thay đổi pH của bê tông/bentonite tại 25°C



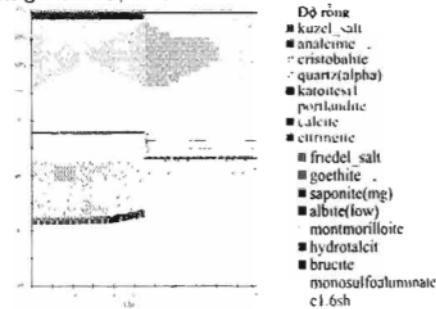
Hình 3. Sự thay đổi của khoáng bê tông theo thời gian ở 25°C tại giao diện tiếp xúc với bentonite

Hình 3 cho thấy sự thay đổi các khoáng tại giao diện bê tông/bentonite, trong đó bao gồm sự trường nò của ettringite, hòa tan Monosulfoaluminatc, Jennite (Cl.6SH) tạo ra sự kết tủa của (Cl.2SH). Portlandite, Goethite và Hydrotalcite

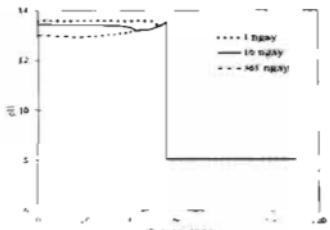
vẫn ổn định sau một năm. Độ rỗng giảm xấp xỉ 8% (độ rỗng được biểu thị phản màu trắng trong biểu đồ hình 3).

4.2. Tương tác bê tông/bentonite tại 50°C

Sự thay đổi thành phần khoáng của bê tông/bentonite tại 50°C được mô tả trong hình 4 và thay đổi pH tại 50°C được mô tả trong hình 5. Kết quả mô phỏng cho thấy tương tác bê tông/bentonite tương đối thấp. Sự thay đổi pH trong phản bentonite đã không xảy ra, cũng như việc thay đổi thành phần khoáng trong bentonite là rất thấp. Đối với bê tông, chỉ có khoáng Portlandite được hòa tan, làm tăng độ rỗng bê tông. Ở nhiệt độ cao hơn, sự thay đổi của bê tông/bentonite chậm hơn tại nhiệt độ bình thường 25°C. Ở nhiệt độ 50°C các khoáng dường như có sự ổn định hơn ở nhiệt độ 25°C có thể giải thích thông qua hằng số cân bằng được liệt kê ở bảng 1. Hằng số cân bằng ở nhiệt độ 50°C thấp hơn so với hằng số cân bằng ở nhiệt độ 25°C.



Hình 4. Thành phần khoáng của bê tông bentonite ở 50°C sau một năm



Hình 5. Thay đổi pH của bê tông/bentonite tại 50°C

5. KẾT LUẬN

Một mô hình địa hóa bao gồm mô hình phức tạp bề mặt được phát triển để nghiên cứu về tương tác bê tông/bentonite, vẫn để phổ biến ảnh hưởng đến độ bền của hệ thống chống thấm trong xây dựng dân

dụng, giao thông (hầm metro). Sự thay đổi các thành phần khoáng của bê tông/bentonite xảy ra mạnh hơn ở nhiệt độ 25°C so với nhiệt độ 50°C. Phản tiếp xúc bê tông/bentonite bị ảnh hưởng lớn nhất bởi dung dịch có trong lớp màng bentonite. Điều này dẫn tới việc hình thành Ettringite gây ra sự trương nở, sự hòa tan lớn của các khoáng Monosulfatoaluminate, phong hóa Jennite với tỷ lệ Ca/Si=1,6 thành C-S-H với tỷ lệ Ca/Si=1,2 từ đó làm giảm độ rỗng. Tuy nhiên với việc hình thành Ettringite sẽ làm xuất hiện các vi nứt trong lớp vỏ bê tông gây ảnh hưởng độ bền hệ thống chống thấm. Do vậy, để hạn chế hình thành Ettringite thứ cấp gây phá hủy kết cấu bê tông việc sử dụng bê tông bền sunphat với lượng C₃A thấp có thể làm giảm hình thành Ettringite thứ cấp, tăng độ bền cho hệ thống chống thấm bê tông/bentonite.

Kết quả mới chỉ dừng lại ở nghiên cứu mô hình số cho một năm do đó cần tiến hành các mô phỏng với các thời gian lâu hơn trong các nghiên cứu tiếp theo.

LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển Khoa học và Công nghệ Quốc gia (NAFOSTED) trong đề tài mã số 107.99-2018.337.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Nguyễn Hữu Năm (2020). Mô hình nhiệt động lực học và ứng dụng trong nghiên cứu sử dụng các chất kết dính vôi cát. *Tạp chí Khoa học và Công nghệ Thủy lợi*, vol. 58, pp. 63–70.

2. L. De Windt, F. Marsal, E. Tinseau and D. Pellegrini (2008). Reactive transport modeling of geochemical interactions at a concrete/argillite interface, Tournemire site (France). *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, vol. 33, pp. S295–S305, Jan. 2008, doi: 10.1016/j.jpc.2008.10.035.

3. L. De Windt, D. Pellegrini and J. van der Lee (2004). Coupled modeling of cement/claystone interactions and radionuclide migration. *Journal of Contaminant Hydrology*, vol. 68, no. 3–4, pp. 165–182, Feb. 2004, doi: 10.1016/S0169-7722(03)00148-7.

4. O. Bildstein, L. Trotignon, M. Perronet and M. Jullien (2006). Modelling iron-clay interactions in deep geological disposal conditions. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, vol. 31, no. 10,

pp. 618–625, Jan. 2006, doi: 10.1016/j.jpc.2006.04.014.

5. L. Trotignon, V. Devallois, H. Peycelon, C. Tiffreau and X. Bourbon (2007). Predicting the long term durability of concrete engineered barriers in a geological repository for radioactive waste. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, vol. 32, no. 1, pp. 259–274, Jan. 2007, doi: 10.1016/j.jpc.2006.02.049.

6. B. T. Vu *et al.* (2018). A geochemical model for analyzing the mechanism of stabilized soil incorporating natural pozzolan, cement and lime. In *Proceedings of China-Europe Conference on Geotechnical Engineering*, 2018, pp. 852–857.

7. V. Q. Tran, A. Soive, S. Bonnet and A. Khelidj (2018). A numerical model including thermodynamic equilibrium, kinetic control and surface complexation in order to explain cation type effect on chloride binding capability of concrete. *Construction and Building Materials*, vol. 191, pp. 608–618, Dec. 2018, doi: 10.1016/j.conbuildmat.2018.10.058.

8. V. Q. Tran (2016). Contribution à la compréhension des mécanismes de dépassivation des armatures d'un béton exposé à l'eau de mer: théorie et modélisation thermochimique. PhD Thesis, 2016.

9. A. Soive and V. Q. Tran (2017). External sulfate attack of cementitious materials: New insights gained through numerical modeling including dissolution/precipitation kinetics and surface complexation. *Cement and Concrete Composites*, vol. 83, pp. 263–272, Oct. 2017, doi: 10.1016/j.cemconcomp.2017.07.024.

10. H. L. Nguyen, V. Q. Tran, L. K. Nguyen, T. A. Pham, Q. T. Ngo and V. L. Giap (2019). Geochemical modelling for prediction of chloride diffusion in concrete exposed to seawater. In *CIGOS 2019, Innovation for Sustainable Infrastructure*, Singapore, 2020, pp. 385–390.

11. V. Q. Tran, A. Soive and V. Baroghel-Bouny (2018). Modelisation of chloride reactive transport in concrete including thermodynamic equilibrium, kinetic control and surface complexation. *Cement and Concrete Research*, vol. 110, pp. 70–85, Aug. 2018, doi: 10.1016/j.cemconres.2018.05.007.

12. A. Soive, V. Q. Tran and V. Baroghel-Bouny (2018). Requirements and possible simplifications for multi-ionic transport models – Case of concrete subjected to wetting-drying cycles in marine environment. *Construction and Building Materials*, vol. 164, pp. 799–808, Mar. 2018, doi: 10.1016/j.conbuildmat.2018.01.015.
13. V. Q. Tran *et al.* (2019). Temperature effects on chloride binding capacity of cementitious materials. *Magazine of Concrete Research*, pp. 1–39, Dec. 2019, doi: 10.1680/jmacr.19.00484.
14. A. Soive, V. Q. Tran and M. Gasc-Barbier (2019). The advantages of using a geochemical transport model including thermodynamic equilibrium, kinetic control and surface complexation to simulate the durability of concretes exposed to chlorides and sulphates. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, vol. 23, no. 5, pp. 552–563, 2019.
15. T. Xu, N. Spycher, E. Sonnenthal, L. Zheng and K. Pruess (2011). TOUGHREACT User's Guide: A Simulation Program for Non-isothermal Multiphase Reactive Transport in Variably Saturated Geologic Media, Version 2.0, p. 240, 2011.
16. Ph. Blanc *et al.* (2012). Thermoddem: A geochemical database focused on low temperature water/rock interactions and waste materials. *Applied Geochemistry*, vol. 27, no. 10, pp. 2107–2116, Oct. 2012, doi: 10.1016/j.apgeochem.2012.06.002.
17. A. C. Lasaga (1998). *Kinetic theory in the earth sciences*. Princeton, NJ: Princeton University Press, 1998.

USING GEOCHEMICAL CODE FOR SURFACE COMPLEXATION SIMULATION OF CONCRETE/BENTONITE INTERACTIONS

Tran Van Quan

Summary

Concrete underground construction, such as metro tunnels, basements of high-rise buildings often use bentonite membranes to treat waterproofing works. The alkaline conditions of concrete can alter the bentonite properties which effects on the durability of the multi-barrier system. In this paper, the temperature effect on the alteration process of concrete/bentonite is investigated. High alkaline of concrete increase pH of bentonite media inducing analcime precipitation in an early stage at 25°C, however that is not observed in the numerical results at 50°C. In higher temperatures, the stability of mineral at 50°C is higher than at normal temperature 25°C.

Keywords: *Underground constructions, concrete, bentonite, geochemical code, temperature effect, waterproofing works.*

Người phản biện: PGS.TS. Nguyễn Quang Phú

Ngày nhận bài: 02/3/2020

Ngày thông qua phản biện: 3/4/2020

Ngày duyệt đăng: 10/4/2020