

Résumé

Modélisations physico-chimiques de la pénétration des ions chlorures dans les matériaux cimentaires

Thai Quang NGUYEN

Cette thèse répond au besoin de mieux maîtriser la durabilité des structures en béton armé exposées aux embruns d'eau de mer ou aux projections de sels de déverglaçage, en proposant une modélisation de la pénétration des ions chlorure dans les matériaux cimentaires lors des cycles de séchage-imbibition. Ce modèle tient compte de la cristallisation des sels, de la fixation des ions chlorure par les constituants solides de la pâte de ciment et plus généralement des interactions physico-chimiques entre les ions et la matrice cimentaire. Ces dernières sont basées sur l'équilibre chimique de la solution interstitielle avec les aluminates tricalciques (C_3A), la portlandite ($Ca(OH)_2$), et les sels de Friedel ($3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot CaCl_2 \cdot 10H_2O$) et l'adsorption des ions chlorure sur les feuillettes de C-S-H par substitution de l'ion hydroxyle. Cette description physico-chimique des interactions a permis de mettre en évidence que les isothermes de fixation des ions chlorure, mesurés expérimentalement, sont l'addition d'une partie dépendant seulement des teneurs initiales en composants solides issues de l'hydratation du ciment et d'une partie dépendant seulement de la nature intrinsèque des C-S-H produits. La pertinence de cette description est démontrée en comparant les résultats du modèle avec ceux de nombreux essais effectués sur plusieurs matériaux en condition saturées issus de la littérature. L'extension de ce modèle d'interaction aux conditions non saturées n'introduit aucune donnée supplémentaire. Le reste du travail l'a démontré à travers la modélisation et la simulation de nombreux essais de séchage, d'imbibition ou de cycles d'imbibition-séchage sur des matériaux de construction ou cimentaires de caractéristiques différentes. Cette dernière partie a permis de mettre en évidence plusieurs phénomènes importants à prendre en compte tels que l'effet de la force ionique de la solution sur les courbes capillaires du matériau ou le colmatage des pores dû à la cristallisation du chlorure de sodium. Enfin le modèle a servi à expliquer les mécanismes physiques à l'origine de certains phénomènes observés lors du séchage et de l'imbibition de matériaux poreux en présence de sels.

Mots clefs : béton, matériau de construction, durabilité, chlorure, humidité, teneur en eau, isotherme couplage, modélisation, simulation numérique, transferts, diffusion, advection, multi-espèces, transport réactif, équilibre chimique, séchage, volume finis.

Abstract

Physicochemical modelling of chloride ingresse into cementitious materials

Thai Quang NGUYEN

The main purpose of this research was to propose a physico-chemical model to predict the chloride profil in cement based materials submitted to a saline environment such as structures sited near the sea or exposed to deicing salt. The model takes into account the diffusion, the advection, the electrostatic coupling between ions of the pore solution and the salt crystallization, chloride binding ou more general ion-matrix interactions. In fact, chloride ions diffuse in the pore solution of a cement-based material, react with unreacted aluminate phases to form new compounds such as Friedel's salt and also are adsorbed onto C-S-H. To account for these binding phenomena, a physico-chemical approach is developed which addresses separately physical adsorption of chlorides onto C-S-H layers, as a result of exchange between Cl^- of the pore solution and OH^- of the C-S-H, and chemical reactions (formation of Friedel's salt : $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaCl}_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$, as a result of dissolution of $\text{Ca}(\text{OH})_2$ and C_3A). A computer program has been developed to solve this highly nonlinear problem. Then, the validation of the model has been performed on the basis of a comparison between predicted kinetics of chloride penetration or total chloride concentration profiles and experimental ones obtained on various types of materials in saturated condition. Note that an extension of this modeling for unsaturated conditions does not introduce any additional data. Various calculations have been made with the proposed model in order to examine its capability of predicting experimental results involving combined moisture/ion transport, which can be found in the literature (drying, imbibition, cyclic wetting and drying tests which are performed on building or cementitious materials). This last part made it possible to highlight several phenomena important to take into account such as the effect of the ionic concentrations on water evaporation in porous materials or the effect of salt crystallization on the moisture and ionic transport. Finally the model was used to explain the original physical mechanisms of certain phenomena observed during the drying and imbibition of the porous materials in the presence of salt.

Keywords : concrete, buiding material, durability, chloride, modelling, transfert, diffusion, advection, electrical field, migration, diffusion coefficient, chloride binding, multi-species, chemical equilibrium, drying, finite volumes.