## ЦЕМЕНТНАЯ БАЦИЛЛА: ЧТО ЭТО?

### **Кучеренко А.А.,** $\partial$ .m. $\mu$ ., $npo\phi$ .

Одесская государственная академия строительства и архитектуры. Украина

Негативная многогранность цементной бациллы: образуется в твердеющем цементе, что сопровождается тепловыделением и температурными деформациями, и влияет на структуру и свойства твердеющего и затвердевшего бетона; при эксплуатации в сульфатных (карбонатных и т.п.) средах, возникает в виде кристалла с увеличением в объёме в 2,6 раза и разрушает конструкции; всегда готова к перекристаллизации с нарушением структуры бетона. Позитивная составляющая - является компонентом напрягающего цемента, создающего преднапряжённый железобетон. С этих позиций актуально изучить структуру и химическую термодинамику 3-х сульфатного гидроалюмината кальция, 3CaO·AI $_2$ O $_3$ ·3CaSO $_4$ ·32H $_2$ O, т.е. эттрингита или «цементной бациллы». Известно [1] химическое уравнение возникновения кристалла этой бациллы: 3CaO·AI $_2$ O $_3$ +3CaSO $_4$ +32H $_2$ O=3CaOAI $_2$ O $_3$ ·3CaSO $_4$ ·32H $_2$ O

Структурная форма этого уравнения приведена на рис. 1.

Характеристика бациллы. Кристаллическая форма её — гексагональные призмы или удлинённые иглы. Включает 98 межатомных связей и 30 шт (30,6%) — Ван дер Ваальсовых (вдв) связей, энергия которых в 15-34 раза меньше энергии межатомных связей в этой же бацилле. Подавляющее большинство атомов (91%) - это атомы водорода и кислорода, остальные 9% - атомы металлов (Ca, Al и S). Это означает, что строение и свойства кристалла,  $3\text{CaOAl}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 32\text{H}_2\text{O}$ , определяют в основном газо- и водообразующие атомы H и O. Особенность кристалла, рис. 2, (фигура 2), в том, что он состоит из остова твёрдого тела, фигура 3, и функциональной водной оболочки (фигура 1). Водная оболочка окантовывает твёрдое тело, т.е. остов кристалла (фигуру 3). Весь кристалл (фигура 2) можно рассматривать как систему общего названием «объект-среда», т.е. «остов - водная оболочка».

Практически кристалл состоит из двух фаз: твёрдой — остов и жидкой — водная оболочка. Последняя связана с атомами остова силами вдв. Она как бы защищает остов кристалла от воздействия на него окружающей среды (среды бетона).

Рис. 1.Структурное уравнение преобразования исходного сырья в эттрингит,  $3CaOAl_2O_3 \cdot 3CaSO_4 \cdot 32H_2O$  — - межатомные связи; ••• - связи вдв; H-O-H — молекулы воды

Характеристика твёрдой фазы. Включает остов, рис. 2, фигура 2, вертикальная цепь атомов металла (Ca, S и Al), окантованная десятью атомами Н, относящимися к разряду функциональных групп – ОН. Твёрдая фаза остова включает атомы разной валентности: наибольшей (S, Al и Са) – в центре и наименьшей (Н) на периферии. Подобное замечено и в других новообразованиях вяжущих Поэтому возникает гипотеза: «Структура твёрдого тела формируется по закону постоянно убывающей энергии (количества валентных электронов) межатомных связей: в центре кристалла располагаются атомы с максимальной (атомы максимальной валентности), к периферии - убывающей и на периферии с минимальной (атомы минимальной валентности) энергией межатомных связей

Характеристика водной оболочки. Водная оболочка, рис. 2, фигура 2, состоит, очевидно из кристаллизационных молекул  $H_2O$ . структурная формула которых H-O-H. Роль связи H-O в них характеризуется рядом положительных свойств: поставщик кислорода в виде заряженного иона для окисления металлов остова; поставщик ионов  ${}^{-}OH$  и  ${}^{+}$ ; защита этими ионами остова твёрдого тела (Ca, Al, S) от контакта их с окружающей средой; проникновение протона  ${}^{+}$  в любую соседнюю кристаллическую решётку и нейтрализация

локальной энергии в ней после или при стабилизации э.м.а.с. в остове кристалла, а также при синтезе с нестабильными или неоднородными

по величине заряда атомами, выравнивая силы заряда и уводя их от диполя.

Фигура 1 Фигура 2 Фигура 3 Рис. 2. Структурная схема кристалла 3CaOAl<sub>2</sub>O<sub>3</sub>·3CaSO<sub>4</sub>·32H<sub>2</sub>O

Взаимодействие твёрдой фазы и водной оболочки. Заслуживает особого внимания тот факт, что межатомных связей у водной оболочки  $60 \, \mathrm{mr}$ , у остова  $-40 \, \mathrm{mr}$ , а межмолекулярных сил вдв  $-30 \, \mathrm{mr}$ . Процентное отношение между ними практически одинаково. Поэтому велика

роль водной функциональной группы (фигура 1): малейшее изменение окружающей среды (температуры, влажности) вокруг кристалла изменит количественный атомарный состав водной оболочки, а, следовательно, и её энергетический потенциал, что повлечёт за собой энергетическую нестабильность (кристалл превратится в диполь) остова кристалла. А при дипольном характере остова, из-за контакта с изменяющейся окружающей средой, возможна его перекристаллизация. Ион атома водорода может быть как положительным  $H^+$ , так и отрицательным  $H^-$ , что позволяет стабилизировать как положительные, так и отрицательные диполи нестабильных атомов и оксидов оболочки и остова. К отрицательной роли ионов  $H^+$  и  $^-$ ОН можно отнести блокировку ими остова твёрдого тела (в данном случае 10 атомов Н остова, фигура 2 и водная оболочка, фигура 1), что предотвращает дальнейший рост твёрдого тела.

#### Выводы

Эттрингит – очень сложный комплекс твёрдой фазы (остова) и водной оболочки Частично изучены их свойства. Водная оболочка определяет стабильность остова.

Разработка механизма взаимодействия цементной бациллы с окружающей средой позволит свести к минимуму негативные и использовать на максимум позитивные процессы в обеспечении долговечности бетона, эксплуатируемого в агрессивных средах.

## **Summary**

The negative properties of cement bacillus can be minimized if we study its structural and thermodynamic characteristics.

# Литература

- 1. Добролюбов Г. Прогнозирование долговечности бетона с добавками / Г Добролюбов, В.Б., Т.И.Ратинов –М.: -Стройиздат, 1983. 212 с.
- 2. Бацанов С.С. Структурная химия. Факты и зависимости / С.С Бацанов . М.: Диалог-МГУ, 2000. -292 с.