

УКБ 691.327

СИСТЕМНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БЕТОНА.

Кучеренко А. А. /Одесская государственная академия строительства и архитектуры/

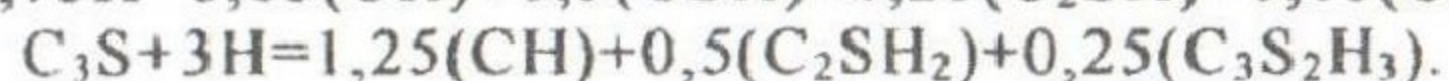
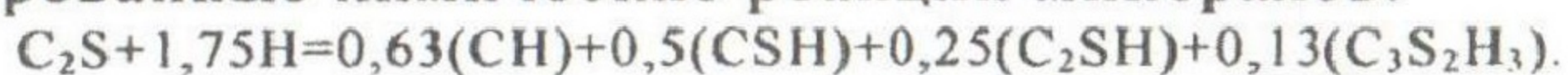
Метод системно-технологического моделирования бетона предназначен для изучения взаимодействия одних компонентов бетона в среде других или полуфабрикатов в среде параметров (режимов) перерабатывающего технологического оборудования.

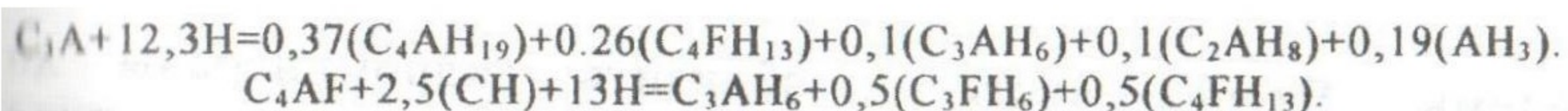
В общем случае система «объект-среда» – это определенная взаимосвязь их друг с другом и взаимодействие друг на друга с возникновением нового качества у одного из них или у обоих. Объектом может быть, например твердый компонент от частицы (атома и др.) до бетона (колонна и др.). Средой – параметры или режимы (процессы) тех технологических аппаратов, в условиях которых находится и преобразуется объект или тех условий в которых эксплуатируется объект. Практически это совокупность изучаемого объекта со средой его обитания. Технологических – это множество локальных систем в технологической последовательности производства бетона. Последовательно, по технологической цепочке, изучая частные системы создать целостное представление о технологии бетона и о бетоне.

Этот метод требует определенной идеализации принятых в расчетах свойств и параметров объекта (условный диаметр зерен, частиц и т.п.), а иногда и среды (температура и т.п.).

Система «минералы цемента-вода затворения», т.е. гидратация минералов и получение стабильных новообразований – далеко не решена. Однако, нам удалось (в первом приближении) установить количество ведущих новообразований цемента (гидроминералов) и синтезтрованные реакции их получения.

К основным (ведущим) новообразованиям можно отнести: моногидросиликаты кальция (CSH и C_2SH); полигидросиликаты кальция ($C_2S \cdot nH_2$ и C_3SH_3); алюмоферриты кальция (C_4AH_{19} и C_4FH_{13}); этtringит ($C_3ACs_3H_{32}$); и портландит – $Ca(OH)_2$. Синтезированные химические реакции минералов:





Система «минерал-гидроминералы». Когда бетоноведение «встретится» с нанотехнологией необходимость в знании этого неизбежна как и то, что кроме марки цемента прочность бетона придется оценивать по количеству тех или иных гидроминералов (по факту), а не по марке цемента (что сопровождается большим количеством условностей, имитировать которые в нанотехнологию бетоноведения практически невозможно). . Поэтому, как бы странно это не звучало (в перспективе это будет обычным делом), но уйти от марки цемента можно с учетом зависимостей, приведенных в табл. 1.

Таблица 1. Количество минералов и новообразований ПЦП/А-III-500, обеспечивающих необходимую марку бетона нормального твердения

Вещества	Количество веществ, кг/м ³ , для бетона марок					
	200	300	350	400	450	500
Расход основных минералов						
C ₂ S	27	37	42	46	52	64
C ₃ S	107	147	166	184	207	253
C ₃ A	18	25	28	31	36	43
C ₄ AF	31	43	49	54	58	74
CaSO ₄ ·2H ₂ O	15	20	23	25	29	35
H ₂ O _{х.с.}	67	91	103	114	129	158
Расход	265	363	411	454	511	627
Приход основных новообразований						
CSH+C ₂ SH	25	35	39	44	49	60
C ₂ SH ₂ +C ₃ S ₂ H ₃	89	122	138	153	173	211
C ₄ AH ₁₉	24	33	37	41	46	56
C ₄ FH ₁₃	40	55	62	68	77	94
C ₃ FCs ₃ H ₃₁	36	49	55	61	69	84
Ca(OH) ₂	50	68	77	85	96	118
Приход	264	362	408	452	510	623

Точность расчетов превышает 99%, что вполне отвечает во-первых справедливости закона сохранения масс веществ, во-вторых правильности выбранных основных новообразований гидратированного цемента и в третьих методике расчета как минералов так и гидроминералов цемента на 1 м³ бетона.

Система «зерна цемента-вода затворения». Получить достаточное количество нужных новообразований – это часть

проблемы. Вторая часть – сблизить гидроминералы до расстояния их атомарного взаимодействия и атомарное взаимодействие (синтез) их друг с другом и другими твердыми компонентами. На микроуровне, табл.2, по мере диспергации зерен цемента и увеличения их количества, при постоянном расходе воды, действительно частицы сблизжаются и все больше контактируют друг с другом

Таблица 2. Трансформация системы «порошок цемента-вода затворения» в свежеприготовленном бетоне (микроуровень)

Характеристика объекта (порошка)			Изменение свойств среды (воды)		
Рамер зерен, мкм	$S_{уд}, S \times 10^3, \text{см}^2/\text{г}$	Возникшая Поверхность, $F \times 10^{14}, \text{мкм}^2$	Масса H_2O в монослое на зернах, г,	Число слоев H_2O , шт	Расстояние между зернам и, мкм
80	0,75	0	2,4	62000	47,5
40	1,5	45,9	4,8	31000	23,9
20	3	91,9	9,5	15500	12
5	12	282	38	4000	3
1	60	826	190	800	0,6

Говорить же о количестве контактов и эффективности внешних воздействий не представляется возможным из-за отсутствия данных в этой области. Можно только предположить, что микроуровень может обеспечить контакты и синтез зерен (десятки микрометров), которые еще будут разрушаться, диспергировать, создавать новые частицы, но тогда связь их будет преждевременной. Однако расчеты, табл. 2, свидетельствуют о продолжении этого процесса (возможно очень длительное время) за счет самодиспергирования зерен цемента и от этого самоуплотнения, самоупаковки и необходимого приближения друг к другу на расстояние, обеспечивающее синтез. Границей перехода не эффективных размеров зерен к эффективным по степени диспергации является размер зерна в пределах 20-40 мкм.

При одном и том же расходе воды затворения и при сохранении одного и того же объема свежетоформованного бетона продолжение диспергации зерен цемента способствует возникновению (раскрытию) новых поверхностей, повышению удельной поверхности частиц геля и резкому увеличению числа

контактов между ними. Это, в свою очередь, требует смачивания. А при постоянном расходе воды (так как смесь уже уплотнена) смачивание раскрывшихся новых поверхностей может произойти только за счет уменьшения толщины водных оболочек на соседних твердых частицах геля. На микроуровне диспергация зерен цемента сопровождается резким повышением удельной поверхности их (в 80 раз). Однако воды затворения достаточно и для смачивания этих зерен и для обеспечения подвижности смеси. И даже при условии, когда все зерна цемента продиспергировали до условного диаметра 1 мкм, водная оболочка между соседними зернами (0,6 мкм) столь велика, что синтеза зерен такой системы «порошок Ø1 мкм – вода затворения» не произойдет. Это все еще гелевые контакты частиц.

Система «наночастицы-вода затворения». Начинается уход от гелевых контактов частиц к расстояниям атомарного взаимодействия их, табл.3.

Таблица 3. Трансформация гелеобразной системы «цементный порошок-вода затворения» в твердую - «цементный камень-окружающая среда» (наноуровень)

Изменение свойств объекта			Изменение свойств среды		
Размер частиц, нм	$S_{уд}, \text{ м}^2/\text{г}$	Поверхность частиц, м^2	Масса монослоя H_2O на частицу, л	Число слоев H_2O , шт	Расстояние между частицами, нм
Период предатомарных связей новообразований					
100	0,06	735×10^4	1,9	78	60
10	0,6	735×10^5	19	8	6
1	6	735×10^6	190	0,8	0,6
Период атомарных связей новообразований					
0,8	7,5	923×10^6	238	0,62	0,48
0,7	8,6	105×10^7	272	0,54	0,42
0,6	10,2	127×10^7	326	0,45	0,36
0,5	11,7	148×10^7	380	0,39	0,3

Атомарное взаимодействие частиц геля начинается при расстоянии между ними $\leq 0,4$ нм. Какая же величина частиц при этом должна быть? Наши расчеты (см. таблица 3) показывают, что при принятом составе бетона частицы должны быть примерно с условным диаметром менее 1 нм. А это в сумме составляет 3 минерала, в составе

которых около 9 оксидов СаО. Здесь суммарная поверхность частиц диаметром 1 нм такова, что принятые нами 190 л воды на 380 кг цемента исчерпаны.

Для периода синтеза (атомарных взаимодействий новообразований) нужны еще более мелкие частицы, но для покрытия их поверхности потребуется в 2 раза больше воды - 380 л/м³. Это нереально и в тоже время свидетельствует о том, что далеко не все зерна цемента превращаются в нужные нам частицы менее 1 нм. Должны ли мы думать, что и степень гидратации цемента также низка?

Тоньше водная оболочка – ближе частицы друг к другу. Постепенно приближается момент предатомарного (около 0,4 нм), а затем и атомарного ($\leq 0,4$ нм) взаимодействия твердых частиц (кристаллов) геля и создание единого пространственного кристаллического каркаса бетона.

Система «синтез-твердое тело». Прораствание гелеобразной фазы кристаллами, скорее более ценно не «армированием» геля, а сближением растущих кристаллов с частицами геля (а этих частиц с соседними) на расстояние атомарного взаимодействия и синтеза с ними, т.е. увеличением объема конструированного из них твердого вещества. Кроме того, прорастающие длинные и другой более сложной формы, кристаллы в среде геля также приближаются друг к другу на расстояние атомарного взаимодействия и срастаются, возможно, образуя единый, сросшийся по контактам, пространственный каркас. Так прорастающие кристаллы по всей своей поверхности через атомарное взаимодействие обрастают кристаллическими частицами геля, а последние с соседними себе подобными (минеральными зернами). Сравнивая химическое строение минералов и гидроминералов, можно прийти к выводу: остов у них единый, нередко как бы сохраняется. Он состоит из многовалентных, с сильными связями, элементов (Si, Al, Fe и др.) в сочетании с кислородом. У гидроминералов остов окантовывают (окружают) низковалентные, с менее прочными связями, функциональные группы (H⁺, OH⁻ и др.). Наличие последних определяет постоянное изменение состава гидроминералов в условиях изменяющегося состава окружающей среды (перекристаллизация, потеря химически связанных молекул H₂O и др.). Все в движении, в сближении и в синтезе пока есть вода затворения.

Система «бетон-окружающая среда». При недостатке воды гелефаза становится прерывистой и остается в среде кристаллического каркаса. Под действием сил гравитации, капиллярных и др. она может мигрировать внутри массива бетона. Были новообразования в виде отдельных кристаллов и кристаллогидратов (как порошок) в среде воды.

По исчерпанию воды стал гель в среде сросшейся кристаллической решетки. А прочность бетона – это количество и качество контактов и сростков. Получаем кристаллический каркас (бетон хрупкое тело) внутри которого гелеобразная фаза, т.е. водная среда с дисперсно распределенными в ней твердыми частицами на расстоянии друг от друга больше атомарного взаимодействия. Рост прочности во времени – это скорее преобразование гелеобразной фазы в кристаллическую, тесно связанного со скоростью этого процесса.

Жесткие бетонные смеси приходят к уровню атомарного взаимодействия за счет мощных средств уплотнения (вибрации с пригрузом, прессования и др.). В подвижных бетонных смесях с большим количеством воды затворения и слабыми средствами уплотнения частицы геля приближаются друг к другу на расстояние атомарного взаимодействия и за счет диспергации зерен цемента отбора ими излишней воды затворения и более плотной упаковки их. В самоуплотняющихся бетонных смесях, где внешнее воздействие уплотнения отсутствует, сближение частиц на расстояние атомарного взаимодействия идет только за счет диспергирования имеющихся зерен цемента. Этот случай и описан в данной статье.

Под действием диспергатора зерна цемента (при $V=Const$) от своего $S_{уд} \approx 3 \times 10^3 \text{ см}^2/\text{г}$ (микроуровня) должны разваливаться до $S_{уд} \approx 3 \times 10^6 \text{ см}^2/\text{г}$ (наноуровня), чтобы сблизиться на расстояние атомарного взаимодействия твердых частиц и синтезировать, создавая твердое тело (бетон).

Диагностика бетона. Для условий монолитного домостроения совместно с аспирантом Одесского политехнического университета Чепелевым Д.В. разработана программа компьютерного управления и диагностики свежесформованного бетона, твердеющего в условиях окружающей среды и после тепловой обработки. Разработаны и несколько лет эксплуатируются следующие модели управления и диагностики: М1 и М2 – для бетона, твердеющего в условиях окружающей среды и пропаренного; М3 – подбор состава бетона марок 300 и выше; М4-1, М4-2 и М4-3 – рост прочности бетона в первые 12 ч, 24 ч и в возрасте 28 суток в условиях окружающей среды.

Выводы. Системно-технологическое моделирование – путь к разработке теоретических и практических основ компьютерного бетоноведения.