

**ВЫБОР ИСХОДНОГО СЫРЬЯ НА НАНОУРОВНЕ И МЕХАНИЗМ ОТВЕРДЕВАНИЯ СМЕСИ**

Кучеренко А.А.

*Одесская государственная академия строительства и архитектуры,  
г. Одесса, Украина, nano-aak@mail.ru*

**Аннотация.** Статья посвящена методологии использования энергии межатомных связей, «прятанную» в термодинамически устойчивом природном веществе разного фазового состава, для получения строительного материала с заданными свойствами. Искусственно активизировать эту энергию, введя её в возбуждённое состояние, и получить минеральные вяжущие вещества как более качественное исходное сырьё для бетона. По известным уравнениям и технологиям преобразовать исходное сырьё (минералы вяжущего и воду) в продукт (новообразования в виде гидроминералов). На наноуровне разработан механизм отвердевания уложенной в дело и уплотнённой строительной смеси. Изложены теоретические основы минералогенной инженерии в технологии строительного материаловедения.: По заданным термодинамическим характеристикам выбирать исходное сырьё и назначать технологические режимы создания строительного материала от нано– к макроуровню, от теории к практике. При выборе исходного сырья учтены термодинамические характеристики атомов, молекул и кристаллов. При отвердевании смеси обращено внимание на термодинамические характеристики электронов и энергию химических связей, т.е. кинетику межэлектронных, межатомных и межмолекулярных взаимодействий.

**Ключевые слова:** атом, электрон, энергия, связи, технология, материал, свойства.

**Введение.** Технология строительных материалов и строительные материалы, как правило, связаны с твёрдым телом и жидкостью. Эйнштейн вывел уравнение, согласно которому любое твёрдое тело содержит в себе внутреннюю энергию,  $E$ , зависящую от его массы,  $m$ , при скорости света,  $c=300\ 000$  км/с:  $E=mc^2$ . Огромное количество не востребованной природной энергии горных пород (Закарпатья, Закавказья, Гималаев и др.) и воды (морей, океанов и др.), состоят из множества связанных друг с другом минералов и молекул  $H_2O$ . В них произошли определённые химические взаимодействия, обусловленные природой атомов, их количеством и строением, энергия связей которых обеспечила соответствующие физико-механические свойства. А их свойства таковы, что энергия межатомных связей (э.м.а.с.) в молекулах  $H_2O$  равна 969,3 кДж/моль [1], а межмолекулярных связей (э.м.м.с.) – около 20 кДж/моль. Тогда в 1 л воды скрытой энергии меж-145атомных и межмолекулярных связей содержится 54960 кДж. В основном минерале цемента – алите,  $3CaO \cdot SiO_2$ , с общей э.м.а.с. – 5239,2 кДж/моль [1], а в 1 кг содержится 22947,7 кДж. Это сопоставимо со сжиганием  $54960:35845=1,53$  и  $22947,7:35845=0,64$  мз газа – метана. При этом известно, что э.м.а.с. исходного сырья (воды и минералов вяжущего) определяет свойства конечного продукта. Поэтому, всегда присутствующую в веществе, энергию химических связей (в кДж/моль) целесообразно принять за единый критерий оценки свойств исходного сырья, полуфабриката (на каждом технологическом переделе при любых режимах его переработки) и конечного продукта. Величины э.м.а.с. в процессе их преобразования, согласно химических реакций, можно найти в справочниках. Определяют их по величине энергии отрыва одного атома от другого. Методы отрыва известны: ИК-спектроскопические, кинетические, термохимические и др. [2], Проблема: научиться извлекать природную энергию, научиться управлять ею и создавать строительный материал с нужными величинами э.м.а.с., определяющих, требуемое качество.

**Актуальность.** Получение строительного материала с заданными свойствами и компьютерное управление этими процессами – актуальная задача. Так же актуальны и все более глубокие знания в области сознательного управления как технологическими, так и физико-химическими и химико-физическими процессами, формирующими твёрдое тело (например, бетон).

**Цели и задачи.** Цель – создать строительный материал с заданными свойствами, используя фундаментальные законы физики и химии.

Задача не только в том, чтобы энергия вещества работала на создание строительного материала с целью энергосбережения в технологии, а и извлечь её с целью изменения направления химических реакций и создания нового более качественного вещества (новообразования). Заменить слабые межатомные связи на более сильные (например, Ca–O на

Si-O), дающие новые более плотные, прочные и водостойкие образования (например, CSH вместо Ca(OH)<sub>2</sub>, т.е. в идеале преобразовать воздушное вяжущее в гидравлическое). Создать пространственную структуру твёрдого тела (например, введением много-валентных атомов металла, типа углерода и т.п.). По заданным термодинамическим характеристикам исходного сырья и конечного продукта обеспечить сквозное проектирование строительного материала с заданными или улучшенными свойствами.

**Методы исследований.** В настоящее время мировое интеллектуальное сообщество предъявляет к строительным материалам высокие требования с гарантированными свойствами, обеспечивающими длительную безотказную эксплуатацию зданий и сооружений. Ведутся разработки получения лунного бетона. Крайне актуальна утилизация химически разных отходов промышленности в области строительного материаловедения. Но методы исследований остаются прежними: от практики к теории. В основу минералогенной инженерии заложены методы исследований от теории к практике, от наноуровня к макроуровню на базе знаний фундаментальных законов химии и физики. Чётких наработок в этой области нет. Излагается методология работы исследователей в области минералогенной инженерии в промышленности строительных материалов.

**Выбор исходного сырья.** В природном исходном сырье (например, глинистой породе, известняке, воде и др.) электроны атомов находятся в покое (электронейтральны). Задача технолога вывести их из покоя, активизировать и придать возбуждённое состояние. Тогда атомы исходного сырья станут активными (электронезаряженными), например, вяжущими или клеящими веществами и вступят в реакцию между собой или с другими веществами. Мы уже имеем примеры получения минеральных вяжущих веществ как исходного сырья для бетона, искусственно (дроблением, обжигом, помолом) активизируя природную энергию, введя её в возбуждённое состояние.

Строительные материалы получают из разных веществ, разного строения, состава и свойств, но всегда построенных из химических веществ, простейшим из которых является атом. Атом состоит из положительно заряженного ядра и отрицательно заряженных электронов. Природа электрона характерна тем, что он в состоянии покоя имеет свойства частицы (массу и др.), а в возбуждённом состоянии его движение напоминает волну и характеризуется длиной волны, амплитудой и частотой колебаний др. Представить себе электрон в виде материальной точки практически невозможно. Его движение по орбите можно представить не в виде линии, а в виде облака ширина которого равна амплитуде колебаний, как бы круглая вокруг атома «радуга» по траектории орбиты. Облако не имеет чётко очерченных границ. В каждом орбитальном слое электроны обладают разной энергией. Но химические свойства атомов в сильной мере определяются количеством электронов только во внешнем электронном слое атомов.

Черняевым И.И. была установлена закономерность так называемого «транслирования» – «внутримолекулярного катализа...». Суть его в том [2], что в любом кристалле, молекуле или комплексе их, состоящих из суммы разного рода атомов, один из атомов всегда более активен, чем другие. Поэтому, следуя этому понятию, в молекуле, кристалле остова твёрдого тела можно найти самый активный атом в среде других, который вступит в реакцию с аналогичным по активности атомом окружающей среды или химической добавки. Для этого по табличным данным [1,2] находим термодинамические характеристики каждого атома, входящего в состав строительного материала, а при необходимости и окружающей среды.

Выбор атомов с наименьшими величинами *потенциала ионизации, средства к электрону и с максимальными электроотрицательностями* предпочтительно. Исходное сырьё с большим количеством таких атомов ускорит, например химический процесс отвердевания бетона, т.е. сработает как ускоритель. Это позитив при созидании строительного материала. А при эксплуатации железобетона в агрессивной окружающей среде есть свой наиболее активный атом-агрессор, который инициирует негативный коррозионный процесс. Зная этот атом в окружающей среде можно подкорректировать атомарный состав исходного сырья для строительного материала. Таким образом, выбор соответствующего атомарного состава исходного сырья определит технологию и эксплуатацию изделий и конструкций.

Количество атомов можно определить, соотношение разных атомов можно назначить, нужный атом можно выбрать. При соответствующем подборе исходного сырья, с большим

или меньшим количеством того или иного вещества, можно получить строительный материал с заданными свойствами. Основные элементы, применяемые в строительном материаловедении: s-элементы H, Be, Na, Mg, K, Ca; p-элементы B, C, N, O, F, Al, Si, P, S, Cl и d-элементы Fe, Cr, Cu. Они носят названия s-, p-, d- или f-вещества, с соответствующими свойствами, которые и определяют свойства строительного материала. Учитывают, что если принять энергию связи s-вещества за единицу, то коэффициент перехода для p-вещества равен 1,7, а d-вещество сильнее в 3 раза. Выбранное вещество определит прочность бетона.

Как обеспечивается *химическая связь*? Она возникает при взаимодействии атомов. Причиной образования химической связи является стремление атомов приобрести более устойчивое состояние, т.е. состояние с минимально возможным запасом энергии. Это происходит при взаимодействии одних атомов с другими атомами. Следовательно, основным условием образования химической связи является понижение полной энергии (E) многоатомной системы по сравнению с суммарной энергией изолированных атомов, т.е.:  $E_{AB} < E_A + E_B$  в случае образования молекулы AB из атомов A и B, т.е. образование любой химической связи всегда сопровождается выделением энергии.

Природа химической связи - электростатическая, т.е. представляет собой различные виды взаимодействий между положительно заряженными ядрами и отрицательно заряженными электронами. При образовании химической связи между атомами основную роль играют валентные электроны, т.е. электроны, которые находятся на внешнем энергетическом уровне и слабо связаны с ядром атома. У них внешние энергетические уровни незавершенные, а в процессе химического взаимодействия атомы стремятся их завершить. Достигнуть такого электронного состояния атомы могут только за счет образования химической связи.

Химические связи по *кратности* могут быть одинарными, двойными и тройными. С увеличением кратности изменяются свойства связи и качество конечного продукта. Одинарные межатомные связи. обладают гибкостью и потому полученный материал податлив и эластичен. Кратные (двойные и др.) связи более жёсткие и строительный материал характеризуется жёсткостью, хрупкостью, но и повышенной прочностью, так как кратные связи короче (следовательно материал плотнее) и сильнее (выше прочность строительного материала) чем одинарных.

Энергия  $\pi$ -связи меньше, чем энергия  $\sigma$ -связи и потому  $\pi$ -связь менее прочная и при химических взаимодействиях с окружающей средой разрушается в первую очередь.

*Длина* химической связи – это расстояние между ядрами атомов в их соединениях. Чем короче связь, тем она сильнее, так как чем короче связь между атомами, тем выше плотность твёрдого тела.

По *валентности* атомов можно судить о будущей структуре продукта. 2-х валентные атомы (например, Ca-содержащие и др.) дают цепочечную или плоскую структуру твёрдого тела. 3-х валентные (например, Al или Fe-содержащие) – на 2/3 дают цепочечную или плоскую структуры и на 1/3 – пространственную. 4-х валентные (например, Si-содержащие) дают пространственную структуру [4]. 6-ти и 8 [5] валентные (S-содержащие) формируют структуру строительного материала с еще большими элементами разветвленного пространства. Знание этого позволит нам выбрать нужное по качеству исходное сырьё (известняковый, кварцевый, алюминатный и др. или их комплекс) с содержанием нужных атомов а, следовательно, и. создать нужную структуру (плотную, пористую др.), обеспечивающую строительному материалу заданные свойства (например, теплопроводность, долговечность в конкретных условиях), И тогда при равной механической прочности, плоская или пространственная структуры придадут строительному материалу разные физико-механические свойства. Подобный подход особенно важен при работе с техногенным исходным сырьём, отходами промышленных предприятий, илом дноуглубления морей (Чёрного, Азовского и др.), лиманов, каналов и других водоёмов, отходами сельского хозяйства и химии.

**Отвердевание смесей.** [3]. Их взаимодействие порождает твёрдое тело, жидкую или газообразную фазы. Сила их взаимодействия определяет свойства конечного продукта. Процессы отвердевания смесей рассматриваются с точки зрения *вращения электронов вокруг ядра атома*. При химическом взаимодействии *электроны* (малые кружки) одного атома с

электроном другого атома (большой кружок) образуют одну или несколько общих электронных пар, рисунок 1 (фигура 1, где одна точка - один электрон). Электронные облака трёх атомов (фигура 2) перекрываются с уплотнением в месте их контактов (фигура 2, два тёмных пятна). В зоне двух тёмных пятен величина общего заряда и плотность облака повышаются. Стабилизация (уравновешивание) плотности зарядов приводит к обобществлению электронов: индивидуальные для каждого атома становятся общими для 3-х атомов, (фигура 3, затемнённая зона). Результатом общего (объединяющего три атома) электронного облака, рисунок 1 (фигура 3, тёмная зона) стало новое вещество (молекула): плотное, жидкое или газообразное с соответствующими физико-механическими свойствами. Кроме того связь электронейтральных атомов, молекул и др. частиц между собой за счёт взаимного притяжения обеспечивается силами вандерваальса (рисунок 1, фигура 4), носит название вандерваальсового взаимодействия и обозначается тремя точками (•••). 1 2 3 4

Рисунок 1 – Схема межатомных химических связей, создающих новое вещество

При сближении полученной молекулы и рядом расположенной на расстояние менее 1 нм, они превращаются в диполь, (с положительным зарядом в одной молекуле и отрицательным – в другой) силы притяжения и величина заряда обеих повышаются и электронное облако одной индивидуальной молекулы перекрывается с электронным облаком другой индивидуальной молекулы. Затем электронные облака 2-х молекул обобществляются в одно, соединительное электронное облако. Получаем твёрдое тело из двух молекул – квадруполь – в среде электронных облаков. Взаимодействие двух квадруполей даёт октауполь в среде соединительных электронных облаков и т.д. до получения строительного материала заданного объёма.

Если молекулы не активны, то на близком расстоянии электронные облака положительно заряженные одной молекулы и отрицательно – другой молекулы реагируют на соседство друг друга. Из двух один заряд всегда сильнее. И от этого между электронными облаками «срабатывает эффект хамелеона», выбросившего язык и притягивающего жертву. Облака каждой, вытягиваясь больше со стороны сильного заряда притягиваются друг к другу. В точке сцепления облака перекрываются, плотность совмещённых облаков повышается, заряд увеличивается (фигура 2) и возникает обобществлённое облако (фигура 3). Это облако соединительное. Оно соединяет и удерживает внутри своего пространства все атомы двух молекул.

Коллектив физиков из Люксембурга, США и Германии предложил принципиально новый механизм образования межмолекулярного взаимодействия [4]. Исследователи рассматривают его не как взаимодействие частиц, а как связь между волнами плотности заряда (электронов), т.е. *электроны не вращаются* вокруг ядра атома. Они создают вокруг твёрдого тела (ядра атома) электромагнитные поля притяжения или отталкивания, обеспечивающие создание твёрдого тела. Плотность этих полей максимальна вблизи ядра атома и минимальна – на удалении от него. В зоне минимальной плотности происходят взаимодействия межатомных электрических и магнитных полей.

В строительном материаловедении природа исходного сырья (минералы цемента, гипса, извести и др.) – это проводники, полупроводники и диэлектрики. Проводники (Fe-, Al-содержащие минералы, жидкие растворы и др.) пропускают сквозь себя электрические заряды от заряженных тел к незаряженным. Полупроводники (Si-содержащие и др.) – это кристаллы, в которых атомы объединены ковалентной связью, а электрон может быть освобождён при энергии не более 1,5–2 эВ. Диэлектрики или изоляторы (минералы стекла, кремния и др.) – это кристаллы, электрон которых может быть освобождён при энергии более 1,5–2 эВ и не пропускают электрические заряды. В связи с этим надо учитывать разное поведение проводников, полупроводников и диэлектриков в электрических и магнитных полях и разные свойства зарядов в электрическом и магнитном полях. Не изучено их поведение в обеспечении прочности химических связей вяжущих и клеящих веществ. Это показано в наших опытах при определении зависимости между длиной связи (начала взаимодействия магнита и железа) и её силой в магнитном поле, таблица 1. Чем выше масса твёрдого тела, тем короче длина связи и сила взаимодействия проводника с зарядом.

Таблица 1 – Длина связи магнитного поля при взаимодействии спроводником (Fe) Масса железа, г	20	40	50	100	200	400	500	600
Длина связи, мм	9,8	8,6	7,1	6,0	2,9	0,8	0,3	0,1
Сила связи, г/см <sup>2</sup>	12,1	24,1	30,1	60,2	120,5	241	331,2	568,4
связи, г/см <sup>2</sup>	12,1	24,1	30,1	60,2	120,5	241	331,2	568,4

Очевидно, что процессы отвердевания строительных смесей надо рассматривать в системе «объект – среда». Если в качестве объекта рассматривать преобразующееся в ионы, и поставляющие заряды исходное сырьё, то в качестве окружающей среды – электромагнитное поле. Если в качестве объекта рассматривать твёрдую фазу исходного сырья, то в качестве окружающей среды – электрическое поле водного раствора. При этом надо понимать не буквально твёрдые вещества двух молекул соединяются друг с другом. Практически строительный материал – это пространственная система «объект–среда» атомов (объект) в среде электронных облаков (окружающая среда). Знание этого заставляет технологов изучать природу подобных связей, сил, связывающих индивидуальные атомы в (молекулы, кристаллы, минералы, частицы), твёрдое вещество, в котором они удерживают друг друга, находясь на определённом расстоянии друг от друга. И опять же технолог обратит внимание на электрические заряды, всегда находящиеся в природе.

Затем наступает период стабилизации: возникновение усреднённых величин плотности электронных облаков и энергий межатомных и межмолекулярных химических связей, взаимодействующих молекул и между атомами внутри обобществлённого облака – т.е. обобществлённые облака создают элементный монолит твёрдого тела, будь то два и более атома, молекулы, кристалла, квадруполь, октуполь и т.п.

Однако, не ясно сколь велико это твёрдое тело. Можно представить, что размер его зависит от величины заряда электронных облаков на нём. Можно предугадать множество таких монотел. Очевидно, многие или все они соединены силами вандерваальса..и, местами, химическими связями. Возможно, что со временем вандерваальсовы связи трансформируются в химические. Если признать, что в формировании твёрдого тела определяющим является заряд, то возникает гипотеза: «Структура твёрдого тела формируется по закону постоянно убывающей энергии межатомных связей (валентности атомов): первыми синтезируются атомы максимальной валентности, затем – убывающей и последними – с минимальной энергией межатомных связей (атомы минимальной валентности, чаще Н и ОН)».

В отвердевании строительной смеси следует учитывать и гравитационное взаимодействие составляющих строительного материала. Например, в отвердевающей бетонной смеси возникающие кристаллы эттрингита,  $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 32\text{H}_2\text{O}$ , молекулярной массы 1255,11 а.е.м. [5,6] сравнительно например с кристаллами портландита,  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ , (его в бетоне около 20-25%) молекулярной массы 76,1 а.е.м. ускоряют процессы седиментации, быстрее и плотнее упаковываются, изменяют вокруг себя процессы гравитационного взаимодействия соседних частиц и, в итоге, ускоряют сроки отвердевания бетона, влияют на его структуру и прочность

*Молекула* – нейтральная по заряду наименьшая совокупность атомов, химически связанных в определённом порядке, не имеющая неспаренных электронов. Молекула – понятие условное и им пользуются для оценки состава и количества соответствующих ионов в элементарном соединении. Однако, она представляет собой устойчивую, электрически нейтральную частицу, способную к самостоятельному существованию. Энергия межмолекулярных связей обеспечивает качество и определяет технологию строительного материала.

Твёрдое тело, в большинстве, состоит из *кристаллов*, построенных из трёхмерных пространственных решёток, в узлах которых регулярно расположены атомы. Энергия кристаллической решётки – это работа, необходимая для её разрушения. Кристаллическая решётка разрушается при растворении, испарении или плавлении. Величины её свойств определяются энергией кристаллической решётки. Так, чем меньше их энергия, тем выше растворимость твёрдого тела (например, солей, минералов и др.), а чем больше, тем плотнее и прочнее строительный материал.

**Выводы.** На наноуровне изложены теоретические основы минералогенной инженерии в технологии строительного материаловедения на этапах выбора исходного сырья и отвердевании его смеси. Учтены все известные четыре фундаментальных взаимодействия: сильное, слабое, гравитационное и электромагнитное. При выборе исходного сырья используют термодинамические характеристики атомов, молекул и кристаллов. При отвердевании смеси учитывают термодинамические характеристики электронов и энергию химических связей, т.е. кинетику межэлектронных, межатомных и межмолекулярных взаимодействий.

150

#### **Библиографический список**

1. Кузнецова Т.В. Физическая химия вяжущих материалов /Т.В Кузнецова. И.В. Кудряшов, В.В.Тимашев. – М.: Высш. шк, 1989. – 384 с.
2. Бацанов С.С. Структурная химия. Факты и зависимости / С.С Бацанов. – М.: Диалог-МГУ, 2000. -292 с.
3. Иоффе А.Ф. О физике и физиках Л.: Изд-во «Наука», 1985. 544 с.
4. <http://www.nkj.ru/news/28389/> (Наука и жизнь, Новое о старых силах).
5. Кучеренко А.А. Теория твердения бетона /А.А. Кучеренко Технологии бетонов. – 2009. – Ч. 2, № 6. – С. 5–7. РФ.
6. Кучеренко А.А. Структурные и термодинамические характеристики этtringита. А.А. Кучеренко //Технологии бетонов.– №9-10. 2012. – С. – .РФ.