

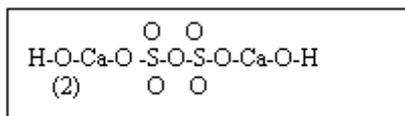
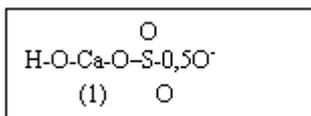
ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЭНЕРГИИ МЕЖАТОМНЫХ СВЯЗЕЙ СТРОИТЕЛЬНОГО ГИПСА

Кучеренко А.А. (Одесская государственная академия строительства и архитектуры)

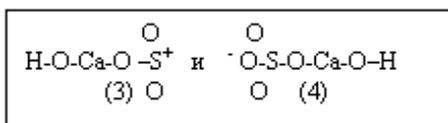
Энергия межатомных связей составляющих определяет качество строительного гипса. Знание технологии преобразования ее от исходного сырья до конечного продукта, умение слабые связи заменить на сильные – путь к конструированию гипсобетона заданных свойств.

Ключевые слова: Строительный гипс, межатомные связи, потенциальная энергия, преобразование энергии, свойства.

При производстве строительного (полуводного) гипса испаряются молекулы H_2O из-за разрыва связей с атомами Ca^{2+} и SO_4^{4-} природного двухводного гипса. При этом расстояние между ионами несколько увеличивается и они выстраиваются в цепочки – $SO_4 - Ca - SO_4 - Ca - SO_4$ [1]. Увеличение длины одних связей и разрыв других приводят к получению строительного (β - $CaSO_4 \cdot 0,5H_2O$) термодинамически неустойчивого гипса. Это вызвано неподделенной валентностью при атоме кислорода фигура (1). В таком состоянии в момент производства вяжущее в виде иона характеризуется определенной активностью, а близость соседних, таких же неустойчивых ионов, очевидна. Поэтому есть предположение, что электронейтральными, т.е. энергетически стабильными (которые можно хранить во времени) могут быть полимерные цепочки неустойчивых минералов и, как минимум, их пара, т.е. квадруполь [2] (фигура 2). Во всех фигурах атом серы (S) шестивалентный и потому связан с выше и ниже расположенными атомами кислорода (O) двойными связями.

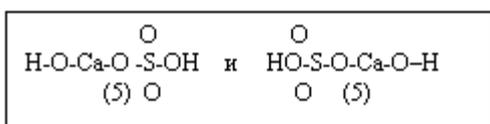


Тогда в качестве исходного сырья принимаем строительный гипс в виде квадруполь $2(\beta$ - $CaSO_4 \cdot 0,5H_2O$). При затворении водой квадруполь растворится с разрывом самой

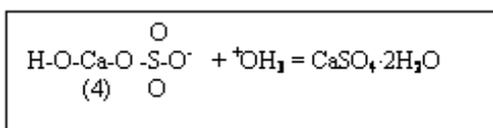


слабой связи: S-O. Возникнет два иона: один положительно заряжен (фигура 3), второй – отрицательно (фигура 4).

Разрыв связей спаренных минералов полуводного гипса сопровождается изменением тепловой энергии, которая инициирует ионизацию молекул воды затворения на ионы H^+ и HO^- . Взаимодействие отрицательно заряженного иона гипса (фигура 4) с положительно заряженным ионом воды H^+ , а положительно заряженного иона гипса (фигура 3) с отрицательно заряженным ионом HO^- могут дать два одинаковых электронейтральных гидроминерала: $CaSO_4 \cdot H_2O$ (фигуры 5). В этом случае процесс их синтеза должен быть физико-химическим [3,4]. Для их сближения и последующего синтеза потребуется значительно больше времени, чем существующие сроки схватывания гипса – 4-12 мин [5].



Но если учесть, что в нейтральной и тем более в подкисленной ($pH \leq 7$) среде, результатом ионизации H_2O чаще возникает оксоний OH_3^+ , то с фигурой 4 он может дать конечный продукт - $CaSO_4 \cdot 2H_2O$. Это резко ускорит сроки схватывания гипсового вяжущего, что фактически характерно для гипса [5]



В расчетах принят 1 кг $\text{CaSO}_4 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ и необходимое для его гидратации химически связанное количество воды согласно уравнения $2(\text{CaSO}_4 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}) + 3\text{H}_2\text{O} = 2(\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O})$. Левая часть уравнения отнесена к статье «расход исходного сырья», а правая - «приход конечного продукта». Результаты расчетов по электронным связям приведены в таблице 1, а по энергии связей из расчета на 1 кг CaSO_4 – в таблице 2.

Таблица 1

Характеристика электронных связей составляющих гипсового вяжущего

Вид веществ реакции	Количество их, $n \cdot 10^{22}$, шт	Количество электронных связей, $n \cdot 10^{23}$, шт	Электрический заряд $n \cdot 10^5$, Кл	Работа электронных связей, кВт. час
Расход исходного сырья				
$2(\text{CaSO}_4 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O})$	207	289	119	11,9
$3\text{H}_2\text{O}$	311	186	597	6
Σ расход	518	475	716	17,9
Приход новообразований				
$2(\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O})$	207	455	729	15,9

Оба результата (работа прихода, равная 15,9 квт·ч и расхода – 17,9) и энергия связи атомов молекул (в расходной части 57370 кДж, а в приходной – 59554) свидетельствуют о том, что средний уровень потенциальной энергии молекул продукта реакции ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) выше среднего уровня энергии молекул исходных веществ. Значит процесс гидратации строительного гипса протекает по схеме: $2(\text{CaSO}_4 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}) + 3\text{H}_2\text{O} + Q = 2(\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O})$, т.е. $37400 + 19968 + Q = 59554$. Откуда $Q = +2184$ кДж, т.е. реакция экзотермическая. На выделение тепла уходит 3,8% энергии, т.е. эта разность величин потенциальной энергии исходных связей и конечного продукта равна тепловому эффекту процесса гидратации двух молекул полуводного гипса.

Таблица 2.

Энергия межатомных связей исходных компонентов и продуктов реакции

Исходные вещества и продукты реакции	Вид связи	Расход сырья			Приход продукта		
		Число связей, шт	Энергия связей		Число связей, шт	Энергия связей	
			кДж/моль	%		кДж	%
$2(\text{CaSO}_4 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O})$	Ca-O	4	17729	30,9	2	17729	29,8
	S-O	4	5779	10,1	4	11553	19,4
	S=O	4	7224	12,6	1	3610	6,1
	H-O	2	6670	11,6	4	26662	44,8
H_2O	H-O	2	19968	33,2			
Расход энергии их связей			57370	100			
Приход новообразований и энергии их связей [6].						59554	100
Σ расхода=57370кДж;		Σ прихода = 59554 кДж.					

Если суммарную энергию связей в 1 кг полуводного гипса принять за 100%, то на долю связей H-O, которые дает только химически связанная вода, приходится 44,8-46,4%, а Ca-O – 29,8-30,9%. Это значит, что энергетически роль только химически связанной воды практически такая же, как и полуводного гипсового вяжущего. Это позволяет утверждать о наличии неиспользованных, скрытых энергетических резервов и что к воде затворения вяжущих надо относиться не менее серьезно, как и к самим вяжущим. Кроме того, это

означает, что прочность конечного продукта на 74-79,4% обеспечивается силами связей Са-О и Н-О.

Двойные связи в исходном сырье в результате синтеза с водой убывают: их становится меньше в 2 раза. Количество слабых связей (S-O) и (S=O) достигает 20,1-25,5% от всей энергии минералов. Результаты трансформации энергии межатомных связей исходного сырья в конечный продукт можно проследить по данным таблицы 3.

Таблица 3.

Изменение энергии межатомных ковалентных связей

Наименование показателей и их количество	Расход	Приход	Изменение, %
связей, шт	8	11	>10
валентных электронов, шт	20	24	>20
двойных связей, шт.	2	1	<200
электричества, $n \cdot 10^5$, Кл	70,5	77,6	>9,1
Работа связей, кВт/час	7,1	7,8	>14
Энергия связей, кДж	57370	59554	<3,8

Выводы. Изучение процессов трансформации потенциальной энергии межатомных связей строительного гипса позволило выявить сильные Са-О и Н-О и слабые S-O и S=O связи, количество их (сильных 74-79%, слабых 20-25,5%). Энергетически мощная составляющая (44,8-46,4%) от суммы всех межатомных связей принадлежит воде – актуальность работы с которой несомненна. Указано на необходимость разработки механизма преобразования минералов полуводного гипса в конечный продукт с учетом характера среды, в которой преобразуются межатомные связи.

ENERGY CONVERSION ATOMIC BONDS HIGH PLASTER

The energy of interatomic bonds determines the quality of high-strength gypsum. Knowledge of technology transforming it from raw material to a finite product, the ability to replace the weak links on the strong - the way to constructing gypsum concrete specified properties.

Keywords: Gypsum, interatomic bonds, the potential energy, energy transformation, properties.

Литература

1. Кузнецова Т.В. Физическая химия вяжущих материалов /Т.В. Кузнецова, И.В.Кудряшов, В.В.Тимашов –М.: Высш.шк., 1989. -384 с.
2. Иоффе А.Ф. О физике и физиках /А.Ф.Иоффе. Л.: -Наука, 1985. – 344 с.
3. Кучеренко А.А. Механизм отвердевания цементного камня /А.А.Кучеренко //Вісник ОДАБА. – 2009. - №33. – С. 235-242.
4. Кучеренко А. А. О теория твердения бетона /А.А.Кучеренко //Вісник ОДАБА. – 2009. - №34. – С. 123-127.
5. Бутт Ю.М Технология вяжущих веществ /Ю.М.Бутт, С.Д.Окороков, М.М. Сычев, В.В.Тимашов. – М.: Высш.шк. 1965. – 620 с.

Кучеренко А.А. Преобразование энергии межатомных связей высокопрочного гипса / /А.А.Кучеренко //Вісник ОДАБА. – 2010. - №38.