

МИНЕРАЛОГЕННАЯ ИНЖЕНЕРИЯ В ТЕХНОЛОГИИ СТРОИТЕЛЬНОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Кучеренко А.А., д.т.н., профессор
Одесская государственная академия строительства и архитектуры
nano-aak@mail.ru

Аннотация. Известно, что энергия межатомных связей исходного сырья (воды и минералов вяжущего) определяет свойства конечного продукта. Поэтому, всегда присутствующую в веществе, потенциальную 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 их энергии, в процессе преобразования согласно химических реакций, можно найти в справочниках. Проблема: научиться извлекать природную энергию, выбирать исходное сырьё с нужной термодинамикой связей, управлять ею и создавать строительный материал с энергией межатомных и межмолекулярных связей, определяющих требуемое качество. Знание технологии преобразования энергии межатомных связей от исходного сырья до конечного продукта, умение слабые связи заменить на сильные – путь к конструированию строительного материала заданных свойств.

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

МІНЕРАЛОГЕННА ІНЖЕНЕРІЯ В ТЕХНОЛОГІЇ БУДІВЕЛЬНОГО МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА

Кучеренко О.А., д.т.н., професор
Одеська державна академія будівництва та архітектури
nano-aak@mail.ru

Анотація. Відомо, що енергія міжатомних зв'язків вихідної сировини (води і мінералів в'язучого) визначає властивості кінцевого продукту. Тому, завжди присутню в речовині, потенційну енергію хімічних зв'язків (в кДж/моль) доцільно прийняти за єдиний критерій оцінки властивостей вихідної сировини, напівфабрикату (на кожному технологічному переділі при будь-яких режимах його переробки) та кінцевого продукту. Величини їх енергії, в процесі перетворення згідно хімічних реакцій, можна знайти в довідниках. Проблема: навчитися отримувати природну енергію, вибирати вихідну сировину з потрібною термодинамікою зв'язків, керувати нею і створювати будівельний матеріал з енергією міжатомних і міжмолекулярних зв'язків, визначають необхідну якість. Знання технології перетворення енергії міжатомних зв'язків від вихідної сировини до кінцевого продукту, вміння слабкі зв'язки замінити на сильні – шлях до конструювання будівельного матеріалу заданих властивостей.

Ключові слова: атом, електрон, енергія, зв'язки, технологія, матеріал, властивості.

MINERALOGY ENGINEERING IN TECHNOLOGY OF BUILDING MATERIALS

Kucherenko A.A., Doctor of Engineering, Professor
Odessa State Academy of Civil Engineering and Architecture
nano-aak@mail.ru

Abstract. Technology of building materials and building materials, generally are associated with solid and liquid. Einstein derived the equation according to which any solid contains internal energy. A great amount of natural energy of rocks and water that has no demand is composed of many interrelated minerals and H₂O molecules. This feedstock determines the properties of a final product. Attention is given to the energy of interatomic bonds, "hidden" in a thermodynamically stable natural substance with different phase compositions. Therefore, it is advisable to adopt potential energy of chemical bonds (in kJ/mol) which always occurs in the substance as a single criterion for evaluating the properties of raw materials, a semi-finished product (on every technological redistribution in all modes of processing) and a final product. To step up this energy artificially by entering it in the excited state, and to obtain mineral binders as a higher quality feedstock for a building material. According to the well-known equations and technology, using the bases of mineralogy engineering, to convert raw materials (minerals of a binder and water) in the product (hydrominerals and other new formations). To learn to draw natural energy, to choose a feedstock with the required thermodynamics of relations, to manage it, to calculate its amount and create a building material with the energy of interatomic and intermolecular bonds that determine the required quality. Knowledge of the technologies converting the energy of the interatomic bonds from raw material to a final product, the ability to replace weak chemical bonds by strong ones - the way to detailing of building material with specified properties.

Keywords: atom, electron, energy, communications, technology, material, properties.

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: $E=m \times c^2$. 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 H₂O. 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 одной молекуле H₂O равна 969,3 кДж/моль [1], а межмолекулярных связей (э.м.м.с.) – около 20 кДж/моль. Тогда в 1 л воды скрытой энергии межатомных и межмолекулярных связей содержится 54960 кДж. В основном минерале цемента – алите, 3CaO·SiO₂, 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 м³ 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. В статье сделана попытка использовать энергию межатомных связей, «спрятанную» 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 (гидроминералы и другие новообразования). Определить его достоинства и недостатки. 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). Мы уже получаем минеральные вяжущие вещества как исходное сырьё для бетона, искусственно активизируя природную энергию, введя её в возбуждённое состояние дроблением, обжигом, помолом.

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. Поэтому в статье излагается методология работы с использованием минералогенной инженерии для исследователей, работающих в области в промышленности строительных материалов.

Выбор исходного сырья. В природном исходном сырьё (например, глинистой породе, известняке, воде и др.) электроны атомов находятся в покое (электронейтральны). Задача технолога активизировать их, из покоя вывести их в возбуждённое состояние, и тогда атомы исходного сырья станут активными (электроразряженными), например, вяжущими или клеящими веществами и вступят в реакцию между собой или с другими веществами.

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. [2] была установлена закономерность так называемого «трансвлияния» – «внутримолекулярного катализа...». Суть её в том, 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 кристалле, молекуле, комплексе атомов всегда есть и можно найти самый активный атом в среде других, который вступит в реакцию с аналогичным по активности атомом окружающей среды или других комплексов их. 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 длительность эксплуатации 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 [3]. Поэтому, выбранное из них вещество и его количество, определяют физико-механические свойства будущего строительного материала.

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. Основным условием образования химической связи между ними является понижение полной энергии E_{AB} 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 могут быть кратными: одинарными, двойными и тройными. С увеличением кратности изменяются свойства связи и 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 одинарные.

Энергия π -связи меньше, чем энергия σ -связи и потому π -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, тем выше плотность твёрдого тела.

По *валентности* атомов можно судить о будущей структуре продукта. Так, 2-х валентные атомы (например, Ca-содержащие и др.) создают 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. 6-ти и 8-мивалентные (S-содержащие) формируют структуру строительного материала с еще большими элементами разветвленного пространства, как у кристаллов этрингита [4] и таумасита [5]. 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 заданную структуру (плотную, пористую и 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.

Результаты исследований. Фундаментальные законы физики и химии «говорят», что в природе нет ничего, кроме электричества: плюса и минуса (*ионы*) [6]. Их взаимодействие порождает твёрдое тело, жидкую или газообразную фазы. Сила их взаимодействия определяет свойства конечного продукта. При химическом взаимодействии *электроны* одного атома (малые кружки), рис. 1, а, с электроном другого атома (большой кружок) образуют одну или несколько общих электронных пар (на рис.1, а две пары, в которых каждая точка означает один электрон). Электронные облака трёх атомов перекрываются и уплотняются в месте их контактов за счёт суммы двух электрических зарядов атомов, рис.1, б (два тёмных пятна). В зоне двух тёмных пятен величина общего заряда и плотность облака повышаются. Затем идут процессы стабилизации (уравнивания концентраций плотности и величины зарядов), что приводит к обобществлению электронов во внешнем электронном слое трёх атомов: индивидуальные для каждого *атома* электроны внешнего слоя становятся общими для 3-х атомов и вращаются уже вокруг трёх атомов в их общем внешнем электронном слое, (рис.1, в, затемнённая зона). Результатом общего, объединяющего три атома, электронного облака, рис. 1, в (тёмная зона) стало новое твёрдое вещество – молекула из трёх атомов. Полученная молекула аналогичным образом соединительным электронным облаком объединяется с соседней и даёт другое твёрдое вещество большего объёма – квадруполь. Два квадруполя объединяются в единый, удерживаемый обобществлённым внешним электронным облаком, т.е. химической связью, – октуполь [6] и т.д. строится твёрдое тело любого строительного материала. Свойства твёрдого тела обеспечивают два вида химической связи: между атомами (э.м.а.с.), между молекулами (э.м.м.с.) внутри квадруполя и и вне его соединительными обобществлёнными облаками электронов внешнего слоя.



Рис. 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 повышается и электронное облако одной индивидуальной молекулы перекрывается с электронным облаком другой индивидуальной молекулы, трансформируясь в обобществлённое соединительное облако, т.е. вышеизложенный процесс повторяется.

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 (рис. 1, б) и возникает обобществлённое облако (рис. 1, в). Это облако соединительное. Оно создаёт элементный монолит твёрдого тела, будь то два и более атома, молекулы, кристалла, квадруполя, октуполя и т.п.

При этом надо понимать не буквально твёрдые вещества (ядра) двух молекул соединяются друг с другом. Ядра атомов всегда положительно заряжены и всегда отталкиваются друг от друга. Электроны всегда отрицательны и всегда отталкиваются друг от

друга. Поэтому твёрдое тело можно рассматривать как систему «объект – среда» т.е. «ядра атомов – электроны». Мысленно можно представить себе твёрдое тело как ядра атомов дисперсно размещённых в окружающей среде электронов. При этом ядра атомов не соприкасаются друг с другом, электроны не соприкасаются друг с другом и ядра не соприкасаются с электронами. Это действительно облако, т.е. система твёрдых частиц (ядер и электронов) в среде электрических (магнитных) полей. Есть ли здесь разница между химическими связями и силами вандерваальса. В такой системе пустоте нет места, определяющим является заряд и тогда возникает гипотеза: «Структура твёрдого тела формируется по закону постоянно убывающей энергии межатомных связей (валентности атомов): в первую очередь, в центре новообразований, синтезируются ионы с максимальной (атомы максимальной валентности, например Si^{4+}), к периферии – убывающей и на периферии – с минимальной энергией межатомных связей (атомы минимальной валентности, чаще ионы H^+ и OH^-)». Именно с учётом этого надо создавать новый или реконструировать имеющийся строительный материал.

Кроме того связь электронейтральных атомов, молекул и др. частиц обеспечивается между собой за счёт взаимного притяжения силами вандерваальса (рис. 1, г), носит название вандерваальсового взаимодействия и обозначается тремя точками (•••). Однако, не ясно сколь велико это твёрдое тело. Можно предугадать множество таких молекул.

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 элементном 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 частицы (атомы, зёрна и т.п.). Энергия кристаллической решётки – это работа, необходимая для её разрушения. Кристаллическая решётка разрушается при растворении, испарении или плавлении. Величины этих 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. В первой части на наноуровне изложены теоретические основы минералогенной инженерии в технологии строительного материаловедения: выборе исходного сырья и отвердевании его смеси. При выборе исходного сырья учитывают термодинамические характеристики атомов, молекул, кристаллов и минералов. При отвердевании смеси учитывают термодинамические характеристики электронов и энергию химических связей, т.е. кинетику межэлектронных (орбитальных), межатомных и межмолекулярных взаимодействий.

Литература

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. Курс общей химии. Под ред. проф. Коровина Н.В. – М.: Высшая шк., 1985. – 431 с.
4. Кучеренко А.А. Структурные и термодинамические характеристики этtringита / А.А. Кучеренко // Технологии бетонов. – 2012. – №9-10. – С. 60-63. РФ
5. Кучеренко А.А. Теория твердения бетона / А.А. Кучеренко // Технологии бетонов. – 2009. – Ч. 2, № 6. – С. 5-7. РФ.
6. Иоффе А.Ф. О физике и физиках / А.Ф. Иоффе. – Л.: Изд-во «Наука», 1985. – 544 с.