

**ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЭНЕРГИИ МЕЖАТОМНЫХ СВЯЗЕЙ  
ТВЕРДЕЮЩЕГО ВЫСОКОПРОЧНОГО ГИПСА**

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

Химическая связь – это взаимодействие атомов, в результате которого высвобождается энергия. Количество этой энергии служит мерой оценки силы связи. Множество связей и их величин, трансформирующихся в процессе превращения вяжущего (порошка) в конечный продукт (камень), определяют и технические (прочностные и др.) характеристики последнего. Необходимость разработки теоретических и практических основ компьютерного бетоноведения очевидна, а потому знание трансформации энергии связей в технологии бетона актуально. К тому же знание этого может позволить технологу убрать слабые связи и обратить внимание (а возможно и добавить) на сильные связи.

Известно, что полная энергия межатомных связей складывается из кинетической и потенциальной. Наше внимание обращено к потенциальной энергии, характеризующейся силами притяжения (отталкивания) при синтезе атомов исходного сырья, полуфабриката и бетона. При этом оценивается конечное состояние каждой системы (гидратация, отвердевание) и не учитывается кинематическое движение одной системы к другой или нахождение их в тех или иных условиях.

В исследованиях предполагается изучить потенциальную энергию межатомных связей минеральных вяжущих с целью более глубокого понимания процессов их отвердевания и поведения в разных эксплуатационных средах. Присутствие определенной идеализации в подходе к решению поставленной задачи объясняется отсутствием некоторых литературных данных: например, точной энергии связей одного и того же типа, но в разных молекулах, минералах, разных исследователей и т.п. Неизбежностью принятия неординарных решений: невозможно одну молекулу, например, воды отделить от другой, точно подсчитать количество разных минералов в объеме зерна вяжущего и др. Однако на данный момент у технолога-строителя два выбора: или вообще ничего не считать или считать с перспективой улучшения методов и качества теоретических расчетов.

В наших расчетах и последующих исследованиях принят метод СТРЕМ (системно-технологическое расчетно-экспериментальное моделирование) объекта, находящегося в технологическом режиме или в окружающей среде. В общем случае это система под названием «объект-среда», состоящая из мелких локальных систем, изменяющихся (преобразующихся в другие) в технологической последовательности, теоретический расчет физико-химического взаимодействия объекта со средой и на основе последнего, экспериментальной проверки результатов расчета [1].

Мы исходим из того, что окислительно-восстановительные процессы вяжущего с водой, с окружающей средой или с условиями эксплуатации служат не только единственным источником электрической энергии. Они протекают и при участии, всегда существующей в вяжущем, внутренней электрической энергии. Что есть две технологии преобразования потенциальной энергии межатомных связей: физико-химическая и химико-физическая.

Физико-химическая, когда физические процессы предшествуют химическим, когда энергетический процесс направлен к сближению и к сокращению расстояния между соседними атомами (частицами), что ведет к химическому процессу - к синтезу – с последующим процессом гибридизации с уменьшением и стабилизацией длины межатомных связей. Физико-химическая технология ведет к созиданию, конструированию продукта.

Химико-физическая технология процессов преобразования потенциальной энергии межатомных связей, когда минералы и новообразования зрелого бетона химически взаимодействуют с окружающей средой и образуют новые твердые вещества. Вслед за химическим процессом наступает физический: новые твердые вещества требуют себе место, не находят его, раздвигают соседние атомы, удлиняют и разрывают связи между ними. Это приводит к разрушению, коррозии бетона.

При физико-химической технологии надо привносить активное вещество или создавать условия, способствующие сокращению связей, при химико-физической - сохраняющие длину связей и их энергию.

Системы «электронные связи – гипс» и «электронные связи - вода затворения» отражают качество исходного сырья, ( $\text{CaSO}_4$  и  $\text{H}_2\text{O}$ ) его внутреннюю потенциальную энергию. Поэтому рассмотрены графические схемы взаимодействия атомов, например  $\text{H}_2\text{O}$  как  $\text{H}-\text{O}-\text{H}$  с двумя связями, энергией этих связей, количеством их и др. В расчетах принят 1 кг  $\text{CaSO}_4$  и необходимое для его гидратации химически связанное количество воды согласно уравнения  $\text{CaSO}_4 + 2\text{H}_2\text{O} = \text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ . 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  $\text{CaSO}_4$  – 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				
H <sub>2</sub> O	882	176	28,2	2,8
CaSO <sub>4</sub>	441	265	42,3	4,2
Ерасход	1323	441	70,5	7,1
Приход новообразований				
CaSO <sub>4</sub> ·2H <sub>2</sub> O	441	485	77,6	7,8

Оба результата (работа прихода, равная 7,1 квт·ч и расхода – 7,8) и энергия связи атомов молекул (в расходной части 46951 кДж, а в приходной – 49421) свидетельствуют о том, что средний уровень потенциальной энергии молекул продукта реакции (CaSO<sub>4</sub>·2H<sub>2</sub>O) выше среднего уровня энергии молекул исходных веществ (CaSO<sub>4</sub> + 2H<sub>2</sub>O). Значит процесс гидратации эстрих-гипса протекает с поглощением энергии из окружающей среды. Окружающей средой являются ионы гипса и воды. Положительно и отрицательно заряженные ионы притягиваются друг к другу, поглощая энергию. На поглощение тепла уходит энергии по величинам заряда 14% и по энергии связи 5%, т.е. в среднем десятая часть всей потенциальной энергии исходных связей. Эта разность равна тепловому эффекту процесса гидратации, что соответствует сжиганию 0,07 м<sup>3</sup> метана.

Таблица 2.

Энергия межатомных связей исходных компонентов и продуктов реакции

Реагирующие вещества и продукты	Вид связи	Расход CaSO <sub>4</sub> + H <sub>2</sub> O			Приход CaSO <sub>4</sub> ·2H <sub>2</sub> O		
		Кол-во связей, шт	Энергия связей,		Число связей, шт	Энергия связей,	
			кДж	%		кДж	%
CaSO <sub>4</sub>	Ca-O	2	18897	40,2	2	18885	38,2
	S-O	2	6157	13,1	4	12308	24,9
	S=O	2	7697	16,4	1	3846	8,3
H <sub>2</sub> O	H-O	2	14200	30,2	2	14202	28,7
Расход энергии их связей			<b>46951</b>	100			100
Приход новообразований и энергии их связей						<b>49421</b>	
Тепловой эффект +2470 кДж или +337 кДж/моль							

Если суммарную энергию связей в 1 кг безводного гипса принять за 100%, то на долю связей Н-О, которые дает только химически связанная вода, приходится 29%, а Ca-O – 38%. Это значит, что энергетически роль только химически связанной воды практически такая же, как и высокопрочного гипсового вяжущего. Кроме того, это означает, что прочность конечного продукта на 71% обеспечивается связями Ca-O и Н-О. Однако, определив массу химически связанных молекул H<sub>2</sub>O и минералов вяжущего находим истинное водотвердое отношение  $V_{х.с.}/\Gamma=0,26$ . Для гипсового теста нормальной густоты -  $V_{н.г.}/\Gamma=0,35-0,45$ , [2] а готовят гипсовые изделия при  $V/\Gamma=0,6$  [2]. Это означает, что 1 кг гипса затворяют водой более чем в 2 раза большим количеством, чем необходимо для химических связей. Следовательно, количество потенциальной энергии с водой затворения привносится практически столько же, что и с гипсовым вяжущим. Поэтому умение использовать хотя бы только потенциальную энергию H<sub>2</sub>O в процессах отвердевания CaSO<sub>4</sub> (очевидно, как и других вяжущих) – проблема актуальная.

Двойные связи в исходном сырье в результате синтеза с водой убывают: их становится меньше в 2 раза. Это ведет с одной стороны к ослаблению энергии межатомных связей в конечном продукте (больше слабых связей атомов S-O вместо более сильных S=O), а с другой – к разветвлению каркаса (остова) твердого тела и вовлечения большего количества атомов со слабыми связями.

Самые слабые связи (S-O), (S=O) и Н-О. Этих связей в составе конечного продукта (двуводного гипса) содержится 62% (остальные 38% - это связи Ca-O). Усредненная энергия слабых связей 472 кДж/моль, а связей Ca-O - 1076 кДж/моль, т.е. в 2,3 раза больше. Поэтому негативные свойства гипсового вяжущего (пониженные водостойкость и др.), очевидно, обеспечиваются связями серы и водорода с кислородом. Свести их к минимуму – это значит заменить их на более сильные и стойкие в воде, например на связи Ca-O (известь и др.) [2], силоксановые –Si-O-Si-, (ГКЖ-94 [3], жидкое стекло, микрокремнезем и др.) или

добавить сильные связи Al-O (метакаолин и др) с образованием новых связей: более прочных, объемноуплотняющих серу и ускоряющих сроки твердения. Уменьшить количество слабых связей можно снижением валентности серы в процессе трансформации ее энергии. Возможен вариант вытеснения атомов серы из остова (внутреннего объема) твердого тела к периферии, т.е. в состав функциональных групп. 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 CaSO <sub>4</sub> +H <sub>2</sub> O	Приход CaSO <sub>4</sub> ·2H <sub>2</sub> O	Изменения, %
связей, шт	8	11	>10
валентных электронов, шт	20	24	>20
двойных связей, шт.	2	1	<200
электричества, Кл	70,5	77,6	>9,1
Работа связей, кВт/час	7,1	7,8	>14
Энергия связей, кДж	46951	49421	>5

**Выводы.** Изучение процессов преобразования потенциальной энергии межатомных связей высокопрочного гипса позволило выявить характер (сильные – 38% и слабые – 62%) связи, количество (соотношение) их, наметить пути уменьшения слабых и увеличить количество сильных связей, теоретически обосновать уже имеющиеся практические результаты. Обращено внимание технологов на энергетически мощную (30%) составляющую - водозатворения.

#### Литература.

1. Кучеренко А. А. Системно-технологическое моделирование бетона / А. А. Кучеренко // Вісник ОДАБА. – 2008. – № 31. – С. 189–194.
2. Волженский А.В. Минеральные вяжущие вещества/ А.В.Волженский, Ю.С. Буров, В.С. Колокольников –М.: 1973, - 480с.
3. Кучеренко А. А. О механизме гидрофобизации бетона / А. А. Кучеренко, Р. А. Кучеренко // Вісник ОДАБА. – 2009. – № 35. – С. 207–213.

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

#### ENERGY CONVERSION ATOMIC BONDS HIGH PLASTER

Kucherenko A.

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:** high-strength gypsum, interatomic bonds, the potential energy, energy transformation, properties.