## Моделирование структурных свойств гидратированного тоберморита

**Ю.А. Абзаев, С.В. Коробков, А.И. Гныря**

Томский государственный архитектурно-строительный университет, 634003, Россия, г. Томск, пл. Соляная, 2

В работе объектом исследования был модельный тоберморит с водоцементным отношением 0,85, который относится к промежуточным состояниям гидратированного портландцемента. К числу эффективных средств изучения гидратированного тоберморита относится молекулярная динамика (МД), и первопринципное изучение свойств кристаллической решетки. Представляют интерес результаты расчетов термодинамических и механических характеристик. Исследуемой решеткой тоберморита является суперячейка с химической формулой Ca10Si12H12O40, пространственной группой P2/m, моноклинным семейством и параметрами решетки a = 7,39, b = 22,779, c = 6,69 A и углами 90,0; 123,49 и 90,0 градусов, которая относится к семейству Ричардсона, и в которой внедрение молекул воды оказывается символьным. Восстановление молекул воды в решетке тоберморита производилось под разными углами, и в каждом случае оценивалась энергия в рамках МД. Для внедрения молекул H2O в суперячейку Ричардсона, на заданный угол применялись операции матричной алгебры. Рассматривались матрицы перехода координат молекулы H2O от начального положения до конечного значения в результате вращения вокруг осей x, y, z и последующего внедрения в решетку тоберморита. Суперячейка состояла из 57 атомов с известными координатами. Расчеты проводились в программах Gulp, Lammps. Атомные потенциалы межатомных взаимодействий для Si, Ca, O, H были взяты из работы [1]. Использовались 2-х (Букингем) и 3-х (гармонический) частичные потенциалы. Использовались также следующие атомные заряды: Ca – 2,0; Si – 4,0; O – (-2); H – 0,4. Была проведена геометрическая оптимизация методом Ньютона-Равсона, оценка упругих модулей. После достижения финальной конфигурации с энергией (–1925,89) эВ были рассчитаны объемный модуль упругости (В); модуль сдвига (S); модуль Юнга (E), рассчитаны также отношения Пуассона в различных плоскостях. Параметры финальной суперячейки оказались равными: a = 6,991, b = 7,796, c = 51,818A с углами 90,77; 102,10 и 90,26 градусов. Результаты расчетов механических характеристик тоберморита оказались равными: B = 11,404; 22,934; 17,169 ГПа, S = 17,169; 30,390; 18,755 ГПа, E = 13,217 ГПа в рамках моделей Reuss, Voigt, Hill, которые соответствовали конфигурации H2O с углом в 4 градуса. Суперячейка тоберморита с конфигурацией H2O под углом в 80 градусов также является наиболее стабильной. Первопринципные расчеты [3] позволили оценить упругие модули: B = 18,65 ГПа, S = 12,77 ГПа, с которыми удовлетворительно согласуются данные МД.

**Список литературы**

1. Subramani V.J. Potential Applications of Nanotechnology for improved performance of Cement based materials. MSCE-thesis. Department of Civil Engineering, University of Arkansas. 2008.
2. Richardson I.G. The nature of the hydration products in hardened cement pastes // Cement and Concrete Composites. 2000. V. 22. P. 97−113.
3. Isayev O., Oses C., Toher C., Gossett E., Curtarolo S., Tropsha A. Universal fragment descriptors for predicting properties of inorganic crystals // Nature communications. 2016. V. 8(1). P. 1−12.