

СТРОИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И ИЗДЕЛИЯ

УДК 669.24'783:539.389.1

DOI: 10.31675/1607-1859-2022-24-5-122-132

*Ю.А. АБЗАЕВ, С.В. КОРОБКОВ, Л.А. АНИКАНОВА, В.А. СТАРЕНЧЕНКО,
Томский государственный архитектурно-строительный университет*

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРАТАЦИИ ПОРТЛАНДЦЕМЕНТА С РАЗНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ ВОДЫ*

Аннотация. Гидратация портландцемента в обычных условиях представляет сложную проблему. Детальное описание гидратационных процессов твердения включает в себя проблемы растворения клинкеров, диффузионные процессы, поверхностные явления на зародышах новых фаз, количественный состав твердого вещества и рост продуктов гидратации, пористой структуры, влаги в зависимости от времени твердения и водоцементного отношения. Термодинамическое моделирование гидратации портландцементов в рамках модели Lothenbach позволяет осуществить в значительной мере решение указанных проблем. В программном комплексе GEMs оценивается в равновесных условиях количественное содержание как исходного клинкера, так и продуктов гидратации (цементный камень, портландит и т. д.) в течение длительного времени.

В статье представлены результаты моделирования содержания фаз в процессе гидратации портландцемента в программе GEMs в рамках модели В. Lothenbach при отсутствии минеральных добавок calcite, lime, anhydrite, gypsum, hemihydrate, K₂SO₄. Водоцементное отношение было выбрано равным 0,3; 0,4 и 0,5.

Установлено, что к конечным доминирующим продуктам относятся гель CSHQ сложного состава, portlandite, нерастворимые клинкерные минералы, а также hydrogarnet, monosulfate, влага, распределенная в пористом пространстве, эттрингит отсутствует. Определено, что доля пористого пространства возрастает с увеличением водосодержания и даже после 1250 дней твердения вклад нерастворимых клинкеров составляет 20–25 г среди 150 г гидратированного портландцемента.

Ключевые слова: термодинамическое моделирование, гидратация портландцемента, водоцементное отношение

Для цитирования: Абзаев Ю.А., Коробков С.В., Аниканова Л.А., Старенченко В.А. Термодинамическое моделирование гидратации портландцемента с разным содержанием воды // Вестник Томского государственного архитектурно-строительного университета. 2022. Т. 24. № 5. С. 122–132.
DOI: 10.31675/1607-1859-2022-24-5-122-132

* Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FEMN-2020-0004).

*Yu.A. ABZAEV, S.V. KOROBKOV, L.A. ANIKANOVA, V.A. STARENCHENKO,
Tomsk State University of Architecture and Building*

THERMODYNAMIC SIMULATION OF PORTLAND CEMENT HYDRATION WITH DIFFERENT WATER CONTENT

Abstract. Hydration of Portland cement in normal conditions is a complex problem. A detailed description of the hydration process includes the clinker dissolution, diffusion processes, surface phenomena on the nuclei of new phases, quantitative composition of the solid matter and growth of hydration products, porous structure, humidity depending on the hardening time and water/cement ratio. Thermodynamic modeling of Portland cement hydration based on the Lothenbach model allows solving these problems to a large extent. Using GEMS software, thermodynamic simulation allows detecting the amount of both initial clinker and hydration products such as cement paste, ettringite, Portlandite, and others for a long period of time.

The paper presents the simulation results of the phase content during Portland cement hydration based on the Lothenbach model, in the absence of such mineral additives as calcite, lime, anhydrite, gypsum, hemihydrate, K_2SO_4 . The water/cement ratio is 0.3, 0.4 and 0.5.

It is found that the final dominant products include CSH gel of a complex composition, portlandite, insoluble clinker minerals as well as hydrogarnet, monosulfate, humidity distributed in the porous space; ettringite is absent. It is determined that the fraction of the porous space increases with increasing water content and even after 1250 days of hardening the contribution of insoluble clinkers is 20–25 g among 150 g of hydrated Portland cement.

Keywords: thermodynamic modeling, Portland cement hydration, water/cement ratio

For citation: Abzaev Yu.A., Korobkov S.V., Anikanova L.A., Starenchenko V.A. Termodinamicheskoe modelirovanie gidratatsii portlandtsementa s raznym soderzhaniiem vody [Thermodynamic simulation of Portland cement hydration with different water content]. Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo arkhitekturno-stroitel'nogo universiteta – Journal of Construction and Architecture. 2022. V. 24. No. 5. Pp. 122–132. DOI: 10.31675/1607-1859-2022-24-5-122-132

Введение

Бетонные изделия эксплуатируются в разнообразных внешних условиях: влажностной среды, градиентов температур, тепломассопереноса, особенностей требований прочностных характеристик и т. д. В соответствии со служебными задачами, внешними условиями эксплуатации портландцементов на цементных заводах указываются паспортные характеристики и содержание исходных компонентов. Приведенных данных, однако, как правило, недостаточно для оценки количественного содержания основных фаз цементного камня и, следовательно, интенсивности накопления прочностных, служебных характеристик за определенный период времени. Мольное содержание минералов может различаться в цементах, изготовленных на разных заводах. Может различаться также состав и содержание продуктов гидратации вследствие разной доли минеральных добавок и воды в замесе. Учет факторов, определяющих гидратацию цементов, представляет сложную проблему, решение которой экспериментальными методами затруднительно. Определенный интерес вызывает численное изучение содержания основных фаз цементного камня и других продуктов в процессе гидратации, формирования доли пористого пространства, содержания влаги в порах.

Представляется актуальным решение указанных задач на основе термодинамического подхода, реализованных В. Lothenbach [1–10] в программном

комплексе GEMs [11–13]. В комплексе GEMs вблизи равновесия цементной системы рассматривается баланс растворения клинкерных фаз, образование твердых растворов конечных продуктов на основе минимизации энергии Гиббса и базы термодинамических характеристик отдельных фаз на различных стадиях твердения. Объектом исследования был выбран портландцемент, изготовленный на Тимлюйском цементном заводе, к особенностям которого относится отсутствие некоторых добавок в клинкере, в частности calcite, lime, anhydrite, gypsum, hemihydrate, K_2SO_4 .

Целью работы в рамках термодинамического подхода является исследование количественного содержания продуктов гидролиза, гидратации портландцемента без минеральных добавок с разным содержанием воды в пределах 1250 дней, а также определение количественного содержания исходных клинкерных фаз, влаги, пористых структур, состава и содержания продуктов гидратации в процессе реакции и на конечном этапе.

Материальная и модельная аппроксимация

В портландцементных, как правило, кроме основных клинкерных компонентов присутствуют также добавки gypsum, anhydrite, hemihydrate, calcite, оксид кальция, магнезия, Na- и K-sulphates. В настоящей работе в качестве объекта исследования был выбран портландцемент Тимлюйского цементного завода, в котором присутствуют не все из перечисленных минералов. Было проведено термодинамическое моделирование гидратации портландцемента в программном комплексе GEMs [11] при комнатной температуре. В исходном состоянии в клинкере присутствуют основные минералы: силикаты кальция, алюминат и алюмоферрит. Для портландцемента известен химический состав: SiO_2 (20,47 масс. %); Al_2O_3 (4,87 масс. %); Fe_2O_3 (4,04 масс. %); CaO (63,47 масс. %); MgO (1,64 масс. %); Na₂O (0,239 масс. %); K₂O (0,461 масс. %); SO_3 (2,67 масс. %). Известно также минералогическое содержание клинкера: alite (C_3S , 67 %), belite (C_2S , 12 %), aluminat (C_3A , 6,2 %), aluminoferrite (C_4AF , 12 %). В программе GEMs исследуется химическое взаимодействие клинкерных минералов с водой в рамках термодинамического подхода в условиях минимума свободной энергии. В GEMs возможно рассмотрение входных данных как на основе химического, так минералогического составов клинкера. Состав и накопление фаз осуществляется с помощью термодинамического моделирования растворения, гидратации продуктов твердой фазы, ионного состава водной среды, содержания газов на основе термодинамических данных CEMDATA 18 [14]. Расчеты проводятся как в условиях образования конечных продуктов однократным моделированием, так и поэтапным, пошаговым накоплением продуктов в зависимости от времени (степени гидратации) в модели Lothenbach [1, 2, 15, 16].

Результаты

В модели [1] реализовано детальное активационное накопление продуктов гидратирования на основе полуэмпирических зависимостей Parrot-Killox. В настоящей работе с помощью GEMs реализованы оба этапа моделирования гидратации Тимлюйского портландцемента. Исходные данные клинкерного состава, содержания влаги и минеральных добавок масштабировались в обла-

сти 100 г (г/100 г). Для расчетов был использован минералогический состав портландцемента. Дополнительно в модели учтен также кислород O_2 (0,1 г). Рассмотрено разное содержание воды H_2O , в частности 30, 40 и 50 г соответственно. Расчеты проводились при комнатной температуре $T = 20$ °C. В табл. 1 приведены результаты оценки содержания фаз после однократного моделирования, т. е. результаты расчетов содержания только конечных продуктов гидратации. Был получен состав и количественное содержание фаз в твердом, жидком и газообразном состояниях (в г) гидратированного портландцемента (ГПЦ) с содержанием воды 30 (а); 40 (б); 50 (в) г. Для удобства модели обозначены как ГПЦ-1, ГПЦ-2 и ГПЦ-3 соответственно. Из полученных результатов следует, что с увеличением исходного содержания влаги доля газов мало меняется.

Таблица 1

**Содержание продуктов гидратации портландцемента
с разным агрегатным состоянием после однократного моделирования**

Фазы	Химическая формула	ГПЦ-1, содержание фаз, г	ГПЦ-2, содержание фаз, г	ГПЦ-3, содержание фаз, г
aq_gen	H_2O	–	3,982	13,763
gas_gen	O_2	0,1	0,0999	0,0995
CSHQ	–	50,161	69,063	69,520
$SO_4_OH_AFm$	$(CaO)_3(CaCO_3)Al_2O_3 \cdot 12H_2O$	14,695	23,418	23,924
Belite	$2CaO \cdot SiO_2$	12,281	–	–
Hydrogarnet	C_3AH_6	5,829	0,306	–
Hydrogarnet	$C_3FS_{1,34}H_{3,32}$	11,562	11,562	11,265
Portlandite	$Ca(OH)_2$	32,126	30,080	29,664
arcanite	K_2SO_4	0,5143	0,0221	–
OH-hydrotalcite	$Mg_4Al_2(OH)_{0,1413}H_2O$	3,822	3,822	3,822
thenardite	Na_2SO_4	0,967	–	–

Обнаружено, что в моделях ГПЦ-2, ГПЦ-3 вода присутствует в пористом пространстве (Aqueous), а в модели ГПЦ-1, наоборот, отсутствует, что свидетельствует о том, что все молекулы воды внедрены в решетки твердых фаз, т. е. отсутствует связанная и свободная влага в гидратированном цементе. В модели ГПЦ-3 вода в порах существенно превосходит содержание воды в модели ГПЦ-2. Анализ продуктов гидратации твердой фазы показал, что ее накопление оказывается немонотонным. В самом деле, наибольшее содержание обнаружено в модели ГПЦ-2. Использование воды 50 г приводит к росту пористого пространства, но не приводит к увеличению содержания твердой фазы. Анализ фазового состава твердой фазы показал, что в фазе доминируют кальций силикат гидрат (CSHQ) и портландит. Причем в CSHQ присутствуют фазы как на дженитовой, так и на тоберморитовой основах, которые характеризуются разным отношением (основностью) Ca/Si (табл. 2).

Таблица 2

Состав геля CSHQ

Фаза	Модификации	Концентрация, г		
		ГПЦ-1	ГПЦ-2	ГПЦ-3
CSHQ	CSH-JenD (CaO) _{1,5} (SiO ₂) _{0,6667} (H ₂ O) _{2,5}	0,310	0,394	0,407
	CSH-JenH (CaO) _{1,333} (SiO ₂) ₁ (H ₂ O) _{2,1667}	0,439	0,298	0,276
	CSH-TobD [(CaO) _{1,25} (SiO ₂) ₁ (H ₂ O) _{2,75}] _{0,6667}	0,230	0,293	0,3023
	CSH-TobH (CaO) _{0,6667} (SiO ₂) ₁ (H ₂ O) _{1,5}	0,0205	0,014	0,0130

В рамках модели установлено, что содержание белита в связи с низкой скоростью реакции (по сравнению с C₃S) или неизменно, или мало меняется. Из результатов следует, что увеличение содержания воды приводит к разнонаправленному накоплению отдельных фаз цементной пасты CSHQ. Обнаруживается рост количества фаз CSH-JenD, CSH-JenD с высокой основностью и снижение CSH-JenH, CSH-TobD (табл. 2). Заметную часть твердой фазы составляют hydrogarnet (C₃AH₆), твердый раствор кремнистого гидрограната C₃FS_{1,34}H_{3,32}, а также AFm фаза – SO₄_OH_AFm (см. табл.1). Причем содержание AFm фазы возрастает с увеличением водосодержания, а hydrogarnet, наоборот, существенно снижается. Среди твердых продуктов гидратации обнаруживаются в небольшом количестве также thenardite – безводный сульфат натрия (Na₂SO₄) и arcanite – сульфат калия (K₂SO₄), содержание которых резко снижается с ростом водосодержания.

Определение основных фаз, полученных после расчетов одноэтапной гидратации (одионый процесс), позволяет записать уравнения растворения клинкеров, накопления продуктов гидратации в программном комплексе GEMs [11, 14]. Подробное описание используемых полуэмпирических соотношений обсуждается в работе [16].

Было рассмотрено накопление следующих продуктов гидратации трех агрегатных состояний, находящихся вблизи термодинамического равновесия: aqua, gas, CSHQ, SO₄_OH_AFm, C₃AH₆, C₃FS_{1,34}H_{3,32}, portlandite, arcanite, OH-hydrogarnet. Были выполнены расчеты ионного содержания свободной влаги (aqua), газа (gas), твердых выделений на каждом шаге накопления вышеперечисленных фаз. Зависимость содержания клинкерных фаз alite, belite, ferrite, aluminate от времени гидратации оценивалась в рамках модели Lothenbach [1, 2]. Предполагалось, что свободная влага заполняет объем пор портландцемента. На рис. 1, 2 приведены данные о содержании всех фаз в портландцементе в зависимости от времени гидратирования, причем процесс рассматривается в течение 1250 дней.

Из анализа данных, представленных на рис. 1 и 2, следует, что к доминирующим продуктам относятся гель CSHQ, портландит, существенный рост которых начинается с ~ 0,05 ч (~10^{-1,17} дня). Меньшую долю составляют твердые

фазы hydrogarnet (C_3AH_6), OH-hydrotalcite, monosulfate ($C_3ACaSO_4 \cdot 12H_2O$) и $C_3FS_{0,84}H_{4,32}$. Причем в совокупности масса твердой фазы практически не изменяется в портландцементях с разным водосодержанием, возрастает лишь масса жидкости, находящейся в пористом пространстве. Доля влаги в конечном продукте возрастает с увеличением водосодержания в исходном растворе. Отсюда следует, что даже после 1250 дней твердения избыточная влага в исходной цементной пасте стимулирует в основном рост пористых структур и, следовательно, менее плотный бетон.

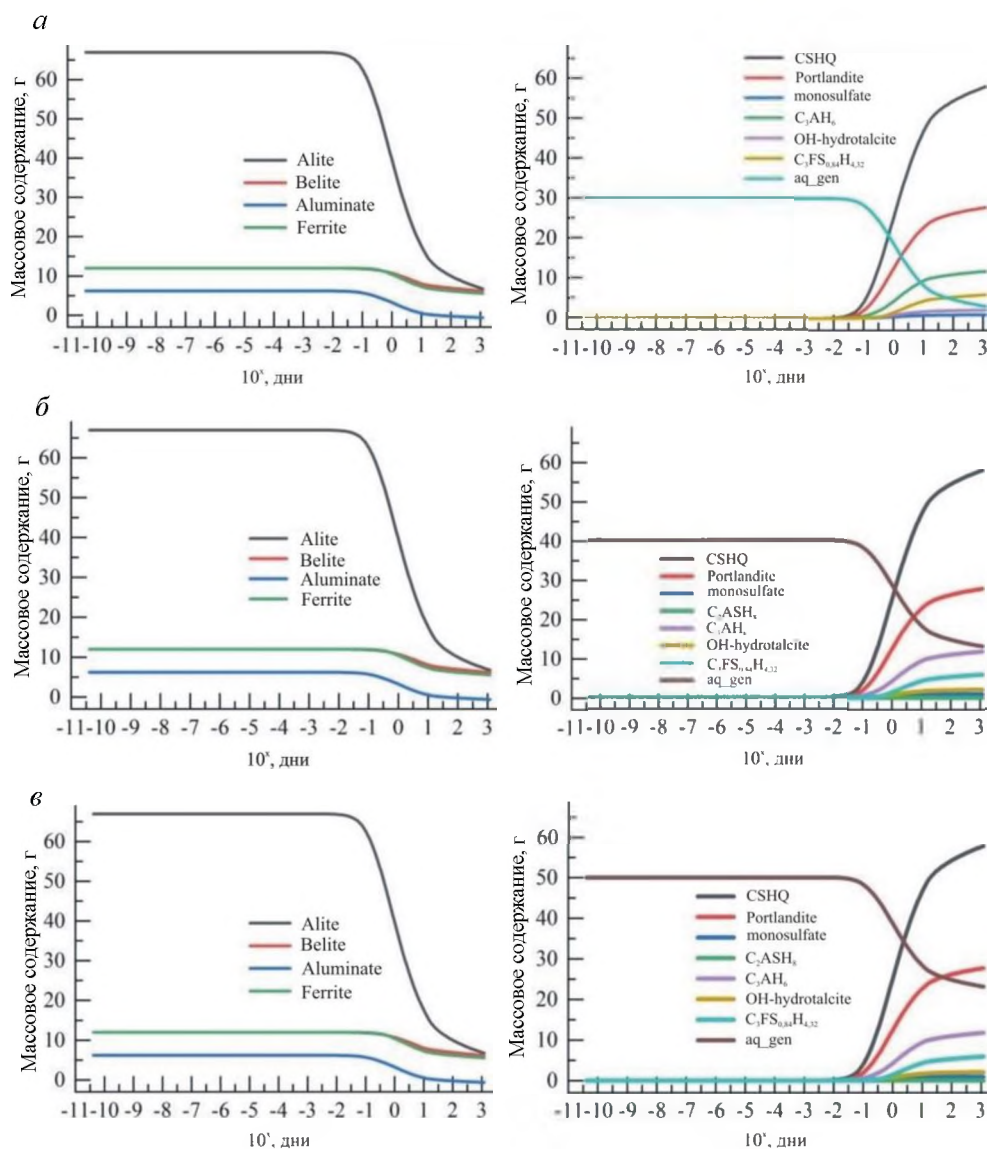


Рис. 1. Растворение клинкерных фаз и накопление продуктов в процессе гидратации в течение 100 дней в портландцементях ГПЦ-1 (а), ГПЦ-2 (б) и ГПЦ-3 (в) с содержанием 30, 40 и 50 г воды

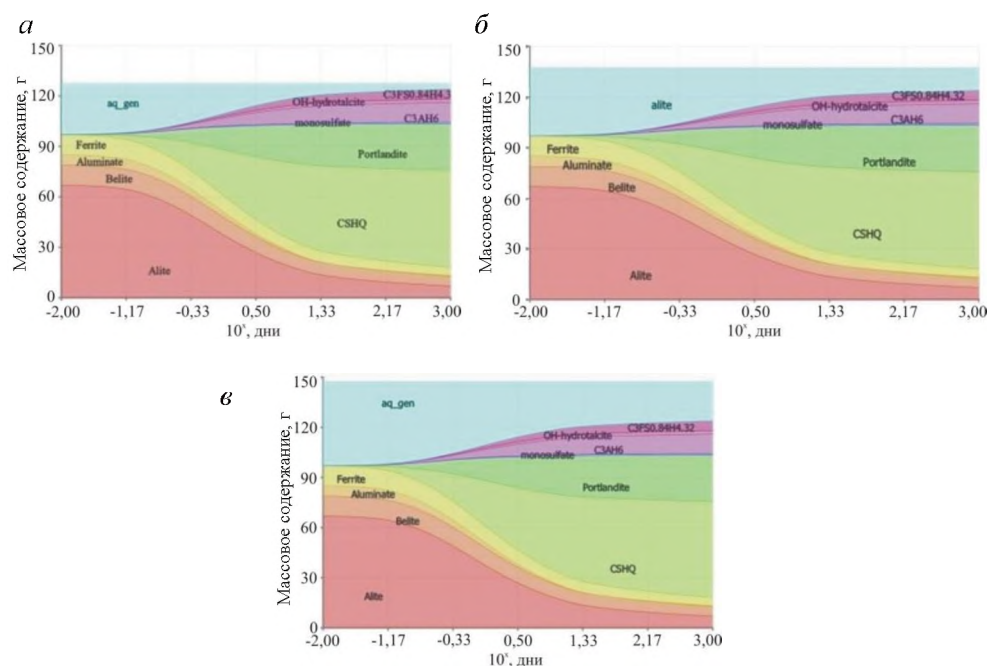


Рис. 2. Кумулятивное растворение клинкеров и накопление продуктов гидратации в портландцементе ГПЦ-1 (а), ГПЦ-2 (б) и ГПЦ-3 (в) в течение 1000 дней с содержанием 30, 40 и 50 г воды

На рис. 1 и 2 указано также растворение клинкерных минералов в зависимости от времени гидратации. За указанный период существенно снижается доля alite, ferrite и aluminates, при этом доля belite снижается в меньшей степени. Алюминат практически полностью растворяется. Накопление портландита осуществляется только за счет снижения в основном доли alite. В конечном продукте содержание клинкерных минералов в совокупности достигает 20–25 г, не произошло их полного растворения. Разный состав воды не меняет количественное содержание продуктов, однако меняет состав продуктов. В самом деле, в портландцементе с 30 г воды нет минерала C_2ASH_8 , для которого отсутствуют условия реакции, связанные с дефицитом влаги. В других случаях в начальный момент гидратации возникает C_2ASH_8 , правда, через короткое время (1 ч) данный продукт растворяется (табл. 3). Из данных табл. 3 следует также, что разное водосодержание не оказывает влияния на скорость реакций образования продуктов и, следовательно, содержание конечных продуктов гидратации. Массы отдельных твердых продуктов одинаковы при разном содержании воды.

Таким образом, исходный минералогический состав, количественное содержание играют важную роль в формировании продуктов гидратации связующих бетонов. Показано, что к доминирующим фазам исследуемого твердеющего портландцемента относятся гель CSHQ сложного состава, portlandite, нерастворимые клинкерные минералы, а также hydrogarnet, monosulfate (фаза $SO_4\text{-OH-AFm}$), влага, распределенная в пористом пространстве. Доля пористой структуры увеличивается с ростом содержания влаги свыше 30 г.

Таблица 3

**Содержание продуктов гидратации в портландцементе
с разным водосодержанием**

Время	CSHQ	Порт- ландит	Mono- sulfate	C ₂ ASH ₈	C ₃ AH ₆	ОН- hydrotalcite	C ₃ FS _{0,84} H _{4,32}
30 г воды							
5 мин	0,003	0	0	—	0	2,260×10 ⁻⁴	0
1 ч	3,388	1,6437	0,053	—	0,517	0,105	0,056
10 ч	23,440	11,642	0,374	—	3,904	0,790	1,277
28 дн	34,892	17,186	0,826	—	10,333	1,853	4,917
1250 дн	57,891	27,720	0,933	—	11,790	2,100	5,904
40 г воды							
5 мин	0,002	0	0	0,0023	0	2,259×10 ⁻⁴	0
1 ч	3,388	1,628	0,053	0	0,517	0,105	0,056
10 ч	23,431	11,636	0,375	0	3,903	0,790	1,277
28 дн	34,870	17,181	0,828	0	10,331	1,853	4,917
1250 дн	57,823	27,714	0,935	0	11,787	2,101	5,904
50 г воды							
5 мин	0,002	0	0	0,00193	0	2,259×10 ⁻⁴	0
1 ч	3,388	1,613	0,054	0	0,517	0,105	0,056
10 ч	23,426	11,628	0,375	0	3,903	0,791	1,277
28 дн	34,857	17,176	0,830	0	10,330	1,853	4,917
1250 дн	57,783	27,709	0,937	0	11,785	2,101	5,904

Отсутствие традиционно используемых добавок, в частности calcite, lime, anhydrite, gypsum, hemihydrate, K₂SO₄, не привело к существенному изменению доли основных продуктов: CSHQ и portlandite. Однако в связующей смеси бетонов даже после значительного периода твердения обнаруживаются нерастворимые клинкерные минералы, достигающие 5-й части общего содержания, и отсутствует этtringит.

Заключение

Таким образом, исходный минералогический состав и количественное содержание играют важную роль в формировании продуктов гидратации связующих бетонов. Показано, что к доминирующим фазам исследуемого твердеющего портландцемента относятся: гель CSHQ сложного состава, portlandite, нерастворимые клинкерные минералы, а также hydrogarnet, monosulfate (фаза SO₄_OH_AFm), влага, распределенная в пористом пространстве. Доля пористой структуры возрастает с увеличением содержания влаги свыше 30 г. Отсутствие традиционно используемых добавок, в частности calcite, lime, anhydrite, gypsum, hemihydrate, K₂SO₄, не привело к существенному изменению доли основных продуктов: CSHQ и portlandite. Однако в связующей смеси бетонов

даже после значительного периода твердения обнаруживаются нерастворимые клинкерные минералы, достигающие 5-й части общего содержания, и отсутствует эттрингит.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Lothenbach B., Wimmerfeld F. Thermodynamic modelling of the hydration of Portland cement // *Journal of Cement and Concrete Research*. 2006. V. 36. № 2. P. 209–226.
2. Lothenbach B., Le Saout G., Gallucci E., Scrivener K. Influence of limestone on the hydration of Portland cements // *Cement and Concrete Research*. 2008. V. 38. P. 848–860.
3. Lothenbach B., Le Saout G., Ben Haha M., Figi R., Wieland E. Hydration of a low-alkali CEM III/B-SiO₂ cement (LAC) // *Journal of Cement and Concrete Research*. 2012. V. 42. № 2. P. 410–423.
4. Ben Haha M., De Weerd K., Lothenbach B. Quantification of the degree of reaction of fly ash // *Journal of Cement and Concrete Research*. 2010. V. 40. № 11. P. 1620–1629.
5. Ben Haha M., Le Saout G., Wimmerfeld F., Lothenbach B. Influence of activator type on hydration kinetics, hydrate assemblage and microstructural development of alkali activated blast-furnace slags // *Journal of Cement and Concrete Research*. 2011. V. 41. № 3. P. 301–310.
6. Pelletier-Chaignat L., Wimmerfeld F., Lothenbach B., Müller C.J. Beneficial use of limestone filler with calcium sulfoaluminate cement // *Construction and Building Materials*. 2012. V. 26. № 1. P. 619–627.
7. Pelletier-Chaignat L., Wimmerfeld F., Lothenbach B., Le Saout G., Müller C.J., Famy C. Influence of the calcium sulphate source on the hydration mechanism of Portland cement-calcium sulfoaluminate clinker-calcium sulphate binders // *Cement and Concrete Composites*. 2011. V. 33. № 5. P. 551–561.
8. Wimmerfeld F., Lothenbach B. Hydration of calcium sulfoaluminate cements — Experimental findings and thermodynamic modelling // *Journal of Cement and Concrete Research*. 2010. V. 40. № 8. P. 1239–1247.
9. De Weerd K., Ben Haha M., Le Saout G., Kjellsen K.O., Justnes H., Lothenbach B. Hydration mechanisms of ternary Portland cements containing limestone powder and fly ash // *Journal of Cement and Concrete Research*. 2011. V. 41. № 3. P. 279–291.
10. Kunther W., Skibsted J., Lothenbach B. Influence of the Ca/Si ratio of the C–S–H phase on the interaction with sulfate ions and its impact on the ettringite crystallization pressure // *Cement and Concrete Research*. 2015. V. 69. P. 35–49.
11. *Gibbs Energy Minimization Software for Geochemical Modeling*. URL: <https://gems.web.psi.ch>
12. Kulik D.A., Wagner T., Dmytrieva S.V., Kosakowski G., Hingerl F.F., Chudnenko K.V., Berner U. GEM-Selektor geochemical modeling package: revised algorithm and GEMS3K numerical kernel for coupled simulation codes // *Computational Geosciences*. 2013. V. 17. № 1. P. 1–24.
13. Wagner T., Kulik D.A., Hingerl F.F., Dmytrieva S.V. GEM-Selektor geochemical modeling package: TSolMod library and data interface for multicomponent phase models // *Canadian Mineralogist*. 2012. V. 50. P. 1173–1195.
14. Matschei T. Thermodynamics of Cement Hydration. Thesis. Doctor of Philosophy // University of Aberdeen Department of Chemistry. 2007. December. 222 p.
15. Zhuangzhuang Liu, Aimin Sha, Liqun Hu, Yongwei Lu, Wenxiu Jiao, Zheng Tong, Jie Gao. Kinetic and thermodynamic modeling of Portland cement hydration at low temperatures // *Journal of Chemical Papers*. 2017. V. 71. № 4. P. 741–751.
16. Abzaev Yu.A., Gnyrya A.I., Korobkov S.V., Gauss K.S. Phase analysis of hydrated Portland cement // *IOP Conf. Series: Earth and Environmental Science*. 2018. V. 193. 012001.

REFERENCES

1. Lothenbach B., Wimmerfeld F. Thermodynamic modelling of the hydration of Portland cement. *Journal of Cement and Concrete Research*. 2006. V. 36. No. 2. Pp. 209–226.
2. Lothenbach B., Le Saout G., Gallucci E., Scrivener K. Influence of limestone on the hydration of Portland cements. *Cement and Concrete Research*. 2008. V. 38. Pp. 848–860.

3. Lothenbach B., Le Saout G., Ben Haha M., Figi R., Wieland E. Hydration of a low-alkali CEM III/B-SiO₂ cement (LAC). *Journal of Cement and Concrete Research*. 2012. V. 42. No. 2. Pp. 410–423.
4. Ben Haha M., De Weerd K., Lothenbach B. Quantification of the degree of reaction of fly ash. *Journal of Cement and Concrete Research*. 2010. V. 40. No. 11. Pp. 1620–1629.
5. Ben Haha M., Le Saout G., Winnefeld F., Lothenbach B. Influence of activator type on hydration kinetics, hydrate assemblage and microstructural development of alkali activated blast-furnace slags. *Journal of Cement and Concrete Research*. 2011. V. 41. No. 3. Pp. 301–310.
6. Pelletier-Chaignat L., Winnefeld F., Lothenbach B., Müller C.J. Beneficial use of limestone filler with calcium sulphoaluminate cement. *Construction and Building Materials*. 2012. V. 26. No. 1. Pp. 619–627.
7. Pelletier-Chaignat L., Winnefeld F., Lothenbach B., Le Saout G., Müller C.J., Famy C. Influence of the calcium sulphate source on the hydration mechanism of Portland cement-calcium sulphoaluminate clinker-calcium sulphate binders. *Cement and Concrete Composites*. 2011. V. 33. No. 5. Pp. 551–561.
8. Winnefeld F., Lothenbach B. Hydration of calcium sulfoaluminate cements – Experimental findings and thermodynamic modelling. *Journal of Cement and Concrete Research*. 2010. V. 40. No. 8. Pp. 1239–1247.
9. De Weerd K., Ben Haha M., Le Saout G., Kjellsen K.O., Justnes H., Lothenbach B. Hydration mechanisms of ternary Portland cements containing limestone powder and fly ash. *Journal of Cement and Concrete Research*. 2011. V. 41. No. 3. Pp. 279–291.
10. Kunther W., Skibsted J., Lothenbach B. Influence of the Ca/Si ratio of the C–S–H phase on the interaction with sulfate ions and its impact on the ettringite crystallization pressure. *Cement and Concrete Research*. 2015. V. 69. Pp. 35–49.
11. Gibbs Energy Minimization software for geochemical modeling. Available: <https://gems.web.psi.ch>
12. Kulik D.A., Wagner T., Dmytrieva S.V., Kosakowski G., Hingerl F.F., Chudnenko K.V., Berner U. GEM-Selektor geochemical modeling package: revised algorithm and GEMS3K numerical kernel for coupled simulation codes. *Computational Geosciences*. 2013. V. 17. No. 1. Pp. 1–24.
13. Wagner T., Kulik D.A., Hingerl F.F., Dmytrieva S.V. GEM-Selektor geochemical modeling package: TSolMod library and data interface for multicomponent phase models. *Canadian Mineralogist*. 2012. V. 50. Pp. 1173–1195.
14. Matschei T. Thermodynamics of cement hydration. PhD Thesis. University of Aberdeen Department of Chemistry. 2007. 222 p.
15. Zhuangzhuang Liu, Aimin Sha, Liqun Hu, Yongwei Lu, Wenxiu Jiao, Zheng Tong, Jie Gao. Kinetic and thermodynamic modeling of Portland cement hydration at low temperatures. *Journal of Chemical Papers*. 2017. V. 71. No. 4. Pp. 741–751.
16. Abzaev Yu.A., Gnyrya A.I., Korobkov S.V., Gauss K.S. Phase analysis of hydrated Portland cement. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*. 2018. V. 193. 012001.

Сведения об авторах

Абзаев Юрий Афанасьевич, докт. физ.-мат. наук, профессор, Томский государственный архитектурно-строительный университет, 634003, г. Томск, пл. Соляная, 2, abzaev2010@yandex.ru

Коробков Сергей Викторович, канд. техн. наук, доцент, Томский государственный архитектурно-строительный университет, 634003, г. Томск, пл. Соляная, 2, korobkov_1973@mail.ru

Аниканова Любовь Александровна, канд. техн. наук, доцент, Томский государственный архитектурно-строительный университет, 634003, г. Томск, пл. Соляная, 2, kafedra_smit@tsuab.ru

Старенченко Владимир Александрович, докт. физ.-мат. наук, профессор, Томский государственный архитектурно-строительный университет, 634003, г. Томск, пл. Соляная, 2, star@tsuab.ru

Authors Details

Yurii A. Abzaev, DSc, Professor, Tomsk State University of Architecture and Building, 2, Solyanaya Sq., 634003, Tomsk, Russia, abzaev2010@yandex.ru

Sergei V. Korobkov, PhD, A/Professor, Tomsk State University of Architecture and Building, 2, Solyanaya Sq., 634003, Tomsk, Russia, korobkov_1973@mail.ru

Lyubov A. Anikanova, PhD, A/Professor, Tomsk State University of Architecture and Building, 2, Solyanaya Sq., 634003, Tomsk, Russia, kafedra_smit@tsuab.ru

Vladimir A. Starenchenko, DSc, Professor, Tomsk State University of Architecture and Building, 2, Solyanaya Sq., 634003, Tomsk, Russia, star@tsuab.ru