

## СТРОИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И ИЗДЕЛИЯ

УДК: 669.24' 783:539.389.1

*АБЗАЕВ ЮРИЙ АФАНАСЬЕВИЧ, докт. физ.-мат. наук, профессор,  
abzaev@tsuab.ru*

*САФРОНОВ ВЛАДИМИР НИКОЛАЕВИЧ, канд. техн. наук, доцент,  
v.n.safronov@mail.ru*

*САРКИСОВ ЮРИЙ СЕРГЕЕВИЧ, докт. техн. наук, профессор,  
yu-s-sarkisov@yandex.ru*

*ГОРЛЕНКО НИКОЛАЙ ПЕТРОВИЧ, докт. техн. наук, профессор,  
Gorlen52@mail.ru*

*КУГАЕВСКАЯ СОФЬЯ АЛЕКСАНДРОВНА, ст. преподаватель,  
samano@mail.ru*

*КОВАЛЕВА МАРГАРИТА АЛЕКСЕЕВНА, канд. техн. наук, доцент,  
xomoch28@yandex.ru*

*ЕРМИЛОВА ТАТЬЯНА АЛЕКСАНДРОВНА, студентка,  
ermilovatatyana@icloud.com*

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

### **МАГНИТНОЕ ПОЛЕ КАК ФАКТОР УПРАВЛЕНИЯ СВОЙСТВАМИ И СТРУКТУРОЙ ЦЕМЕНТНЫХ СИСТЕМ. ЧАСТЬ 2. СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МИНЕРАЛОВ В РАННИЕ СРОКИ ТВЕРДЕНИЯ ЦЕМЕНТНОГО КАМНЯ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ МАГНИТНО-АКТИВИРОВАННОЙ ВОДЫ ЗАТВОРЕНИЯ\***

В работе проведен количественный фазовый анализ цементного камня после суток естественного твердения в исходном состоянии после 15 и 25 циклов магнитной обработки воды. Количественный фазовый анализ проводился на основе метода Ритвельда. С целью анализа влияния магнитной обработки воды затворения портландцемента на механизмы формирования фаз при твердении цементного теста, особенностей структурного состояния компонентов портландцемента в работе исследовался не только количественный фазовый состав, но и проведены расчеты энергии кристаллических решеток фаз портландцемента. Энергии решеток фаз портландцемента на начальной стадии твердения (одни сутки) вычислялись из первых принципов при 0 К. Установлено, что цикловая магнитная обработка воды затворения цемента оказывает влияние на количественный состав фаз,

---

\* Исследование выполнено при финансовой поддержке работ по гранту Министерства образования и науки Российской Федерации.

а также существенное изменение полной энергии кристаллических решеток после 15 и 25 циклов магнитной обработки по сравнению с исходным состоянием.

**Ключевые слова:** активированная воды затворения; цементный камень; метод Ритвельда; параметры решетки; кристаллическое строение; количественный фазовый анализ.

*YURI A. ABZAEV, DSc, Professor,*

*abzaev@tsuab.ru*

*VLADIMIR N. SAFRONOV, PhD, A/Professor,*

*v.n.safronov@mail.ru*

*YURII S. SARKISOV, DSc, Professor,*

*yu-s-sarkisov@yandex.ru*

*NIKOLAI P. GORLENKO, DSc, Professor,*

*Gorlen52@mail.ru*

*SOF"YA A. KUGAEVSKAYA, Senior Teacher,*

*samano@mail.ru*

*MARGARITA A. KOVALEVA, PhD, A/Professor,*

*xomoch28@yandex.ru*

*TAT"YANA A. ERMILOVA, Student,*

*ermilovatatyana@icloud.com*

*Tomsk State University of Architecture and Building,*

*2, Solyanaya Sq., 634003, Tomsk, Russia*

## **MAGNETIC FIELD AS CONTROL FOR THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF CEMENT SYSTEMS. PART 2. STRUCTURAL PROPERTIES OF MINERALS AT CEMENT BRICK EARLY HARDENING USING MIXING WATER MAGNETIC ACTIVATION**

The paper presents the quantification phase analysis of cement brick after a day of its natural hardening in the original state and after 15 and 25 cycles of magnetic activation of mixing water. The phase analysis is carried out using the Rietveld method. The energy computations of crystal lattices of Portland cement phases are provided to analyze the influence of magnetic activation on phase formation at cement paste hardening and the structural state of Portland cement components. Energies of Portland cement phase lattices are computed at 0 K at the initial stage of hardening (for one day). It is shown that the magnetic activation of mixing water has a considerable effect on the quantitative phase composition and the crystal lattice energy after 15 and 25 cycles of magnetic activation in comparison with the original state of cement system.

**Keywords:** activated mixing water; cement brick; Rietveld method; lattice parameters; crystalline structure; quantification phase analysis

### **Введение**

В литературе неоднозначно оценивается влияние магнитной обработки воды и водных растворов на свойства цементных систем и механизм гидратации портландцемента и твердения цементного камня. Применение современных методов количественного фазового анализа и расчетов из первых принципов

пов энергии решеток фаз позволяет с большей определенностью оценить влияние магнитной обработки воды на механизмы твердения портландцемента.

В работе объектом исследования был выбран портландцемент М-400 Топкинского завода, использовалась вода, обработанная магнитным полем с различным числом циклов, в частности 15 и 25 циклов. Проведено исследование количественного фазового состава, энергии кристаллических решеток фаз и энергии Ферми после суток естественного твердения цементного камня. В работе осуществлен экспериментальный поиск особенностей количественного состава фаз портландцемента, а также представлен анализ изменения энергии решеток фаз, обусловленного структурными особенностями решеток. В литературе отсутствуют рентгеноструктурные исследования КФА фаз на основе метода Ритвельда на начальных стадиях твердения цементного камня с описанием кристаллохимических свойств исходных фаз, расчетов энергии решеток фаз, энергии Ферми для условий использования намагниченной цикловой магнитно-активированной воды затворения портландцемента.

Целью настоящей работы является детальное изучение структурного состояния, энергии решеток фаз цементного камня на начальной стадии его твердения и влияния на этот процесс режимов цикловой магнитной активации воды затворения.

#### **Количественный фазовый анализ и расчеты из первых принципов энергии решеток фаз портландцемента**

В работе проведены рентгеноструктурные исследования цементного камня, полученного при затворении портландцемента водой без магнитной обработки и на основе активированной воды после 15 и 25 циклов магнитной обработки. Рентгеноструктурный анализ цементных образцов проводился после суточного твердения на дифрактометре ДРОН4-07, который был модифицирован к цифровой обработке сигнала. Съёмки производились на медном излучении ( $K_{\alpha}$ ) по схеме Брегга – Брентано с шагом  $0,02^{\circ}$ , временем экспозиции в точке 1 с и в угловом диапазоне  $17-92^{\circ}$ . Напряжение на рентгеновской трубке составляло 30 кВ, ток пучка 25 мА.

Количественный фазовый анализ (КФА) объекта исследования проводился на основе модифицированного метода Ритвельда, учитывающего энергию решеток фаз материала [1]. Энергия решеток в КФА анализировалась в рамках молекулярной динамики. В методе Ритвельда оценивается вклад интенсивностей отдельных решеток фаз в интегральную интенсивность на основе минимизации относительной разности интегральной и экспериментальной интенсивностей. В методе рассматривается максимальный вклад в интенсивность при вариации профильных структурных параметров решеток (координаты атомов, параметры решеток) фаз. Интенсивность фонового излучения на дифрактограммах аппроксимировалась многочленом 20-й степени. Расчеты интенсивности самосогласованным образом позволяют оценить долю вклада отдельных фаз в интегральную интенсивность, а также структурные параметры решеток [1, 3]. При КФА была достигнута хорошая степень сходимости расчетных интегральных интенсивностей (рис. 1–3) к экспериментальным.

Критерии сходимости оказались равными  $R_{wp} = 6,64 \%$  для исходного состояния (рис. 1),  $R_{wp} = 6,88 \%$  для цементного камня, затворенного на воде после 15 циклов магнитной обработки (рис. 2, а), и, наконец,  $R_{wp} = 6,89 \%$  для цементного камня после 25 циклов магнитной обработки воды затворения (рис. 3, а). Для проведения КФА методом Ритвельда были использованы эталонные фазы, список которых приведен в табл. 1, который был составлен на основе базы структурных данных COD цементных материалов [2]. В работе использовалась полная структурная информация эталонов: пространственная группа и класс, параметры решетки, относительные координаты атомов. В полнопрофильном методе [3] с целью максимальной сходимости интегральной интенсивности к экспериментальной уточнялись все структурные параметры: параметры решетки фаз, относительные координаты атомов (в пределах 10 %), а также профильные параметры: полуширина, интенсивность рефлексов, фон и т. д. Результаты количественного фазового анализа приведены в табл. 1–3.

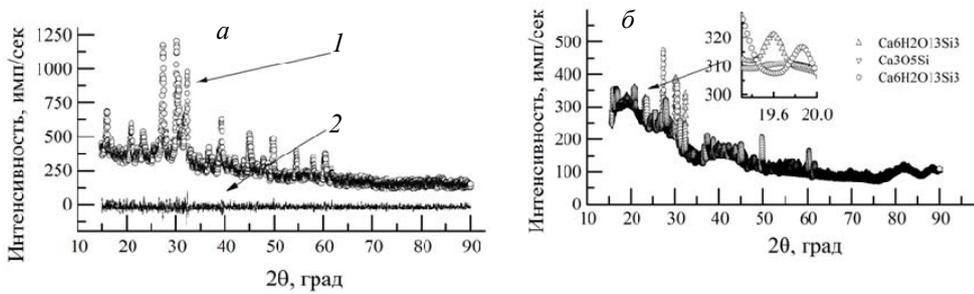


Рис. 1. Количественный фазовый анализ цементного камня после суток твердения в исходном состоянии:

а: 1 – экспериментальная дифрактограмма; 2 – разность между расчетной и экспериментальной интенсивностями; б – теоретические интенсивности отдельных фаз:  $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$  (карточка № 10, табл. 1),  $\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$ ,  $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$  (карточка № 16, табл. 1)

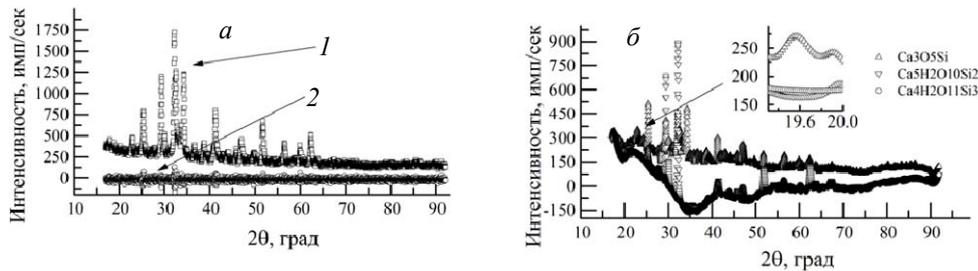


Рис. 2. Количественный фазовый анализ цементного камня после суток твердения и 15 циклов магнитной обработки:

а: 1 – экспериментальная дифрактограмма; 2 – разность между расчетной и экспериментальной интенсивностями; б – теоретические интенсивности отдельных фаз:  $\text{Ca}_4\text{H}_2\text{O}_{11}\text{Si}_3$ ,  $\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$ ,  $\text{Ca}_5\text{H}_2\text{O}_{10}\text{Si}_2$

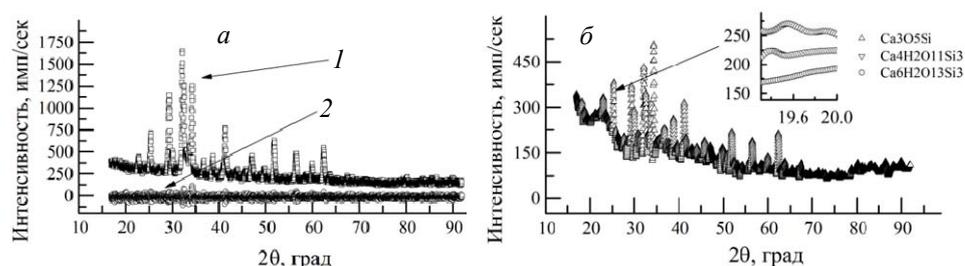


Рис. 3. Количественный фазовый анализ цементного камня после суток твердения и 15 циклов магнитной обработки:

*a*: 1 – экспериментальная дифрактограмма; 2 – разность между расчетной и экспериментальной интенсивностями; *б* – теоретические интенсивности отдельных фаз:  $\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$ ,  $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$ ,  $\text{Ca}_4\text{H}_2\text{O}_{11}\text{Si}_3$

Таблица 1

**Список фаз из базы COD, использованных для количественного фазового анализа**

№ п/п	Карточки	Хим. формула	Хим. имя	Пространств. группа и класс
1	96-100-1769	$\text{CaH}_2\text{O}_2$	Portlandite	P-3m1, trigonal
2	96-230-0259	$\text{CaH}_4\text{O}_6\text{S}$	Gypsum	C2/c, monoclinic
3	96-500-0041	$\text{CaO}_4\text{S}$	Anhydrite	Cmcm, orthorhombic
4	96-900-0106	$\text{C}_2\text{CaMgO}_6$	Dolomite	R-3c, trigonal
5	96-900-0966	$\text{CCaO}_3$	Calcite	R-3c, trigonal 1
6	96-900-4097	$\text{CaO}_4\text{S}$	Anhydrite	Cmcm, orthorhombic
7	96-900-6173	$\text{CaO}_3\text{Ti}$	Perovskite	Pmmm, orthorhombic
8	96-900-6695	$\text{CaO}$	Lime	Fm-3m, cubic
9	96-900-7499	$\text{Al}_2\text{O}_3$	Corundum	R-3c, trigonal
10	96-900-9534	$\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$	Dellaite	P-1, triclinic
11	96-901-1114	$\text{AlCa}_2\text{FeO}_5$	Brownmillerite	Ima2, orthorhombic
12	96-901-1877	$\text{Ca}_5\text{H}_2\text{O}_{10}\text{Si}_2$	Reinhardbraunsite	P2/m, monoclinic
13	96-901-2792-	$\text{Ca}_2\text{O}_4\text{Si}$	Larnite	P2/m, monoclinic
14	96-901-4241	$\text{Ca}_4\text{H}_2\text{O}_{11}\text{Si}_3$	Trabzonite	Ama2, orthorhombic
15	96-901-4360	$\text{Al}_2\text{Ca}_3\text{O}_6$	Tricalcium Aluminate	Pm-3m, cubic
16	96-901-5896	$\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$	Dellaite	P-1, triclinic
17	96-901-6014	$\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$	Brownmillerite	Pmmm, orthorhombic
18	96-901-6126	$\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$	Alite	P-1, triclinic

В работе рассчитывались энергии решеток фаз  $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$  (Dellaite),  $\text{Ca}_2\text{FeAlO}_5$ ,  $\text{Ca}_2\text{O}_4\text{Si}$ ,  $\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$  (Alite). Энергии решеток вычислены с помощью градиентного псевдопотенциала электронной плотности (GGA) с учетом спина электронов при 0 К. Детали вычислительного кода приведены в работе [4]. Энергии решеток, а также энергия Ферми приведены в табл. 1–3. Волновые функции валентных электронов анализировались в базисе плоских волн с ра-

диусом обрезания кинетической энергии в 330 эВ. В этом случае сходимость полной энергии составляла  $\sim 0,5 \cdot 10^{-6}$  эВ/атом.

### Обсуждение результатов

Влияние магнитно-активированной воды затворения на структурные свойства исследовалось после суток естественного твердения. Предполагалось, что в этом случае эффект от магнитно-активированной воды затворения проявится в наибольшей степени.

КФА показал, что в исходном состоянии цементный камень состоит из фаз:  $\text{CaH}_2\text{O}_2$ ,  $\text{CaH}_4\text{O}_6\text{S}$ ,  $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$ ,  $\text{AlCa}_2\text{FeO}_5$ ,  $\text{Ca}_5\text{H}_2\text{O}_{10}\text{Si}_2$ ,  $\text{Ca}_2\text{O}_4\text{Si}$ ,  $\text{Ca}_4\text{H}_2\text{O}_{11}\text{Si}_3$ ,  $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$ ,  $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ ,  $\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$  (табл. 2). Количественный состав фаз цементного камня определяется по относительной доле интенсивностей фаз, приведенных в табл. 2. Вклад в интегральную интенсивность от указанных фаз составляет практически 99 %. Из данных таблицы видно также, что после суток естественного твердения в цементном камне доминируют  $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$  (Dellaite) и  $\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$  (Alite). В цементном камне после суток твердения (15 циклов магнитной активации воды) присутствуют:  $\text{AlCa}_2\text{FeO}_5$ ,  $\text{Ca}_5\text{H}_2\text{O}_{10}\text{Si}_2$ ,  $\text{Ca}_2\text{O}_4\text{Si}$ ,  $\text{Ca}_4\text{H}_2\text{O}_{11}\text{Si}_3$ ,  $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$ ,  $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ ,  $\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$  (табл. 3). Суммарная интенсивность от перечисленных фаз составляет свыше 99 %. Доминирующей фазой является  $\text{Ca}_2\text{O}_4\text{Si}$ , вклад которой в интегральную интенсивность равен 65,66 %. После 25 циклов магнитной обработки воды –  $\text{AlCa}_2\text{FeO}_5$ ,  $\text{Ca}_5\text{H}_2\text{O}_{10}\text{Si}_2$ ,  $\text{Ca}_2\text{O}_4\text{Si}$ ,  $\text{Ca}_4\text{H}_2\text{O}_{11}\text{Si}_3$ ,  $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$ ,  $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ ,  $\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$  (табл. 3). Доминирует также фаза  $\text{Ca}_2\text{O}_4\text{Si}$ , вклад которой в интегральную интенсивность равен 66,14 %. Количественный состав фаз в исследуемых объектах при всех состояниях определен с высокой степенью сходимости. Списочный состав фаз в цементном камне после 15 и 25 циклов магнитной обработки воды затворения одинаков, но различается их количественное содержание, которое оценивается по относительной величине интенсивностей (табл. 3). Доля фаз  $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$ ,  $\text{Ca}_2\text{O}_4\text{Si}$  и  $\text{AlCa}_2\text{FeO}_5$  возросла примерно в 1,5 раза с ростом числа циклов от 15 и до 25, но доля  $\text{Ca}_5\text{H}_2\text{O}_{10}\text{Si}_2$ ,  $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$  уменьшалась. Содержание остальных фаз мало изменилось. Интересно отметить, что доля  $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$  (Dellaite) резко уменьшилась под влиянием магнитной обработки воды до 15 циклов. Обнаруживается также уменьшение содержания  $\text{Ca}_2\text{O}_4\text{Si}$  (Larnite),  $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$  (Brownmillerite). После магнитной обработки в цементном камне не обнаруживаются фазы  $\text{CaH}_2\text{O}_2$ ,  $\text{CaH}_4\text{O}_6\text{S}$ , которые наблюдаются в исходном состоянии (табл. 2). Результаты свидетельствуют, что магнитная обработка воды затворения портландцемента подавляет структурирование фаз  $\text{CaH}_2\text{O}_2$ ,  $\text{CaH}_4\text{O}_6\text{S}$  и ускоряет фазу  $\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$ . Причем в значительной степени ускоряется структурирование решетки Alite ( $\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$ ). Относительное содержание Alite после магнитной обработки воды возросло практически в 4,5 раза (табл. 2, 3). Уменьшается интенсивность структурирования фаз  $\text{Ca}_2\text{O}_4\text{Si}$  и  $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ . Таким образом, магнитная обработка водной среды по цикловой технологии оказывает заметное влияние на процессы при подготовке цементного камня и последующую интенсивность структурирования его в течение суток твердения.



Таблица 3

**Количественный фазовый состав цементного камня  
при различных циклах магнитной активации воды, сутки твердения**

		15 циклов				25 циклов			
Карточка	Хим. формула	Интенсивность, %	Энергия, $1,602 \cdot 10^{-19}$ Дж	Энергия Ферми, $1,602 \cdot 10^{-19}$ Дж	Карточка	Хим. формула	Интенсивность, %	Энергия, $1,602 \cdot 10^{-19}$ Дж	Энергия Ферми, $1,602 \cdot 10^{-19}$ Дж
96-900-9534	$\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$	5,69	-23860,708	4,904	96-900-9534	$\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$	9,09	-23808,595	4,447
96-901-1114	$\text{AlCa}_2\text{FeO}_5$	2,95	-22218,729	-2,354	96-901-1114	$\text{AlCa}_2\text{FeO}_5$	4,84	-22387,9425	2,3120
96-901-1877	$\text{Ca}_3\text{H}_2\text{O}_{10}\text{Si}_2$	6,56			96-901-1877	$\text{Ca}_3\text{H}_2\text{O}_{10}\text{Si}_2$	3,16		
96-901-2792	$\text{Ca}_2\text{O}_4\text{Si}$	2,05	-16044,830	6,011	96-901-2792	$\text{Ca}_2\text{O}_4\text{Si}$	3,45		
96-901-4241	$\text{Ca}_4\text{H}_2\text{O}_{11}\text{Si}_3$	6,960			96-901-4241	$\text{Ca}_4\text{H}_2\text{O}_{11}\text{Si}_3$	5,74		
96-901-5896	$\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$	6,04			96-901-5896	$\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$	5,28		
96-901-6014	$\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$	3,45			96-901-6014	$\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$	1,91		
96-901-6126	$\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$	65,66	-92972,562	5,448	96-901-6126	$\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$	66,14	-92694,515	5,610
		99,36					99,61		

В работе анализ влияния магнитной обработки воды на интенсивность структурирования фаз цементного камня рассматривается также на основе расчетов полной энергии кристаллических решеток отдельных фаз из первых принципов. КФА полнопрофильным уточнением Ритвельда позволяет определить полную структурную информацию решеток фаз. Структурные характеристики решеток являются входными данными для определения квантово-химическими методами полной энергии с помощью программного комплекса, подробное описание которого приведено в работе [4]. Вследствие большой трудоемкости квантовохимические расчеты энергии решеток были проведены только для фаз  $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$ ,  $\text{AlCa}_2\text{FeO}_5$ ,  $\text{Ca}_2\text{O}_4\text{Si}$ ,  $\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$ . В табл. 2, 3 приведены результаты расчетов, а также энергии Ферми. Предполагается, что решетки стабильны после суток твердения в исходном состоянии (без магнитной обработки воды затворения). Анализ результатов показал, что после 15 циклов магнитной обработки воды затворения энергия решеток  $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$ ,  $\text{AlCa}_2\text{FeO}_5$ ,  $\text{Ca}_2\text{O}_4\text{Si}$ ,  $\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$  резко уменьшилась. Магнитная обработка воды затворения до 25 циклов неоднозначно сказывается на изменении фаз: если энергия решеток  $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$  и  $\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$  возросла, то энергия  $\text{AlCa}_2\text{FeO}_5$ , наоборот, уменьшилась. Необходимо отметить, что исследуемые решетки находятся в стабильном состоянии. Для решетки  $\text{Ca}_2\text{O}_4\text{Si}$  энергия не приводится, т. к. для нее не выполнено самосогласование энергии по критериям сходимости. Энергия Ферми исследуемых решеток (табл. 2, 3) существенно меняется в результате магнитной обработки воды затворения. Эти данные свидетельствуют о том, что в кристаллических структурах меняется электронная плотность на атомах решеток в процессе твердения, наблюдается эффект атомной зарядовой поляризации, на которую оказывает влияние магнитная обработка водной среды по цикловой технологии.

Анализ результатов показывает, что в решетках  $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$  с разным состоянием (исходное, после 15 и 25 циклов магнитной обработки воды) наблюдается различное пространственное распределение атомов. В результате перераспределения атомов понижается энергия, но содержание фазы в цементном камне существенно уменьшается. Решетка  $\text{AlCa}_2\text{FeO}_5$  вследствие понижения энергии оказалась более стабильной, причем содержание этой фазы в цементном камне мало изменилось. Наиболее сильно эффект магнитной активации воды проявился на решетке  $\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$  (Alite). Разному пространственному распределению атомов в стабильной решетке с разным состоянием (исходное и 15 циклов) соответствует значительная разница энергии, в результате доля фазы Alite значительно возрастает. Дальнейшее увеличение числа циклов магнитной обработки воды, по нашему мнению, оказывает вторичное действие: перераспределение атомов в сформированной фазе  $\text{Ca}_3\text{O}_5\text{Si}$  цементного камня лишь повышает полную энергию решетки. Данные по энергии Ферми в исследуемых фазах с разным состоянием указывают на то, что стабильным решеткам соответствует разная зарядовая поляризация на атомах решеток. Можно полагать, что атомная анизотропия зарядов в магнитно-активированной водной среде оказывает влияние на механизмы структурных изменений решеток фаз.

Таким образом, количественный фазовый анализ цементного камня на основе полнопрофильного уточнения Ритвельда показал, что цикловая магнитная активация воды затворения оказывает заметное влияние на количественное содержание фаз в цементном камне и, следовательно, на его твердение. Эффект магнитной обработки воды в течение 15 циклов проявляется в существенной интенсификации структурирования фазы Alite. Ее доля в цементном камне резко возрастает, а полная энергия решетки значительно уменьшается, почти на ~270 эВ. К интересным фактам относится изменение содержания фазы  $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{13}\text{Si}_3$  с увеличением числа циклов магнитной обработки: более стабильной решетке соответствует ее меньшее содержание в цементном камне.

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Полнопрофильный рентгеноструктурный анализ клинкерного минерала S4AF* / Ю.А. Абзаев, Ю.С. Саркисов, А.А. Клопотов, В.Д. Клопотов, Д.А. Афанасьев // Вестник Томского государственного архитектурно-строительного университета – 2012. – № 4. – С. 200–209.
2. *Crystallography Open Database*. – Условия доступа : [www.crystallography.net](http://www.crystallography.net)
3. *Основы рентгеноструктурного анализа в материаловедении* / А.А. Клопотов, Ю.А. Абзаев, А.И. Потехаев, О.Г. Волокитин. – Томск : Изд-во ТГАСУ, 2012. – 275 с.
4. *Абзаев, Ю.А.* Первопринципные расчеты концентрационной зависимости упругих параметров в монокристаллах  $\text{Ni}_3(\text{Ge}_{1-x}\text{Al}_x)$  / Ю.А. Абзаев, М.Д. Старостенков, А.А. Клопотов // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2014. – Т. 11. – № 1. – С. 56–62.

#### REFERENCES

1. *Abzaev Yu.A., Yu.S. Sarkisov, Klopotov A.A., Klopotov V.D. Afanasiev D.* Polnoprofil'nyi rentgenostrukturalnyi analiz klinkernogo minerala S4AF [Rietveld method for clinker mineral S4AF]. *Vestnik TSUAB*. 2012. No. 4. Pp. 200–209. (rus)
2. *Crystallography Open Database* Available at : [www.crystallography.net](http://www.crystallography.net)
3. *Klopotov A.A., Abzaev Yu.A., Potekhaev A.I., Volokitin O.G.* Osnovy rentgenostruktural'nogo analiza v materialovedenii [Principles of X-ray diffraction analysis in materials science]. Tomsk : TSUAB Publ., 2012. 275 p. (rus)
4. *Abzaev Yu.A., Starostenkov M.D., Klopotov A.I.* Pervoprintsipnye rascheti kontsentratsionnoi zavisimosti uprugikh modulei v monokristallakh  $\text{Ni}_3(\text{Ge}_{1-x}\text{Al}_x)$  [Computations of concentration dependence of elastic moduli in single crystal  $\text{Ni}_3(\text{Ge}_{1-x}\text{Al}_x)$ ]. *Basic Problems of Material Science*. 2014. V. 11. No. 1. Pp. 56–62. (rus)