

Міністерство освіти і науки України
Національний університет
«Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»

Тези

**76-ї наукової конференції професорів,
викладачів, наукових працівників,
аспірантів та студентів університету**

ТОМ 2

14 травня – 23 травня 2024 р.

А.Т. Лобурець, к.ф.-м.н., доцент
С.О. Заїка, старший викладач
А.А. Єпремян, студент гр 103Б
С.М. Жданов, студент гр 103Б
Національний університет
«Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»

ЗАСТОСУВАННЯ НАНОТЕХНОЛОГІЙ ПРИ СТВОРЕННІ НОВИХ КОНСТРУКЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ

Бетон є складним наноструктурним матеріалом. Це найпоширеніший будівельний матеріал, відомий з давніх часів. Він складається з аморфної фази і кристалів розміром від нано-до мікрометра та зв'язаної води. Властивості бетону формуються на базі властивостей попередніх осередків меншого розміру [1], тобто у багатомасштабному діапазоні.

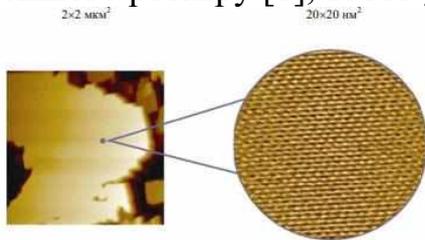


Рис. 1. Аморфна фаза гідросилікату кальцію $\text{CaO-SiO}_2\text{-H}_2\text{O}$ є «клеєм», який скріплює компоненти бетону [1] і він уже сам по собі є наноматеріалом. Нанорозмірна структура С–S–Н, кристалізована на кальцитній підкладці та виявлена за допомогою АСМ (атомно-силового мікроскопа) [1]

З точки зору підходу конструювання нових матеріалів «знизу вгору», бетон у нанодіапазоні є композитом молекулярних структур, утворених поверхнями заповнювачів, волокон та хімічними зв'язками, що взаємодіють за допомогою локальних хімічних реакцій, міжмолекулярних сил та *внутрішньофазної дифузії*. Властивістю, що характеризує цей діапазон, є молекулярна структура, поверхневі функціональні групи, а також довжина зв'язку, енергія і щільність. Структура аморфної та кристалічної фаз і міжфазних границь входить до згаданого вище діапазону. Властивості та процеси в нанодіапазоні визначають взаємодіями між частинками та фазами в мікромасштабі та міжексплуатаційними навантаженнями і навколишнім середовищем у макромасштабі. Процеси, що відбуваються в наномасштабі, впливають на технічні властивості та характеристики матеріалу в цілому [2].

Нанонаука та наноінженерія бетону, які іноді називають наномодифікуванням, – це терміни загального користування, які описують два головні напрямки нанотехнології бетону [3]. Наномасштаб має справу з вимірюванням та визначенням характеристик нано- та мікромасштабної структури матеріалів на основі цементу. Він необхідний для кращого розуміння впливу даної структури на властивості та характеристики макромасштабу із застосуванням передової техніки та моделювання на атомарному або молекулярному рівнях. Наноінженерія охоплює методи маніпулювання структурою на наномасштабному рівні для розробки

нового покоління оптимальних, багатфункціональних в'язучих складів з високими механічними характеристиками та зносостійкістю, а також таких нових властивостей, як пластичність та здатність до самозаліковування дефектів. Бетон можна модифікувати на нанорівні шляхом впровадження нанорозмірних блоків або об'єктів (наприклад, наночастинок і нанотрубок) для управління роботою матеріалу та додавання нових властивостей або шляхом включення молекул у цементні частинки, фази, заповнювачі та добавки (включаючи нанорозмірні).

Розвиток комп'ютерного матеріалознавства та обчислювальних технологій дозволив передбачати мікроструктуру та властивості бетону, об'єднавши фізику та хімію [4]. Моделювання на атомарному рівні (молекулярна динаміка МД) та метод мінімізації енергії надають нові можливості науці про цементі і проливають світло на нанорозмірні процеси, необхідні для розуміння властивостей матеріалів на макрорівні та формування стратегії покращення характеристик цементу. У той час як моделювання на атомарному рівні дає безпрецедентну можливість маніпулювати окремими атомами та молекулами, необхідно мати гарантію, що удосконалення, проведені на нанорівні, можуть бути переведені в корисні властивості матеріалу на макрорівні. Необхідним є вивчення взаємного впливу між нано-, мікро- і макромасштабами.

На кафедрах хімії та фізики і комп'ютерних та інформаційних технологій і систем проводяться успішні спільні дослідження процесів структуроутворення (самоорганізації) у двовимірних адсорбованих плівках, 2D дифузії та фазових переходів у гомо- та гетерофазних системах.

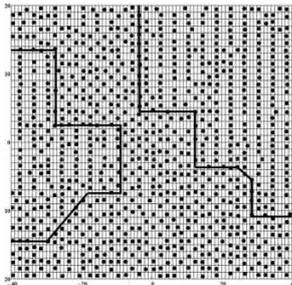


Рис. 2. Співіснуючі фази при надстехіометричному покритті літію $\theta_{Li} = 0.275$ мають чітко виражені границі. Це ознака фазового переходу першого роду. Результати одержано нами. Такі дослідження мають пряме відношення до розглянутих вище проблем нанотехнологій у будівництві. На рисунках 1 і 2 дуже чітко проявляються процеси самоорганізації у 2D плівках в бетоні і метали. Про залізобетон ми маємо надію поговорити пізніше

Література

1. Z. Bittnar, P.J.M. Bartos, J. Nemecek, V. Smilauer, J. Zeman, editors. *Nanotechnology in construction: proceedings of the NICOM3 (3rd international symposium on nanotechnology in construction)*. Prague, Czech Republic: Springer-Verlag Berlin Heidelberg; 2009, p. 438.
2. E.J. Garboczi, D.P. Bentz. *Modelling of the microstructure and transport properties of concrete*. *Construct Build Mater* 1996; 10(5): 293–300.
3. K.L. Scrivener, R.J. Kirkpatrick. *Innovation in use and research on cementitious material*. *Cem Concr Res* 2008; 38(2): 128–36.
4. E.J. Garboczi, D.P. Bentz, G.J. Frohnsdorff. *The past, present, and future of computational materials sciences of concrete*. In: *Materials science of concrete workshop (in honor of J. Francis Young)*. Proceedings. Center for Advanced-Cement-Based Materials (ACBM), Lake Shelbyville, IL; April 27–29, 2000, p. 10.