

последней с большой амплитудой могут привести к нежелательным результатам. Т.е. при этом закон движения игловода и иглы может меняться в широком диапазоне, тем самым это приводит к нарушению процесса петлеобразования.

Отмечено, что рекомендуемая конструкция кулирного клина с клиновидным резиновым амортизатором обеспечивает не только надежную работу системы петлеобразования, но и позволяет повышение производительности кругловязальной трикотажной машины.

#### Список литературы

1. Джураев А.Д., Мукимов М.М. Новый игловод кругловязальной трикотажной машины // Республиканская научно-практическая конф. Ташкент, 2010. 22-23 октября. – С.33-37.
2. Мукимов Б.М. Совершенствование конструкций и обоснование рабочих параметров петлеобразующих систем трикотажных машин: дисс. ... канд. – Ташкент, 2005. – С.75-98.
3. Мукимов Б.М., Даминов А.Д., Джураев А.Д. Расчет рабочих параметров демпфирующего клипа кругловязальной машины // Актуальные проблемы переработки льна в сырье: тезисы докладов международной конференции. – Кострома, 2002. – С. 158.
4. Махмудова Г.И. Кулирный клин кругловязальной трикотажной машины: Патент РК. 23514 от 10.12.10.

### ДОБАВКИ ДЛЯ РЕГУЛИРОВАНИЯ КАЧЕСТВЕННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЦЕМЕНТНЫХ БЕТОНОВ

Сидоренко Ю.В., Мруз Е.С.

*Самарский государственный архитектурно-строительный университет, Самара, e-mail: sm-samgasa@mail.ru*

В настоящее время в производстве цементосодержащих материалов общестроительного и специального назначения широко применяются различные добавки. Они представляют собою органические и неорганические вещества, комплексы, введение которых в сырьевые составы позволяет регулировать свойства изготавливаемого материала [1, 2]. Добавки применяются для сохранения свойств бетонов при подготовке смеси к укладке, вибрированию и твердению, для создания высокопористой структуры, снижения затрат на строительство (включая экономию цемента) и т.д. Наиболее востребованными являются следующие виды добавок. Поризующие добавки – это вещества, способствующие целенаправленному образованию в теле бетона газообразных пор. Их основное назначение – повышение морозостойкости бетонов, снижение плотности и теплопроводности легких и ячеистых бетонов. По принципу действия они бывают воздухововлекающими, пенообразующими и газообразующими. Добавки-регуляторы твердения (ускорители и замедлители) применяются при бетонировании бетонных и железобетонных конструкций. Они позволяют сократить выдержку отформованных изделий в формах, уменьшить требуемое количество форм. Противоморозные добавки нашли широкое применение в ходе возведения монолитных

и сборно-монолитных бетонных и железобетонных конструкций и т.д. Такие добавки позволяют снимать опалубку без дефектов и сколов. Пластификаторы – добавки, увеличивающие подвижность (или уменьшающие жесткость) бетонных смесей без снижения прочности бетона. Применение пластификаторов позволяет эффективно применять бетонные смеси с низким водосодержанием, получать высокую прочность бетонов (60 ... 80 МПа), успешно бетонировать конструкции сложного профиля, сократить время формования изделий, а так же повысить качество лицевых поверхностей.

Анализируя влияние тонкодисперсных минеральных компонентов на структуру и свойства цементосодержащих (а также силикатных, сложносоставленных и др.) материалов, отметим, что введение активных минеральных наполнителей в качестве самостоятельных составляющих является одним из резервов оптимизации структурообразования, улучшения строительно-технологических свойств и долговечности в целом [2-4]. Высокодисперсные (нано- и микроразмерные) частицы являются дополнительными центрами кристаллизации, увеличивают поверхностную энергию, что в свою очередь благоприятно сказывается на прочностных характеристиках, а также водо- и морозостойкости цементного камня [5]. Двухкомпонентные (бинарные) наполнители, сочетающие более жесткие частицы с мягкими, более активные – с менее активными (которые представлены соединениями  $\text{CaCO}_3$  и  $\text{MgCO}_3$  в виде наноразмерных частиц, а также микроразмерных частиц песка), отличаются поверхностной энергией и демпфирующими свойствами; к числу подобных наполнителей можно отнести, например, пыль предприятий строительного профиля [5]. В ходе проведенной учебно-исследовательской работы установлено, что производители бетонов в Самарской области применяют преимущественно пластификаторы и противоморозные добавки. Практическое использование минеральных тонкомолотых добавок-наполнителей на данный момент затруднительно из-за отсутствия их устойчивой и качественной сырьевой базы. В Самарской области возможно применение наполнителей – отходов горно-обогачительных комбинатов в составах бетонов и растворов, однако для этого, в частности, требуется деятельность предприятия, которое бы контролировало и подготавливало соответствующие наполнители непосредственно для производителей цементосодержащих материалов.

#### Список литературы

1. ГОСТ 24211-2008. Добавки для бетонов и строительных растворов. Общие технические условия. – М.: Изд-во МНТКС, 2008. – 15 с.
2. Рамачандран В.С., Фельдман Р.Ф., Коллепарди М. и др. Добавки в бетон: справочное пособие / под ред. В.С. Рамачандрана; пер. с англ. Т.И. Розенберг и С.А. Болдырев; под ред. А.С. Болдырева и В.Б. Рагинова. – М.: Стройиздат, 1988. – 575 с.

3. Гусев Б.В., Ин Иен-лян С., Кузнецова Т.В. Цементы и бетоны – тенденции развития. / Под общей редакцией Б.В. Гусева. – М.: Научный мир, 2012. – 136 с.

4. Сидоренко Ю.В., Коренькова С.Ф. Многоуровневый синергетический подход к формированию механизма

твердения контактно-конденсационных систем силикатного типа: монография. – Самара: СГАСУ, 2005. – 112 с.

5. Коренькова С.Ф., Сидоренко Ю.В. Бинарные наполнители для строительных материалов. // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований, 2014. – № 6. – С. 39 – 40.

### Физико-математические науки

#### ЛОКАЛИЗАЦИЯ АТОМОВ В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ РАСЧЕТА СУММ ВАЛЕНТНОСТЕЙ СВЯЗЕЙ

Голубев А.М., Кучина Ю.В., Горячева В.Н.,  
Березина С.Л., Шаповал В.Н., Якушева Е.А.

Московский государственный технический  
университет им. Н.Э. Баумана, Москва,  
e-mail: amgol@bmstu.ru

Концепция валентностей связей в настоящее время широко используется в кристаллохимическом анализе структур неорганических соединений с ионным типом химических связей [1]. Согласно данной концепции по аналогии с порядком связи для органических соединений вводится понятие валентности связи для взаимодействий катион – анион в структурах неорганических соединений. Сумма валентностей связей для каждого иона должна равняться абсолютному значению его заряда. Зависимость валентности связи от межатомного расстояния не является линейной. Наилучшее совпадение табличных и рассчитанных зарядов ионов получается при использовании экспоненциальной зависимости валентности связи  $s$  от межатомного расстояния  $d$ :

$$s = \exp[(R_0 - d)/b],$$

где  $R_0$  и  $b$  – табулированные эмпирические параметры. Параметр  $R_0$  характеризует конкретное взаимодействие катион – анион. Для параметра  $b$  предложено универсальное значение  $0.037 \text{ нм}^{-1}$  для всех пар катион – анион, но также используются и индивидуальные значения для каждой пары.

Наряду с оценкой корректности определения кристаллической структуры и идентификации катионов и анионов в спорных случаях применение концепции валентностей связей расширилось до энергетических расчетов [2] и моделирования кристаллических структур [3, 4]. На современном этапе развития компьютерной техники и программного обеспечения по массивам данных сумм валентностей связей, рассчитанных для элементарной ячейки кристалла возможно построение трехмерного распределения отдельных или всех ионов в кристалле [5, 6]. Построение поверхностей одинакового уровня сумм валентностей связей дает информацию о характере распределения ионов в кристалле: локальном или не локальном. Не локальное распределение позволяет в структурах определить каналы проводимости или пути миграции ионов в процессе ионной проводимости.

В настоящей работе нами получены массивы данных сумм валентностей связей для ряда структур с целью оценки возможности использования поверхностей одинакового уровня не только при определении путей миграции ионов, но также при расшифровке кристаллических структур и анализе фазовых переходов первого рода. В целях удобства сравнения результатов для разных структур рассчитывалась разность  $\Delta$  суммы валентностей связей и абсолютного значения заряда  $|z|$  соответствующего иона:

$$\Delta = \sum \exp[(R_0 - d)/b] - |z|.$$

Локализации ионов отвечали в этом случае области около нулевых значений  $\Delta$ . Для оценки возможности миграции ионов и оценки смещений атомов в результате тепловых колебаний использовались значения  $\Delta$  с относительными отклонениями  $0.1 - 0.2$  от нулевого значения. Суммирование при расчете сумм валентностей связей проводилось в пределах  $0.5 - 0.7 \text{ нм}$  в целях гарантированного учета ионов противоположного знака в пределах первой координационной сферы. Значения параметров  $R_0$  были взяты из [1], использовалось универсальное значение параметра  $b$ , равное  $0.037 \text{ нм}^{-1}$ . Для получения поверхностей одинакового уровня полученные массивы данных сумм валентностей связей обрабатывались с помощью программы VESTA [6].

Проведенные нами расчеты для структуры суперинионного проводника AgI (рис. 1а) свидетельствуют о корреляции полученных результатов по распределению ионов  $\text{Ag}^+$  с высокой ионной проводимостью данного соединения. Поверхности одинакового уровня образуют непрерывное распределение по всему объему кристалла в виде связанных вершинами искаженных тетраэдров. В структуре  $\text{SrTiO}_3$  (рис. 1б) поверхности одинакового уровня не образуют непрерывного распределения, что свидетельствует о малой вероятности суперинионной проводимости данного соединения. Формы поверхностей одинакового уровня указывают на ангармоничный характер тепловых смещений катионов и аниона кислорода. Для катиона  $\text{Ti}^{4+}$  – это куб с «вытянутыми» вершинами, для катионов  $\text{Sr}^{2+}$  – искаженная за счет удлинений вдоль координатных осей сфера, для анионов  $\text{O}^{2-}$  – тетрагональная призма с закругленными ребрами и вершинами. Данные результаты коррелируют с известными экспериментальными фактами и свидетельствуют о возможности анализа характера тепловых смещений по известным координатам атомов.