

## МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ ОКСИДНЫХ СИСТЕМАХ С CaO

Молчан Н.В., Фертиков В.И.

*Представлены расчеты межмолекулярных взаимодействий в двухкомпонентных оксидных системах с CaO по нормированной величине изменения объемов прореагировавших компонентов. Расчеты проведены на основании справочных данных плотностей веществ. Предлагается рассматривать структуру конденсированного состояния, как пространство заполненное остовом из ядер атомов и функционирующими между ними электронами. Установлено, что на основании величин, характеризующих межмолекулярные взаимодействия возможно прогнозирование свойств соединений.*

**Ключевые слова:** концентрация электронов, плотность, оксиды, структура.

**Введение.** Минеральное сырье для силикатной промышленности представляет собой в большинстве случаев оксиды и их комбинации, взаимодействующие между собой. Химические взаимодействия сопровождаются тепловыми процессами и изменениями объема веществ, вступающих в реакцию. Тепловые процессы достаточно подробно рассмотрены в многочисленных работах по химической термодинамике и термохимии, как экспериментальных, так и с применением расчетных методов, а данных по изменению объемов при химических реакциях практически нет. При этом именно величина изменения объема может характеризовать новую структуру вещества, полученного в результате реакции.

В работах [1–8] представлены результаты расчетов по межатомным взаимодействиям. В работах [9,10] представлены результаты расчетов по межмолекулярным взаимодействиям.

Взаимосвязь между структурными характеристиками и свойствами представлена в работах

[11,12]. Конденсированное состояние характеризуется наполненностью атомов ядрами и электронами.

Изменение структуры вещества без изменения химического состава всегда сопровождается изменением взаимодействия электронов в веществе (фазовые превращения) [13,14]. Изменения объемов наряду с тепловыми эффектами могут характеризовать межмолекулярные и межатомные взаимодействия. Химические превращения определяются взаимодействием электронных оболочек атомов и молекул.

Целью настоящей работы было выявить возможность использования коэффициента уплотнения как характеристики, позволяющей оценивать интенсивность взаимодействия между разнородными молекулами, а концентрацию электронов и концентрацию ядер атомов, определяемые в единицах моль/см<sup>3</sup>, в качестве величин, позволяющей оценить структуру материала. Указанная цель достигалась путем выявления различия в объемах веществ до

образования соединения и после на примере ряда продуктов взаимодействия CaO с другими оксидами двухкомпонентных систем.

Приведенные ниже вычисления построены на основании справочных данных по плотности веществ в конденсированном состоянии [15-17].

Соединение типа  $A_aB_bC_c$  имеет концентрацию электронов

$$C_{\text{электр}} = \frac{aZ_A + bZ_B + cZ_C}{M/d} \quad (1)$$

Соединение типа  $A_aB_bC_c$  имеет концентрацию ядер (независимо от их сорта)

$$C_{\text{ядер}} = \frac{a+b+c}{M/d} \quad (2)$$

Коэффициент уплотнения определяется по формуле 3.

$$K_{\text{упл.}} = \left( \frac{\sum V_{\text{компон.}} - V_{\text{прод.}}}{V_{\text{прод.}}} \right) \times 100\% \quad (3)$$

где  $C_{\text{электр}}$  – концентрация электронов в единице объема, моль/см<sup>3</sup>;  $Z$  – порядковый номер элемента ( $Z_A$ ,  $Z_B$  и  $Z_C$  – номера элементов  $A$ ,  $B$  и  $C$  соответственно);  $a$  – подстрочный индекс элемента  $A$ ;  $b$  – подстрочный

индекс элемента  $B$ ,  $c$  – подстрочный индекс элемента  $C$ ,  $K_{\text{упл.}}$  – коэффициент уплотнения (%);  $V_{\text{компон.}}$  – молярный объем компонента в конденсированном состоянии, см<sup>3</sup>/моль;  $V_{\text{прод.}}$  – молярный объем соединения в конденсированном состоянии, см<sup>3</sup>/моль.

Величина  $K_{\text{упл.}}$  представляет собой выраженное в процентах изменение общего объема исходных компонентов веществ по сравнению с объемом соединения. Коэффициент уплотнения позволяет характеризовать любое соединение как продукт, полученный в результате либо разрыхления, либо уплотнения электронных оболочек при взаимодействии составляющих его компонентов.

**Результаты исследования.** На примере ряда продуктов взаимодействия CaO с оксидами двухкомпонентных систем проведены расчеты коэффициента уплотнения (%), концентрации электронов соединения (моль/см<sup>3</sup>) и концентрации ядер соединения (моль/см<sup>3</sup>) по формулам (1) и (2) и (3). Результаты вычислений представлены в таблице 1.

Таблица 1 - Межмолекулярные взаимодействия CaO с оксидами.

Соединение	Формула для расчета при сохранении материального баланса	Коэффициент уплотнения, %	Концентрация электронов соединения, моль/см <sup>3</sup>	Концентрация ядер соединения, моль/см <sup>3</sup>
1	2	3	4	5
Ca(OH) <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O*CaO	2,9	1,128	0,148
Ca <sub>12</sub> Be <sub>17</sub> O <sub>29</sub>	(CaO) <sub>12</sub> *(BeO) <sub>17</sub>	-17,9	1,301	0,140
CaB <sub>4</sub> O <sub>7</sub>	CaO*(B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	26,6	1,317	0,165
B <sub>2</sub> Ca <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *B <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9,5	1,386	0,136
CaB <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	CaO*B <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	17,0	1,333	0,150
Ca <sub>3</sub> B <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	(CaO) <sub>3</sub> *B <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14,3	1,538	0,143
CaCO <sub>3</sub> кальцит	CaO*CO <sub>2</sub>	16,5	1,396	0,134
CaCO <sub>3</sub> арагонит	CaO*CO <sub>2</sub>	26,3	1,515	0,146
CaCO <sub>3</sub> фатерит	CaO*CO <sub>2</sub>	13,7	1,363	0,131
CaOAl <sub>12</sub> O <sub>19</sub>	CaO*(Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) <sub>6</sub>	-3,2	1,859	0,181
CaAl <sub>4</sub> O <sub>7</sub>	CaO*(Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-24,1	1,429	0,134
CaAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	CaO*Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-21,1	1,454	0,130
Ca <sub>3</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	(CaO) <sub>3</sub> *Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-15,3	1,502	0,123
Ca <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-4,2	1,722	0,146
Ca <sub>5</sub> Al <sub>6</sub> O <sub>14</sub>	(CaO) <sub>5</sub> *(Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	-17,2	1,499	0,129
Ca <sub>3</sub> SiO <sub>5</sub>	(CaO) <sub>3</sub> *SiO <sub>2</sub>	5,0	1,57	0,124
CaSiO <sub>3</sub>	CaO*SiO <sub>2</sub>	7,2	1,45	0,125
Ca <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *SiO <sub>2</sub>	2,1	1,48	0,120
Ca <sub>3</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	(CaO) <sub>3</sub> *(SiO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	4,6	1,47	0,123
Ca <sub>2</sub> P <sub>6</sub> O <sub>17</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *(P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> ) <sub>3</sub>	-19,5	1,182	0,111
CaP <sub>4</sub> O <sub>11</sub>	CaO*(P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	-21,9	1,139	0,108
Ca <sub>4</sub> P <sub>6</sub> O <sub>19</sub>	(CaO) <sub>4</sub> *(P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> ) <sub>3</sub>	-10,0	1,352	0,122
Ca <sub>2</sub> P <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0,7	1,537	0,134
CaSO <sub>4</sub>	CaO*SO <sub>3</sub>	12,1	1,490	0,131
CaSO <sub>3</sub>	CaO*SO <sub>2</sub>	37,4	1,648	0,137
CaSc <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	CaO*Sc <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	5,2	1,890	0,141
CaTiO <sub>3</sub>	CaO*TiO <sub>2</sub>	6,7	1,881	0,143
CaTi <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	CaO*(TiO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	27,1	2,096	0,153
Ca <sub>2</sub> Ti <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *(TiO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	0,8	1,778	0,135
CaTi <sub>4</sub> O <sub>9</sub>	CaO*(TiO <sub>2</sub> ) <sub>4</sub>	0,1	1,802	0,140
CaTi <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	CaO*(TiO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	-6,4	1,672	0,129
CaVO <sub>3</sub>	CaO*VO <sub>2</sub>	10,9	2,078	0,155
CaV <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	CaO*V <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6,7	2,205	0,157
CaV <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	CaO*V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	-4,9	1,533	0,121
Ca <sub>2</sub> V <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0,5	1,633	0,126
CaV <sub>4</sub> O <sub>9</sub>	CaO*(VO <sub>2</sub> ) <sub>4</sub>	-11,2	1,755	0,134
CaV <sub>3</sub> O <sub>7</sub>	CaO*(VO <sub>2</sub> ) <sub>3</sub>	-14,6	1,674	0,127

Продолжение таблицы 1				
1	2	3	4	5
Ca <sub>5</sub> V <sub>2</sub> O <sub>10</sub>	(CaO) <sub>5</sub> *V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	-9.3	1.493	0.112
CaV <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	CaO*(VO) <sub>2</sub>	-38.9	1.759	0.133
CaCr <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	CaO*Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-7.7	2.014	0.141
CaCrO <sub>4</sub>	CaO*CrO <sub>3</sub>	6.9	1.515	0.120
Ca <sub>2</sub> Cr <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-8.6	1.873	0.132
CaCrO <sub>3</sub>	CaO*CrO <sub>2</sub>	43.3	2.146	0.158
Ca <sub>2</sub> MnO <sub>4</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *MnO <sub>2</sub>	3.7	1.989	0.144
CaMnO <sub>3</sub>	CaO*MnO <sub>2</sub>	8.9	2.214	0.160
Ca <sub>4</sub> Mn <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	(CaO) <sub>4</sub> *Mn <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	31.6	2.407	0.168
Ca <sub>2</sub> Mn <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *Mn <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.2	2.076	0.144
CaMn <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	CaO*Mn <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.0	2.207	0.151
Ca <sub>2</sub> Mn <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *(MnO <sub>2</sub> ) <sub>3</sub>	-5.6	1.983	0.144
Fe <sub>2</sub> CaO <sub>4</sub>	CaO*Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	5.9	2.340	0.158
Fe <sub>2</sub> Ca <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-5.2	1.965	0.134
CaFe <sub>3</sub> O <sub>5</sub>	CaO*Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	6.0	2.385	0.156
Ca <sub>2</sub> Fe <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-5.7	1.955	0.133
CaFe <sub>4</sub> O <sub>7</sub>	CaO*(Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-7.6	2.148	0.143
Ca <sub>3</sub> Ga <sub>4</sub> O <sub>9</sub>	(CaO) <sub>3</sub> *(Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-16.4	1.984	0.124
Ca <sub>5</sub> Ga <sub>6</sub> O <sub>14</sub>	(CaO) <sub>5</sub> *(Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	-16.3	1.960	0.123
CaGa <sub>4</sub> O <sub>7</sub>	CaO*(Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-23.1	2.065	0.124
CaGa <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	CaO*Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-18.7	2.034	0.125
Ca <sub>3</sub> Ga <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	(CaO) <sub>3</sub> *Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-0.9	2.136	0.138
CaGe <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	CaO*(GeO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	48.1	2.282	0.147
Ca <sub>2</sub> Ge <sub>7</sub> O <sub>16</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *(GeO <sub>2</sub> ) <sub>7</sub>	11.1	2.183	0.139
Ca <sub>3</sub> GeO <sub>5</sub>	(CaO) <sub>3</sub> *GeO <sub>2</sub>	-4.1	1.722	0.117
CaGeO <sub>3</sub>	CaO*GeO <sub>2</sub>	29.5	2.446	0.161
Ca <sub>2</sub> GeO <sub>4</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *GeO <sub>2</sub>	16.2	2.124	0.143
Ca <sub>2</sub> As <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *As <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	-5.6	1.710	0.116
CaAs <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	CaO*As <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	18.1	2.173	0.146
CaSe <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	CaO*(SeO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	0.9	1.773	0.111
CaSeO <sub>4</sub>	CaO*SeO <sub>3</sub>	16.1	1.923	0.134
Ca <sub>0.1</sub> Sr <sub>0.9</sub> O	(CaO) <sub>0.1</sub> *(SrO) <sub>0.9</sub>	5.9	2.181	0.099
Ca <sub>0.2</sub> Sr <sub>0.8</sub> O	(CaO) <sub>0.2</sub> *(SrO) <sub>0.8</sub>	5.4	2.136	0.101
Ca <sub>0.3</sub> Sr <sub>0.7</sub> O	(CaO) <sub>0.3</sub> *(SrO) <sub>0.7</sub>	4.8	2.087	0.103
Ca <sub>0.4</sub> Sr <sub>0.6</sub> O	(CaO) <sub>0.4</sub> *(SrO) <sub>0.6</sub>	4.2	2.037	0.105
Ca <sub>0.5</sub> Sr <sub>0.5</sub> O	(CaO) <sub>0.5</sub> *(SrO) <sub>0.5</sub>	3.6	1.984	0.107
Ca <sub>0.6</sub> Sr <sub>0.4</sub> O	(CaO) <sub>0.6</sub> *(SrO) <sub>0.4</sub>	2.9	1.928	0.110
Ca <sub>0.7</sub> Sr <sub>0.3</sub> O	(CaO) <sub>0.7</sub> *(SrO) <sub>0.3</sub>	2.1	1.868	0.112
Ca <sub>0.8</sub> Sr <sub>0.2</sub> O	(CaO) <sub>0.8</sub> *(SrO) <sub>0.2</sub>	1.2	1.806	0.114
Ca <sub>0.9</sub> Sr <sub>0.1</sub> O	(CaO) <sub>0.9</sub> *(SrO) <sub>0.1</sub>	0.3	1.740	0.117
CaZr <sub>4</sub> O <sub>9</sub>	CaO*(ZrO <sub>2</sub> ) <sub>4</sub>	1.0	2.480	0.138
CaZrO <sub>3</sub>	CaO*ZrO <sub>2</sub>	-1.9	2.160	0.129
Ca <sub>2</sub> Nb <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *Nb <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	2.1	2.089	0.129
CaNb <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	CaO*Nb <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	3.6	2.209	0.133
CaNbO <sub>3</sub>	CaO*NbO <sub>2</sub>	1.5	2.280	0.134
Ca <sub>3</sub> Nb <sub>2</sub> O <sub>8</sub>	(CaO) <sub>3</sub> *Nb <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	1.2	2.012	0.127
CaMoO <sub>4</sub>	CaO*MoO <sub>3</sub>	0.8	2.002	0.128
Ca <sub>3</sub> MoO <sub>6</sub>	(CaO) <sub>3</sub> *MoO <sub>3</sub>	3.3	1.922	0.128
CaRuO <sub>3</sub>	CaO*RuO <sub>2</sub>	4.5	2.566	0.146
CaRh <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	CaO*Rh <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4.9	3.127	0.154
CaPd <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	CaO*(PdO) <sub>3</sub>	6.3	3.326	0.140
Ca <sub>3</sub> In <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	(CaO) <sub>3</sub> *In <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.8	2.363	0.126
CaIn <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	CaO*In <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-0.2	2.742	0.128
CaSnO <sub>3</sub>	CaO*SnO <sub>2</sub>	2.8	2.513	0.134
Ca <sub>2</sub> SnO <sub>4</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *SnO <sub>2</sub>	0.4	2.228	0.128
Ca <sub>2</sub> Sb <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *Sb <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	46.6	2.442	0.136
CaSb <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	CaO*Sb <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	42.1	2.363	0.125
CaSb <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	CaO*Sb <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	11.1	2.525	0.115
Ca <sub>3</sub> TeO <sub>6</sub>	(CaO) <sub>3</sub> *TeO <sub>3</sub>	5.7	2.001	0.125
CaTeO <sub>4</sub>	CaO*TeO <sub>3</sub>	3.1	2.093	0.121
CaGd <sub>4</sub> O <sub>7</sub>	CaO*(Gd <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	5.2	3.052	0.110
CaEr <sub>3</sub> O <sub>5.5</sub>	CaO*(Er <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) <sub>1.5</sub>	1.6	3.276	0.116
CaYb <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	CaO*Yb <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.3	3.327	0.121
CaLu <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	CaO*Lu <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	5.0	3.463	0.125
Ca <sub>2</sub> Hf <sub>7</sub> O <sub>16</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *(HfO <sub>2</sub> ) <sub>7</sub>	-5.0	3.655	0.136

Продолжение таблицы 1				
1	1	1	1	1
CaHfO <sub>3</sub>	CaO*HfO <sub>2</sub>	-3.9	3.026	0.130
CaHf <sub>4</sub> O <sub>9</sub>	CaO*(HfO <sub>2</sub> ) <sub>4</sub>	-5.6	3.682	0.136
CaTa <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	CaO*Ta <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	-5.2	3.018	0.127
Ca <sub>2</sub> Ta <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *Ta <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	-0.1	2.883	0.131
CaTa <sub>4</sub> O <sub>11</sub>	CaO*(Ta <sub>2</sub> O <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	-4.7	3.234	0.129
CaWO <sub>4</sub>	CaO*WO <sub>3</sub>	-2.9	2.495	0.119
Ca <sub>3</sub> WO <sub>6</sub>	(CaO) <sub>3</sub> *WO <sub>3</sub>	6.0	2.343	0.129
Ca <sub>3</sub> ReO <sub>6</sub>	(CaO) <sub>3</sub> *ReO <sub>3</sub>	7.4	2.370	0.129
CaIrO <sub>3</sub>	CaO*IrO <sub>2</sub>	6.2	3.583	0.148
Ca <sub>2</sub> IrO <sub>4</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *IrO <sub>2</sub>	4.6	2.968	0.139
Ca <sub>2</sub> Pt <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *(PtO <sub>2</sub> ) <sub>3</sub>	-18.6	3.025	0.116
Ca <sub>4</sub> PtO <sub>6</sub>	(CaO) <sub>4</sub> *PtO <sub>2</sub>	0.8	2.420	0.129
Ca(Au <sub>2</sub> O <sub>4</sub> )	CaO*Au <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2.4	3.867	0.129
CaHgO <sub>2</sub>	CaO*HgO	-12.9	2.780	0.096
Ca(Tl <sub>2</sub> O <sub>4</sub> )	CaO*Ta <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6.2	3.701	0.121
Ca <sub>2</sub> PbO <sub>4</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *PbO <sub>2</sub>	1.6	2.661	0.121
CaPbO <sub>3</sub>	CaO*PbO <sub>2</sub>	-1.5	2.945	0.117
CaBi <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	CaO*Bi <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-5.4	2.982	0.096
Ca <sub>4</sub> Bi <sub>6</sub> O <sub>13</sub>	(CaO) <sub>4</sub> *(Bi <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	0.1	3.048	0.103
Ca <sub>2</sub> Bi <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *Bi <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-4.6	2.736	0.100
Ca <sub>3</sub> UO <sub>6</sub>	(CaO) <sub>3</sub> *UO <sub>3</sub>	-8.0	2.181	0.109
CaUO <sub>4</sub>	CaO*UO <sub>3</sub>	9.8	3.099	0.129
CaUO <sub>3</sub>	CaO*UO <sub>2</sub>	-4.9	3.128	0.115
Ca <sub>2</sub> UO <sub>4</sub>	(CaO) <sub>2</sub> *UO <sub>2</sub>	18.4	3.349	0.143

Точность расчетов объемов, участвующих реагентов и продуктов, зависит от точности и надежности значений плотности веществ, т.к. атомные и молекулярные веса определены с большой точностью.

Из приведенных в таблице 1 данных обращают особое внимание несколько групп бинарных соединений. Карбонат кальция имеет несколько структурных модификаций. Самая плотная арагонит и самая рыхлая фатерит. Обе эти модификации являются термодинамически неустойчивыми в сравнении с кальцитом, т.к. при нагревании выше 400 С° переходят в кальцит, одна разрыхляясь, а другая уплотняясь.

Двухкомпонентная группа CaO – P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> имеют значительное разрыхляющее взаимодействие. Эта группа является важной как в биологической жизни, так и различных технологиях.

Высокие коэффициенты уплотнения имеют взаимодействия оксидов сурьмы, германия, хрома и марганца.

#### Литература:

1. Molchan N.V., Fertikov V.I. Determination of Concentration of Electrons for Description of the Structure of Materials, with Sulfides as an Example // Journal of Materials Sciences and Applications. – 2015. – Vol. 1, № 2. – P. 38–44.
2. Молчан Н.В., Фертиков В.И. Концентрация электронов как структурная характеристика оксидов // Техника и технология силикатов. – 2016. – Т. 23, № 2. – С. 8–14.
3. Molchan N.V., Fertikov V.I. Interrelation of Thermodynamic Parameters and Structural Characteristics, with Halides of Groups 1 and 2 Elements as an Example // American Journal of Chemistry and Application. – 2016. – Vol. 3, № 5. – P. 28–32.
4. Seguru G., Fertikov V. Interaction of Elements in Binary

Можно предположить, что при модифицировании цемента механизмы взаимодействия соединений марганца и хрома с основой будут сходными.

**Заключение.** На основании справочных данных по плотности оксидов в двухкомпонентных системах с CaO проведено вычисление межмолекулярных взаимодействий.

Приведены расчеты концентрации электронов и концентрации ядер атомом, которые являются структурными характеристиками веществ.

Рассчитанные характеристики, такие как коэффициенты уплотнения, концентрации электронов и концентрации ядер атомов могут быть использованы при прогнозировании свойств продуктов реакции.

#### References:

1. Molchan N.V., Fertikov V.I. Determination of Concentration of Electrons for Description of the Structure of Materials, with Sulfides as an Example. Journal of Materials Sciences and Applications, 2015, vol. 1, no. 2, pp. 38-44.
2. Molchan N.V., Fertikov V.I. Kotsentratsiya ehlektronov kak strukturnaya kharakteristika oksidov [Concentration of electrons as a structural characteristic of oxides]. Tekhnika i tekhnologiya silikatov, 2016, vol. 23, no. 2, pp. 8–13 (in Russian).
3. Molchan N.V., Fertikov V.I. Interrelation of Thermodynamic Parameters and Structural Characteristics, with Halides of Groups 1 and 2 Elements as an Example. American Journal of Chemistry and Application, 2016, vol. 3, no. 5, pp. 28–32.

- Compounds of Hydrogen// American Journal of Chemistry and Application. – 2017. - Vol. 4№ 6. – P. 59–62.
5. Fertikov V., Seguru G. The Interaction of Iron with the Chemical Elements, Forming Binary Compounds // SciFed Journal of Metallurgical Science – 2017. – V.1.Iss.I. P.1 -5.
6. Fertikov V., Seguru G. Assessment of Changes in Volume of Nickel Compounds Interacting With the Chemical Elements // International Journal of Current Research. – 2017 - V.9, Iss. 08. P.56361-56364.
7. Seguru G., Fertikov V. Interatomic Interactions in Binary Nitrogen Compounds // International Journal of Innovation in Engineering Research & Management. – 2018 – V. 05. Iss. 02. P. 1-5.
8. Молчан Н. В., Кривобородов Ю.Р. Фертиков В. И. Взаимодействие кремния с химическими элементами, образующими с ним бинарные соединения. // Техника и технология силикатов. – 2017. – Т. 24, № 4. – С. 11–17.
9. Молчан Н.В., Кривобородов Ю.Р. Фертиков В.И. Взаимодействие воды с оксидами, образующими гидроксиды и кристаллогидраты // Техника и технология силикатов. – 2017. – Т. 24, № 1. – С. 11–16.
10. Молчан Н. В., Кривобородов Ю.Р. Фертиков В. И. Межмолекулярные взаимодействия в двух-компонентных оксидных системах с SiO<sub>2</sub> // Техника и технология силикатов. – 2018. – Т. 25, № 3. – С. 80–84.
11. Молчан Н.В., Фертиков В. И. Сжимаемость веществ и размеры атомов // Материаловедение. – 2011. – Т. 171, № 6. – С. 2–6.
12. Молчан Н.В., Фертиков В.И. Концентрация электронов и механические свойства веществ. В сб.: ТестМат – 2013. Сборник докладов Всероссийской конференции по испытаниям и исследованиям свойств материалов. 2013. С. 9
13. Molchan N., Eliseev D., Fertikov V. Control of Nickel Alloy Structural Change by the Atomic Emission Spectroscopy Method // American Journal of Analytical Chemistry. – 2016. – Vol. 7, № 9. – P. 633–641.
14. Молчан Н.В., Фертиков В.И. Контроль изменения структуры стали при отжиге методом атомно-эмиссионной спектроскопии. // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. -2016. –Т.82, №5. –С.39-43.
15. International Centre for Diffraction Data. JCPDS PCPDFWIN. – 2002. – V. 2.03.
16. Новый справочник химика и технолога. Основные свойства неорганических, органических и элементоорганических соединений. – СПб.: Профессионал, 2007. – 1276 с.
17. Физические величины: справочник / А. П. Бабичев, Н. А. Бабушкина, А. М. Братковский [и др.]; под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
4. Seguru G., Fertikov V. Interaction of Elements in Binary Compounds of Hydrogen// American Journal of Chemistry and Application. – 2017. - Vol. 4,№ 6. – P. 59–62.
5. Fertikov V., Seguru G. The Interaction of Iron with the Chemical Elements, Forming Binary Compounds // SciFed Journal of Metallurgical Science – 2017. – V.1.Iss.I. P.1 -5.
6. Fertikov V., Seguru G. Assessment of Changes in Volume of Nickel Compounds Interacting With the Chemical Elements // International Journal of Current Research. – 2017.- V.9, Iss. 08. P.56361-56364.
7. Seguru G., Fertikov V. Interatomic Interactions in Binary Nitrogen Compounds // International Journal of Innovation in Engineering Research & Management. – 2018 – V. 05. Iss. 02. P. 1-5.
8. Molchan N., Krivoborodov Yu., Fertikov V. The interaction of silicon with the chemical elements, forming with it a binary connection. //Technique and technology of silicates, 2017; 4: 11-17. (in Russian)
9. Molchan N., Krivoborodov Yu., Fertikov V. The interaction of water with oxides, forming hydroxides and crystal hydrates, //Technique and technology of silicates, 2017; 1: 11-15. (in Russian)
10. Molchan N., Krivoborodov Yu., Fertikov V. Intermolecular interactions in two-component oxide systems with SiO<sub>2</sub>. //Technique and technology of silicates, 2018; v.25; 3 80-84. (in Russian)
11. Molchan N.V., Fertikov V.I. Compressibility of substances and the size of atoms // Materialovedenie. - 2011, Vol. 171, № 6. – P. 2–6. (in Russian).
12. Molchan N.V., Fertikov V.I. Concentration of electrons and mechanical properties of substances. In the collection: TestMat - 2013. Collection of reports of the All-Russian Conference on testing and research of material properties. 2013. P. 9. (in Russian).
13. Molchan N., Eliseev D., Fertikov V. Control of Nickel Alloy Structural Change by the Atomic Emission Spectroscopy Method. American Journal of Analytical Chemistry, 2016, vol. 7, no. 9, pp. 633–641.
14. Molchan N.V., Fertikov V.I. Control of steel structure changes during annealing by atomic emission spectroscopy. //Zavodskaya Laboratoriya, Diagnostika materialov. -2016, V .82, no. 5, pp. 39 – 43.
15. International Centre for Diffraction Data. JCPDS PCPDFWIN, 2002. V. 2.03.
16. Novyy spravochnik khimika i tekhnologa. Osnovnye svoystva neorganicheskikh, organicheskikh i elementoorganicheskikh soedineniy [The new reference book for chemist and technologist. The basic properties of inorganic, organic and element organic compounds]. St.-Petersburg: Professional, 2007, 1276 p (in Russian).
17. Babichev A. P., Babushkina N. A., Bratkovskiy A. M., et al. Fizicheskie velichiny: spravochnik [Physical quantities:reference book]. Ed. by I. S. Grigor'ev, E. Z. Meylikhov. Moscow: Energoatomizdat, 1991, 1232 p (in Russian).

**Молчан Н.В.** кандидат фармацевтических наук, - Научный центр экспертизы средств медицинского применения, Москва; E-mail: [nimolchan@mail.ru](mailto:nimolchan@mail.ru)  
**Фертиков В. И.**, кандидат биологических наук, - Всероссийский институт легких сплавов, Москва.