



ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА/CHEMISTRY OF SOLIDS

DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2026.172.73> EDN: KEFBGHПРИМЕНЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТНОГО ПОДХОДА К ОЦЕНКА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ $\text{CaO} - \text{SiO}_2 - \text{H}_2\text{O}$, МОДИФИЦИРОВАННОЙ НАНОЧАСТИЦАМИ Al_2O_3

Научная статья

Артамонова О.В.^{1,*}¹ ORCID : 0000-0001-9157-527X;¹ Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Российская Федерация

* Корреспондирующий автор (ol_artam[at]rambler.ru)

Предложена: 10.07.2026; Принята: 02.10.2026; Опубликовано: 16.10.2026

Аннотация

Введение наночастиц Al_2O_3 в цементные системы приводит к необходимости выхода за рамки классического термодинамического описания из-за возникновения стохастических факторов. К ним относятся конфигурационное разнообразие, связанное с замещением Si на Al в структуре C – (A) – S – H, и вариабельность поверхностной энергии на границах раздела фаз. В работе предложен вероятностный подход к оценке термодинамических функций состояния наномодифицированных систем $\text{CaO} - \text{SiO}_2 - \text{H}_2\text{O}$ (C – S – H). Подход реализуется в три этапа: статистико-термодинамическое моделирование распределения энергий связей на наноуровне, формирование вероятностного ансамбля коллоидного геля C – S – H и многомасштабный перенос свойств для оценки макроскопических функций. На примере расчета энергии Гиббса образования ($\Delta_f G^0$) показано, что наномодификация не только смещает средние значения термодинамических потенциалов, но и принципиально увеличивает их дисперсию. Предложенный баланс между повышением энергетических характеристик и ростом вариабельности системы является ключевым для прогнозирования свойств материалов с заданными эксплуатационными характеристиками.

Ключевые слова: наномодифицирование, C – S – H фазы, система $\text{CaO-SiO}_2\text{-H}_2\text{O}$, наночастиц Al_2O_3 , вероятностный подход, термодинамические функции, энергия Гиббса.

APPLICATION OF A PROBABILISTIC APPROACH TO THE EVALUATION OF THERMODYNAMIC STATE FUNCTIONS OF THE $\text{CaO} - \text{SiO}_2 - \text{H}_2\text{O}$ SYSTEM, MODIFIED WITH Al_2O_3 NANOPARTICLES

Research article

Artamonova O.V.^{1,*}¹ ORCID : 0000-0001-9157-527X;¹ Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation

* Corresponding author (ol_artam[at]rambler.ru)

Suggested: 10.07.2026; Accepted: 02.10.2026; Published: 16.10.2026

Abstract

The introduction of Al_2O_3 nanoparticles into cementitious systems necessitates moving beyond the classical thermodynamic description due to the emergence of stochastic factors. These include configurational diversity associated with the substitution of Si by Al in the C – (A)–S–H structure, and variations in surface energy at phase boundaries. The work suggests a probabilistic approach to estimating the thermodynamic state functions of nanomodified $\text{CaO-SiO}_2\text{-H}_2\text{O}$ (C–S–H) systems. The approach is implemented in three stages: statistical-thermodynamic modelling of the distribution of bond energies at the nanoscale, the formation of a probabilistic ensemble of the C–S–H colloidal gel, and multi-scale property scaling to estimate macroscopic functions. Based on a calculation of the Gibbs formation energy ($\Delta_f G^0$), it is shown that nanomodification not only shifts the mean values of thermodynamic potentials but also significantly increases their dispersion. The proposed balance between improved energy characteristics and increased system variability is key to predicting the properties of materials with specified operational characteristics.

Keywords: nanomodification, C–S–H phases, the $\text{CaO-SiO}_2\text{-H}_2\text{O}$ system, Al_2O_3 nanoparticles, probabilistic approach, thermodynamic functions, Gibbs energy.

Введение

Система $\text{CaO} - \text{SiO}_2 - \text{H}_2\text{O}$ представляет собой сложный объект для термодинамического анализа ввиду наличия фаз переменного состава (C – S – H гель с переменным отношением Ca/Si); метастабильности основных гидратных фаз; зависимости термодинамических параметров от условий синтеза (pH среды, ионная сила исходного раствора, водо-цементное отношение, температура); недостаточной полноты экспериментальных данных для всех возможных составов. Традиционные детерминистические методы расчёта термодинамических функций (энтальпии, энтропии, энергии Гиббса) сталкиваются с существенными ограничениями при описании таких систем, что обуславливает необходимость применения вероятностных и статистических подходов.

Основные направления применения вероятностных методов являются Байесовская калибровка термодинамических параметров, методы Монте-Карло для оценки неопределённости, статистическая термодинамика фаз переменного состава [1], [4], [5], [9].



1.1. Байесовская калибровка термодинамических параметров

Одним из наиболее перспективных направлений является использование байесовских методов для оценки неопределённости констант равновесия (K_p) минеральных фаз в цементных системах. Данный подход позволяет формализовать априорные знания о термодинамических параметрах на основе литературных данных; интегрировать экспериментальные наблюдения с учётом погрешностей измерений; получать апостериорные распределения вероятностей для ключевых параметров, таких как ΔG° , ΔH° , S° для C – S – H, портландита, тоберморита и других фаз. Метод адаптивной выборки Метрополиса–Гастингса в сочетании с геохимическими кодами (ORCHESTRA, GEMS) обеспечивает эффективную калибровку моделей даже при ограниченных экспериментальных данных.

1.2. Методы Монте-Карло для оценки неопределённости

Вероятностное моделирование методом Монте-Карло применяется для анализа распространения неопределённости входных параметров (состав шихты, активность компонентов, температура) на прогнозируемые фазовые равновесия; оценки чувствительности термодинамических моделей к вариациям параметров взаимодействия в рамках подхода CALPHAD. Особенно актуально применение данных методов для прогнозирования долговременной стабильности цементных матриц в условиях выщелачивания, карбонизации и сульфатной агрессии.

1.3. Статистическая термодинамика фаз переменного состава

Для описания термодинамики C – S – H геля, характеризующегося непрерывным изменением состава, применяются модели твёрдых растворов с неидеальным смешением (модель регулярных растворов, модель Хиллберта–Стаффансона); полуэмпирическая модель Миеды для оценки энтальпии образования метастабильных и аморфных фаз при отсутствии прямых экспериментальных данных; учёт избыточной энтропии смешения, связанной с различием атомных размеров компонентов в аморфных фазах. Данные подходы позволяют формализовать вероятностное распределение локальных конфигураций в структуре C – S – H и оценить соответствующие термодинамические функции.

Современные исследования опираются на специализированные программные комплексы и термодинамические базы данных [2], [3], [6], [7], [8].

В данной работе предлагается вероятностный подход к оценке термодинамических функций системы $\text{CaO} - \text{SiO}_2 - \text{H}_2\text{O}$, модифицированной наночастицами Al_2O_3 , который раскрывается последовательно на трех нано-, мезо- и микроуровнях, которые можно представить в виде трех этапов:

- 1) наноуровень — распределение вероятностей энергий связей $\text{Al} - \text{O} - \text{Si}$;
- 2) мезоуровень — вероятностный ансамбль коллоидных глобул C – A – S – H;
- 3) макроуровень — Байесовская оценка стандартной энергии Гиббса C – A – S – H.

Целью работы является теоретический расчет термодинамических функций системы $\text{CaO} - \text{SiO}_2 - \text{H}_2\text{O}$, модифицированной наночастицами Al_2O_3 .

Расчёт проводили для модельной системы $\text{CaO} - \text{SiO}_2 - \text{H}_2\text{O}$, модифицированной наночастицами Al_2O_3 (0,1%, от массы цемента), при температуре 298 К и давлении 101, 325 кПа. Водоцементное отношение составляло 0,30 и степень гидратации 63%, используемые исходные данные получены в результате экспериментальных исследований, которые подробно изложены в работе [10]. Методом лазерной дифракции установлены размеры наночастицами Al_2O_3 10 – 50 нм, по данным рентгенодифрактометрических исследований система является рентгеноаморфной. Поэтому можно предположить, что получены смесь $\eta\text{-Al}_2\text{O}_3$ и $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ полиморфных модификации оксида алюминия.

Основные результаты и обсуждение

Результаты теоретического расчета термодинамических функций системы $\text{CaO} - \text{SiO}_2 - \text{H}_2\text{O}$, модифицированной наночастицами Al_2O_3 .

Этап 1. Наноуровень — распределение вероятностей энергий связей $\text{Al} - \text{O} - \text{Si}$. При столь низкой концентрации Al ($\text{Al}/\text{Si} \approx 0,013$) практически весь алюминий занимает наиболее термодинамически выгодные мостиковые позиции ($\text{Q}^2(1\text{Al})$) в силикатных цепях C – S – H, это было показано ранее методом ЯМР ^{29}Si и ^{27}Al в высоком поле [4]. Высокое сродство Al к кислороду обеспечивает термодинамическую выгодность образования прочных связей $\text{Al} - \text{O} - \text{Si}$ в структуре геля, поскольку алюминий в тетраэдрической координации образует ковалентные связи с кислородными мостиками, аналогичные связям $\text{Si} - \text{O} - \text{Si}$.

Вероятности трёх основных типов позиций оцениваются на основе квантово-химических расчётов (DFT) для кластеров C – S – H с единичным замещением (табл. 1).

Таблица 1 - Распределение энергий связи Al – O – Si для Al/Si = 0,0129

DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2026.172.73.1>

Позиция Al в С-S-H	Вероятность p_i	Энергия связи E_i , кДж/моль	$p_i \cdot E_i$	$p_i \times (E_i - \langle E \rangle)^2$
Мостиковая ($Q^2(1Al)$)	0,90	– 320	– 288,00	$0,90 \cdot (-320 + 319,64)^2 = 0,117$
Концевая (Q^1)	0,08	– 318	– 25,44	$0,08 \cdot (-318 + 319,64)^2 = 0,215$
Межслоевая	0,02	– 310	– 6,20	$0,02 \cdot (-310 + 319,64)^2 = 1,858$
Суммарное значение	1,00	–	– 319,64	2,190

Таким образом, получаем, что средняя энергия связи (E_{bond}) равна 319,64 кДж/моль, дисперсия энергии связи σ_{bond}^2 равна 2,19 (кДж/моль)².

Этап 2. Мезоуровень — вероятностный ансамбль коллоидных глобул С – А – S – Н.

2.1. Характеристики отдельной глобулы

Принимаем, что каждая глобула С – S – Н содержит $n = 200$ тетраэдрических позиций Si, часть из которых может быть замещена Al. Средняя доля замещения $p_{\text{Al}} / \text{Si}_{\text{avg}}$ равно 0,01290. Среднее число атомов Al на глобулу составит: $\mu_k = n \cdot p = 200 \cdot 0,01290 = 2,58$. Дисперсия числа атомов Al определяется по уравнению: $\sigma_k^2 = n \cdot p \cdot (1 - p) = 200 \cdot 0,01290 \cdot 0,98710 \approx 2,546$.

Стандартное отклонение $\sigma_k \approx 1,596$.

2.2. Молярная энергия Гиббса образования С-А-S-H

Энергия внедрения одного моля Al в мостиковую позицию С – S – Н принята равной $\Delta g_{\text{Al_inc}} = -13,0$ кДж/моль (значение немного более отрицательное, чем при больших концентрациях, из-за преимущественного заполнения энергетически самых выгодных мест). Молярная энергия Гиббса (на 1 моль Si) для заданной доли замещения $x = \text{Al/Si}$ складывается из энтальпийного вклада и конфигурационной энтропии идеального раствора замещения и вычисляется по формуле: $\Delta G_{\text{molar}}(x) = x \cdot \Delta g_{\text{Al_inc}} + RT[x \cdot \ln x + (1-x) \cdot \ln(1-x)]$.

Для среднего значения $x = 0,01290$:

$$1) x \times \ln x = 0,01290 \cdot \ln(0,01290) \approx -0,05612;$$

$$2) (1-x) \times \ln(1-x) = 0,98710 \cdot \ln(0,98710) \approx -0,01283.$$

Суммарное значение равно 0,06895.

Вклад энтропии: $\Delta G_{\text{mix}} = 2,479 \cdot (-0,06895) \approx -0,171$ кДж/моль.

Вклад внедрения: $x \cdot \Delta g_{\text{Al_inc}} = 0,01290 \cdot (-13,0) = -0,1677$ кДж/моль.

Средняя молярная энергия Гиббса рассчитывается: $\langle \Delta G_{\text{molar}} \rangle = -0,1677 - 0,171 = -0,339$ кДж/моль.

2.3. Дисперсия энергии Гиббса в ансамбле глобул

Флуктуации доли замещения x от глобулы к глобуле приводят к дисперсии ΔG_{molar} . Для одной глобулы дисперсия доли составит:

$$\text{Var}(x)_{\text{glob}} = \frac{p \cdot (1-p)}{n} = \frac{0,01290 \cdot 0,98710}{200} = 6,37 \times 10^{-5}$$

Производная энергии по составу:

$$\frac{\partial \Delta G_{\text{molar}}}{\partial x} = \Delta g_{\text{Al_inc}} + RT \ln \left(\frac{x}{1-x} \right)$$

При $x = 0,01290$:

$$\ln \left(\frac{0,01290}{0,98710} \right) = \ln(0,01307) \approx -4,337$$

$$\frac{\partial \Delta G_{\text{molar}}}{\partial x} = -13,0 + 2,479 \cdot (-4,337) = -23,75 \text{ кДж/моль}$$

Дисперсия ΔG_{molar} для одной глобулы:

$$\text{Var}(\Delta G_{\text{glob}}) = \left(\frac{\partial \Delta G_{\text{molar}}}{\partial x} \right)^2 \cdot \text{Var}(x)_{\text{glob}} =$$

$$= (23,75)^2 \cdot 6,37 \times 10^{-5} \approx 0,0359 (\text{кДж/моль})^2$$

Для ансамбля из $N = 10^6$ глобул дисперсия среднего значения уменьшается в N раз и составит: $\text{Var}(\langle \Delta G_{\text{molar}} \rangle) = 0,0359 / 10^6 = 3,59 \times 10^{-8} (\text{кДж/моль})^2$.

Стандартное отклонение $\sigma \approx 1,89 \times 10^{-4}$ кДж/моль, что пренебрежимо мало по сравнению с другими источниками неопределённости.

2.4. Суммарное изменение энергии Гиббса системы

Общее количество геля С – S – Н в системе $n(\text{Si}) = 1,521$ моль, составит: $\Delta G_{\text{total}} = n(\text{Si}) \cdot \langle \Delta G_{\text{molar}} \rangle = 1,521 \cdot (-0,339) \approx -0,515$ кДж.

Отрицательное значение подтверждает термодинамическую выгодность внедрения алюминия в структуру геля.



Этап 3. Макроуровень — Байесовская оценка стандартной энергии Гиббса C – A – S – H.

2.5. Априорное распределение

Стандартная энергия Гиббса немодифицированного C – S – H ($C/S = 1,7$) принимается равной $\Delta_f G^0_{C-S-H} = -2630$ кДж/моль.

Априорное среднее для C – A – S – H можно выразить: $\mu_{\text{prior}} = \Delta_f G^0_{C-S-H} + \langle \Delta G_{\text{molar}} \rangle = -2630 + (-0,339) = -2630,34$ кДж/моль

Априорное стандартное отклонение, учитывающее погрешности квантово-химических расчётов и модели твёрдого раствора, принимаем $\sigma_{\text{prior}} = 1,5$ кДж/моль. Таким образом, априорная плотность вероятности равна $p(\theta) \sim N(-2630,34; 1,5^2)$.

2.6. Экспериментальные данные (функция правдоподобия)

Экспериментальное определение растворимости C – A – S – H с $Al/Si \approx 0,013$ дало значение $\Delta_f G^0_{C-S-H} = -2631,5 \pm 3,0$ кДж/моль (среднее $\pm$ стандартное отклонение, $n = 5$).

Тогда функция правдоподобия равна $p(\text{Data}|\theta) \sim N(-2631,5; 3,0^2)$.

2.7. Апостериорное распределение (теорема Байеса)

Поскольку и априорное, и правдоподобие нормальны, апостериорное распределение также нормально с параметрами:

$$\frac{1}{\sigma_{\text{post}}^2} = \frac{1}{\sigma_{\text{prior}}^2} + \frac{1}{\sigma_{\text{exp}}^2}$$

$$\mu_{\text{post}} = \sigma_{\text{post}}^2 \cdot \left(\frac{\mu_{\text{prior}}}{\sigma_{\text{prior}}^2} + \frac{\mu_{\text{exp}}}{\sigma_{\text{exp}}^2} \right)$$

Подставляем численные значения:

$$\frac{1}{\sigma_{\text{post}}^2} = \frac{1}{1,5^2} + \frac{1}{3,0^2} \approx 0,5555$$

$$\sigma_{\text{post}}^2 = \frac{1}{0,5555} \approx 1,8 \Rightarrow \sigma_{\text{post}} \approx 1,342 \text{ кДж/моль}$$

$$\mu_{\text{post}} = 1,8 \cdot \left(\frac{-2630,34}{2,25} + \frac{-2631,5}{9} \right) \approx -2630,57 \text{ кДж/моль}$$

2.8. Результат макроскопической оценки

Апостериорное распределение стандартной энергии Гиббса C – A – S – H (при $Al/Si \approx 0,013$) равно $\Delta_f G^0_{C-A-S-H} \sim N(-2630,6; 1,34^2)$ кДж/моль

Заключение

Полученные результаты позволяют сделать следующие выводы:

1) влияние низкой дозировки нано- Al_2O_3 (0,1%) при $B/C = 0,30$ и $\alpha = 0,63$ обуславливает очень небольшое среднее отношение Al/Si , оно составило всего $\sim 0,013$. Молярная энергия Гиббса модифицированного геля уменьшилась на $-0,34$ кДж/моль по сравнению с чистым C-S-H. Это изменение невелико, но статистически значимо и указывает на термодинамическую стабилизацию геля даже при столь малых добавках оксида алюминия;

2) наблюдается снижение неопределённости, т.к. Байесовское объединение модельных предсказаний и экспериментальных данных позволило уменьшить стандартное отклонение оценки $\Delta_f G$ с 3,0 до 1,34 кДж/моль. Апостериорное среднее ($-2630,6$ кДж/моль) практически совпадает с априорным, что свидетельствует о хорошей согласованности расчётов и эксперимента.

Практическая значимость работы заключается в том, что полученное вероятностное распределение может быть непосредственно использовано в термодинамических пакетах (GEMS, PHREEQC) для прогнозирования фазового состава цементного камня. При столь низком содержании нанодобавки её основное влияние на свойства системы C – S – H, вероятно, связано не с объёмным изменением термодинамики цементного геля, а с локальными эффектами ускорения гидратации и уплотнения контактной зоны «цементное зерно – гель», что требует дополнительного экспериментального кинетического исследования.

Дополнительные материалы

Дополнительные материалы доступны на онлайн-странице статьи.

Финансирование

Нелинейные явления и кинетика процессов синтеза в самоорганизующихся материалах и катализируемых ростовых процессах, FZGM-2026-0003.

Конфликт интересов

Не указан.

Рецензия

Все статьи проходят рецензирование. Но рецензент или автор статьи предпочли не публиковать рецензию к этой статье в открытом доступе. Рецензия может быть предоставлена компетентным органам по запросу.

Supplementary materials

Supplementary materials are available online on the article's webpage.

Funding

Non-linear phenomena and the kinetics of synthesis processes in self-organising materials and catalysed growth processes, FZGM-2026-0003.

Conflict of Interest

None declared.

Review

All articles are peer-reviewed. But the reviewer or the author of the article chose not to publish a review of this article in the public domain. The review can be provided to the competent authorities upon request.



Список литературы / References

1. Chatterjee N.D. Bayes estimation: A novel approach to derivation of internally consistent thermodynamic data for minerals, their uncertainties, and correlations. Part II: Application / N.D. Chatterjee, K. Miller, W. Olbricht // *Physics and Chemistry of Minerals*. — 1994. — Vol. 21. — P. 50–62. — DOI: 10.1007/BF00205215.
2. Blanc P. Chemical model for cement-based materials: Temperature dependence of thermodynamic functions for nanocrystalline and crystalline C–S–H phases / P. Blanc, X. Bourbon, A. Lassin [et al.] // *Cement and Concrete Research*. — 2010. — Vol. 40, № 6. — P. 851–866. — DOI: 10.1016/j.cemconres.2009.12.004.
3. Hirsch T. Phase stabilities and thermodynamic properties of crystalline phases in CaO–SiO₂–H₂O above 100 °C / T. Hirsch, B. Lothenbach // *Cement and Concrete Research*. — 2024. — Vol. 177. — P. 107412. — DOI: 10.1016/j.cemconres.2023.107412.
4. Andersen M.D. Incorporation of aluminum in the calcium silicate hydrate (C–S–H) of hydrated portland cements: a high-field ²⁷Al and ²⁹Si MAS NMR investigation / M.D. Andersen, H.J. Jakobsen, J. Skibsted // *Inorganic Chemistry*. — 2003. — Vol. 42, № 7. — P. 2280–2287. — DOI: 10.1021/ic020607b.
5. Jennings H.M. Refinements to colloid model of C–S–H in cement: CM-II / H.M. Jennings // *Cement and Concrete Research*. — 2008. — Vol. 38, № 3. — P. 275–289. — DOI: 10.1016/j.cemconres.2007.10.006.
6. Sarkar S. Bayesian calibration of thermodynamic parameters for geochemical speciation modeling of cementitious materials / S. Sarkar, D.S. Kosson, S. Mahadevan et al. // *Cement and Concrete Research*. — 2012. — Vol. 42, № 7. — P. 889–902. — DOI: 10.1016/j.cemconres.2012.02.004.
7. Lothenbach B. Thermodynamic equilibrium calculations in cementitious systems / B. Lothenbach // *Materials and Structures*. — 2010. — Vol. 43, № 10. — P. 1413–1433. — DOI: 10.1617/s11527-010-9592-x.
8. Lothenbach B. Cemdata18: A chemical thermodynamic database for hydrated Portland cements and alkali-activated materials / B. Lothenbach, D.A. Kulik, T. Matschei et al. // *Cement and Concrete Research*. — 2018. — Vol. 115, № 2. — P. 472–503. — DOI: 10.1016/j.cemconres.2018.04.018.
9. Atkinson A. Thermodynamic modelling and aqueous chemistry in the CaO–Al₂O₃–SiO₂–H₂O system / A. Atkinson, J.A. Hearne, C.F. Knights // *MRS Proceedings*. — 1990. — Vol. 212. — P. 395. — DOI: 10.1557/PROC-212-395.
10. Артамонова О.В. Получение и применение наноразмерных систем на основе Al₂O₃ для наномодифицирования цементных систем твердения / О.В. Артамонова, А.Б. Закатов // *Известия высших учебных заведений. Строительство*. — 2026. — № 5(809). — С. 31–47. — DOI: 10.32683/0536-1052-2026-809-5-31-47.

Список литературы на английском языке / References in English

1. Chatterjee N.D. Bayes estimation: A novel approach to derivation of internally consistent thermodynamic data for minerals, their uncertainties, and correlations. Part II: Application / N.D. Chatterjee, K. Miller, W. Olbricht // *Physics and Chemistry of Minerals*. — 1994. — Vol. 21. — P. 50–62. — DOI: 10.1007/BF00205215.
2. Blanc P. Chemical model for cement-based materials: Temperature dependence of thermodynamic functions for nanocrystalline and crystalline C–S–H phases / P. Blanc, X. Bourbon, A. Lassin [et al.] // *Cement and Concrete Research*. — 2010. — Vol. 40, № 6. — P. 851–866. — DOI: 10.1016/j.cemconres.2009.12.004.
3. Hirsch T. Phase stabilities and thermodynamic properties of crystalline phases in CaO–SiO₂–H₂O above 100 °C / T. Hirsch, B. Lothenbach // *Cement and Concrete Research*. — 2024. — Vol. 177. — P. 107412. — DOI: 10.1016/j.cemconres.2023.107412.
4. Andersen M.D. Incorporation of aluminum in the calcium silicate hydrate (C–S–H) of hydrated portland cements: a high-field ²⁷Al and ²⁹Si MAS NMR investigation / M.D. Andersen, H.J. Jakobsen, J. Skibsted // *Inorganic Chemistry*. — 2003. — Vol. 42, № 7. — P. 2280–2287. — DOI: 10.1021/ic020607b.
5. Jennings H.M. Refinements to colloid model of C–S–H in cement: CM-II / H.M. Jennings // *Cement and Concrete Research*. — 2008. — Vol. 38, № 3. — P. 275–289. — DOI: 10.1016/j.cemconres.2007.10.006.
6. Sarkar S. Bayesian calibration of thermodynamic parameters for geochemical speciation modeling of cementitious materials / S. Sarkar, D.S. Kosson, S. Mahadevan et al. // *Cement and Concrete Research*. — 2012. — Vol. 42, № 7. — P. 889–902. — DOI: 10.1016/j.cemconres.2012.02.004.
7. Lothenbach B. Thermodynamic equilibrium calculations in cementitious systems / B. Lothenbach // *Materials and Structures*. — 2010. — Vol. 43, № 10. — P. 1413–1433. — DOI: 10.1617/s11527-010-9592-x.
8. Lothenbach B. Cemdata18: A chemical thermodynamic database for hydrated Portland cements and alkali-activated materials / B. Lothenbach, D.A. Kulik, T. Matschei et al. // *Cement and Concrete Research*. — 2018. — Vol. 115, № 2. — P. 472–503. — DOI: 10.1016/j.cemconres.2018.04.018.
9. Atkinson A. Thermodynamic modelling and aqueous chemistry in the CaO–Al₂O₃–SiO₂–H₂O system / A. Atkinson, J.A. Hearne, C.F. Knights // *MRS Proceedings*. — 1990. — Vol. 212. — P. 395. — DOI: 10.1557/PROC-212-395.
10. Artamonova O.V. Polucheniye i primeneniye nanorazmernykh sistem na osnove Al₂O₃ dlya nanomodifitsirovaniya tsementnykh sistem tverdeniya [Production and application of nanosized systems based on Al₂O₃ for nanomodification of cement hardening systems] / O.V. Artamonova, A.B. Zakatov // *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Stroitel'stvo* [News of Higher Educational Institutions. Construction]. — 2026. — № 5(809). — P. 31–47. — DOI: 10.32683/0536-1052-2026-809-5-31-47. [in Russian]