

## Silikatų technologijos

### Mokslo kryptys

T 005 Chemijos inžinerija.

### Tyrėjai

Tyrėjai: dr. K. Baltakys, dr. I. Barauskas, dr. T. Dambrauskas, dr. A. Eisinas, dr. A. Grinevičienė, dr. R. Kaminskas, dr. A. Kantautas, dr. N. Kybartienė, dr. R. Kubiliūtė, dr. E. Prichockienė, dr. R. Šiaučiūnas, dr. Z. Valančius, dr. V. Valančienė, dr. G. Vaickelionis.

Podoktorantūros stažuotojas dr. A. Eisinas.

Doktorantai: E. Augustinienė, A. Gineika, D. Niūniavaitė, V. Rudelis, K. Ruginytė, G. Smalakys.

### Moksliniai tyrimai

- Funkcinių silikatinų medžiagų sintezė, savybės ir taikymas, vadovas dr. K. Baltakys  
Tyrimų kryptys: modernūs hidroterminės, mikrobangų ir kietfazio sukepimo procesai, kurie apima silikatinų ir giminingų medžiagų sintezės ypatumus, jų savybių bei struktūros tyrimus ir panaudojimą mažai energijai imlių cementų ir kitų produktų aplinkai draugiškos gamybos technologijose.  
Rišamųjų medžiagų, gamtinių bei technogeninių išteklių chemijos ir procesų inžinerija, vadovas dr. R. Kaminskas  
Tyrimų kryptys: įvairių technogeninių ir gamtinių priedų, galinčių pakeisti įprastinio portlandcemenčio klinkerį, tyrimai ir taikymas technologijose. Technogeninių išteklių panaudojimas ir alternatyvių rišamųjų medžiagų kūrimas, tyrimas ir taikymas technologijose.

Didelės apimties tyrimai buvo atlikti kuriant CO<sub>2</sub> emisiją į aplinką mažinančius cementus. Nustatyta, kad iš rankinoto rišamosios medžiagos mišinių su smėliu (santykis – 1:3) galima gaminti ilgaamžį ~45 MPa gniuždomojo stiprio betoną, jį 15 bar CO<sub>2</sub> slėgyje ir 45 °C temperatūroje kietinant 24 val. Rišamosios medžiagos tešlos ir jos mišinių su smėliu karbonizacijos metu susidaro skirtingi reakcijos produktai. Vienintelė kristalinė CaCO<sub>3</sub> polimorfinė atmaina mišiniuose su smėliu yra kalcitas, o tešloje dar papildomai susidaro vateritas ir aragonitas. Bandinių karbonizacijos laipsnis priklauso nuo rišamosios medžiagos sluoksnio mikrostruktūroje. Tik ~40 % rišamosios medžiagos turi karbonizuotis, kad tešlos bandinys pasiektų maksimalų karbonizacijos laipsnį.

Tiriant kalcio hidrosilikatų ir giminingų medžiagų sintezės ypatumus, nustatyta, kad CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O sistemoje be C<sub>3</sub>AH<sub>6</sub> (katoito) susidaro ir kitos grupės junginys – kalcio aluminio karbonato hidroksido hidratas Ca<sub>4</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub>CO<sub>3</sub>·11H<sub>2</sub>O, kurio kiekis produkte tiesiogiai priklauso nuo hidroterminio išlaikymo trukmės. 250-350 °C temperatūroje C<sub>3</sub>AH<sub>6</sub> skyla į majenitą, o Ca<sub>4</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub>CO<sub>3</sub>·11H<sub>2</sub>O suyra jau ~150 °C, susidarant aragonitui, gipsitui ir CaO. CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub>·nH<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub>O sistemoje didinant Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> priedo kiekį susidaro mažiau katoito, bet daugiau kalcio hidrosilikatų. Degimo metu susidaro majenitas (350 °C), volastonitas (820-945 °C) bei gelenitas (880-945 °C). Abu priedai, t. y. sintezės produktas ir apdorotas termiškai, greitina aluminatinio cemento hidrataciją ir atskirų jo komponentų sureagavimą: gryno cemento bandinyje indukcinis periodas tęsiasi 6-6,5 val., o bandiniuose su priedais – tik 2-2,5 val.

Iširta, kad sintetiniai α-C<sub>2</sub>SH ir hidroksiledgrevitas yra mezoporės medžiagos, kurių savitasis paviršiaus plotas S<sub>BET</sub> yra lygus 33,81 ir 14,30 m<sup>2</sup>/g, juose vyrauja plyšio formos poros tarp netvarkingai išsidėsčiusių plokščių kristalų. Sintetinis kilchoanitas yra beporė medžiaga, kurios S<sub>BET</sub> =15,24 m<sup>2</sup>/g, o suminis porų tūris Σ<sub>VP</sub> =9,01·10<sup>-3</sup> cm<sup>3</sup>/g. Degimo temperatūra turi ženklų įtaką tiek kalcio hidrosilikatų S<sub>BET</sub>, tiek ir vyraujančių porų formai. Šie junginiai pasižymi geromis adsorbcinėmis savybėmis, nes jau per pirmąsias reakcijos minutes į jų kristalų gardelę įsiterpia 100 % Cu<sup>2+</sup>, Co<sup>2+</sup> ir Cr<sup>3+</sup> jonų. Kinetiniais skaičiavimais įrodyta, kad dvibaziai kalcio hidrosilikatai yra chemosorbentai. Nustatyta, kad 1,13 nm

tobermorito tekstūros ypatybės priklauso nuo sintezei naudotos gamtinės žaliavos prigimties. Kuo joje yra daugiau amorfinės dalies, tuo didesnis produkto savitasis paviršiaus plotas, o suminis porų tūris kinta nuo 0,054 cm<sup>3</sup>/g (žaliava – granito atsijos) iki 0,113 cm<sup>3</sup>/g (opoka). Didėjant tobermorito  $S_{BET}$  ir porėtumui, mažėja iš jo pagamintų termoizoliacinių gaminių tankis.

Nustatyta, kad  $AlF_3 \cdot 3H_2O$  gamybos atlieka – silikagelis po atitinkamo paruošimo gali būti naudojama kalcio hidrosilikatų sintezei. Apdorojimo metodas ir sąlygos turi ženklų įtaką tiek silikagelyje esančio  $AlF_3 \cdot 3H_2O$  stabilumui, tiek fluoro jonų koncentracijai bandinyje. Daugiau nei 2 kartus jų kiekį silikagelyje galima sumažinti apdorojant vandeniu ar įmaišant šarminių priedų.

Tiriant gamybos atliekų utilizavimo ir panaudojimo problemas nustatyta, kad akytojo autoklavinio betono gamybos atliekų priedas teigiamai veikia cemento akmens stiprumą – pakeitus iki 15 % portlandcemenčio, padidėja bandinių stipris gniuždant. Maistinio aliejaus valymui panaudoto smektitinio molio atliekai regeneruoti netinka ekstrakcijos organiniais tirpikliais metodus, tačiau didelio pucolaninio aktyvumo medžiaga gaunama ją aktyvavus 600 °C temperatūroje. Nustatyta, kad gautu pucolaniniu priedu galima pakeisti iki 15 % portlandcemenčio klinkerio, o degto kaolinitinio molio priedo suspensijos apdorojimas ultragarsu didina cemento akmens stiprumą.

Tiriant netradicinių žaliavų įtaką keraminio kūno mineralinei sudėčiai ir savybėms nustatyta, kad grikių lukštai bei jų pelenai sumažina lydalo susidarymo temperatūrą ~100 °C ir pagreitina molio mineralų skilimo procesus. Jie skatina anortito bei leucito susidarymą. Šie priedai gali būti sėkmingai naudojami porėtosis keramikos gamybos technologijose.

## Vykdyti projektai

Nacionaliniai:

- LMT mokslininkų grupių projektas „Aplinką tausojantis Ca/Si kompozicinių medžiagų gavimo būdas (AKASIM)“, 2017–2020, dr. R. Šiaučiūnas.
- ES struktūrinių fondų investicijų veiksmų programos priemonės 09.3.3-LMT-K-712 veiklos „Stażuočių po doktorantūros studijų skatinimas“ projektas „Majenito sintezė ir panaudojimas“, 2017–2019, dr. K. Baltakys.

Instituciniai:

- KTU MTEPI fondo projektas „MexOyCazSiq nanodarinių sintezė ir taikymas energetiškai efektyviose technologijose (STEET)“, 2019, dr. A. Eisinai.

Užsakovieji:

- UAB „Vilniaus Aidai“, MTEP paslauga SV9-1992 „Medžiagos mineralinės sudėties nustatymas (RSDA analizė), oksidinės sudėties nustatymas (XRF analizė), granulimetrinės sudėties/dalelių pasiskirstymo pagal dydį (PSD, naudojant granulimetrą CILAS 1090 LD) nustatymas“, 2018–2019, dr. K. Baltakys.
- UAB „Matuizų dujų silikatas“, MTEP paslauga SV9-2504 „Smėlio lydumo priklausomybės nuo jo cheminės sudėties nustatymas“, 2019, dr. R. Šiaučiūnas.
- UAB „Norvegijos kontaktai“, MTEP paslauga SV9-2706 „Giluminio grunto, elastingų klijų ir elastingų plytelių eksploatacinių savybių nustatymas“, 2019–2020, dr. T. Dambrauskas.

## Apgintos disertacijos

- T. Dambrauskas, „ $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH, kilchoanito bei hidroksiledgrevito sintezė ir jų funkcinės savybės“, 2019-05-08, vadovas dr. K. Baltakys.
- A. Šmigelskytė, „Rankinito sintezė, savybės ir panaudojimas CO<sub>2</sub> aplinkoje kietėjančio betono gamyboje“, 2019-12-12, vadovas dr. R. Šiaučiūnas.

### Rengiamos disertacijos

- G. Smalakys, „Efektyvios termoizoliacinės medžiagos iš kalcio hidrosilikatų sintezė savybės ir panaudojimas“, vadovas dr. R. Šiaučiūnas.
- V. Rudelis, „Technologinio produkto-silikagelio inovatyvios perdirbimo technologijos“, vadovas dr. K. Baltakys.
- D. Niūniavaitė, „Daugiafunkcinių  $M_{x}Al_{y}O_{z}$  nanodarinių sintezė, modifikavimas ir taikymas energetiškai efektyviose technologijose“, vadovas dr. K. Baltakys.
- E. Augustinienė, „Dvistadijinis aplinkai draugiškų kalcio silikatų gamybos būdas“, vadovas dr. K. Baltakys.
- A. Gineika, „Daugiafunkcinių kalcio ir silicio nanodarinių sintezė, modifikavimas ir taikymas energetiškai efektyviose technologijose“, vadovas dr. K. Baltakys.
- K. Ruginytė, Kalcio aluminatų sintezė ir panaudojimas, vadovas dr. A. Eisinai.

### Tyrėjai, kėlę mokslinę kvalifikaciją užsienio institucijose

- Dr. A. Eisinai. Košicės technikos universitetas, Slovakija. 2019 m. balandžio 25 – gegužės 4 d. Majenito įtaka nuotekų dumble esančių sunkiųjų metalų stabilizavimui cemento bandiniuose.
- Dr. A. Eisinai. Slovakijos technologijos universitetas, Bratislavoje bei Slovakijos mokslų akademija, Slovakija. 2019 m. birželio 11–27 d. Majenito įtaka cemento bandinių hidratacijai ir mechanizmui bei bandinių mechaninėms savybėms.
- Dr. K. Baltakys. Kartachenos technikos universitetas, Ispanija. 2019 m. rugsėjo 21–28 d. Instrumentinės analizės ypatumai (RSDA, VTA).

### Reikšmingiausios publikacijos

- [S1; GB] Gineika, Andrius; Siauciunas, Raimundas; Baltakys, Kestutis. Synthesis of wollastonite from AlF<sub>3</sub>-rich silica gel and its hardening in the CO<sub>2</sub> atmosphere // Scientific Reports. London: Springer Nature. ISSN 20452322. 2019, vol. 9, art. no. 18063, p. 1-10. DOI: 10.1038/s41598-019-54219-6. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus; DOAJ] [IF: 4,011; AIF: 5,145; IF/AIF: 0,779; Q1 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
- [S1; NL] Niuniavaite, Domante; Baltakys, Kestutis; Dambrauskas, Tadas; Eisinai, Anatolijus. Cu<sup>2+</sup>, Co<sup>2+</sup> and Cr<sup>3+</sup> adsorption by synthetic dibasic calcium silicate hydrates and their thermal stability in a 25–1000 °C temperature range // Journal of thermal analysis and calorimetry. Dordrecht: Springer. ISSN 1388-6150. eISSN 1588-2926. 2019, vol. 138, iss. 3, p. 2241-2249. DOI: 10.1007/s10973-019-08795-4. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,471; AIF: 4,295; IF/AIF: 0,575; Q2 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
- [S1; NL] Dambrauskas, T.; Baltakys, K.; Eisinai, A.; Kitrys, S. The specific surface area and porosity of synthetic and calcined  $\alpha$ -C<sub>2</sub>SH, kilchoanite and hydroxyledgrewite // Powder Technology. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0032-5910. eISSN 1873-328X. 2019, vol. 355, p. 504-513. DOI: 10.1016/j.powtec.2019.07.078. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 3,413; AIF: 4,134; IF/AIF: 0,825; Q1 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,750]
- [S1; NL] Smigelskyte, A.; Siauciunas, R. Parameter influence on the rankinite binder paste and mortar accelerated carbonation curing // Journal of thermal analysis and calorimetry. Dordrecht: Springer. ISSN 1388-6150. eISSN 1588-2926. 2019, vol. 138, iss. 4, p. 2651-2659. DOI: 10.1007/s10973-019-08590-1. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,471; AIF: 4,295; IF/AIF: 0,575; Q2 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]

- [S1; NL] Gineika, A.; Baltakys, K.; Dambrauskas, T. The application of silica gel waste for the two-step synthesis of wollastonite in temperature range of 200–950 °C // *Journal of thermal analysis and calorimetry*. Dordrecht: Springer. ISSN 1388-6150. eISSN 1588-2926. 2019, vol. 138, iss. 3, p. 2263-2273. DOI: 10.1007/s10973-01908481-5. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,471; AIF: 4,295; IF/AIF: 0,575; Q2 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
- [S1; NL] Eisinas, A.; Dambrauskas, T.; Baltakys, K.; Ruginyte, K. The peculiarities of mayenite formation from synthetic katoite and calcium monocarboaluminate samples in temperature range 25–1150 °C // *Journal of thermal analysis and calorimetry*. Dordrecht: Springer. ISSN 1388-6150. eISSN 1588-2926. 2019, vol. 138, iss. 3, p. 2275-2282. DOI: 10.1007/s10973-019-08482-4. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,471; AIF: 4,295; IF/AIF: 0,575; Q2 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
- [S1; NL] Krivenko, Pavel; Vaičiukynienė, Danutė; Kantautas, Aras; Vaitkevičius, Vitoldas; Šerelis, Evaldas. Effect of AIF<sub>3</sub> production waste on the processes of hydration and hardening of the alkali-activated Portland cement with sodium silicate hydrate // *Journal of thermal analysis and calorimetry*. Amsterdam: Springer. ISSN 1388-6150. eISSN 1588-2926. 2019, vol. 138, iss. 2, p. 879-887. DOI: 10.1007/s10973-019-08086-y. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,471; AIF: 4,295; IF/AIF: 0,575; Q2 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005, T 002] [Indėlis: 0,200]
- [S1; CH] Rudelis, Valdas; Dambrauskas, Tadas; Grineviciene, Agne; Baltakys, Kęstutis. The prospective approach for the reduction of fluoride ions mobility in industrial waste by creating products of commercial value // *Sustainability*. Basel: MDPI AG. eISSN 2071-1050. 2019, vos. 11, iss. 3, art. no. 634, p. 259-266. DOI: 10.3390/su11030634. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 2,592; AIF: 4,796; IF/AIF: 0,540; Q2 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 0,750]
- [S1; GB] Baltakys, Kęstutis; Eisinas, Anatolijus; Doneliene, Jolanta; Dambrauskas, Tadas; Sarapajevaite, Gabriele. The impact of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> amount on the synthesis of CASH samples and their influence on the early stage hydration of calcium aluminate cement // *Ceramics international*. Oxford: Elsevier. ISSN 0272-8842. eISSN 1873-3956. 2019, vol. 45, iss. 2, pt. B, p. 2881-2886. DOI: 10.1016/j.ceramint.2018.07.286. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 3,450; AIF: 2,588; IF/AIF: 1,333; Q1 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]
- [S1; GB] Siauciunas, Raimundas; Bankauskaite, Agnė; Baltakys, Kestutis; Stankeviciute, Monika. The impact of Na<sub>2</sub>O on the synthesis of α-C<sub>2</sub>SH with different mineral composition and the stability of intermediate and final products // *Ceramics international*. Oxford: Elsevier. ISSN 0272-8842. eISSN 1873-3956. 2019, vol. 45, iss. 2, pt. B, p. 2846-2851. DOI: 10.1016/j.ceramint.2018.07.291. [Science Citation Index Expanded (Web of Science); Scopus] [IF: 3,450; AIF: 2,588; IF/AIF: 1,333; Q1 (2018, InCites JCR SCIE)] [M.kr.: T 005] [Indėlis: 1,000]

### Plenariniai / reikšmingiausi pranešimai tarptautinėse mokslinėse konferencijose

- Dr. R. Šiaučiūnas, žodinis pranešimas „Karbonizacijos parametrų įtaka rankinito kietėjimo procesui“. 15-as tarptautinis cemento chemijos kongresas ICC2019, 2019 m. rugsėjo 16–20 d., Praha, Čekija.
- Dr. K. Baltakys, plenarinis pranešimas „Aplinkai draugiški kalcio silikatai: sintezės metodai, terminės savybės ir taikymas“. Tarptautinė konferencija „5th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry (CEEC-TAC5) & 14th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis (Medicta2019)“, 2019 m. rugpjūčio 27–30 d., Roma, Italija.

## Atstovavimas universitetui mokslo ir inovacijų politiką kuriančiose bei įgyvendinančiose tarptautinėse ir šalies institucijose

- Dr. K. Baltakys – Mokslo projektų paramos agentūros prie Slovakijos Respublikos Švietimo, mokslo, tyrimų ir sporto ministerijos ir Slovakijos mokslų akademijos projektų ekspertas. Lietuvos mokslo tarybos ir Lietuvos verslo paramos agentūros ekspertas.
- Dr. R. Šiaučiūnas – Lietuvos mokslų akademijos tikrais narys ir Prezidiumo narys. Lietuvos aukštojo mokslo tarybos narys. LMA mokslinių tyrimų ir tarptautinio bendradarbiavimo labdaros ir paramos fondo valdybos narys. Lietuvos mokslo tarybos ekspertas. Lietuvos mokslų akademijos stipendijų ir premijų komisijų narys ekspertas.
- Dr. T. Dambrauskas – Čekijos mokslo fondo Technikos mokslų komiteto ekspertas.
- Dr. R. Kaminskas – Čekijos mokslo fondo Technikos mokslų komiteto ekspertas.
- Dr. A. Eisinas – MITA ekspertas. Lietuvos verslo paramos agentūros ekspertas.
- Dr. I. Barauskas – Lietuvos standartizacijos departamento TK 25 „Rišamosios medžiagos, gipsas ir gipso gaminiai“ narys.
- Dr. E. Prichockienė – Lietuvos standartizacijos departamento TK 23 „Keraminės plytelės, mūras ir gamtinis akmuo“ narė.

## Kiti individualūs tyrėjų pasiekimai

- Dr. R. Šiaučiūnas – mokslo žurnalų „Journal of Civil Engineering and Management“, „Journal of Sustainable Architecture and Civil Engineering“ ir „Selected Scientific Papers – Journal of Civil Engineering“ (Slovakija) redakcinių kolegijų narys. Tarptautinės konferencijos „5th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry (CEEC-TAC5) & 14th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis (Medicta2019)“, vykusios 2019 m. rugpjūčio 27–30 d., Romoje, Italijoje, garbės komiteto narys.
- Dr. K. Baltakys – mokslo žurnalų „International Journal of Environmental Monitoring and Analysis“ (JAV), „International Journal of Materials Science and Applications“ (JAV), „American Journal of chemical engineering“ (JAV), „Journal of Civil Engineering and Management“ ir „Sustainable Building Materials and Technologies“ redakcinių kolegijų narys.
- Dr. A. Eisinas – 2-sios tarptautinės konferencijos „Advances in Environmental Engineering (AEE 2019)“, vykusios 2019 m. lapkričio 25–27 d., Ostravoje, Čekijoje, mokslo komiteto narys.
- Dr. T. Dambrauskas – Lietuvos mokslų akademijos Teodoro Grotuso vardo stipendija. Tarptautinės konferencijos „5th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry (CEECTAC5) & 14th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis (Medicta2019)“, vykusios 2019 m. rugpjūčio 27–30 d., Romoje, Italijoje, mokslo komiteto narys.

## Mokslinės veiklos rezultatų sklaida visuomenei

- Dr. R. Šiaučiūnas, mokslinio seminaro „Stiklo pramonės vystymosi Lietuvoje perspektyvos“, organizacinio komiteto pirmininkas, 2019 m. lapkričio 24 d., KTU, Kaunas.
- Dr. R. Šiaučiūnas, tarptautinio mokslinio seminaro „Nauji silikatinių medžiagų struktūros tyrimo metodai“ organizacinio komiteto pirmininkas, 2019 m. gruodžio 12–13 d., KTU, Kaunas.
- Padalinio mokslininkai 2019 m. aktyviai skaitė paskaitas Lietuvos mokyklų moksleiviams.