

基于MD模拟的再生沥青混合料微观特性研究

张宇翔¹, 马少卿², 武康森²

¹武汉科技大学汽车与交通工程学院, 湖北 武汉

²青海省交通规划设计研究院有限公司, 青海 西宁

收稿日期: 2024年1月1日; 录用日期: 2024年1月19日; 发布日期: 2024年2月29日

摘要

通过分子动力学方法(MD)选取植物油提取物油酸、亚油酸以及石油基提取物乙基四氢化萘三种再生剂成分, SiO_2 、 Al_2O_3 、 CaO 、 MgO 四种氧化物, 构建沥青粘聚模型以及沥青-集料界面模型, 研究不同老化条件下, 三种再生剂对沥青粘聚能以及沥青-集料界面粘附能的影响, 并构建界面剪切试验模拟沥青-集料界面在剪切加载下的失效过程。结果表明: 不同老化程度下4种氧化物集料与沥青之间的粘附能从小到大依次为: $\text{CaO} > \text{Al}_2\text{O}_3 > \text{MgO} > \text{SiO}_2$, 碱性氧化物与沥青之间的粘附性大于酸性氧化物与沥青之间的粘附性; 随着沥青老化程度加深, 沥青质聚集程度加强, 使其在受到剪切加载时表现出更高的抗剪切性能; 相同条件下植物油在改善老化沥青混合料的粘附性能方面优于乙基四氢化萘。

关键词

分子动力学, 植物油, 沥青混合料, 界面能, 剪切强度

Study on Micro-Characteristics of Recycled Asphalt Mixture Based on MD Simulation

Yuxiang Zhang¹, Shaoqing Ma², Kangsen Wu²

¹School of Automobile and Traffic Engineering, Wuhan University of Science and Technology, Wuhan Hubei

²Qinghai Transportation Planning and Design Institute Co., Ltd., Xining Qinghai

Received: Jan. 1st, 2024; accepted: Jan. 19th, 2024; published: Feb. 29th, 2024

Abstract

The molecular dynamics method (MD) was used to select the regenerating agent components of oleic acid, linoleic acid and petroleum-based extract ethyl tetrahydronaphthalene, and the four oxides of SiO_2 , Al_2O_3 , CaO and MgO , the effects of three kinds of reclaiming agents on the adhesion

energy of asphalt and the adhesion energy of asphalt-aggregate interface under different aging conditions were studied, the interfacial shear test was constructed to simulate the failure process of asphalt-aggregate interface under shear loading. The results show that the adhesion energy between the four oxide aggregates and asphalt is $\text{CaO} > \text{Al}_2\text{O}_3 > \text{MgO} > \text{SiO}_2$ in order from large to small, the adhesion between basic oxide and asphalt is greater than that between acidic oxide and asphalt, and with the aging of asphalt, the degree of asphaltene aggregation increases, under the same conditions, vegetable oil is better than ethyl tetrahydronaphthalene in improving the adhesion of aged asphalt mixture.

Keywords

Molecular Dynamics, Vegetable Oil, Asphalt Mixture, Interfacial Energy, Shear Strength

Copyright © 2024 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

沥青混合料的破坏主要源于沥青的粘聚失效以及沥青 - 集料界面的粘附性破坏[1], 其破坏形式不仅受到沥青与集料化学组成的影响, 而且与沥青 - 集料界面的受力模式有关, 由此所表现出的力学特性将直接影响沥青混合料强度, 进而影响沥青路面的路用性能。为了提高沥青路面的使用寿命, 研究人员通过感应加热、微波加热方法提高沥青的温度以增强分子流动性[2], 向路表喷洒再生剂[3]等方式优化材料的性能以提高路面的耐久性。过去广泛采用的柴油、机油等石油基再生剂在修复受损的沥青路面中发挥了一定作用, 但这类再生剂的温度敏感性和耐老化性较差, 容易在再生沥青混合、运输的过程中高温挥发, 应用效果不佳[4]。随着生物技术的发展, 从植物、动物废弃物等其他可再生来源提取的生物基再生剂, 由于其环保、可再生、低挥发性等优点, 成为弥补石油基再生剂缺陷的理想选择, 在沥青路面应用领域逐渐受到广泛关注。

目前针对植物油对沥青混合料粘附性能影响的研究大多采用室内实验手段, 满琦等[5]选取大豆油、玉米油、葵花油三种植物油进行物理性能研究, 发现它们与沥青间具有足够亲和的渗透能力、较好的流变特性及溶解和分散能力, 可以有效降低老化沥青的粘度。Gao 等[6]通过力学试验研究沥青 - 集料界面的变形破坏行为, 发现界面的剪切强度受界面层应力状态的控制, 沥青 - 集料界面在低应变速率下表现为韧性破坏, 植物油的加入能够提高界面的抗变形能力。然而, 传统实验方法受客观条件和外部干扰等因素的影响, 效率较低且缺乏对沥青 - 集料界面微观结构和破坏过程的深入研究。

随着计算机的快速发展, 分子动力学(Molecular Dynamics)模拟方法已成为研究材料内部分子相互作用的基本工具。Zahoor 等[7]研究发现植物油再生过程属于物理溶解, 酯基可作为特征官能团, 其掺入可恢复老化沥青的胶体结构。Dong 等[8]通过 MD 模拟发现沥青老化之后分子间发生缔合与缩聚作用, 植物油可以使老化沥青的沥青质分子解聚集, 从而增强沥青-SiO₂ 界面的粘附强度。Yan 等[9]通过 MD 模拟计算沥青-SiO₂ 界面的相互作用能来研究粘附性, 发现界面的粘附性主要受范德华力的影响, 植物油能够在一定程度上恢复界面的力学性能。这些研究表明采用 MD 模拟方法在微观尺度上研究植物油对沥青混合料粘附性能的影响是可行的。

选取植物油提取物油酸、亚油酸以及石油基提取物乙基四氢化萘作为再生剂, SiO₂、Al₂O₃、CaO、MgO 四种氧化物, 采用 MD 方法构建沥青粘聚模型以及沥青 - 集料界面模型。研究不同老化条件下, 三

种再生剂对沥青粘聚能以及沥青-集料界面粘附能的影响,并构建界面剪切试验模拟沥青-集料界面在剪切加载下的失效过程,在纳米尺度上观察界面的微观结构和破坏过程,分析再生剂种类对沥青-集料界面剪切力学行为的影响,从而为再生剂的设计与选择提供途径。

2. 分子动力学模型构建

2.1. 沥青分子模型

2.1.1. 模型构建

根据 Li 等[10]提出的 4 种组分(12 个分子)来构建沥青分子模型,由于 Li 等未充分考虑沥青分子的老化状态,团队利用旋转薄膜老化(RTFOT)和 UV 紫外老化模拟国创 70#沥青的热老化和光老化,利用 Corbett 分离法将沥青分为四组分,确定沥青分子老化前后羰基(C=O)和亚砷基(S=O)数量的变化[11],采用红外光谱仪进行定量分析,将羰基和亚砷基官能团添加到沥青分子氧化的位置,根据官能团分子的组成比率得到了沥青在老化前后晶胞中各种分子的数量[12],从而建立老化沥青分子晶胞模型如图 1 所示。

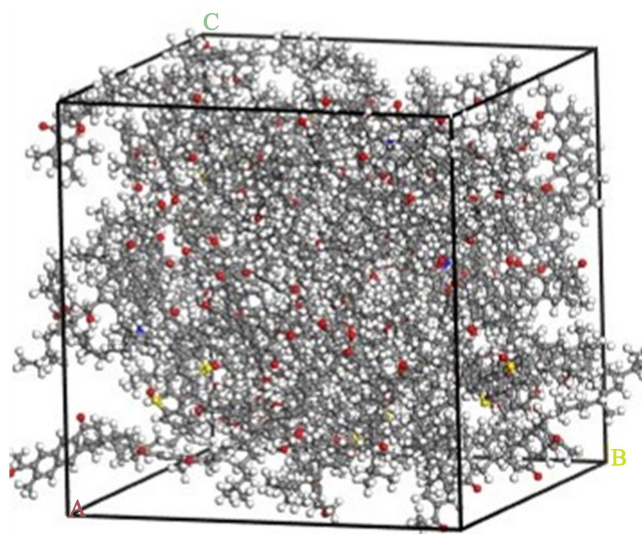


Figure 1. Molecular unit cell model of aging asphalt
图 1. 老化沥青分子晶胞模型

2.1.2. 模型合理性验证

内聚能密度(CED)是单位体积内 1 mol 物质克服分子之间相互作用所需的能量,溶解度参数(σ)是评价沥青分子相溶性的物理常数,采用密度和溶解度参数评估沥青分子模型的合理性。在 298 K 模拟得到沥青分子的密度随着时间变化的曲线如图 2 所示。沥青密度在 298 K 的模拟值为 0.981 g/cm^3 , 70#沥青的密度实验值为 1.009 g/cm^3 , 浓度比为 97%, 相对偏差可以忽略不计。因此,建立的沥青分子模型基本达到实际条件下的沥青状态。

溶解度参数的物理意义是内聚能密度的平方根,如下式所示。

$$\sigma = \sqrt{\text{CED}} = \sqrt{\sigma_{\text{vdw}}^2 + \sigma_{\text{ele}}^2} \quad (1)$$

式中: σ 为溶解度参数; σ_{vdw} 为范德华力; σ_{ele} 为库仑静电力; CED 为内聚能密度。

通过 MD 模拟计算得到沥青分子模型的溶解度参数为 $16.99 \text{ (J/cm}^3)^{0.5}$, 处于实验值 $13.30\sim 22.5 \text{ (J/cm}^3)^{0.5}$ 的范围内[13]。从密度和溶解度参数两个方面验证,所建立的沥青分子模型是合理的。

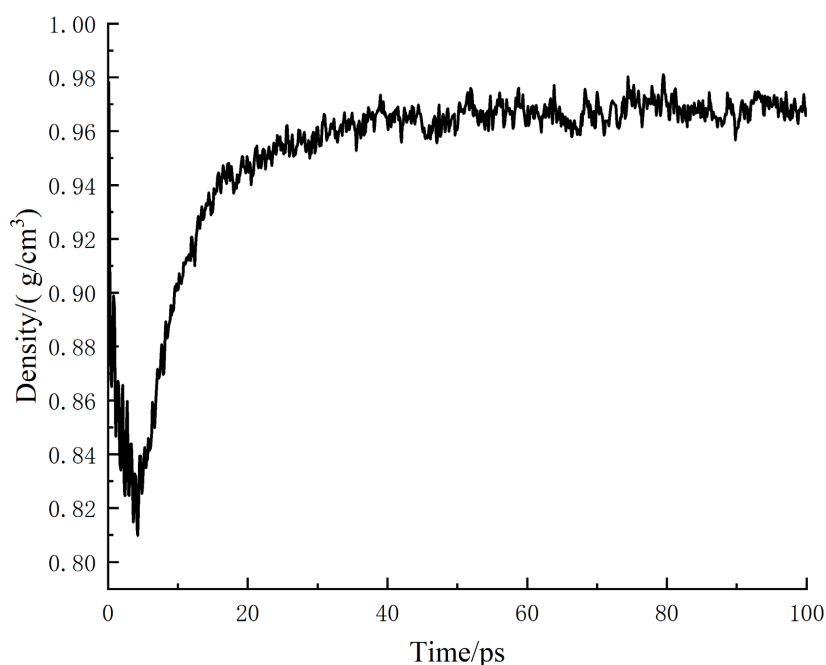


Figure 2. Density of asphalt model at 298 K
图 2. 298 K 时沥青模型的密度

2.2. 沥青粘聚模型

选取植物油提取物油酸($C_{18}H_{34}O_2$)、亚油酸($C_{18}H_{32}O_2$)作为实验组再生剂,石油基提取物乙基四氢化萘($C_{12}H_{16}$)作为对照再生剂,分别记作 R1, R2, R3。采用 MD 方法向晶胞中随机投放老化沥青分子的同时,按比例添加再生剂分子 R1、R2、R3,分别添加 16、16、26 个(R1、R2、R3)分子,对应的再生剂含量为 10% [11],即可构建沥青-再生剂分子晶胞。

对沥青-再生剂分子晶胞 298 K 温度下进行动力学优化,优化步骤为:① NVT 正则系综、Andersen 温度控制器运行 200 ps,步长 1 fs;② NPT 正则系综、Nose 压力控制器、Berendsen 温度控制器运行 200 ps,步长 1 fs;③ 重复第一次步骤,沥青-再生剂分子晶胞在 50~100 ps 之间达到稳定状态。沥青粘聚模型由两层达到稳定状态的沥青-再生剂分子晶胞构成,如图 3 所示(蓝色部分为再生剂)。

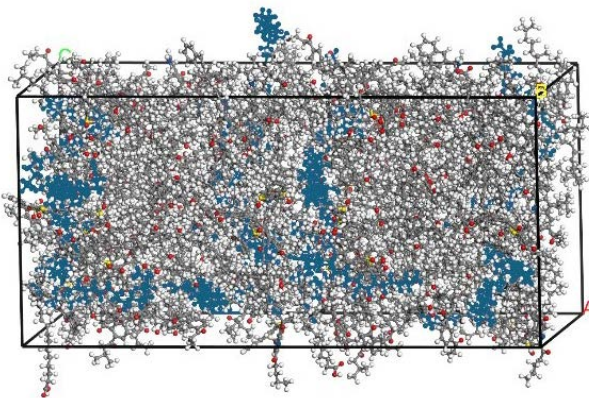


Figure 3. Asphalt cohesion model
图 3. 沥青粘聚模型

2.3. 沥青 - 集料界面模型

沥青路面集料来源广泛, 常用集料类型包括石灰石、玄武岩、辉绿岩、花岗岩等。Horgnies 等[14]通过能量色散 X 射线光谱法和剥离试验分析矿物成分对沥青与集料之间粘附性能的影响, 发现 SiO_2 、 Al_2O_3 、 CaO 、 MgO 是对该粘附行为产生影响的主要因素, 因此本文对 SiO_2 、 Al_2O_3 、 CaO 、 MgO 四种氧化物晶体模型进行了构建。

集料的结构可由分子水平上的晶胞结构表示, 晶胞是一个带有周期性边界的三维盒子, 由长度、角度以及相应的原子组成。氧化物的单个晶格常数[15]如表 1 所示, 晶胞模型如图 4 所示。以 SiO_2 为例, 为了构建集料模型, 使用 Cleave 工具从原始晶胞中切割(0 0 1)截面, 晶胞厚度为 4 Å, 弛豫放松表面后, 在 x 和 y 方向上迭代复制, 逐步增加表面积并引入真空板, 将周期性从二维变为三维, 建立 SiO_2 晶胞模型过程如图 5 所示。

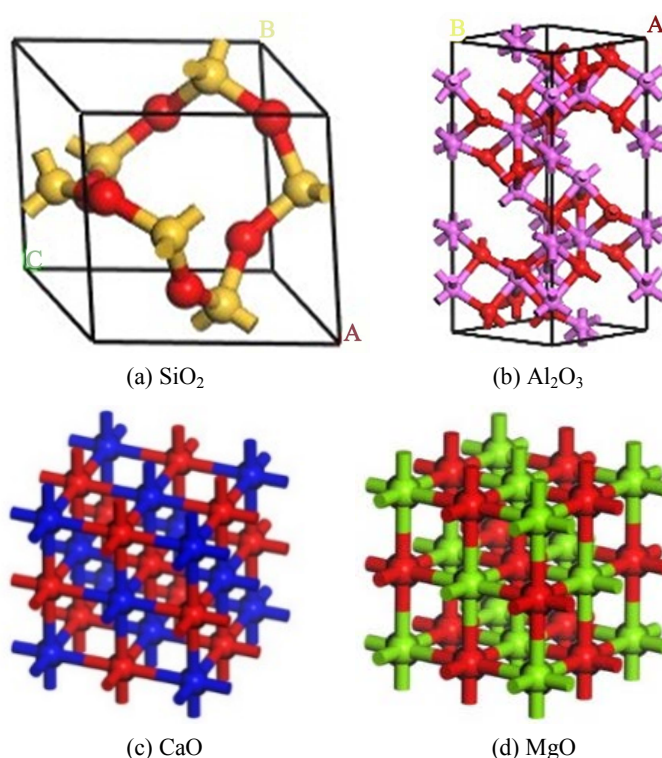


Figure 4. Crystal lattice models of mineral oxides

图 4. 矿物氧化物的晶胞模型

Table 1. Lattice constants of oxides

表 1. 氧化物的晶胞常数

分子类型	长度(Å)			角度(°)		
	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>α</i>	<i>β</i>	<i>γ</i>
SiO_2	5.01	5.01	5.47	90	90	120
Al_2O_3	4.759	4.759	4.759	90	90	120
CaO	4.8105	4.8105	4.8105	90	90	90
MgO	4.2112	4.2112	4.2112	90	90	90

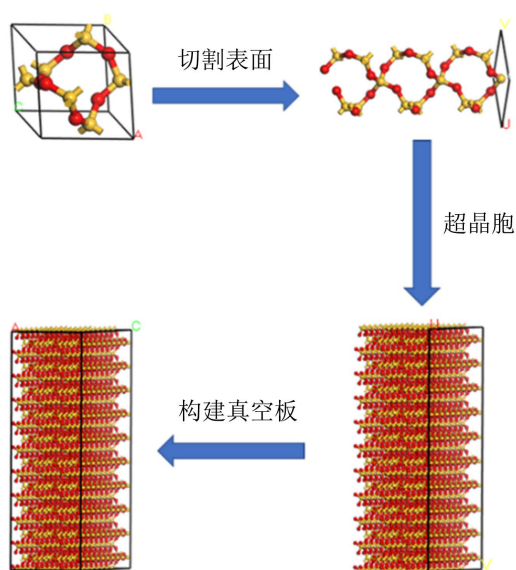


Figure 5. Establishment of cell model

图 5. 晶胞模型的建立

达到稳定状态的沥青分子晶胞与集料晶胞组成沥青 - 集料界面模型，第一层为矿物氧化物，第二层为沥青分子晶胞，第三层为 90 \AA 的真空层，引入较大的真空层旨在消除周期性边界条件对系统的影响，如图 6 所示。

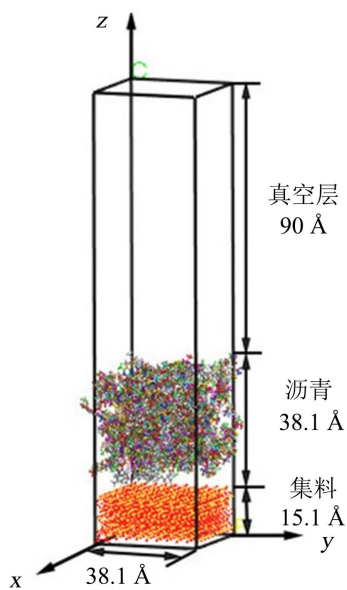


Figure 6. Asphalt-mineral interface model

图 6. 沥青 - 集料界面模型

3. 试验方法

3.1. 界面能的计算

对构建的沥青粘聚模型和沥青 - 集料界面模型进行动力学优化，采用 NVT 正则系综，温度为 298 K ，

Andersen 温度控制器运行 100 ps，步长 1 fs，界面模型在 50~100 ps 之间达到稳定状态。界面模型达到稳定状态后，通过 MD 模拟得到各模型的能量参数，采用界面能表示沥青混合料的粘附性能。

界面能是两个相邻相的界面上所存在的能量，反映了材料在界面上的相互作用强度，包括沥青的粘聚能(cohesive energy)以及沥青与集料之间的粘附能(adhesive energy)。沥青的粘聚能反映了相邻沥青分子或沥青层之间的相互作用能力，表征了沥青内部分子结构的相互粘附程度，较大的粘聚能值表示沥青本身的粘聚性能较好，可由式(2)计算。

$$E_1 = E_{a_1} + E_{a_2} - E_{a_1a_2} \quad (2)$$

式中： E_1 是沥青的粘聚能(kcal/mol)； E_{a_1} 为沥青层 1 达到动力学平衡时的能量(kcal/mol)； E_{a_2} 为沥青层 2 达到动力学平衡时的能量(kcal/mol)； $E_{a_1a_2}$ 是沥青层 1 和 2 粘聚在一起达到动力学平衡时的能量(kcal/mol)。

沥青与集料之间的粘附能是指沥青和集料两种材料在界面上相互吸引的能量，反映了沥青与集料之间相互作用的强度。这些相互作用直接影响沥青与集料之间的粘附性质，可由式(3)计算。

$$E_2 = E_a + E_m - E_{am} \quad (3)$$

式中： E_2 是沥青与集料之间的粘附能(kcal/mol)； E_a 是沥青层达到动力学平衡时的能量(kcal/mol)； E_m 是集料层达到动力学平衡时的能量(kcal/mol)； E_{am} 是沥青层与集料层粘附在一起时达到动力学平衡时的能量(kcal/mol)。

3.2. 沥青 - 集料界面剪切试验

沥青 - 集料界面剪切试验模拟过程采用 LAMMPS 编程实现，在 LAMMPS 中使用图 6 的界面模型在 CVFF 力场进行剪切模拟试验。沥青 - 集料界面剪切模型分为四层：施加边界条件的集料刚性层和沥青刚性层；提取应力参数的集料变形层，高度为 5 Å；中间沥青层保持完全柔性。模拟过程包括加压和剪切两个阶段。在加压阶段，固定下层集料层，垂直界面方向给沥青刚性层施加 $P = 500 \text{ Pa}$ 的压力[16]。系统加压达到稳定状态后，保持系统处于加压状态进行剪切，沿 x 方向给沥青和集料刚性层施加大小相等、方向相反的速度，速度为 50 m/s，步长为 1 fs，剪切模拟如图 7 所示。在剪切模拟过程中，记录集料变形层在 x 方向受到来自沥青的力学响应，可由式(4)计算剪切过程中集料表面受到的剪切应力 τ ，将恒定速度剪切条件下的最大剪切应力定义为剪切强度 τ_c 。

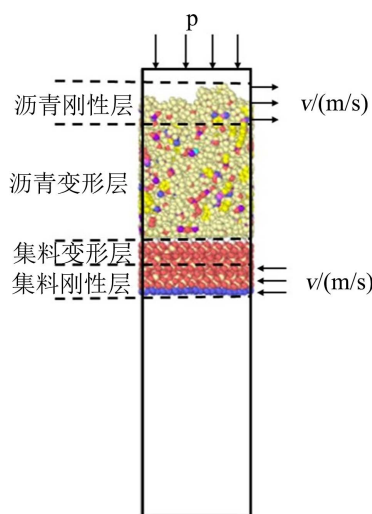


Figure 7. Shear simulation schematic
图 7. 剪切模拟示意图

$$\tau = Fx/A \quad (4)$$

式中： τ 是剪切应力， Fx 是集料界面 x 方向的力学响应； A 是界面接触面积。

4. 结果与讨论

4.1. 植物油对沥青混合物界面能的影响

4.1.1. 沥青的粘聚能

沥青老化过程中的粘聚能如表 2 所示，添加再生剂后短期老化沥青的粘聚能、长期老化沥青的粘聚能如表 3 所示。从表 2 中可知基质沥青的粘聚能最高，短期老化沥青次之，长期老化沥青的粘聚能最低，沥青晶胞的能量刚好与之相反。这表明随着沥青老化程度的加深，沥青发生吸氧反应导致体系能量上升，沥青晶胞的能量逐渐增加。基质沥青的粘聚能要高于老化沥青且老化程度越高粘聚能越低，这表明沥青老化程度越严重沥青的粘聚性能越差。

Table 2. The cohesive energy of asphalt during aging

表 2. 沥青老化过程中的粘聚能

样品	基质沥青	短期老化	长期老化
沥青晶胞(kcal/mol)	4956.4	5463.2	5928.3
粘聚模型(kcal/mol)	9556.6	10650.0	11653.4
粘聚能(kcal/mol)	356.2	276.4	203.2

Table 3. Cohesion energy of aged asphalt after adding regenerator

表 3. 添加再生剂后老化沥青的粘聚能

沥青种类	再生剂	E_{a_1} (kcal/mol)	E_{a_2} (kcal/mol)	$E_{a_1a_2}$ (kcal/mol)	E_1 (kcal/mol)
短期老化	R1	3782.4	3782.4	7234.4	484.5
	R2	4342.7	4342.7	8366.3	445.7
	R3	4413.2	4413.2	8517.6	409.6
长期老化	R1	3982.3	3982.3	9292.7	340.7
	R2	4542.6	4542.6	10612.8	328.9
	R3	4613.2	4613.2	10670.6	314.9

从表 3 中可知，添加再生剂后短期老化沥青和长期老化沥青粘聚能均有所提高，但仍低于基质沥青的粘聚能。这表明三种再生剂成分有助于改善老化沥青的粘聚性能，但无法使老化沥青的粘聚性能完全恢复至未老化状态。添加油酸后老化沥青的粘聚能最高，这表明相较于亚油酸和乙基四氢化萘，油酸在改善老化沥青的粘聚性能方面表现更为优越。

4.1.2. 沥青与集料之间的粘附能

基质沥青、短期老化沥青、长期老化沥青与 4 种集料之间的粘附能如表 4 所示，添加再生剂后长期老化沥青与集料之间的粘附能结果如表 5 所示。结果表明：不同老化程度下沥青与 4 种集料之间的粘附能从大到小依次为： $\text{CaO} > \text{Al}_2\text{O}_3 > \text{MgO} > \text{SiO}_2$ 。其中 CaO 和 MgO 为碱性氧化物， Al_2O_3 为两性氧化物， SiO_2 为酸性氧化物，这表明碱性氧化物与沥青之间的粘附性大于酸性氧化物与沥青之间的粘附性，与宏

观实验结果一致[17]。分析再生剂种类对沥青-集料界面性能的影响,发现不同种再生剂在改善沥青-集料界面粘附性能方面存在显著差异,在不同的界面模型中,添加油酸和亚油酸对沥青-集料界面粘附性能的改善效果优于乙基四氢化萘。

Table 4. Asphalt-mineral adhesion energy

表 4. 沥青-集料的粘附能

氧化物	沥青种类	E_a (kcal/mol)	E_m (kcal/mol)	E_{am} (kcal/mol)	E_2 (kcal/mol)
SiO ₂	基质沥青	4956.4		-59266.2	538.7
	短期老化	5463.2	-63683.9	-58532.2	311.5
	长期老化	5928.3		-57985.8	230.2
MgO	基质沥青	4956.4		-1204796.2	742.3
	短期老化	5463.2	-1209010.3	-1204070.5	523.4
	长期老化	5928.3		-1203501.8	419.8
Al ₂ O ₃	基质沥青	4956.4		-1732099.4	825.5
	短期老化	5463.2	-1736230.3	-1731359.3	592.2
	长期老化	5928.3		-1730803.6	501.6
CaO	基质沥青	4956.4		-758176.8	958.7
	短期老化	5463.2	-762174.5	-757407.6	696.3
	长期老化	5928.3		-756826.7	580.5

Table 5. Asphalt-mineral adhesion energy after adding reclaiming agent

表 5. 添加再生剂后沥青-集料的粘附能

氧化物	再生剂	E_a (kcal/mol)	E_m (kcal/mol)	E_{am} (kcal/mol)	E_2 (kcal/mol)
SiO ₂	R1	3782.4		-59228.4	340.7
	R2	4342.7	-63683.9	-58564.6	328.9
	R3	4413.2		-58524.1	314.9
MgO	R1	3782.4		-1205797.8	569.9
	R2	4342.7	-1209010.3	-1205191.4	523.8
	R3	4413.2		-1205090.8	493.7
Al ₂ O ₃	R1	3782.4		-1733149.4	701.5
	R2	4342.7	-1736230.3	-1732536.3	648.7
	R3	4413.2		-1732410.9	593.8
CaO	R1	3782.4		-759161.6	769.5
	R2	4342.7	-762174.5	-758555.2	723.4
	R3	4413.2		-758418.6	657.3

4.2. 植物油对沥青 - 集料界面剪切强度的影响

4.2.1. 不同老化程度的界面剪切强度

由于 SiO_2 是集料的主要氧化物成分, 选用 SiO_2 晶体代表集料, 对不同老化程度的沥青 - 集料界面进行界面剪切试验, 并分析界面的破坏过程。剪切模拟过程中用 NVT 系综使系统温度稳定, 温度为 298 k, Andersen 温度控制器运行 100 ps, 步长 fs, 界面模型在 50~100 ps 之间达到稳定状态。沥青 - 集料的界面剪切破坏过程的相关结果如图 8 所示, 最高峰的峰位和峰值如表 6 所示。

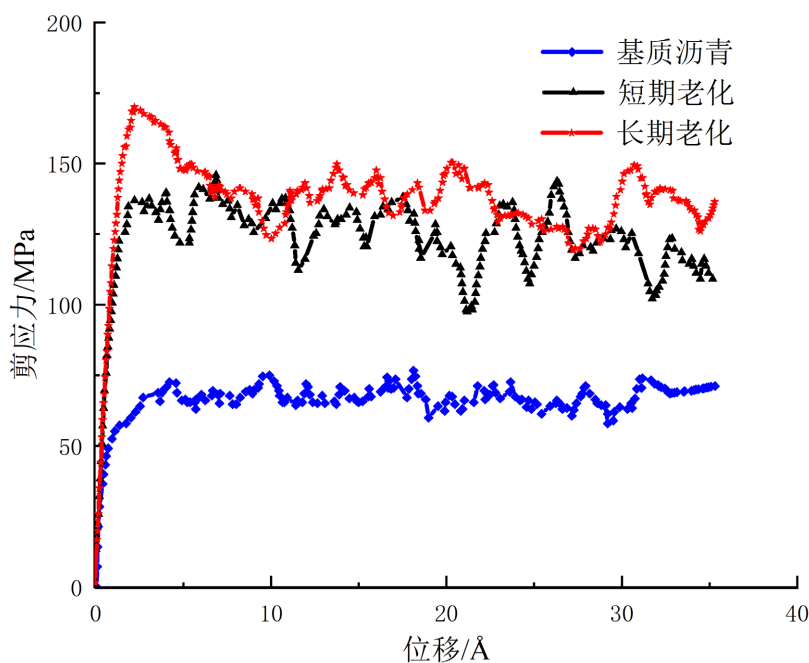


Figure 8. The curve of shear stress with displacement

图 8. 剪切应力随着位移的变化曲线

Table 6. Shear strength of the interface models

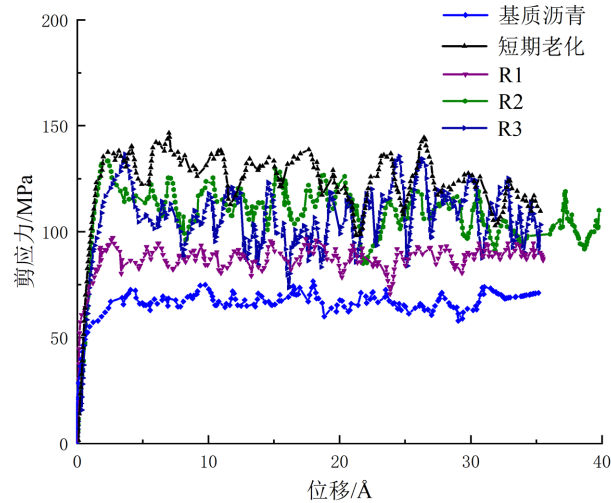
表 6. 界面模型的剪切强度

模型	基质沥青	短期老化	长期老化
峰位(Å)	5.092	7.798	2.575
峰值(MPa)	86.61	164.12	190.44
波动区平均值/MPa	76.53	138.28	155.75

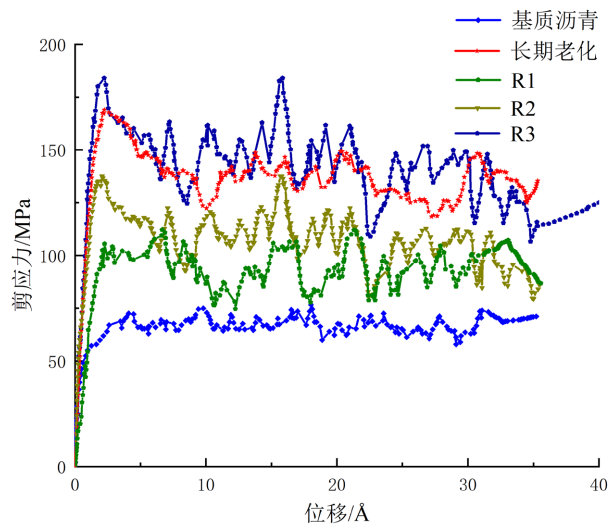
结果表明, 三种界面模型均呈现两段趋势, 以基质沥青 - 集料界面为例, 第一阶段剪切应力随着位移快速升高, 在位移 x 约 5 Å 时 τ 达到最大值 86.61 MPa; 第二阶段 τ 在 68.20 MPa~86.61 MPa 之间波动, 平均应力约为 76.53 MPa。剪切应力 τ 的缓慢变化表明系统在第二阶段的界面黏附失效时处于平衡状态, 未出现明显增加或减少的趋势。因此可以将剪切过程分为两个阶段, 第一阶段, 沥青与集料受到剪切应力的作用发生位移, 随着位移增大, 界面达到恒定速度剪切条件下的最大剪切应力。第二阶段, 达到最大剪切应力后, 剪切应力在一定范围内波动, 界面出现损伤或失效, 此时界面黏附失效处于平衡状态 [17]。

4.2.2. 再生剂成分对界面剪切强度的影响分析

添加再生剂后不同模型剪切破坏过程中剪切应力随着位移的变化曲线结果如图 9 所示，最高峰的峰位和峰值如表 7 所示。



(a) 短期老化



(b) 长期老化

Figure 9. The shear stress curve of interface model with displacement

图 9. 界面模型的剪切应力随着位移的变化曲线

Table 7. Shear strength of different models

表 7. 不同模型的剪切强度

模型	基质沥青	短期老化			长期老化				
		R1	R2	R3	R1	R2	R3		
峰位/Å	5.092	7.798	3.098	2.362	4.127	2.575	7.498	2.331	2.237
峰值/MPa	86.61	164.12	108.99	133.41	153.93	190.44	126.08	153.74	183.94
波动区平均/MPa	76.53	138.28	98.54	109.29	120.45	155.75	106.22	120.26	141.98

结果表明, 剪切强度的差异反映了沥青-集料界面在不同老化状态下的演变。随着沥青老化程度的增加, 进一步提高了界面的剪切强度。这是由于沥青老化后沥青质分子聚集, 增强了沥青分子间的相互作用, 形成更为坚固和紧密的分子结构, 从而提高了沥青的硬度。随着沥青硬度的提高其抗变形性能也随之增强, 在剪切加载下, 沥青变得更难被剪切或变形, 这与室内试验结果一致[17]。

对比添加再生剂后的界面剪切强度, 发现三种再生剂成分对老化沥青-集料界面的力学性能均产生了改善效果。短期老化沥青-集料、长期老化沥青-集料界面剪切强度均表现出下降趋势, 降幅超过了6.6%和3.5%。这表明再生剂会使沥青质分子在界面处发生部分解开或分离的现象[18], 导致界面结构变得更加松散。在剪切加载下, 沥青与集料之间的相对滑动更为容易, 从而导致界面剪切强度的降低。添加油酸和亚油酸模型的界面剪切强度低于添加乙基四氢化萘的模型, 这表明植物油在改善沥青-集料界面的力学性能方面具有显著的优越性。

5. 结语

本文采用 MD 方法构建沥青分子模型, 根据实际条件选择仿真模拟的参数, 进而构建沥青粘聚模型以及沥青-集料界面模型。在最新研究成果的基础上考虑了三种沥青老化状态和四种氧化物, 计算加入不同种再生剂后沥青混合料的粘聚能和粘附能, 并进行了受限剪切模拟, 分析再生剂种类对沥青-集料界面力学性能恢复的影响, 从而为再生剂的优化筛选提供途径。

研究结果表明, 相同条件下植物油在改善老化沥青混合料的粘附性能方面表现出优越性, 与石油基再生剂乙基四氢化萘相比, 植物油更有效地改善了界面的力学性能。因此, 在路面养护中选择再生剂材料时可优先考虑植物油等成分。本文对再生沥青混合料的微观性能研究结论主要在分子模拟的基础上确立, 暂无完整的试验验证以上结论。因此还需完善试验数据, 验证模拟方法的可靠性。

参考文献

- [1] Mirzamajeni, M., Aghayan, I., Behzadian, R., *et al.* (2023) Evaluation of Field Aging Effect on Self-Healing Capability of Asphalt Mixtures. *Construction and Building Materials*, **369**, Article ID: 130571. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2023.130571>
- [2] Gomez-Meijide, B., Ajam, H., Lastra-Gonzalez, A., *et al.* (2016) Effect of Air Voids Content on Asphalt Self-Healing Via Induction and Infrared Heating. *Construction and Building Materials*, **126**, 957-966. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2016.09.115>
- [3] Wan, P., Wu, S., Liu, Q., *et al.* (2023) Extrinsic Self-Healing Asphalt Materials: A Mini Review. *Journal of Cleaner Production*, **425**, Article ID: 138910. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2023.138910>
- [4] Zhang, R., You, Z., Wang, H., *et al.* (2019) The Impact of Bio-Oil as Rejuvenator for Aged Asphalt Binder. *Construction and Building Materials*, **196**, 134-143. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2018.10.168>
- [5] 满琦. 植物油再生沥青及沥青混合料性能研究[D]: [硕士学位论文]. 北京: 北京建筑大学, 2016.
- [6] Cao, X., Wang, H., Cao, W., *et al.* (2018) Investigation of Rheological and Chemical Properties Asphalt Binder Rejuvenated with Waste Vegetable Oil. *Construction and Building Materials*, **180**, 455-463. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2018.06.001>
- [7] Zahoor, M., Nizamuddin, S., Madapusi, S., *et al.* (2021) Sustainable Asphalt Rejuvenation Using Waste Cooking Oil: A Comprehensive Review. *Journal of Cleaner Production*, **278**, Article ID: 123304. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.123304>
- [8] Yan, S., Dong, Q., Chen, X., *et al.* (2022) Performance Evaluation of Waste Cooking Oil at Different Stages and Rejuvenation Effect of Aged Asphalt through Molecular Dynamics Simulations and Density Functional Theory Calculations. *Construction and Building Materials*, **350**, Article ID: 128853. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2022.128853>
- [9] Yan, S., Zhou, C., Ouyang, J., *et al.* (2022) Rejuvenation Effect of Waste Cooking Oil on the Adhesion Characteristics of Aged Asphalt to Minerals. *Construction and Building Materials*, **327**, Article ID: 126907. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2022.126907>

-
- [10] Li, D.D. and Greenfield, M.L. (2014) Chemical Compositions of Improved Model Asphalt Systems for Molecular Simulations. *Fuel*, **115**, 347-356. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2013.07.012>
- [11] 汤文, 郭颖君, 吕悦晶, 等. 植物油再生剂对老化沥青分子聚集行为的影响[J]. 重庆交通大学学报(自然科学版), 2022, 41(6): 92-97.
- [12] 汤文, 旷强, 张宇翔, 等. 植物油微胶囊沥青混合料的微观力学性能及自愈合机制研究[J]. 材料导报, 2024(4): 1-17.
- [13] Wang, P., Dong, Z., Tan, Y., *et al.* (2015) Investigating the Interactions of the Saturate, Aromatic, Resin, and Asphaltene Four Fractions in Asphalt Binders by Molecular Simulations. *Energy & Fuels*, **29**, 112-121. <https://doi.org/10.1021/ef502172n>
- [14] Horgnies, M., Darque-Ceretti, E., Fezai, H., *et al.* (2011) Influence of the Interfacial Composition on the Adhesion between Minerals and Bitumen: Investigations by EDX, XPS and Peel Tests. *International Journal of Adhesion & Adhesives*, **31**, 238-247. <https://doi.org/10.1016/j.ijadhadh.2011.01.005>
- [15] Gao, Y., Zhang, Y., Gu, F., *et al.* (2018) Impact of Minerals and Water on Bitumen-Mineral Adhesion and Debonding Behaviours Using Molecular Dynamics Simulations. *Construction & Building Materials*, **171**, 214-222. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2018.03.136>
- [16] 张晋铭. 拉压和剪切作用下两集料间沥青粘附机理分子动力学研究[D]: [硕士学位论文]. 福州: 福州大学, 2020.
- [17] 季野. 沥青老化行为对沥青-集料界面粘附性影响研究[D]: [硕士学位论文]. 南宁: 广西大学, 2017.
- [18] Khalaf, M.H. and Mansoori, G.A. (2018) A New Insight into Asphaltenes Aggregation Onset at Molecular Level in Crude Oil (an MD Simulation Study). *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **162**, 244-250. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2017.12.045>