

DOI: 10.16544/j.cnki.cn43-1494/u.2022012923081978

文章编号: 1674-599X(2023)04-0039-08

引用格式: 叶群山, 羊治宇, 周剑波. 生物油再生沥青-集料界面分子模拟研究[J]. 交通科学与工程, 2023, 39(4): 39-46.

Citation: YE Qunshan, YANG Zhiyu, ZHOU Jianbo. Molecular simulation on interface between bio-oil recycled asphalt and aggregate[J]. J. Transp. Sci. Eng., 2023, 39(4): 39-46.

生物油再生沥青-集料界面分子模拟研究

叶群山^{1,2}, 羊治宇², 周剑波²

(1. 长沙理工大学 道路结构与材料交通行业重点实验室, 湖南 长沙 410114;

2. 长沙理工大学 交通运输工程学院, 湖南 长沙 410114)

摘 要:为研究生物再生剂对老化沥青-集料之间相互作用的影响,基于分子动力学,分别建立基于干燥和潮湿两种工况的生物油再生沥青-弱碱性集料的界面模型,分析沥青组分在集料表面的空间分布,并计算其界面处的相互作用能。研究表明:3种再生剂中,腰果壳油解除沥青质分子团聚的效果最好。3种再生剂均会削弱老化沥青和集料之间的范德瓦尔斯力,腰果壳油和妥尔油通过在集料表面形成氢键,提高老化沥青的黏附性,降低老化沥青的湿度敏感性。选择沥青再生剂时,应考虑集料和再生剂之间的氢键作用,该作用有助于提高再生沥青和集料的黏附性。

关键词:分子动力学模拟;生物油;再生沥青;界面作用;黏附性

中图分类号:U414

文献标志码:A

Molecular simulation on interface between bio-oil recycled asphalt and aggregate

YE Qunshan^{1,2}, YANG Zhiyu², ZHOU Jianbo²

(1. Key Laboratory of Road Structure and Material of Communication Industry,

Changsha University of Science & Technology, Changsha 410114, China;

2. School of Traffic and Transportation Engineering, Changsha University of Science & Technology,
Changsha 410114, China)

Abstract: In order to study the effect of biological regenerant on the interaction between aged asphalt and aggregate, based on molecular dynamics, the interface models of bio-oil recycled asphalt-weak alkaline aggregate under dry and wet conditions were established respectively. The interaction energy at the interface was calculated. The results show that, among the three bio-oil rejuvenators, cashew nut shell oil has the best effect on relieving the agglomeration of asphaltene molecules. The van der Waals force between aged asphalt and aggregate will be weakened by three kinds of regenerant. forming hydrogen bonds on the surface of aggregate. The hydrogen bonds on the surface of aggregate can be formed by cashew nut shell oil and tall oil, improving the adhesion of aged asphalt and and reducing the humidity sensitivity of aged asphalt. When the asphalt regenerant will be selected, the hydrogen bonding between aggregate and regenerant should be considered, which is helpful to improve the adhesion between recycled asphalt and aggregate.

Key words: molecular dynamics simulation; bio-oil; rejuvenated asphalt; interface interaction; adhesion

收稿日期: 2022-01-29

基金项目: 湖南省教育厅科学研究重点项目(20A012); 长沙市科技计划项目(kq2014107); 交通运输部道路结构和材料重点实验室计划项目(kfj140301)

作者简介: 叶群山(1978—), 男, 长沙理工大学副教授。

沥青路面在服役过程中因长期受车辆荷载、水、热和光照等因素的影响,容易产生车辙、裂缝、坑槽等病害,导致沥青路面使用寿命缩短^[1-2]。为修复此类路面,需对其进行铣刨再生,恢复沥青的路用性能。随着生物质能源技术的发展,国内外许多学者研究利用生物质能源对老化沥青进行再生。已有研究表明:大豆油或玉米油生物基可作为老化沥青的再生剂,且只需要比石油基再生剂更少的用量就能恢复老化沥青相同的流变性能。当生物基和石油基的用量相同时,生物基再生剂对老化沥青的软化效果更显著^[3]。然而,沥青混合料作为由沥青、矿粉和集料组成的多相体系,其力学性能在很大程度上取决于沥青-集料界面的黏附能力^[4-5]。MA等^[6]使用原子力显微镜试验,分析了沥青老化和再生过程对沥青和二氧化硅颗粒黏附性的影响,发现沥青老化会增强沥青和二氧化硅的黏附性,添加食用油后,沥青黏附性会进一步增强。豆莹莹等^[7]基于表面能理论,分析了再生剂对老化沥青抗水损害性能的恢复效果,其研究表明:老化沥青的抗水损害性能的恢复效果与再生剂掺量呈正相关。

采用分子动力学模拟作为仿真实验,结合统计力学和热力学理论,对模拟输出的信息与宏观特征进行分析,可从微观粒子角度解释许多宏观现象的微观机理^[8]。基于分子动力学,建立沥青-集料界面模型,能直接观察到沥青分子和集料的吸附过程,用分子动力学分析沥青和集料的黏附机理。CUI等^[9]建立了沥青-SiO₂和沥青-Al₂O₃界面模型,研究了在水-热耦合作用下,沥青-集料黏附能的衰减过程,黏附功计算结果表明:水和高温均对沥青-集料间黏附性有负面作用,其中,水对其的影响比高温的更大。

对于不同集料,老化引起的沥青黏附性能变化各不相同,随着再生剂的掺入,其界面黏附行为会更复杂。目前,关于再生剂对老化沥青-集料之间黏附性的作用机制的研究较少,研究不同再生剂对老化沥青-集料黏附性能的改善规律,对于选择合理的再生剂及其掺量是十分重要的。因此,本研究基于分子动力学,建立再生沥青-集料界面模型,探索再生剂分子结构和官能团等因素对沥青-集料之间的黏附能、抗水损害性能的改善规律,以期老化沥青再生剂的选择提供参考。

1 建立分子模型

1.1 沥青分子模型

参考LI等^[10]基于美国SHRP计划建立的AAA-1型沥青模型,本研究选择四组分模型,建立原样沥青分子模型,这四组分模型共包含12种不同结构的分子;通过在沥青质、油分和芳香分分子的易氧化电位上添加氧原子,生成羰基和亚砷基,模拟沥青的长期老化过程。参考QU等^[11]相关内容的研究,选择NY1和NY3型沥青分子配比,建立原样和长期老化沥青分子模型,模型分子式与分子数量见表1。

表1 老化沥青与原样沥青分子数量

Table 1 Number of molecules of aged asphalt and virgin asphalt

沥青组分	原样沥青		老化沥青	
	分子式	分子数量	分子式	分子数量
沥青质	C ₄₂ H ₅₄ O	3	C ₄₂ H ₄₃ O ₅	4
	C ₆₆ H ₈₁ N	2	C ₆₆ H ₆₇ NO ₇	3
	C ₅₁ H ₆₂ S	4	C ₅₁ H ₅₄ O ₃ S	4
胶质	C ₄₀ H ₅₉ N	2	C ₄₀ H ₅₆ NO ₂	2
	C ₄₀ H ₆₀ S	2	C ₄₀ H ₅₆ O ₃ S	2
	C ₁₈ H ₁₀ S ₂	3	C ₁₈ H ₁₀ O ₂ S ₂	4
	C ₃₆ H ₅₇ N	2	C ₃₆ H ₅₃ NO ₂	2
	C ₂₉ H ₅₀ O	15	C ₂₉ H ₄₈ O ₂	17
饱和分	C ₃₀ H ₆₂	7	C ₃₀ H ₆₅	6
	C ₃₅ H ₆₂	7	C ₃₅ H ₆₂	7
芳香分	C ₃₅ H ₄₄	18	C ₃₅ H ₃₆ O ₄	13
	C ₃₀ H ₄₆	21	C ₃₀ H ₄₂ O ₂	15

1.2 再生剂分子模型

随着生物再生剂在沥青中的广泛应用,大豆油、蒸馏妥尔油和腰果壳油已被证实其用作沥青再生剂的可行性。本研究选择这3种生物油作为再生剂,从分子层面分析其对老化沥青-集料界面黏附性的改善作用。大豆油作为一种食用油脂,其主要成分为甘油三酯,又因构成脂肪酸的种类不同,大豆油中甘油三酯又可进一步细分,其中,含量较高的依次是LLL、LLO、PLL和LLL_n,其总和占甘油三酯的质量分数为57.21%~88.71%^[12]。蒸馏妥尔油含有约30%的松香酸和约70%的脂肪酸,该脂肪酸主要由油酸和亚油酸组成。腰果壳油含有70%腰果酚、20%强心酚和10%聚合物。

1.3 集料分子模型

选择 CaCO_3 分子建立碱性集料模型。先对矿物晶体进行切面处理,然后扩建超胞至接近沥青分子大小,最后在矿物表面添加真空层,将二维周期性结构变为三维周期性结构,三维集料分子模型如图1所示。

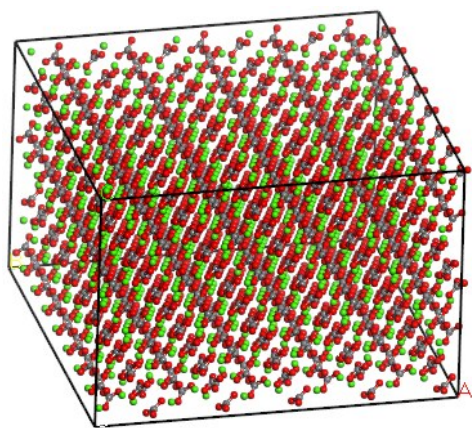


图1 三维集料模型

Fig. 1 Three-dimensional aggregate model

1.4 模型优化和参数设置

本研究选择COMPASS力场进行几何优化与动力学优化,选择Ewald方法确定体系静电能,选择Atombased方法确定体系的范德华能,范德华能计算的截断半径设置为 15.5×10^{-10} m,选择Nose控温方式,Andersen控压方式,压强设置为0.000 1 GPa,再生沥青中再生剂掺量为老化沥青质量分数的12%。

当构建沥青分子模型时,设定初始密度为 0.1 g/cm^3 ,构建无定型晶胞,随后进行20 000步的几何优化,使模型能量最小化;待能量收敛后进行200 ps的NVT动力学优化,使随机分布在晶胞中的分子在范德瓦尔斯力和静电力的作用下聚集在一起;接着在0.000 1 GPa条件下进行200 ps的NPT动力学优化,调整晶胞密度至接近实际状态,密度迭代计算结果如图2所示。在对其进行NPT优化后,基质沥青和老化沥青的密度分别升高至 0.99 g/cm^3 和 1.06 g/cm^3 ,且保持稳定,验证了所选模型的准确性;最后进行200 Ps的NVT(正则系综,系统温度 T 和体积 V 恒定)动力学模拟,获取分子运动轨迹,并进行计算分析,优化完成后原样沥青和老化沥青分子模型如图3所示。

为研究再生剂对老化沥青-集料界面黏附性和抗水损害性能的影响,分别建立了5种沥青(原样沥

青、老化沥青、大豆油再生沥青、蒸馏妥尔油再生沥青和腰果壳油再生沥青)和弱碱性集料(CaCO_3)在有/无水条件下的界面模型。建立界面模型时,需在沥青层上方添加厚度为 60×10^{-10} m的真空层以消除 z 方向的周期性,通过在沥青-集料界面添加200个水分子模拟水分侵入界面的过程,模型建立完成后,对界面模型依次进行20 000 ps的几何优化和200 ps的NVT动力学优化,使沥青层和集料层相互接触。原样沥青-集料界面模型如图4所示。

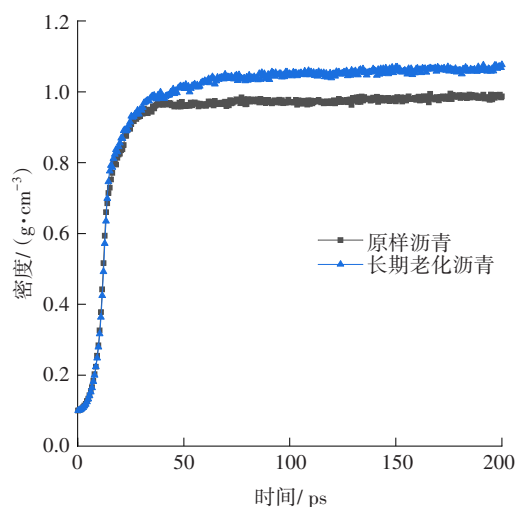
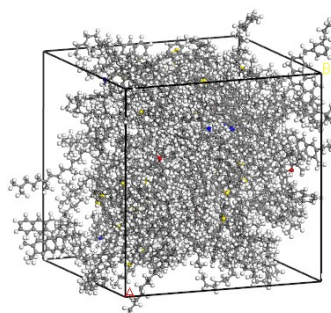
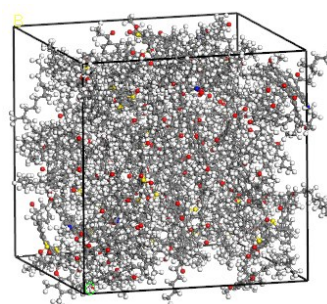


图2 沥青模型密度

Fig. 2 The density of asphalt model



(a) 原样沥青分子模型



(b) 老化沥青分子模型

图3 优化完成后沥青分子模型

Fig. 3 Molecular model of asphalt after optimization

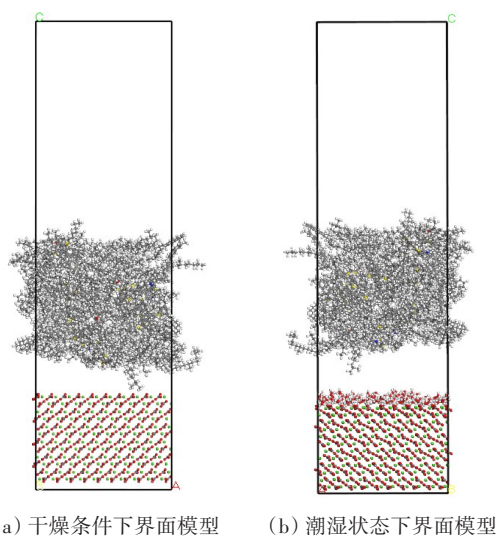


图4 原样沥青-集料界面模型

Fig. 4 Original asphalt-aggregate interface model

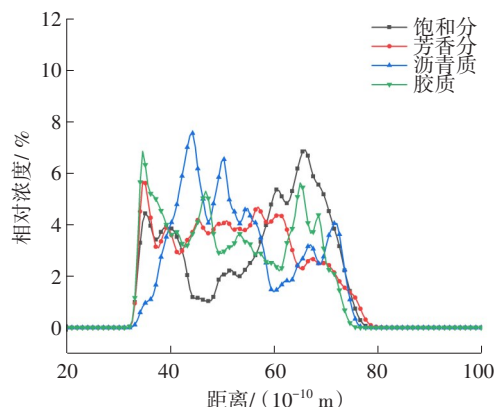
2 模拟结果与讨论

2.1 集料表面沥青组分分布

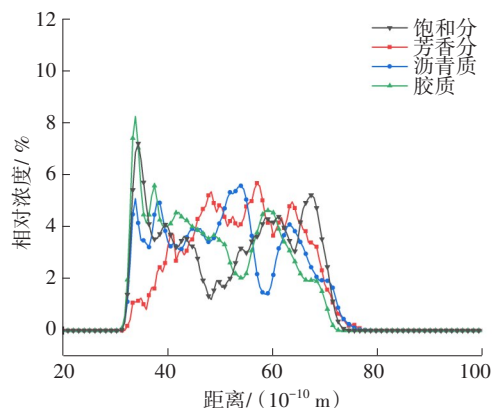
干燥条件下沥青四组分和再生剂的相对浓度分布曲线如图5所示。从图5可以看出,对于基质沥青和老化沥青,胶质的相对浓度峰均靠近集料表面且峰值大于其他组分的,这是因为胶质分子极性较高,沥青中极性强的分子更容易被吸附在集料表面,相比于沥青质分子的“岛状”结构,胶质分子结构更小,而且分子结构中支链较少,在集料表面吸附移动的过程中受到的空间位阻更小,更容易聚集在集料上方。沥青老化后,沥青质分子极性进一步增强,与集料表面的相互作用加剧,因此,在老化沥青-集料表面附近出现了沥青质的相对浓度峰,此外,饱和分也有聚集在集料表面的倾向,而芳香分在沥青分子中分布较为均匀。

加入再生剂分子后,沥青质和胶质分子的聚集行为受到干扰,具体表现为相对浓度峰值下降,且相对浓度峰向后方推移,随着沥青质和胶质远离集料表面,再生剂分子、饱和分分子和芳香分分子更倾向于在界面处聚集。在3种再生剂中,大豆油分子的极性最小,且分子体积最大。因此,除了在集料表面附近存在一个较小的相对浓度峰外,大部分大豆油分子分布在远离集料的位置,极性更大的蒸馏妥尔油分子和腰果壳油分子则更靠近集料表面。但腰果壳油分子在界面处显示出了最高的相对浓度峰,这是因为腰果壳油分子主要由腰果酚和腰果二酚构成,含

有较多的酚基,在靠近 CaCO_3 表面时会与集料表面的原子形成氢键,氢键的键能较大,使腰果壳油分子难以离开集料表面,在沥青分子的布朗运动下,越来越多的腰果壳油分子靠近集料表面被“捕获”,从而产生了较大的相对浓度峰。所有沥青模型中的沥青质相对浓度曲线中都出现了连续,且峰值点之间距离小于 $8.5 \times 10^{-10} \text{ m}$ 的结构,这可能是沥青质和沥青质之间的 $\pi-\pi$ 堆积所导致的, $\pi-\pi$ 堆积是一种存在于芳香环之间的弱相互作用。若峰值点之间的距离为 $4 \times 10^{-10} \sim 6 \times 10^{-10} \text{ m}$,则属于平行堆积;若距离为 $7 \times 10^{-10} \sim 8.5 \times 10^{-10} \text{ m}$,则属于垂直堆积^[13]。其中,大豆油再生沥青中沥青质二聚体位于 $54.5 \times 10^{-10} \text{ m}$ 附近,属于平行堆积;蒸馏妥尔油再生沥青中沥青质二聚体分别出现在 $37.8 \times 10^{-10} \text{ m}$ 和 $55.9 \times 10^{-10} \text{ m}$ 附近,均属于平行堆积;在腰果壳油再生沥青中,位于 $43.9 \times 10^{-10} \text{ m}$ 附近的两峰相距 $8.3 \times 10^{-10} \text{ m}$,属于垂直堆积。沥青老化会增加沥青质分子的极性,导致沥青质分子聚集,宏观上表现为沥青脆性提高^[14],在3种再生沥青中,腰果壳油再生沥青的沥青质二聚体之间的距离最远,表明腰果壳油解除沥青质团聚,恢复老化沥青分子构象的效果最好,CELLA-SILVA 等^[15]的研究也证实了腰果壳油具有解除沥青质分子团聚的能力。



(a) 原样沥青



(b) 老化沥青

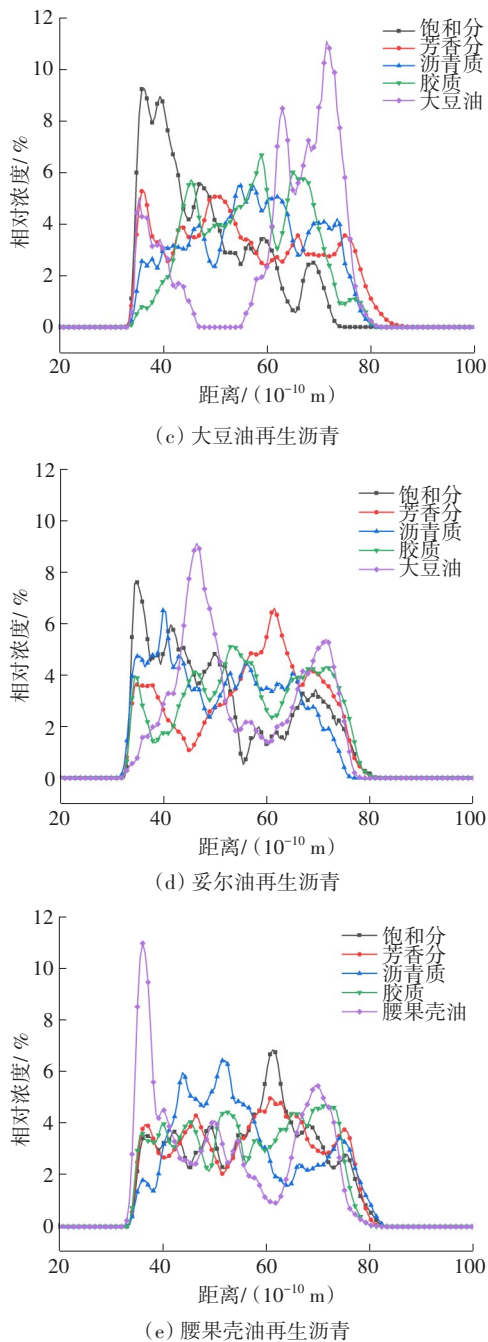


图5 干燥条件下集料表面沥青组分浓度分布

Fig. 5 The concentration of asphalt components on aggregate surface under dry condition

2.2 沥青-集料界面能分析

为了研究再生剂对老化沥青-集料界面黏附性的影响,使用黏附能 E_{ad} 评价沥青-集料界面黏附性的大小,其计算式为:

$$E_{ad} = -[E_{to} - (E_{as} + E_{ag})] \quad (1)$$

式中: E_{to} 为沥青-界面体系能量之和; E_{ad} 为沥青-界面黏附能; E_{as} 为沥青层能量; E_{ag} 为集料层能量。

沥青- CaCO_3 界面体系黏附能计算结果如图6所示。界面总能量由范德华能和静电能组成。对

于所有的沥青模型,在沥青- CaCO_3 界面中,在产生界面黏附作用过程中,范德瓦尔斯力占主导地位,而静电力对界面黏附作用的贡献较小。沥青老化后,其界面能上升,而范德瓦尔斯力下降,这与刘晋周等^[16]的模拟计算和表面能试验的结果一致。图7为集料中5种沥青的浓度分布曲线。范德瓦尔斯力属于短程力,主要作用在 $0 \sim 5 \times 10^{-10} \text{ m}$ 范围内,且范德瓦尔斯力与原子间距离成反比,与原子密度成正比。在 $0 \sim 5 \times 10^{-10} \text{ m}$ 范围内,基质沥青和老化沥青与集料表面的距离基本相同,但基质沥青的相对浓度大于老化沥青的,因此,基质沥青和集料之间会产生更大的范德华力;静电力大小则与原子间距离和原子所带的电荷有关,沥青氧化后,氧原子和沥青分子结合,增强了沥青和集料之间的静电力,与原样沥青相比,老化沥青-集料界面范德华能降低了17.6 kcal/mol,静电能提高了104.5 kcal/mol,总体表现为黏附性上升。

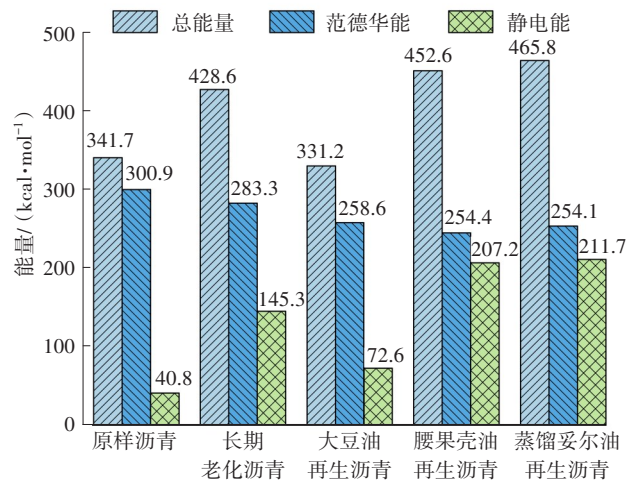
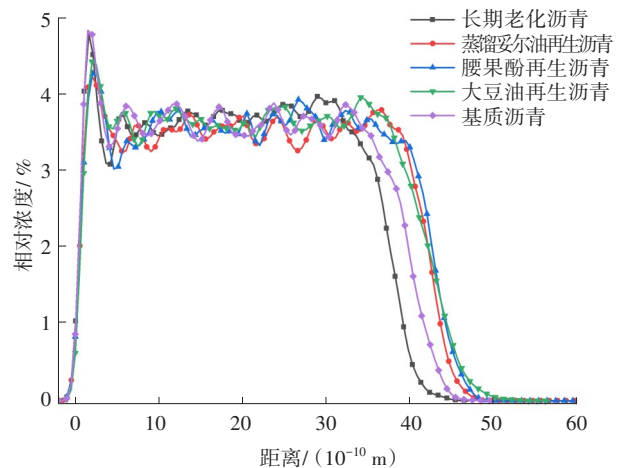
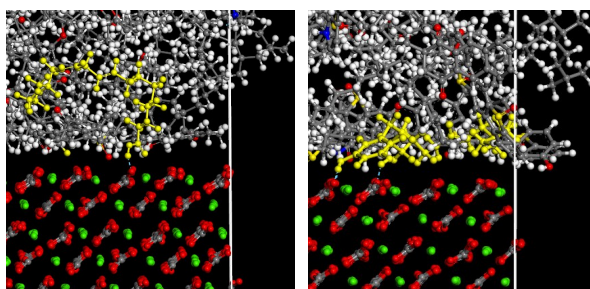
图6 界面黏附能
Fig. 6 Adhesion energy of interface

图7 集料表面沥青层浓度分布

Fig. 7 The concentration distribution of asphalt layer on aggregate surface

分别掺入3种不同的再生剂后,界面能呈现出不同的变化规律,大豆油使老化沥青的黏附能降低了22.7%,使老化沥青的界面黏附能更接近原样沥青,MATOLIA等^[17]的研究也发现以甘油三酯为主要成分的植物油可以在一定程度上恢复老化沥青的表面能。腰果壳油和蒸馏妥尔油则会进一步提高老化沥青和集料的黏附能。在 $0 \sim 5 \times 10^{-10}$ m的分子中,密度最大的为大豆油再生沥青,其余依次为蒸馏妥尔油再生沥青和腰果壳油再生沥青,因此,大豆油再生沥青的界面范德华能最高。蒸馏妥尔油再生沥青和腰果壳油再生沥青界面模型如图8所示。在蒸馏妥尔油再生沥青-集料界面中,油酸尾部的羧基可以与集料表面的氧原子形成氢键(图8中虚线部分),大大提高了界面的静电能。同样地,在腰果壳油再生沥青-集料界面中,腰果酚和强心酚的酚基可以与集料表面的氧原子形成氢键,提高其界面的黏附能,而大豆油再生沥青和集料间不存在氢键。



(a) 妥尔油再生沥青界面模型 (b) 腰果壳油再生沥青界面模型

图8 再生剂-集料间氢键作用示意

Fig. 8 Hydrogen bonding between regenerant-aggregate

2.3 沥青-集料界面湿度敏感性分析

对于水侵入沥青-集料界面的情况,使用分离能 E_{de} 计算水从沥青-集料界面置换沥青时所需要的能量计算式为:

$$E_{de} = E_{aw} + E_{agw} - E_{aag} \quad (2)$$

式中: E_{aw} 为沥青-水之间相互作用能; E_{agw} 为集料-水之间相互作用能; E_{aag} 为沥青-集料之间相互作用能。

使用能量比 r 计算沥青-集料界面的湿度敏感性大小,其计算式为:

$$r = \left| \frac{E_{ad}}{E_{de}} \right| \quad (3)$$

式中: E_{ad} 为干燥条件下沥青-集料之间的黏附能; E_{de} 为潮湿条件下沥青-集料之间的分离能。

能量比和分离能的计算结果见表2。能量比越高,表明界面对水的敏感性越小。由表2可知,集料和水之间的相互作用能远大于集料和沥青之间的相互作用能,表明:对于 CaCO_3 这种弱碱性集料,在水分子存在的情况下,集料更倾向与水分子结合,在水分子侵入界面后,沥青和集料之间的距离增大,导致范德瓦尔斯力和静电力下降,破坏了沥青和集料之间的黏附作用。

分离能计算结果表明:所有沥青和集料之间的分离能都是负值,所以水分子从沥青和集料界面置换沥青分子是自发进行的,不需要额外做功,且分离能的计算结果主要取决于集料和水之间相互作用能的大小。根据 r 的计算结果,5种沥青湿度敏感性由低到高排序依次为:大豆油再生沥青、基质沥青、长期老化沥青、腰果壳油再生沥青、蒸馏妥尔油再生沥青。

表2 分离能与能量比计算结果

Table 2 Calculation results of separation energy and energy ratio

	$E_{aw} /$ ($\text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$)	$E_{agw} /$ ($\text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$)	$E_{aag} /$ ($\text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$)	$E_{de} /$ ($\text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$)	r
基质沥青	-118.284	-3 119.95	-93.6494	-3 144.58	0.109
长期老化 沥青	-209.105	-3 236.6	-106.647	-3 339.06	0.128
大豆油再 生沥青	-142.933	-3 280.78	-97.9525	-3 325.76	0.100
腰果壳油 再生沥青	-219.518	-3 185.71	-102.954	-3 302.27	0.137
蒸馏妥尔油 再生沥青	-175.181	-3 169.23	-97.7506	-3 246.66	0.143

3 结论

1) 在沥青- CaCO_3 界面中,沥青的老化会促进沥青质和胶质在集料表面聚集,掺入再生剂后,再生剂会替代一部分沥青质吸附在集料表面,能与集料表面的氧原子形成氢键的再生剂分子在集料表面的相对浓度较高。

2) 通过浓度分布曲线可知沥青质二聚体的空间分布情况,氧化与老化均会加剧沥青质分子的团聚作用。在3种再生剂中,腰果壳油消除沥青质分子团聚作用的效果最好。

3) 沥青和 CaCO_3 之间的黏附能主要由范德华

能和静电能组成,3种再生剂均会增大沥青和集料之间的空间距离,降低集料界面的范德华能,其中蒸馏妥尔油分子和腰果壳油分子能与集料表面形成氢键,提高界面的静电力。在潮湿状态下, CaCO_3 更倾向于和水分子结合,水分子置换集料表面的沥青分子是自发进行的,掺入蒸馏妥尔油和腰果壳油有助于降低老化沥青的湿度敏感性。

4) 在进行生物再生剂的研发时,对于碱性集料,可以选择分子中含有O-H或N-H等能形成氢键基团的再生剂,增强沥青和集料之间的静电相互作用,提高再生沥青和集料的黏附性与混合料的力学性能。

参考文献(References):

- [1] YU X K, ZAUMANIS M, DOS SANTOS S, et al. Rheological, microscopic, and chemical characterization of the rejuvenating effect on asphalt binders [J]. *Fuel*, 2014, 135: 162-171. DOI: 10.1016/j.fuel.2014.06.038.
- [2] 江圣泽, 盛昀, 方学东. 贵州某机场沥青道面反“Z”形隆起成因分析[J]. *交通科学与工程*, 2021, 37(4): 20-23, 58. DOI: 10.16544/j.cnki.cn43-1494/u.2021.04.003. JIANG Shengze, SHENG Yun, FANG Xuedong. Anti-Z type uplift mechanism analysis of asphalt pavement of an airport in Guizhou [J]. *Journal of Transport Science and Engineering*, 2021, 37 (4) : 20-23, 58. DOI: 10.16544/j.cnki.cn43-1494/u.2021.04.003.
- [3] ZAUMANIS M, MALLICK R B, FRANK R. Determining optimum rejuvenator dose for asphalt recycling based on superpave performance grade specifications [J]. *Construction and Building Materials*, 2014, 69: 159-166. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2014.07.035.
- [4] GAO X W, FAN Z P, ZHANG J P, et al. Micromechanical model for asphalt mixture coupling inter-particle effect and imperfect interface [J]. *Construction and Building Materials*, 2017, 148: 696-703. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2017.05.015.
- [5] 梅晨悦, 刘子铭, 祁静, 等. 小粒径排水型超薄罩面路用性能研究[J]. *公路与汽运*, 2019(2): 84-87, 92. DOI: 10.3969/j.issn.1671-2668.2019.02.023. MEI Chenyue, LIU Ziming, QI Jing, et al. Study on road performance of small particle size drainage ultra-thin overlay [J]. *Highways & Automotive Applications*, 2019 (2) : 84-87, 92. DOI: 10.3969/j. issn. 1671-2668.2019.02.023.
- [6] MA W B, HUANG T B, GUO S C, et al. Atomic force microscope study of the aging/rejuvenating effect on asphalt morphology and adhesion performance [J]. *Construction and Building Materials*, 2019, 205: 642-655. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2019.01.151.
- [7] 豆莹莹, 李晓民, 姚志杰, 等. 基于表面自由能的再生沥青粘附性及其水稳定性[J]. *材料科学与工程学报*, 2020, 38(4): 648-653. DOI: 10.14136/j.cnki.issn1673-2812.2020.04.024. DOU Yingying, LI Xiaomin, YAO Zhijie, et al. Adhesion and water stability of regenerated asphalt based on surface free energy [J]. *Journal of Materials Science and Engineering*, 2020, 38 (4) : 648-653. DOI: 10.14136/j.cnki.issn1673-2812.2020.04.024.
- [8] XU G J, WANG H. Molecular dynamics study of interfacial mechanical behavior between asphalt binder and mineral aggregate [J]. *Construction and Building Materials*, 2016, 121: 246-254. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2016.05.167.
- [9] CUI B Y, GU X Y, HU D L, et al. A multiphysics evaluation of the rejuvenator effects on aged asphalt using molecular dynamics simulations [J]. *Journal of Cleaner Production*, 2020, 259: 120629. DOI: 10.1016/j.jclepro.2020.120629.
- [10] LI D D, GREENFIELD M L. Chemical compositions of improved model asphalt systems for molecular simulations [J]. *Fuel*, 2014, 115: 347-356. DOI: 10.1016/j.fuel.2013.07.012.
- [11] QU X, LIU Q, GUO M, et al. Study on the effect of aging on physical properties of asphalt binder from a microscale perspective [J]. *Construction and Building Materials*, 2018, 187: 718-729. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2018.07.188.
- [12] 张东, 龙伶俐, 薛雅琳, 等. 基于高效液相色谱-串联四极杆飞行时间质谱法的大豆油甘油三酯组成特性分析[J]. *中国油脂*, 2012, 37(12): 81-84. ZHANG Dong, LONG Lingli, XUE Yalin, et al. Analysis of soybean oil triglycerides characteristics by HPLC/Q-TOF [J]. *China Oils and Fats*, 2012, 37(12): 81-84.
- [13] PAHLAVAN F, MOUSAVI M, HUNG A M, et al. Characterization of oxidized asphaltenes and the restorative effect of a bio-modifier [J]. *Fuel*, 2018, 212: 593-604. DOI: 10.1016/j.fuel.2017.10.090.
- [14] SAMIEADEL A, ISLAM RAJIB A, PHANI RAJ

- DANDAMUDI K, et al. Improving recycled asphalt using sustainable hybrid rejuvenators with enhanced intercalation into oxidized asphaltenes nanoaggregates [J]. *Construction and Building Materials*, 2020, 262: 120090. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2020.120090.
- [15] CELIA-SILVA L G, VILELA P B, MORGADO P, et al. Preaggregation of asphaltenes in the presence of natural polymers by molecular dynamics simulation [J]. *Energy & Fuels*, 2020, 34(2): 1581-1591. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.9b03703.
- [16] 刘晋周, 张金生, 于斌, 等. 钢渣矿物组分与沥青黏附的分子模拟和试验研究 [J]. *东南大学学报(自然科学版)*, 2021, 51(6): 1009-1017. DOI: 10.3969/j.issn.1001-0505.2021.06.013.
- LIU Jinzhou, ZHANG Jinsheng, YU Bin, et al. Molecular simulation and experimental research on adhesion between mineral components of steel slag and asphalt [J]. *Journal of Southeast University (Natural Science Edition)*, 2021, 51(6): 1009-1017. DOI: 10.3969/j.issn.1001-0505.2021.06.013.
- [17] MATOLIA S, GUDURU G, GOTTUMUKKALA B, et al. An investigation into the influence of aging and rejuvenation on surface free energy components and chemical composition of bitumen [J]. *Construction and Building Materials*, 2020, 245: 118378. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2020.118378.
- (责任编辑:欧兆虎;校对:李脉;英文编辑:陈璐)

(上接第23页)

- 5, 11. DOI: 10.3969/j.issn.1002-0268.2011.04.001.
- ZHANG Junhui, HUANG Xiaoming. Centrifuge model tests and numerical simulation of geosynthetic-reinforced embankment for expressway widening [J]. *Journal of Highway and Transportation Research and Development*, 2011, 28(4): 1-5, 11. DOI: 10.3969/j.issn.1002-0268.2011.04.001.
- [9] 曹杰, 郑建国, 张继文, 等. 不同边界条件下黄土高填方沉降离心模型试验 [J]. *中国水利水电科学研究院学报*, 2017, 15(4): 256-262. DOI: 10.13244/j.cnki.jiwhr.2017.04.003.
- CAO Jie, ZHENG Jianguo, ZHANG Jiwen, et al. Centrifuge model tests of loess high-filled settlement under different boundary condations [J]. *Journal of China Institute of Water Resources and Hydropower Research*, 2017, 15(4): 256-262. DOI: 10.13244/j.cnki.jiwhr.2017.04.003.
- [10] 浙江省交通运输厅. 高速公路改扩建设计细则: JTG/T L11—2014[S]. 北京: 人民交通出版社, 2015.
- Zhejiang Provincial Communication Department. Guidelines for design of expressway reconstruction and extension: JTG/T L11—2014 [S]. Beijing: China Communications Press, 2015.
- (责任编辑:罗容;校对:李脉;英文编辑:田湘)