

DOI:10.16544/j.cnki.cn43-1494/u.20240122001

文章编号:1674-599X(2026)02-0124-09

引用格式:叶群山,范玲旖,张思敏.废食用油-SBS复合再生剂再生沥青相容性分子模拟研究[J].交通科学与工程,2026,42(2):124-132.

Citation: YE Qunshan, FAN Lingyi, ZHANG Simin. Molecular simulation study on compatibility of reclaimed asphalt with waste cooking oil-SBS composite recycling agent[J]. Journal of Transport Science and Engineering, 2026, 42(2): 124-132.

废食用油-SBS复合再生剂再生沥青相容性分子模拟研究

叶群山,范玲旖,张思敏

(长沙理工大学 交通学院,湖南 长沙 410114)

摘要:【目的】探究不同分子构型及嵌段比的苯乙烯-丁二烯-苯乙烯(styrene-butadiene-styrene, SBS)在老化沥青和废食用油(waste cooking oil, WCO)混合体系中相容性的差异,并研究WCO对SBS分子链行为的影响机制。【方法】采用分子动力学模拟SBS分子构型、嵌段比对SBS与WCO、沥青之间相容性的影响。通过复合再生沥青分子的扩散系数评价各组分的扩散能力,结合溶解度、相互作用能和均方回转半径表征WCO对SBS的增容作用。【结果】与星形SBS分子相比,线性SBS分子与老化沥青的相容性更好;SBS嵌段比越小,分子扩散能力越强,降低嵌段比可促进SBS分子向老化沥青层的扩散;嵌段比为3:7的线性SBS分子在体系中的分子链尺寸最大,WCO对该线性SBS分子与沥青相容性的改善作用最大。【结论】SBS的分子构型和嵌段比显著影响SBS分子在WCO-老化沥青体系中的相容性和扩散行为。

关键词:SBS;废食用油;再生沥青;分子动力学;相容性

中图分类号:U414

文献标志码:A

Molecular simulation study on compatibility of reclaimed asphalt with waste cooking oil-SBS composite recycling agent

YE Qunshan, FAN Lingyi, ZHANG Simin

(School of Transportation, Changsha University of Science & Technology, Changsha 410114, China)

Abstract: [Purposes] This paper aims to investigate the differences in compatibility of styrene-butadiene-styrene (SBS) with different molecular structures and block proportions in aged asphalt and waste cooking oil (WCO) mixtures, and to study the influencing mechanism of WCO on the behavior of SBS molecular chains. [Methods] Molecular dynamics was applied to simulate the impact of SBS molecular configuration and block ratio on the compatibility of SBS with WCO and asphalt. The diffusion coefficients of composite reclaimed asphalt molecules were used to evaluate the diffusion capacity of each component, and the solubility, interaction energies and mean square radius of gyration were combined to characterize the compatibilizing effect of WCO on SBS. [Findings] Linear SBS molecules exhibited superior compatibility with aged asphalt compared to star-shaped SBS molecules. A smaller SBS block ratio correlates with increased molecular diffusion capacity, and the reduction of the block ratio promotes the diffusion of SBS molecules into the aged asphalt layer. Linear SBS molecules with a segment ratio of 3:7 also exhibited the maximum molecular chain size within the system, and WCO has the greatest effect on improving the linear SBS molecules' compatibility with

收稿日期:2024-01-22

基金项目:国家自然科学基金项目(52378437)

通信作者:叶群山(1978—),男,教授,主要从事路面新材料、固体废弃物资源化利用方面的研究工作。

E-mail: yequnshan@csust.edu.cn

投稿网址:https://jtkxygc.csust.edu.cn/jtkxygc/home

asphalt. [Conclusions] The molecular configuration and block proportion of SBS significantly influence its compatibility and diffusion behavior in WCO-aged asphalt systems.

Key words: SBS; waste cooking oil; reclaimed asphalt; molecular dynamics; compatibility

沥青路面维修养护过程中产生了大量的废旧沥青混合料,对其进行二次利用可以有效保护环境、节约资源、提高道路质量,同时也会产生一定的经济效益^[1-3]。废食用油(waste cooking oil, WCO)作为一种具备发展潜力的沥青再生剂,其所含元素与石油沥青相似,可以补充轻质组分,对老化沥青有较好的再生效果,但WCO中的小分子会降低老化沥青的高温性能^[4-6]。通过苯乙烯-丁二烯-苯乙烯(styrene-butadiene-styrene, SBS)与WCO复配再生剂能有效改善再生沥青的高温性能^[7]。而聚合物与沥青的相容性是影响再生沥青高温性能的关键因素,WCO中的小分子有助于改善聚合物与沥青之间的相容性,促进SBS在再生沥青中均匀分散^[8-9]。

LIU等^[10]通过原子力显微镜(atomic force microscope, AFM)发现再生沥青表面“蜂状”结构分散,表明油补充了轻质组分,实现了大分子在老化沥青中的分散,同时提高了SBS和乙烯/醋酸乙烯酯(ethylene vinyl acetate, EVA)改性沥青的储存稳定性,且当WCO用量为10%时,SBS和EVA的相容性最佳。SBS的嵌段比影响其在沥青中的扩散和黏附效果,SBS与沥青发生物理交联,且丁二烯比例越高的SBS与沥青的混溶程度越高^[11]。通过分子动力学模拟计算,可以量化SBS与沥青之间的相互作用。LI等^[12]以相互作用能和溶解度为指标评价了沥青与SBS的相容性,发现160℃时的相容性远比120℃时的好,即升温会改善二者的相容性。

本研究采用分子动力学方法研究SBS-WCO复合再生剂与沥青的相容性,构建WCO、沥青和SBS高聚物的分子模型,从纳观尺度监测不同结构SBS分子和沥青的相互作用,分析WCO对不同结构SBS分子与沥青相容性的影响,以扩散系数、溶解度、相互作用能和均方回转半径为评价指标,确定与沥青相容性最佳的SBS分子结构。

1 建模与参数设置

1.1 单分子基本模型

本文选用DEREK提出的12种分子模型,建立基质沥青模型(图1,图中字母为分子代号)。在沥

青分子中易氧化位点用氧原子取代氢原子,构建老化沥青12种分子模型(图2)^[13-14]。试验所用的基质沥青为70#石油沥青,购自湖南宝利沥青有限公司。对老化沥青按照《公路工程沥青及沥青混合料试验规程》(JTG 3410—2025)中的方法进行室内模拟老化:先后使用旋转薄膜加热试验和加速老化沥青试验对基质沥青进行短期、长期老化,制得老化沥青。沥青老化前后的常规性能见表1。对基质沥青和老化沥青进行四组分试验,模型中各组分的质量分数与试验所得质量分数间的误差均在0.30%以内(表2)。

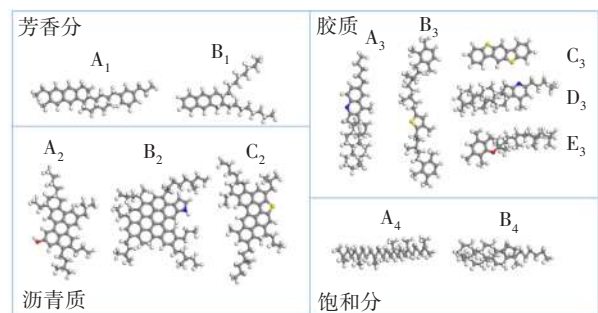


图1 基质沥青的12种分子模型

Fig. 1 Twelve kinds of molecular models of base asphalt

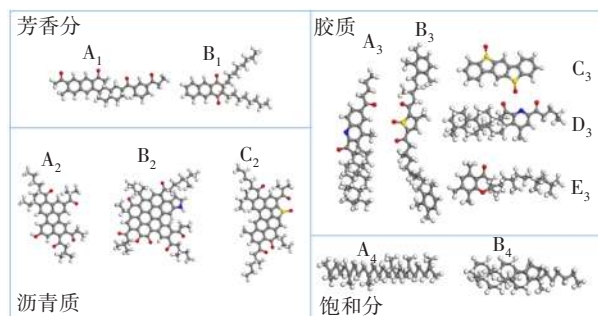


图2 老化沥青的12种分子模型

Fig. 2 Twelve kinds of molecular models of aged asphalt

表1 沥青老化前后的常规性能

Table 1 General performances of asphalt before and after aging

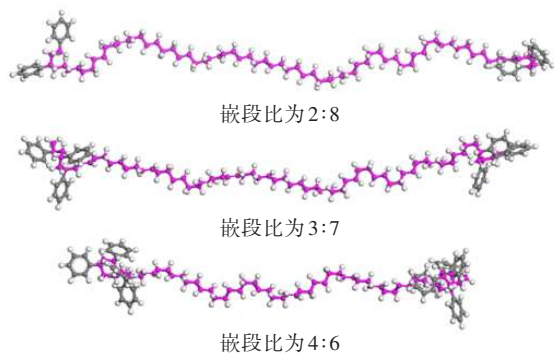
性能指标	基质沥青	老化沥青	试验方法
针入度(25℃, 100 g, 5 s)/0.1 mm	57.5	21.4	T0604
延度(15℃, 5 cm/min)/cm	>100	3	T0605
软化点(环球法)/℃	50	63	T0606

表2 基质沥青和老化沥青的分子配比

Table 2 Molecular ratios of base asphalt and aged asphalt

四组分	基质沥青					老化沥青				
	分子名称	分子数	原子数	模型中的质量分数/%	试验所得质量分数/%	分子名称	分子数	原子数	模型中的质量分数/%	试验所得质量分数/%
芳香分	A ₁	13	1 027	40.14	40.41	A ₁	16	1 200	33.94	33.89
	B ₁	14	1 064			B ₁	8	592		
沥青质	A ₂	2	194	11.81	11.77	A ₂	2	186	16.01	15.87
	B ₂	1	148			B ₂	2	282		
	C ₂	2	228			C ₂	3	333		
胶质	A ₃	2	200	24.92	24.93	A ₃	1	98	32.88	32.89
	B ₃	2	202			B ₃	7	700		
	C ₃	11	330			C ₃	13	416		
	D ₃	2	188			D ₃	2	184		
	E ₃	2	160			E ₃	3	237		
饱和分	A ₄	8	736	23.13	22.89	A ₄	5	460	17.17	17.35
	B ₄	7	679			B ₄	8	776		

按照分子结构可将SBS分子分为线性SBS分子和星形SBS分子,如图3所示^[15]。在Materials Studio软件中,根据SBS单体分子式通过Visualizer模块构建SBS单体分子结构,并通过Build模块构建不同嵌段比的线性SBS分子和星形SBS分子,本文嵌段比指的是苯乙烯与丁二烯链段的质量比。



(a) 线性SBS分子



(b) 星形SBS分子

图3 SBS分子结构

Fig. 3 Structure of SBS molecules

在废食用油的红外光谱中未发现其他明显的特征峰,由此推测WCO中无其他杂质(图4)。结合LUO等^[16]的研究结果,本研究选用具有长链结构的

亚油酸分子作为代表分子进行建模,分别构建脂肪酸分子和甘油三酯分子模型,如图5所示。

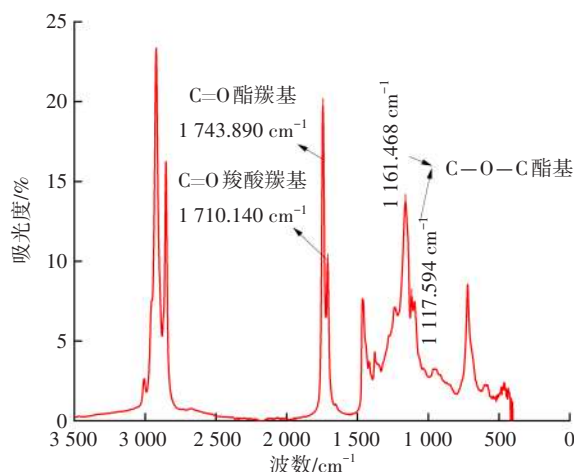


图4 WCO红外光谱

Fig. 4 Infrared spectrogram of WCO

构建SBS-WCO/老化沥青层状体系,将嵌段比为2:8的线性SBS分子和星形SBS分子分别命名为L28和R28,将其与WCO、老化沥青所构建的层状体系分别命名为L28-WA和R28-WA,以此类推,将其余体系分别命名为L37-WA、L46-WA、R37-WA、R46-WA。同时,构建SBS/老化沥青层状体系(L28-A、L37-A、L46-A、R28-A、R37-A、R46-A)作为对照体系。

1.2 沥青分子的建模及优化

根据所选分子、力场、边界条件和热力学控制参数,首先,对所有单个分子进行能量最小化,接着通过Amorphous Cell模块构建基质沥青、老化沥青

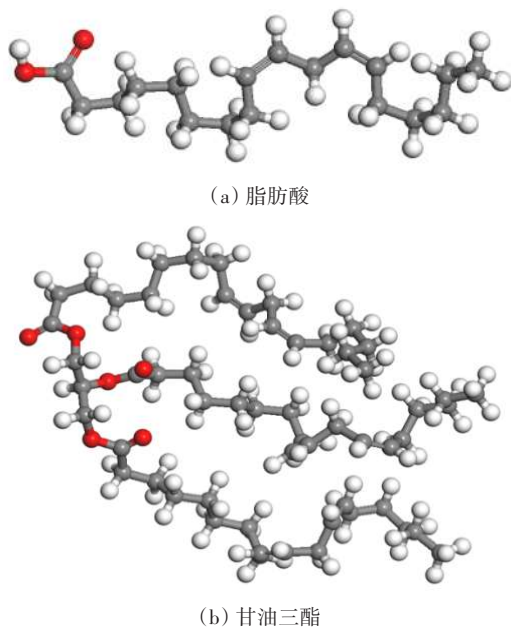
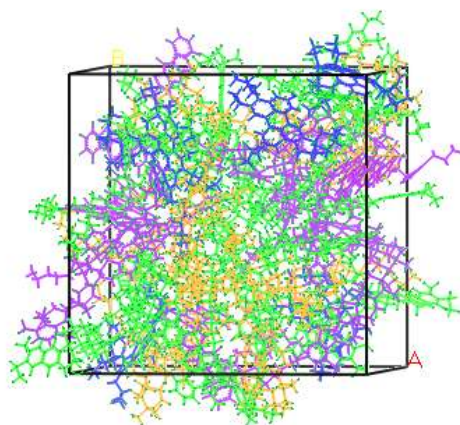


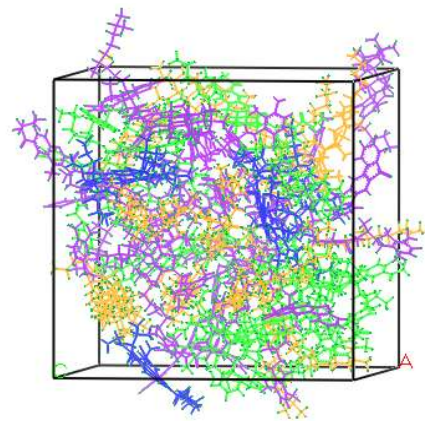
图5 废食用油代表分子模型

Fig. 5 Representative molecular model of WCO

和再生剂分子模型。为防止分子链缠绕或重叠,以 0.1 g/cm^3 为初始密度、 1.0 g/cm^3 为目标密度建立无定形晶胞,保证所有分子随机分布。基于Smart算法,通过Forcite模块进行能量最小化处理,设置最大迭代步长为20 000,精度为Fine,截断半径为 15.5 \AA ,力场为COMPASS II,选择Ewald方法求解体系的静电非键相互作用,使用Atom Based方法计算体系的范德华非键相互作用,设置电荷为Force Field。在优化过程中,体系能量在步长范围内逐渐减小并收敛。其次,在宏观正则(NVT)系综下,通过Dynamic功能固定温度为298 K,对几何优化后的结构进行200 ps模拟,使分子聚集在一起。最后,在等压等温(NPT)系综下优化400 ps,压缩晶胞使分子密度趋向于收敛。优化后的基质沥青、老化沥青分子模型如图6所示。



(a) 基质沥青



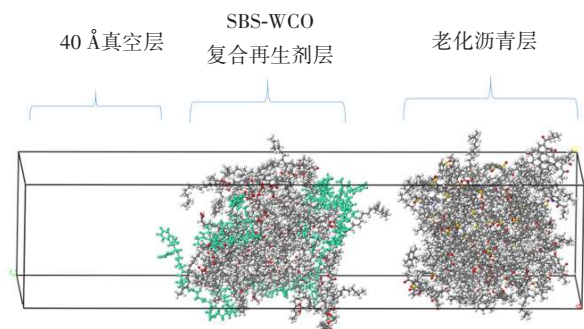
(b) 老化沥青

图6 优化后的沥青分子模型

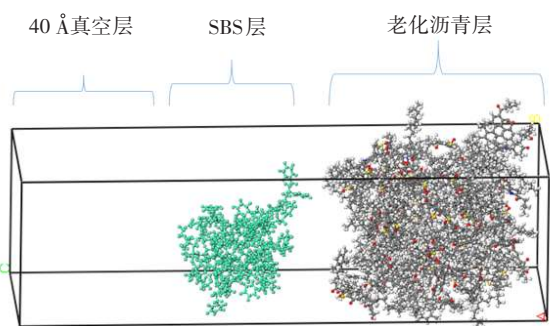
Fig. 6 Optimized molecular models of asphalt

1.3 扩散模型的构建与优化

以L28-WA和L28-A层状体系为例进行优化。步骤为:1)对L28-WCO体系进行20 000步几何优化;2)选择NPT系综,在453.15 K的温度下进行400 ps的动力学优化,使体系内的分子充分接触并达到平衡状态;3)校核SBS-WCO体系的盒子尺寸,使SBS-WCO共混体系的尺寸与优化后的老化沥青分子模型的尺寸相匹配,使用Build Layers功能将老化沥青分子模型和L28-WCO共混体系组合在一起;4)在z轴上增加 40 \AA 厚的真空层,以消除z轴上的周期性分子对镜像相互作用的影响,优化后的扩散模型如图7(a)所示;5)通过Amorphous Cell的Construction功能,以初始密度 0.1 g/cm^3 和目标密度 1.0 g/cm^3 ,将嵌段比为2:8的线性SBS分子结构组合成一个无定形晶胞L28,其优化步骤及参数设置与沥青分子的相同;6)用优化完成的老化沥青分子模型、L28体系和 40 \AA 厚的真空层构建L28-A体系,如图7(b)所示;7)将图7所示的两种层状体系进行20 000步几何优化和NPT系综下的动力学优化,选取NVT系综,控制温度为453.15 K进行1 000 ps的动力学计算,得到优化后的层状体系。



(a) SBS-WA



(b) SBS-A

图7 两种层状体系

Fig. 7 Two kinds of layer system

2 相容性研究

2.1 扩散系数

在布朗运动过程中,粒子随机移动距离的平方与时间成正比。其中,移动距离的平方是均方位移(mean square displacement, MSD),可以表征沥青中各组分的平均迁移速率^[17-19],其计算公式见式(1)~(2)。

$$S_{\text{MSD}} = |r(t) - r(0)|^2 \quad (1)$$

$$D = \frac{1}{6T} S_{\text{MSD}} \quad (2)$$

式中: $r(t)$ 为 t 时刻粒子的位移; $r(0)$ 为粒子初始位移; S_{MSD} 为粒子的均方位移; D 为粒子扩散系数; T 为时间。

提取NVT系综下不同层状体系中最后200 ps粒子运动轨迹的动力学模拟结果,进行均方位移计算。为防止末端误差较大,取前100 ps进行数据统计,即在NVT系综下模拟第800~900 ps的粒子运动轨迹。提取20~60 ps的均方位移并计算扩散系数,结果如图8所示。由图8可知,对嵌段比按SBS分子扩散系数从大到小排列,依次为2:8、3:7、4:6。SBS分子中聚丁二烯段(PB)中含有碳碳双键($-C=C-$),而碳碳双键上可连接的原子或基团数目比单键上的少,导致原子间或基团间的排斥力有所减弱,因此与碳碳双键相连的单键内旋转位垒有所减小,分子柔顺性增强。与此同时,嵌段比增大,SBS分子中聚苯乙烯段(PS)的侧基上不能内旋转的苯环数量增多,会导致分子柔顺性变差。嵌段比越小,即含有碳碳双键的PB段占比越高,则SBS分子的扩散系数越大,SBS分子的扩散能力越强。

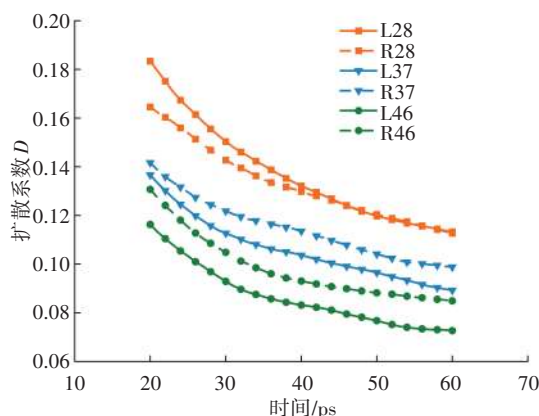


图8 不同SBS在SBS-WA体系中的扩散系数

Fig. 8 Diffusion coefficients of different SBS in SBS-WA system

2.2 溶解度

溶解度是表征物质体系内部分子间作用力的重要参数,本文分别计算了6种SBS-WCO混合体系的溶解度。根据老化沥青的溶解度 $18.57 (\text{J}/\text{cm}^3)^{1/2}$,计算6种SBS-WCO混合体系与老化沥青之间的溶解度差,结果见表3。有研究表明,当两种体系的溶解度差小于 $4.1 (\text{J}/\text{cm}^3)^{1/2}$ 时,可认为两者之间存在良好的相容性^[20]。WCO提供了轻质组分使复合再生剂的溶解度与老化沥青的相近。由表3可知,6种SBS-WCO混合体系均与老化沥青之间有较好的相容性。由于SBS的支化结构影响了体系的稳定性,线性SBS-WCO混合体系与老化沥青之间的溶解度差大多比星形SBS-WCO混合体系的小,其中L37-WCO混合体系与老化沥青之间的溶解度差最小,表明其与老化沥青的相容性最好。

表3 不同SBS-WCO混合体系的溶解度

Table 3 Solubility of different SBS-WCO composite systems

SBS-WCO 混合体系	内聚能密度/ ($\text{J} \cdot \text{cm}^{-3}$)	溶解度/ ($\text{J} \cdot \text{cm}^{-3}$) ^{1/2}	与老化沥青之间的溶解度差/ ($\text{J} \cdot \text{cm}^{-3}$) ^{1/2}
L28-WCO	2.25×10^8	15.01	3.56
L37-WCO	2.34×10^8	15.30	3.27
L46-WCO	2.27×10^8	15.08	3.49
R28-WCO	2.16×10^8	14.71	3.86
R37-WCO	2.18×10^8	14.77	3.80
R46-WCO	2.26×10^8	15.04	3.53

2.3 相互作用能

混合体系(物质A+物质B)相互作用能的计算公式见式(3)~(4),公式中各变量的单位均为kJ/mol。相互作用能的绝对值越大,说明混合体系中分子间

的相互作用越强^[21]。

$$E_{\text{inter}} = E_{\text{total}} - E_{\text{A}} - E_{\text{B}} \quad (3)$$

$$E_{\text{non-bond}} = E_{\text{vdw}} + E_{\text{ele}} \quad (4)$$

式中: E_{inter} 为混合体系中不同物质间的相互作用能; E_{total} 为混合体系的总能量; E_{A} 为只保留A物质计算得到的能量; E_{B} 为只保留B物质计算得到的能量; $E_{\text{non-bond}}$ 为分子间相互作用的非键能部分; E_{ele} 为静电能; E_{vdw} 为范德华势能。

计算各层状体系中不同SBS与WCO-老化沥青间、SBS与老化沥青间的相互作用能,结果如图9所示。范德华势能远高于静电能,是相互作用能的主要部分^[22]。由图9可知,对于同种SBS分子,在老化沥青中引入WCO分子后,SBS与WCO和老化沥青的相互作用能远大于SBS-A体系中SBS与老化沥青的相互作用能;若将SBS视为分散相,将沥青或沥青/生物油体系视为分散介质,则SBS与分散介质之间的相互作用能提高了21%~67%,说明WCO有助于促进SBS在老化沥青中的稳定分散。WCO富含轻质油,主要通过本身富含的轻质油组分与SBS间的强吸附作用,来改善SBS在复合再生沥青中的相容性。按照分散介质与6种SBS分子间的相互作用能大到小对SBS-WA体系进行排序,依次为:L46-WA、L37-WA、L28-WA、R46-WA、R37-WA、R28-WA。随着嵌段比的增大,分散介质与SBS分子间的相互作用有所增大。同时,SBS与老化沥青间的相互作用能也随着嵌段比的增大而增大,SBS分子中PS段与老化沥青间的相互作用强于PB段与老化沥青间的相互作用,使得PS段占比更大的SBS分子与沥青间的相互作用更强。在SBS-WA体系中,线性SBS分子与沥青间的相互作用能均比星形SBS分子的大,这是由于星形SBS分子属于支化聚合物且相对分子质量较大,分子链在旋转时的空间位阻效应以及SBS分子间的远程相互作用相对较强,使得SBS与沥青间的吸引力有所减弱。

计算不同SBS-WA体系中SBS与老化沥青和WCO之间的相互作用能,结果如图10所示。由图10可知,L28与WCO的相互作用能占其与整体分散介质相互作用能的86%,可见SBS与分散介质之间的相互作用主要存在于SBS与WCO之间,WCO通过本身富含的轻质油组分与SBS间的强吸附作用,来改善SBS在复合再生沥青中的相容性。随着嵌段比的增大,SBS分子与分散介质间的相互作用能有所增加。

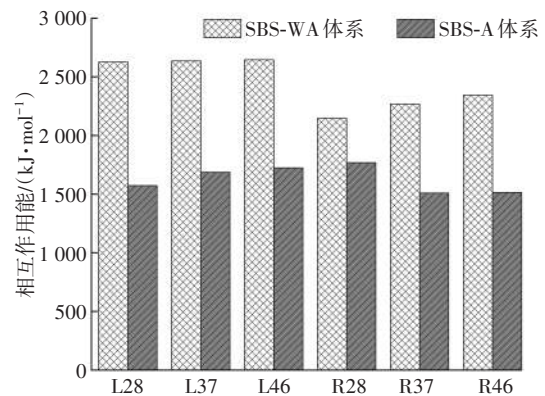


图9 各层状体系中不同SBS与沥青的相互作用能

Fig. 9 Interaction energy between different SBS and asphalt in different layer systems

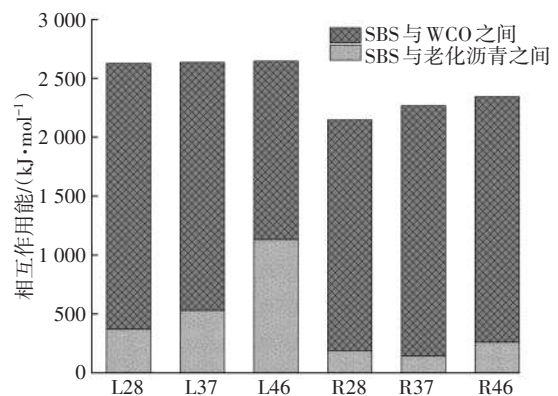


图10 在SBS-WA体系中不同SBS与WCO和老化沥青的相互作用能

Fig. 10 Interaction energy of different SBS with WCO and aged asphalt in SBS-WA system

2.4 均方回转半径

在合成高分子中,回转半径 R_g 等于所有原子到聚合物分子质心距离平方的平均值的平方根,常称为均方回转半径,其计算公式见式(5)。

$$R_g^2 = \frac{\sum m_i r_i^2}{\sum m_i} \quad (5)$$

式中: R_g 为均方回转半径; m_i 为原子*i*的质量; r_i 为分子质心到原子*i*的距离。

R_g 可表征聚合物的延展性、弹性和刚度,常用来反映分子链尺寸及评估SBS分子的紧密性^[23-24]。取前文层状体系在NVT系综下第1000 ps的动力学模拟轨迹进行回转半径分析,结果如图11所示。由图11可知,在相同模拟时长内,SBS-WA体系的 R_g 均比SBS-A体系的大,说明WCO可为SBS分子在沥青中的溶胀提供充足的轻组分,进而增大SBS在沥青中的分子链尺寸。加入WCO后,R37分子的 R_g 增长幅

度最大,变化最小的是L46分子的 R_g 。对SBS-WA体系在NVT系综下进行动力学模拟计算,得到第0 ps和第1 000 ps的回转半径及二者间的差值,结果见表4。由表4可知,星形SBS分子的 R_g 的变化值均为负值,表明随着NVT系综下动力学模拟计算的进行,星形SBS分子链的尺寸逐渐变小,团聚现象也更容易产生。在NVT系综下对L37分子进行动力学模拟计算,结果表明,在第1 000 ps时其 R_g 增大了3.42 Å,说明L37在WCO再生沥青中的溶胀程度最好。

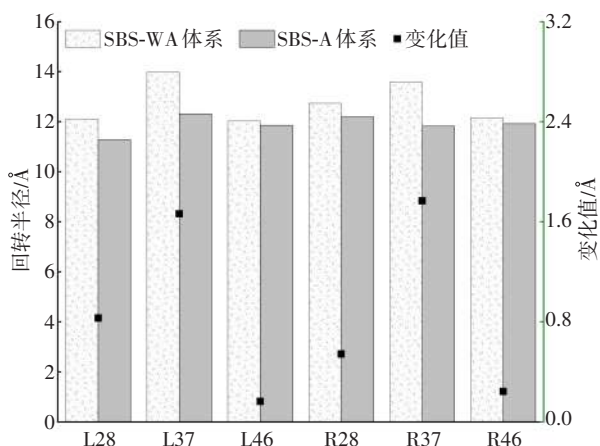


图11 不同SBS分子在不同层状体系中的回转半径

Fig. 11 Radius of gyration of different SBS molecules in different layer systems

表4 不同SBS分子在SBS-WA层状体系中回转半径的模拟结果

Table 4 Simulation results of radius of gyration of different SBS molecules in SBS-WA layered system

SBS分子	回转半径/Å		
	初始值	最终值	变化值
L28	11.30	12.11	0.81
L37	10.56	13.98	3.42
L46	13.07	12.03	-1.04
R28	12.95	12.74	-0.21
R37	15.80	13.59	-2.21
R46	12.86	12.17	-0.69

与WCO和沥青相容性最佳的SBS分子为嵌段比为3:7的线性SBS分子,总结分析见表5。

表5 层状体系中SBS分子共混效果分析

Table 5 Effect of SBS molecular blending in layer systems

评价指标	优选分析	优选出的SBS分子
扩散系数	嵌段比越小,SBS分子的运动扩散能力越强	优选次序为:L28、R28、R37、L37、R46、L46

表5 (续)

Table 5 (Continued)

评价指标	优选分析	优选出的SBS分子
溶解度	线性SBS分子与WCO和老化沥青的相容性更好	优选次序为:L37、L46、L28
相互作用能	随着嵌段比的增大,SBS分子与分散介质间的相互作用能有所增加;与星形SBS分子相比,线性SBS分子与沥青的相互作用能更大	优选次序为:L46、L37、L28
均方回转半径	星形SBS分子的 R_g 的变化值均为负值,随着相互作用时间的延长,星形SBS分子链的尺寸逐渐减小。L37的 R_g 增大了3.42 Å	L37

3 结论

本研究采用分子模拟方法构建了SBS-WCO/老化沥青、SBS/老化沥青两种层状体系,模拟了6种不同构型和嵌段比的SBS分子与WCO和老化沥青之间的相容性,优选出了在WCO中扩散、分布效果最好的SBS分子结构,得出的主要结论如下:

1) SBS-WCO复合再生剂主要是通过WCO中轻质油组分与SBS间的强吸附作用来改善SBS在复合再生沥青中的相容性的。WCO使SBS分子在沥青中溶胀,增大了SBS在沥青中的分子链尺寸,减小了团聚效应,并起到了增容作用。

2) 线性SBS分子与WCO和老化沥青的相容性和混溶程度普遍比星形SBS分子的好,WCO和老化沥青与空间位阻小的线性SBS分子间的相互作用最强。由于L28分子的双键结构最多、苯环数量最少,因此其运动能力最强。减小SBS嵌段比可以促进其向老化沥青层扩散。嵌段比小的SBS分子能提高SBS与分散介质间的相互作用能。

3) 嵌段比为3:7的线性SBS分子与沥青的相容性最佳。

参考文献(References):

[1] FANG Y, ZHANG Z Q, YANG J H, et al. Comprehensive review on the application of bio-rejuvenator in the regeneration of waste asphalt materials [J]. Construction and Building Materials, 2021, 295: 123631. DOI:10.1016/j.conbuildmat.2021.123631.

[2] XU J, PEI J Z, CAI J, et al. Performance improvement and aging property of oil/SBS modified asphalt [J]. Construction and Building Materials, 2021, 300: 123735. DOI:10.1016/j.conbuildmat.2021.123735.

- [3] YAN S, DONG Q, CHEN X Q, et al. Application of waste oil in asphalt rejuvenation and modification: a comprehensive review [J]. *Construction and Building Materials*, 2022, 340: 127784. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2022.127784.
- [4] LI Y B, GE D D, JU Z H, et al. Study on performance and mechanism of SBR and bio-oil recycled SBS modified asphalt [J]. *Polymers*, 2022, 14(23): 5096. DOI: 10.3390/polym14235096.
- [5] LI H B, FENG Z X, AHMED A T, et al. Repurposing waste oils into cleaner aged asphalt pavement materials: a critical review [J]. *Journal of Cleaner Production*, 2022, 334: 130230. DOI: 10.1016/j.jclepro. 2021. 130230.
- [6] 蔡邦, 邓亚军, 朱兴龙, 等. SBR与生物油恢复老化SBS改性沥青性能及机理研究[J]. *长沙理工大学学报(自然科学版)*, 2024, 21(1): 39-49. DOI: 10.19951/j.cnki.1672-9331.20220813002.
CAI Bang, DENG Yajun, ZHU Xinglong, et al. Performances of aged SBS modified asphalt regenerated with SBR and bio-oil and the regeneration mechanism [J]. *Journal of Changsha University of Science & Technology (Natural Science)*, 2024, 21(1): 39-49. DOI: 10.19951/j.cnki.1672-9331.20220813002.
- [7] LUO W H, ZHANG Y H, CONG P L. Investigation on physical and high temperature rheology properties of asphalt binder adding waste oil and polymers [J]. *Construction and Building Materials*, 2017, 144: 13-24. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2017.03.105.
- [8] 冉龙飞, 何兆益, 曹青霞. SBS改性沥青再生剂性能研究[J]. *建筑材料学报*, 2015, 18(4): 578-583, 595. DOI: 10.3969/j.issn.1007-9629.2015.04.008.
RAN Longfei, HE Zhaoyi, CAO Qingxia. Performance research of regenerative agent based on SBS-modified asphalt [J]. *Journal of Building Materials*, 2015, 18(4): 578-583, 595. DOI: 10.3969/j.issn.1007-9629. 2015.04.008.
- [9] 李雪莲, 郭甲林, 崔之靖, 等. 再生SBS改性沥青的蠕变与松弛性能研究[J]. *交通科学与工程*, 2022, 38(2): 7-12, 53. DOI: 10.16544/j.cnki.cn43-1494/u.2022.02.001.
LI Xuelian, GUO Jialin, CUI Zhijing, et al. Creep and relaxation performance of reclaimed asphalt using SBS modified [J]. *Journal of Transport Science and Engineering*, 2022, 38(2): 7-12, 53. DOI: 10.16544/j.cnki.cn43-1494/u.2022.02.001.
- [10] LIU S J, ZHOU S B, PENG A H, et al. Investigation of physiochemical and rheological properties of waste cooking oil/SBS/EVA composite modified petroleum asphalt [J]. *Journal of Applied Polymer Science*, 2020, 137(26): 48828. DOI: 10.1002/app.48828.
- [11] LIU W Y, ZHENG C F, LUO H S, et al. Study on SBS optimal block ratio based on molecular simulation [J]. *Polymers*, 2022, 14(22): 4894. DOI: 10.3390/polym14224894.
- [12] LI C X, FAN S Y, XU T. Method for evaluating compatibility between SBS modifier and asphalt matrix using molecular dynamics models [J]. *Journal of Materials in Civil Engineering*, 2021, 33(8): 04021207. DOI: 10.1061/(asce)mt.1943-5533.0003863.
- [13] 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.
- [14] CHEN Z X, PEI J Z, LI R, et al. Performance characteristics of asphalt materials based on molecular dynamics simulation: a review [J]. *Construction and Building Materials*, 2018, 189: 695-710. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2018.09.038.
- [15] 马晓燕, 陈华鑫, 张星宇, 等. SBS改性沥青低温流变性与原材料性能相关性研究[J]. *材料导报*, 2018, 32(22): 3885-3890.
MA Xiaoyan, CHEN Huaxin, ZHANG Xingyu, et al. An analysis over the correlation between low temperature rheological properties of SBS-modified asphalt and raw materials' performance parameters [J]. *Materials Review*, 2018, 32(22): 3885-3890.
- [16] LUO H S, ZHENG C F, YANG X, et al. Development of technology to accelerate SBS-modified asphalts swelling in dry modification mode [J]. *Construction and Building Materials*, 2022, 314: 125703. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2021.125703.
- [17] CHEN S Q, YANG Q, QIU X, et al. Use of MD simulation for investigating diffusion behaviors between virgin asphalt and recycled asphalt mastic [J]. *Buildings*, 2023, 13(4): 862. DOI: 10.3390/buildings13040862.
- [18] GONG M Y, JIAO B Z. Thermodynamic properties analysis of warm-mix recycled asphalt binders using molecular dynamics simulation [J]. *Road Materials and Pavement Design*, 2024, 25(2): 239-258. DOI: 10.1080/14680629.2023.2199883.
- [19] TAN Y W, XIE J G, SONG J, et al. Interfacial interaction behavior of recycled asphalt pavement: molecular dynamics simulation [J]. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2023, 676: 132194. DOI: 10.1016/j.colsurfa. 2023. 132194.
- [20] ZHU J Y, ZHOU C. Rationality evaluation index of asphalt molecular model [J]. *Materials Research Express*, 2019, 6(11): 115110. DOI: 10.1088/2053-1591/ab437e.
- [21] 郑直, 郭乃胜, 尤占平, 等. 废木油与石油沥青相容机制的分子动力学研究[J]. *化工学报*, 2023, 74(10): 4037-4050. DOI: 10.11949/0438-1157.20230656.

- ZHENG Zhi, GUO Naisheng, YOU Zhanping, et al. Research on compatibility mechanisms between waste wood oil and petroleum asphalt through molecular dynamics [J]. *CIESC Journal*, 2023, 74 (10) : 4037-4050. DOI:10.11949/0438-1157.20230656.
- [22] CUI W T, HUANG W K, HASSAN H M Z, et al. Study on the interfacial contact behavior of carbon nanotubes and asphalt binders and adhesion energy of modified asphalt on aggregate surface by using molecular dynamics simulation [J]. *Construction and Building Materials*, 2022, 316: 125849. DOI:10.1016/j.conbuildmat.2021.125849.
- [23] 张可, 姚重阳, 李栋宇, 等. 基于分子模拟的聚醚醚酮拉伸力学行为与改性[J]. *航空材料学报*, 2022, 42 (2) : 47-56. DOI: 10.11868/j. issn. 1005-5053.2021.000143.
- ZHANG Ke, YAO Chongyang, LI Dongyu, et al. Mechanical behavior and modification of poly-ether-ether-ketone using a molecular dynamics method [J]. *Journal of Aeronautical Materials*, 2022, 42(2) :47-56. DOI:10.11868/j.issn.1005-5053.2021.000143.
- [24] SUN B, ZHOU X X. Diffusion and rheological properties of asphalt modified by bio-oil regenerant derived from waste wood [J]. *Journal of Materials in Civil Engineering*, 2018, 30 (2) : 04017274. DOI: 10.1061/(asce)mt.1943-5533.0002138.

(责任编辑:石月珍;校对:熊怡)