

DOI:10.13409/j.cnki.jdpme.201906031

不同温度水化硅酸钙力学性能的分子动力学模拟*

宁文雨, 余泽川, 刘 斌

(武汉理工大学土木工程与建筑学院, 湖北 武汉 430000)

摘要: 为研究水泥材料中的主要组成成分—水化硅酸钙, 采用基于Tobermorite模型的建模方法, 构造了钙硅比为1.67、密度为 2.4 g/cm^3 的水化硅酸钙(C-S-H)分子模型, 使用分子动力学模拟方法获得水化硅酸钙在不同温度下的拉伸和压缩的力学性能。重点比较分析C-S-H在不同温度下的拉伸和压缩应力—应变曲线、峰值应力、杨氏模量。结果表明: 随着温度的升高, C-S-H拉伸和压缩时的峰值应力以及杨氏模量都显著下降; C-S-H压缩时的峰值应力明显大于拉伸时的峰值应力; 随着温度的升高, 水化硅酸钙Z方向的拉伸破坏形式由塑性破坏转变为脆性破坏。

关键词: 温度; 水化硅酸钙; 分子动力学; 力学性能

中图分类号: TU525 **文献标识码:** A **文章编号:** 1672-2132(2023)02-0366-07

Molecular Dynamics Simulation of Mechanical Properties of C-S-H at Varied Temperatures

NING Wenyu, YU Zechuan, LIU Bin

(School of Civil Engineering and Architecture, Wuhan University of Technology, Wuhan, 430000, China)

Abstract: In order to study the mechanical characteristics of calcium silicate hydrate (C-S-H), the main component of cement materials, a molecular model with a calcium-to-silicon ratio of 1.67 and a density of 2.4 g/cm^3 was constructed based on the Tobermorite model. Then, mechanical properties of C-S-H under compression and tension at varied temperatures were studied by molecular dynamics simulation. Stress-strain relationships, peak stress and Young's modulus of C-S-H at varied temperatures were obtained. Results of molecular dynamics simulation show that: peak stress and Young's modulus of C-S-H in both tensile and compressive tests decrease significantly with the increase of temperature; peak stress of C-S-H in compression is significantly greater than that in tension; tensile fracture pattern of C-S-H in Z-direction changes from plastic failure to brittle failure with the increase of temperature.

Keywords: temperature, calcium silicate hydrate, molecular dynamics, mechanical properties

0 引言

水泥是现代社会中使用量最大的材料,其总用

量仅次于水。2003年我国的水泥产量已达到8.63亿吨,接近世界水泥产量的二分之一,位居世界第一,巨大的产量增幅导致能源和资源的消耗猛增,必须及早解决,否则水泥将成为不可可持续发展的材

* 收稿日期:2019-06-11;修回日期:2019-11-01

基金项目:武汉理工大学创新研究基金(444-20411168/2018VA072)资助

作者简介:宁文雨(1996—),男,硕士研究生。主要从事混凝土材料研究。E-mail:ninwenyu@163.com

料。而且混凝土结构在全世界广泛使用,各种恶劣的环境条件对混凝土本身的性能是一种很大的考验,尤其是各种高温和低温环境,例如核电站的极端高温环境温度可以达到500 K以上,极地考察站的低温环境温度200 K以下。但是目前针对温度对混凝土影响的研究主要是从宏观尺度出发,关于微观尺度下温度对水泥的力学性能影响的研究少之又少。尽管水泥现在随处可见,但是它并不像大多数人所认为的那么简单,水泥其实是一种非常复杂的,而且还没有完全被了解的材料。从微观尺度研究极端温度下的混凝土的力学性能可以分析接近实际的复杂情况而不需要过多的理论假设,而且可以得到一些实验无法测量的结果,对了解水泥的材料的内在特征及性质到制造甚至改进其特点或发展新的水泥有一定贡献。

水化硅酸钙(calicum silicate hydrate, C-S-H)凝胶作为水泥水化产物中最重要的物质约占水化产物体积的70%左右,是水泥水化产物中最重要的强度来源。H. Taylor^[2]首先提出C-S-H是以胶凝的形式存在,并得到普遍认可,为后面学者研究C-S-H提供了依据。1981年, S. A. Hamid^[3]提出了1.1 nm的Tobermorite晶体结构模型,后来S. Merlino等^[4]对Hamid的模型在原子错位方面做了更正,通过应用OD程序,揭示了1.1 nm Tobermorite的真实结构,定义了两种主要的多型体,并指出了它们的结构安排和关系,并提出用Jennite晶体模型替代C-S-H凝胶。Tobermorite和Jennite都是一种含有硅氧四面体($[\text{SiO}_4]^{4-}$)单链的层状结构,硅氧四面体链均以桥四面体加上两个非桥四面体这样的单元重复延伸而形成硅链。Tobermorite和Jennite的主要差异在于两种晶体模型的钙硅比不同, Tobermorite的钙硅比为0.6~1.0,其中1.1 nm Tobermorite钙硅比为1.0, Jennite的钙硅比为1.5。因为无定形的C-S-H同时具有Tobermorite和Jennite的晶体结构特征,所以我们在进行C-S-H原子模型建立时一般使用Tobermorite和Jennite两种晶体结构作为初始模型建模。

Allen通过小角度中子散射测量确定C-S-H的平均钙硅比($C/S=1.7$)和密度(2.6 g/cm^3),其平均化学组分为 $(\text{CaO})_{1.7}(\text{SiO}_2)(\text{H}_2\text{O})_{11.8}$ ^[5]。硅氧四面体的配位通过 Q_n 来表征,其中单独存在不和其他硅氧四面体相连的硅氧四面体记为 Q_0 ;只连接一个硅氧四面体的硅氧四面体记为 Q_1 ;同时连接两个硅氧

四面体的硅氧四面体记为 Q_2 。核磁共振(NMR)实验结果表明C-S-H中的硅氧四面体满足一定的 Q_n 分布: $Q_0 \approx 10\%$, $Q_1 \approx 67\%$ 和 $Q_2 \approx 23\%$ ^[6]。

2009年, R. J. Pellenq等^[7]根据实际的实验数据,提出了一种基于自底向上的原子模拟方法,使用1.1 nm Tobermorite模型,通过随机移除 SiO_2 获得满足 Q_n 分布及钙硅比和密度的C-S-H分子模型^[8]。因为C-S-H凝胶常用Tobermorite和Jennite两种结构表示,所以钙硅比小于1的称为C-S-H(I)型结构,大于1的称为C-S-H(II)型结构。2010年,叶家元等^[8]以Hamid模型为基础建立初始结构,采用分子动力学方法,模拟低钙比的C-S-H(I)型结构。2014年, Q. M. J. Abdolhosseini等^[9]在R. J. Pellenq等^[7]提出的模型的基础上,通过ReaxFF力场模拟了水分子的化学反应,将OH基团引入模型中并研究了钙硅比对C-S-H压痕模量和压痕硬度的影响,发现随着钙硅比增加C-S-H压痕模量和压痕硬度下降。2017年, X. Hao等^[10]用Pellenq方法建立无序C-S-H模型,然后模拟研究温度对C-S-H层状方向(Z方向)上施加拉伸和压缩荷载的力学性能影响,发现随着温度升高C-S-H层状方向的抗拉和抗压能力减弱,本文在他研究基础上进一步分析研究温度对C-S-H模型X、Y、Z三个方向在拉伸和压缩荷载作用下的力学性能影响。

本文采用分子动力学方法,模拟C-S-H在不同温度下的拉伸和压缩的力学性能,是为了从微观尺度下观察和分析温度对C-S-H力学性能的影响。首先介绍了C-S-H模型的建立方法以及C-S-H模型拉伸和压缩的模拟过程,然后对模拟结果进行分析和讨论,发现随着温度的上升C-S-H凝胶的抗拉和抗压性能下降。这一研究对于我们从微观角度去理解温度对水化硅酸钙力学性能的影响有一定的贡献,为未来我们提升水泥基材料在极端温度环境下的强度和耐久度提供一定理论依据。

1 建模和计算

1.1 模型和力场

本研究以和实际NMR测量的实验数据一致的Pellenq提出的钙硅比(Ca/Si)为1.7和密度为 2.6 g/cm^3 的C-S-H原子结构为模型^[7]。首先使用Material Studio软件建立1.1 nm Tobermorite模型的 $4a \times 3b \times 1c$ ($a=0.669 \text{ nm}$, $b=0.739 \text{ nm}$, $c=$

2.277 nm)超晶胞结构作为初始模型,模型尺寸 $a'=2.676$ nm, $b'=2.217$ nm, $c'=2.277$ nm, $\alpha=90^\circ$, $\beta=90^\circ$, $\gamma=123.49^\circ$ 。再使用 Material Studio 软件删除所有水分子和 OH 基团,再使用 S.A.Hamid^[3]的转换矩阵将模型转换为正交模型,改变后的模型尺寸为 $a'=2.232$ nm, $b'=2.217$ nm, $c'=2.277$ nm, $\alpha=90^\circ$, $\beta=90^\circ$, $\gamma=90^\circ$,如图 1(a)所示。然后通过随机删除 Tobermorite 模型硅链上的 SiO₂原子来满足 Q_n分布,本文 Q_n分布为 Q₀=4.8%、Q₁=76.2%、Q₂=19.0%,和 NMR 实测数据^[7]接近,如图 1(b)所示。再通过 GCMC 模拟吸附即用巨正则蒙特卡洛方法模拟水分子的吸附过程,本文使用 Material Studio 软件实现 GCMC 吸附,首先使用 Material Studio 软件建立水分子模型和 C-S-H 模型,然后使用 Adsorption Locator 功能进行水分子吸附,如图 1(c)所示。GCMC 模拟吸附后的 C-S-H 模型密度达到 2.4 g/cm³(和 NMR 的试验测试结果一致),总共 1 127 个原子,如图 1(d)所示。

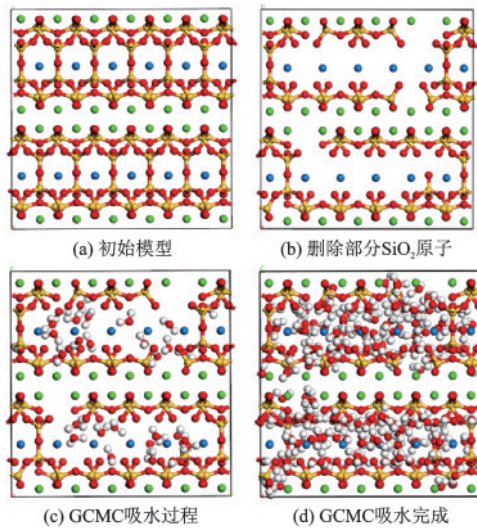


图1 C-S-H模型构造过程

Fig.1 Construction of C-S-H structure

注:图中红色的是氧原子,绿色的是层内钙原子,蓝色的是层间钙原子,黄色的是硅原子,白色的是氢原子

C-S-H模型的拉伸、压缩模拟过程中使用的力场是 R.T.Cygan 等^[11]提出的 Clayff 力场,该力场一般用于模拟计算水泥质材料。在 Clayff 力场中硅原子用 st 表示,层间钙和层内钙分别用 cah 和 cao 表示,氧原子分为桥接氧和非桥接氧可用 ob 和 obos 表示。为了消除边界效应,整个模拟过程采用周期性边界。本文选用 Lammmps^[12]计算程序来实现分子动力学模拟,使用 Lennard-Jones 12-6 势和库伦势为原

子间势,Lennard-Jones 12-6 势和库伦势的截断距离为 8Å 和 10Å。

Lennard-Jones 12-6 表达式如下所示:

$$E = \sum D_{ij} \left[\left(\frac{R_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (1)$$

$$R_{ij} = \frac{1}{2} (R_i + R_j) \quad (2)$$

$$D_{ij} = \sqrt{D_i D_j} \quad (3)$$

库伦势表达式如下:

$$E = \frac{Cq_i q_j}{\epsilon r} \quad (4)$$

式中, r 为原子间的距离; q 为原子电荷量。其余均为待定参数,需要在模拟前确定^[11],本文使用到的 R_{ij} 和 D_{ij} 见表 1。

表 1 Clayff 中相关力场参数

Table 1 Related force field parameters in Clayff

原子对	$R_{ij}/\text{\AA}$	$D_{ij}/(\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1})$
Ca(cah)-Ca(cah)	6.243 6	5.021 9e-6
Ca(cah)-Ca(cao)	6.246 0	5.026 0e-6
Ca(cah)-O	4.710 1	8.834 5e-4
Ca(cah)-Si	4.810 5	3.039 9e-6
Ca(cao)-Ca(cao)	6.248 4	5.030 1e-6
Ca(cao)-O	4.711 9	8.841 7e-4
Ca(cao)-Si	4.812 3	3.042 4e-6
Si-Si	3.706 3	1.840 2e-6
Si-O	3.628 9	5.347 8e-4
O-O	3.553 2	0.155 4

1.2 模拟步骤

考虑到实际情况中混凝土可能使用到的环境条件,此次模拟中对 C-S-H 的拉伸和压缩过程是在分别是在温度 100 K、200 K、300 K、400 K、500 K 中进行的。整个模拟采用的 Ewald 求和方法计算长程库仑力相互作用势,选用的模拟时间步长为 0.1 fs。在使用 GCMC 吸附完成后,首先将 C-S-H 模型在 npt 系综指定温度下弛豫 100 ps 达到平衡,弛豫过程中 X、Y、Z 三个方向的压强控制为零,弛豫过程中均方根偏差(root-mean-square-deviation, RMSD) 处于一个稳定值时即可认为体系已经达到平衡,图 2 以 300 K 的 Z 方向拉伸的 RMSD 图为例。体系达到平衡后,在 npt 系综指定温度下分别对 C-S-H 模型 X、Y、Z 三个方向进行单轴拉伸/压缩模拟,在拉伸/压

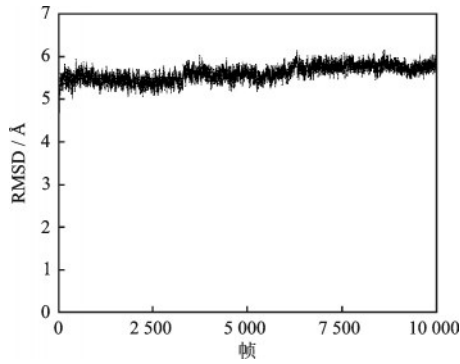


图2 300 K温度下C-S-H在Z方向弛豫过程中RMSD值
Fig2 RMSD value of C-S-H during Z-directional relaxation at 300 K

缩模拟过程中将横向压力控制为零,轴向方向的压力不进行控制,总应变为0.8,应变率为0.008/ps,每1 ps施加一次变形,每0.01 ps记录一次应力应变变化,此模拟过程时间为100 ps。

2 结果和讨论

2.1 温度对C-S-H拉伸应力—应变曲线的影响

模拟结束后,通过提取模拟过程中模型的应力和应变来进行计算分析,分别作出C-S-H模型X、Y、Z方向的拉伸应力—应变曲线,取应力—应变曲线初始线性部分的应力最大值为峰值应力,其对应的应变值为峰值应变,用线性拟合的方法对应力—应变曲线的线性部分计算C-S-H的杨氏模量;同时根据弛豫后的模型体积求出其密度,如图3和表2~4所示。本文的拉伸应力应变曲线和林伟辉等^[10,15]文中拉伸应力应变曲线形状一致。

如图3所示,X和Y方向的最大峰值应力基本上随着温度的升高而降低。当温度小于300 K和大于300 K时,X和Y方向的杨氏模量随着温度的升高而降低,且300 K时X方向的杨氏模量为59.12 GPa(接近最大值60.43 GPa),Y方向的杨氏模量为最大值45.7 GPa。

Z方向的峰值应力和杨氏模量(除了400 K时的36.92 GPa)也是随着温度的升高而降低。不仅如此,随着温度上升C-S-H在层状方向(Z方向)的破坏应变在不断的减小,从100 K的0.584减小到500 K时的0.232,说明C-S-H由塑性破坏向脆性破坏转变,X.Hao等^[10]提出相似结论,随着温度升高,C-S-H的拉伸的力学性能下降,而且Z方向的破坏应变也不断减小,由塑性破坏转

向脆性破坏,和本文结论一致。同时随着温度上升,C-S-H体积增大,因此其密度也随着温度的上升而下降,从100 K的2.46 g/cm³下降到500 K的2.34 g/cm³,表4中展示了不同温度下的密度值。

D.Hou等^[13]对C-S-H进行分子动力学模拟得到在300 K时拉伸结果:X方向峰值应力和杨氏模量为2 GPa和41.7 GPa;Y方向峰值应力和杨氏模量为3.8 GPa和49.6 GPa;Z方向峰值应力和杨氏模量为1.01 GPa和27.2 GPa,和本文结果接近。因为本文和D.Hou等^[13]的 Q_n 值($Q_1=9.7\%$, $Q_2=19.3\%$, $Q_3=71\%$)分布不同,而 Q_n 值影响结构的峰值应力值大小,但是无定形的C-S-H模型只要满足 Q_n 值、密模型度、钙硅比即可认为是正确的模型。

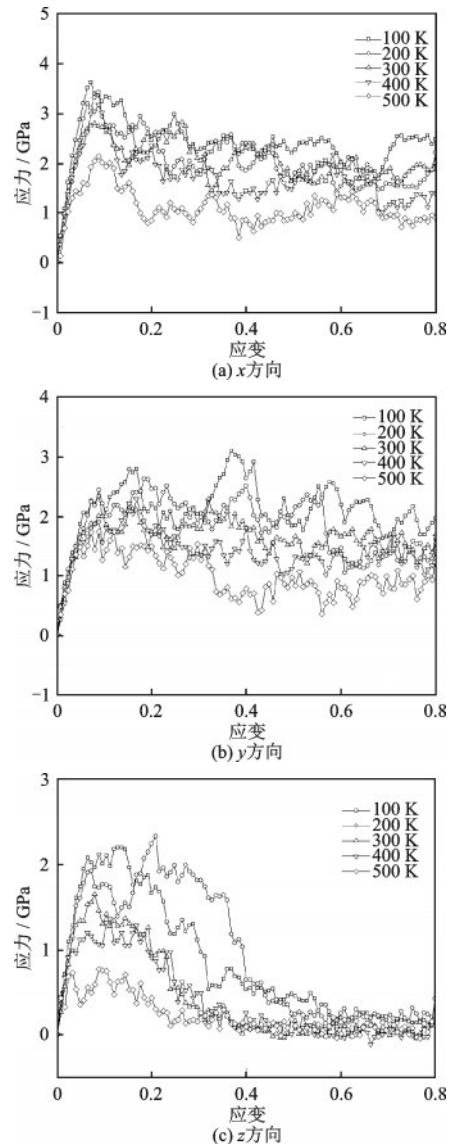


图3 C-S-H在不同方向上的拉伸应力—应变曲线
Fig3 Stress-strain curves of C-S-H under tension in different direction

表2 C-S-H模型X方向拉伸作用下的峰值应力、峰值应变、杨氏模量

Table 2 Peak stress, strain and Young's modulus of C-S-H model under X-directional tension

温度/K	峰值应力/GPa	峰值应变	杨氏模量/GPa
100	3.62	0.072	60.43
200	3.42	0.088	50.51
300	2.80	0.080	59.12
400	3.18	0.088	49.01
500	2.14	0.088	45.26

表3 C-S-H模型Y方向拉伸作用下的峰值应力、峰值应变、杨氏模量

Table 3 Peak stress, strain and Young's modulus of C-S-H model under Y-directional tension

温度/K	峰值应力/GPa	峰值应变	杨氏模量/GPa
100	3.09	0.368	36.30
200	2.63	0.184	35.15
300	2.29	0.320	45.70
400	2.29	0.168	36.23
500	1.73	0.072	32.47

表4 C-S-H模型Z方向拉伸作用下的峰值应力、峰值应变、杨氏模量、破坏应变、密度

Table 4 Peak stress, strain, Young's modulus, failure strain and density of the C-S-H model under Z-directional tension

温度/K	峰值应力/GPa	峰值应变	杨氏模量/GPa	破坏应变	密度/(g·cm ⁻³)
100	2.20	0.128	37.18	0.584	2.45
200	2.335	0.208	34.59	0.528	2.46
300	1.655	0.080	29.92	0.392	2.43
400	1.366	0.112	36.92	0.368	2.38
500	0.764	0.088	24.29	0.232	2.34

周继凯等^[14]用1.1 nm Tobermorite模型建立尺寸为0.669 nm*2.217 nm*2.278 nm、原子数为240的C-S-H计算得到拉伸峰值应力12.8 GPa和杨氏模量为55 GPa,且发现随着C-S-H的体积增大,拉伸峰值应力和杨氏模量不断减小,本文建立的C-S-H模型尺寸为2.232 nm*2.217 nm*2.277 nm,原子数1127,所以可认为本文的结果和周继凯的结果一致。

林伟辉等^[15]建立1.67钙硅比C-S-H的X方向拉伸峰值应力3.07 GPa,杨氏模量59.27 GPa;Y方向拉伸峰值应力2.81 GPa,杨氏模量50.07 GPa;Z方向拉伸峰值应力1.51 GPa,杨氏模量34.34 GPa和本文结果一致。

因为C-S-H是一种各向异性的材料,本身X、Y、Z三个方向的力学性能有一定差异,加之在npt系综弛豫过程中,我们设置三个方向尺寸独立变化,互不影响,所以体系三个方向在弛豫过程中的结构变化不一样,最终呈现的力学性能变化趋势存在差异。

2.2 温度对C-S-H压缩应力—应变曲线的影响

同样分别模拟C-S-H模型在100、200、300、400、500 K时X、Y、Z方向压缩,计算得到压缩应力—应变曲线、杨氏模量、峰值应力、峰值应变,结果如图4和表5~7所示。密度同样取弛豫完成后的模

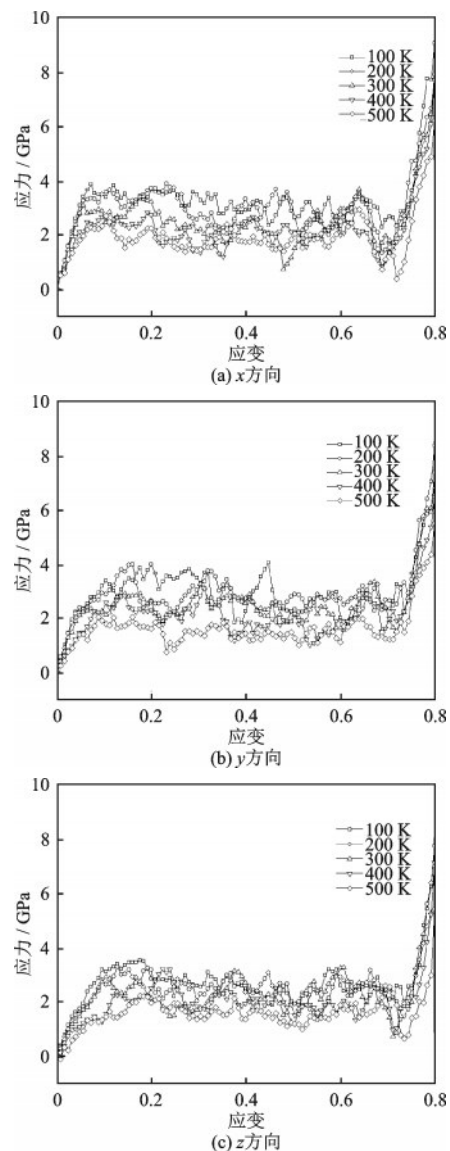


图4 C-S-H在不同方向上的压缩应力—应变曲线
Fig4 Stress-strain curves of C-S-H under compression in different directions

表5 C-S-H模型X方向压缩作用下的峰值应力、峰值应变、杨氏模量和失效应变

Table 5 Peak stress, strain, Young's modulus and failure strain of C-S-H model under compression in X direction

温度/K	峰值应力/ GPa	峰值 应变	杨氏模量/ GPa	失效应变
100	3.89	0.072	67.37	0.71
200	3.90	0.232	65.52	0.70
300	3.40	0.184	59.59	0.71
400	2.82	0.192	44.23	0.69
500	2.70	0.104	42.19	0.72

表6 C-S-H模型Y方向压缩作用下的峰值应力、峰值应变、杨氏模量和失效应变

Table 6 Peak stress, strain, Young's modulus and failure strain of C-S-H model under compression in Y direction

温度/K	峰值应力/ GPa	峰值应变	杨氏模量/ GPa	失效应变
100	3.87	0.176	60.90	0.74
200	4.00	0.160	57.84	0.69
300	2.90	0.136	54.09	0.71
400	2.80	0.144	32.79	0.69
500	2.01	0.088	30.30	0.71

表7 C-S-H模型Z方向压缩作用下的峰值应力、峰值应变、杨氏模量和失效应变

Table 7 Peak stress, strain, Young's modulus and failure strain of C-S-H model under compression in Z direction

温度/K	峰值应力/ GPa	峰值应变	杨氏模量/ GPa	失效应变
100	3.49	0.184	47.71	0.74
200	3.28	0.128	40.46	0.73
300	2.92	0.104	41.64	0.71
400	3.21	0.224	31.93	0.71
500	2.23	0.176	13.05	0.73

型来计算,结果和表4中一致。压缩应力—应变曲线和周继凯等^[14]的压缩应力应变曲线形状一致。

从图4和表5~7可知,不同温度情况下水化硅酸钙X、Y、Z三个方向的抗压强度相近,其中,X、Y、Z方向的抗压强度和杨氏模量都随着温度的升高而降低。且当应变接近0.7后C-S-H应力—应变曲线迅速上升,这和混凝土实际压缩现象相反,这是因为当原子之间距离过近时,原子间相互作用力会急剧

增大,这里将C-S-H模型压缩时应力突然急剧上升时的应变定义为“失效应变”。任意温度下失效应变都在0.7左右,可见失效应变基本不受温度变化的影响。

X.Hao等^[10]提出文中Z方向压缩模拟结果:100 K的峰值应力3.86 GPa,杨氏模量44.8 GPa;200 K的峰值应力4.12 GPa,杨氏模量37.6 GPa;300 K的峰值应力3.47 GPa,杨氏模量34 GPa;400 K的峰值应力3.05 GPa,杨氏模量29.8 GPa;500 K的峰值应力3.05 GPa,杨氏模量23.5 GPa;C-S-H的Z方向压缩力学性能随着温度升高而降低,和本文结果一致。

而且比较C-S-H的拉伸和压缩两个模拟结果,可以发现C-S-H的抗压强度高于抗拉强度,这和水泥的宏观性质是一致的。

2.3 温度和水化硅酸钙力学性能关系的机理

C-S-H力学性能随着温度上升而减弱的原因:不同温度下的C-S-H初始模型是一样的,但是在npt系综下弛豫100 ps过程中,因为体系压强 P 受温度 T 和体积 V 的影响,所以温度 T 不同,为了维持压强 P 的稳定,弛豫过程中会改变的体系的体积 V ,因此弛豫过程中会不断改变体系的结构,导致结构的力学性能产生变化。

2.4 温度对水泥性能的影响

通过以上模拟分析发现C-S-H抗拉和抗压性能会受到温度的影响,且C-S-H作为水泥的主要组成成分,可以认为水泥的抗拉和抗压性能同样会受到温度的显著影响,水泥的抗拉强度和抗压强度同样会随着温度增加而下降。这对水泥的力学性能无疑是一项重大的挑战,在恶劣的高温环境下混凝土的承受力可能会大打折扣,需要我们在未来就这一特性对水泥的性能进一步做出提升和改进。

3 结论

参照Pellenq的建模方法,以1.1 nm的Tobermorite模型作为初始结构建立C-S-H模型,并且在不同温度下对水化硅酸钙进行分子动力学模拟发现:

(1)水化硅酸钙三个方向的拉伸峰值应力都随着温度的升高在降低;除300 K温度,X和Y方向的拉伸杨氏模量都随着温度升高而降低;Z方向的拉

伸的杨氏模量随着温度升高而降低。

(2)水化硅酸钙的三个方向的压缩峰值应力和杨氏模量都随着温度的升高在显著降低。

(3)水化硅酸钙Z方向的拉伸破坏形式随着温度的升高由塑性破坏转变为脆性破坏。

(4)水化硅酸钙的压缩“失效应变”不受温度的影响。

(5)水化硅酸钙的抗压强度高于抗拉强度,这一特点和水泥的宏观性质一致。

参考文献:

- [1] 吴中伟.高性能混凝土——绿色混凝土[J].混凝土与水泥制品,2000,(1):3-6.
Wu Z W. High performance concrete—green concrete [J]. Concrete and Cement Products, 2000,(1):3-6.(in Chinese)
- [2] Taylor H. Structural models for C-S-H gel [C]// Proceedings of the Cement Chemistry. London: Academic Press, 1990:157-177.
- [3] Hamid S A. The crystal structure of the 11 natural tobermorite $\text{Ca}_{11}\text{Si}_{10}\text{O}_{72}(\text{OH})_{14}\cdot 11\text{H}_2\text{O}$ [J]. Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials, 2015, 154 (1-4):189-198.
- [4] Merlino S, Bonaccorsi E, Armbruster T. The real structure of tobermorite 11A: normal and anomalous forms, OD character and polytypic modifications [J]. European Journal of Mineralogy, 2001, 13(3):65-80.
- [5] Allen A J, Thomas J J, Jennings H M. Composition and density of nanoscale calcium-silicate-hydrate in cement [J]. Nature materials, 2007, 6(4): 311-316.
- [6] D'espinoze De La Caillerie J, Lequeux N. Lecture on the structure of CSH, AFm and Aft phases [J]. Physique, Chimie et Mécanique des Matériaux Cimentaire, ed Ecole. ATILH-CNRS, 2008, 106(38):16102.
- [7] Pellenq R J, Kushima A, Shahsavari R, et al. A realistic molecular model of cement hydrates [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2009, 106(38): 16102-16107.
- [8] 叶家元,张文生,王宏霞,等.分子动力学模拟水化硅酸钙 $\text{Ca}_4\text{Si}_6\text{O}_{14}(\text{OH})_4\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ 的结构 [J]. 硅酸盐学报, 2010, 38(12):2346-2352.
Ye J Y, Zhang W S, Wang H X, et al. Molecular dynamics simulation of the structure of calcium silicate hydrate $\text{Ca}_4\text{Si}_6\text{O}_{14}(\text{OH})_4\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ [J]. Acta Silicate Sinica, 2010, 38(12):2346-2352.(in Chinese)
- [9] Abdolhosseini Q M J, Krakowiak K J, Bauchy M, et al. Combinatorial molecular optimization of cement hydrates [J]. Nature Communications, 2014, 5:4960.
- [10] Hao X, Weihui L, Jia F, et al. Temperature effects on tensile and compressive mechanical behaviors of C-S-H structure via atomic simulation [J]. Journal of Nanomaterials, 2017, 2017(5):1-6.
- [11] Cygan R T, Liang J J, Kalinichev A G. Molecular models of hydroxide, oxyhydroxide, and clay phases and the development of a general force field [J]. Journal of Physical Chemistry B, 2004, 108(4): 1255-1266.
- [12] Laboratories, Sandia National. Lammps User's Manual [J]. The Journal of Infectious Diseases, 2014, 209 (8): NP.
- [13] Hou D, Zhu Y, Lu Y, et al. Mechanical properties of calcium silicate hydrate (C-S-H) at nano-scale: a molecular dynamics study [J]. Materials Chemistry and Physics, 2014, 146(3):503-511.
- [14] 周继凯,金龙,陈徐东.水化硅酸钙动态力学性能分子动力学模拟研究 [J]. 防灾减灾工程学报, 2014, 34 (3):277-282.
Zhou J K, Jin L, Chen X D. Molecular dynamics simulation of dynamic mechanical properties of hydrated calcium silicate [J]. Journal of Disaster Prevention and Reduction Engineering, 2014, 34(3):277-282.(in Chinese)
- [15] 林伟辉,付甲,王志华,等.不同钙硅比水化硅酸钙力学性能分子动力学模拟 [J]. 材料导报, 2017, 31(20): 158-163, 169.
Lin W H, Fu J, W Z H, et al. Molecular dynamics simulations of mechanical properties of C-S-H structures with varying calcium-to-silicon ratios [J]. Materials Review, 2017, 31(20):161-166, 172.(in Chinese)

(本文编辑:周小潭)