

DOI:10.3969/j.issn.1003-5060.2024.04.018

基于分子动力学聚合物改性沥青黏附性能研究

李秀君¹, 彭天平¹, 但新华²

(1. 上海理工大学 环境与建筑学院, 上海 200093; 2. 武汉市江夏区公路局, 湖北 武汉 430200)

摘要:为了增强基质沥青与集料之间界面黏附性,选取 PE、SBS、SBR、PU 4 种代表性聚合物对其进行改性,采用分子动力学模拟法对沥青-集料和沥青-水-集料模型进行不同工况模拟,并通过室内试验验证模拟结果。通过分析相对浓度分布曲线得到沥青极性组分的变化规律,研究不同温度下各改性沥青混合料黏附性并根据相对浓度参数对其机理进行分析,通过聚合物改性性能对比,得出其适用条件。结果表明:PE 与沥青相容性好,但 PE 改性沥青混合料水稳定性较差;SBS 改性沥青能在温差较大的环境中保持较高的黏附性;SBR 改性沥青低温条件下黏附性突出,且水稳定性优越,适用于低温多雨的地区;PU 改性沥青综合性能较好,在高温多雨等气候条件复杂的环境中适用性较强。

关键词:改性沥青;分子动力学;黏附性;水稳定性指标;相对浓度

中图分类号:U416.2 **文献标志码:**A **文章编号:**1003-5060(2024)04-0548-07

Adhesion properties of polymer modified asphalt based on molecular dynamics

LI Xiujun¹, PENG Tianping¹, DAN Xinhua²

(1. School of Environment and Architecture, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China; 2. Highway Bureau of Jiangxia District of Wuhan City, Wuhan 430200, China)

Abstract: In order to improve the adhesion between matrix asphalt and aggregate, four representative polymers, polyethylene(PE), SBS, SBR and polyurethane(PU), were selected to modify them, and molecular dynamics(MD) simulation method was used to simulate the models of asphalt-aggregate and asphalt-water-aggregate in different working conditions, and the simulation results were verified by laboratory tests. By analyzing the relative concentration distribution curve, the variation law of the polar components of asphalt was obtained. On this basis, the adhesion of each modified asphalt mixture at different temperatures was studied, and its mechanism was analyzed according to the relative concentration parameters. Finally, the applicable conditions were obtained by comparing the modified properties of the polymers. The results show that PE has good compatibility with asphalt, but the water stability of PE modified asphalt mixture is poor. SBS modified asphalt can maintain high adhesion in environments with large temperature difference. SBR modified asphalt has outstanding adhesion under low temperature conditions and superior water stability, which is suitable for low temperature and rainy areas. PU modified asphalt has good comprehensive performance and strong applicability in environments with complex climatic conditions such as high temperature and rain.

Key words: modified asphalt; molecular dynamics(MD); adhesion; water stability index; relative concentration

沥青混合料黏附破坏是导致路面结构水损坏的关键因素,而沥青作为感温性材料,温度变化会

对其黏附性能产生影响^[1]。同时,由于我国很多地区夏冬气候差异大,加之近年来极端天气的频

收稿日期:2022-08-24;修回日期:2022-11-05

基金项目:浙江省公路科技计划资助项目(2019H15)

作者简介:李秀君(1976—),女,江苏江阴人,博士,上海理工大学副教授,硕士生导师。

繁出现,对沥青混合料的路用性能提出更高的要求,沥青的黏附性成为研究热点。沥青的化学成分是决定其与集料之间黏附性能(黏结强度)的重要因素之一。随着改性沥青的广泛应用,国内外学者研究应用聚合物改性剂以提高沥青集料黏附性能^[2-3],并通过表面能测试或水煮法室内试验^[4]评价不同种类聚合物改性剂的作用效果。

分子动力学(molecular dynamics, MD)模拟法目前多用于研究沥青材料化学结构对物理力学性能的影响,如相容性、自愈性能、与改性剂相互作用等^[5-7],少数用于探究沥青集料黏附性。MD模拟法较传统试验方法可以快速、批量、准确地进行模

拟,在分子尺度下对材料损伤演化过程进行观测,减小偶然性,提高工作效率。本文选取 4 种不同聚合物改性剂构建改性沥青分子晶胞,建立沥青-集料和沥青-水-集料界面模型,在不同温度下进行 MD 模拟,研究聚合物种类对沥青-集料黏附性的影响,分析得到不同种类改性沥青的适用条件。

1 模型建立

本文选择中石化东海牌 70# 沥青,参照文献[8]建立沥青四组分十二分子模型,并根据四组分试验结果,利用规划求解法得出各组分分子量,结果见表 1 所列。

表 1 中石化 70# 沥青四组分十二分子规划求解法结果

组分	名称	相对分子质量	分子式	分子数	四组分试验质量比	分子模拟质量比
饱和分	饱和分 A	422.8	C ₃₀ H ₆₂	1	7.635	7.642
	饱和分 B	482.9	C ₃₅ H ₆₂	2		
芳香分	芳香分 A	464.7	C ₃₅ H ₄₄	7	31.354	31.333
	芳香分 B	406.7	C ₃₀ H ₄₆	6		
胶质	胶质 A	503.9	C ₃₆ H ₅₇ N	2	36.421	36.407
	胶质 B	553.9	C ₄₀ H ₅₉ N	1		
	胶质 C	414.7	C ₂₉ H ₅₀ O	1		
	胶质 D	290.4	C ₁₈ H ₁₀ S ₂	14		
	胶质 E	573.0	C ₄₀ H ₆₀ S	1		
沥青质	沥青质 A	574.9	C ₄₂ H ₅₄ O	1	24.591	24.618
	沥青质 B	888.4	C ₆₆ H ₈₁ N	2		
	沥青质 C	707.1	C ₅₁ H ₆₂ S	3		

选取 PE、SBS、SBR、PU 为改性剂,分别对应最佳掺量 4.5%、5%、7%、18.6%^[9-12]。在 Materialsstudio(MS)软件中建立 4 种改性剂分子模型,如图 1 所示。

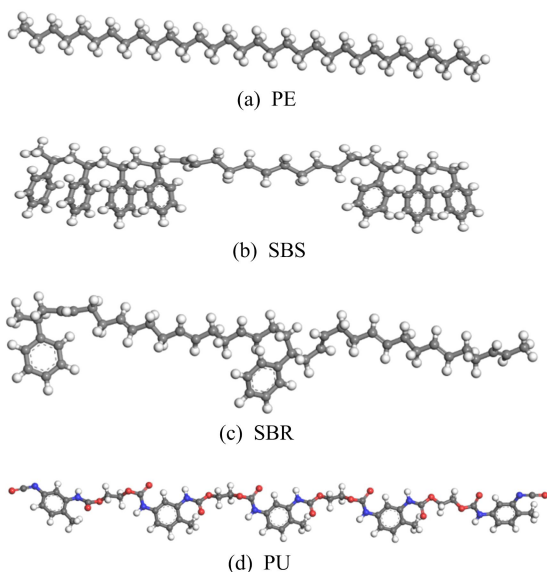


图 1 聚合物改性剂分子模型

由于 MS 软件中建立的模型为周期性结构,为了减小各向异性对模拟结果的影响,本文选择 8 倍沥青分子数进行更真实模拟。通过加入相应数量各组分分子建立沥青和改性沥青高温(480 K)无定型晶胞,使用 Forcite 模块在 NPT(等温、等压)系综条件下,以 1 个标准大气压分步多次退火至 298 K,释放晶胞多余的能量,得到各晶胞密度以验证模型,见表 2 所列。

表 2 298 K 下沥青密度

沥青种类	基质沥青	改性沥青				
		PE	SBS	SBR	PU	
沥青密度/(g/cm ³)		1.021	1.047	1.056	1.028	1.041

二氧化硅(SiO₂)是集料中的主要成分,对 MS 材料库中 SiO₂ 晶胞进行切割、添加真空层、正交、扩展后,与常温沥青晶胞通过 BuildLayers 工具建立沥青-集料(以基质沥青为例)和沥青-水-集料(以 SBR 改性沥青为例)界面模型^[8],如图 2 所示。

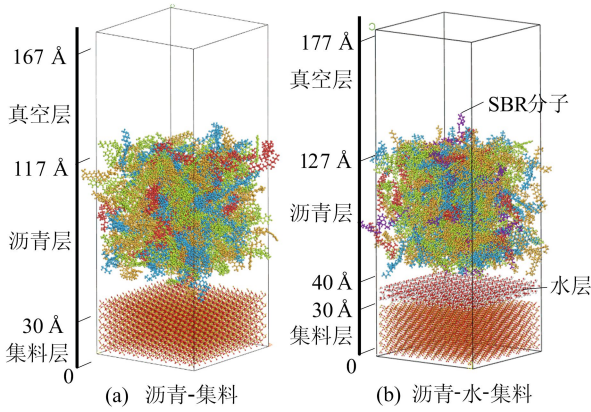


图 2 MS 软件中界面模型屏幕快照

2 MD 模拟与计算参数

2.1 MD 模拟过程

首先在 MS 软件 Forcite 模块中,对沥青-集料界面模型进行多次几何优化至能量稳定,通过 Sets 工具获得单独集料层和沥青层;然后使用正则 NVT 系综、COMPASS II 力场,分别在 278、298、313、333 K 4 种温度下,以 1 fs 为步长,进行 100 ps 时长分子动力学计算,得到最终收敛的分子势能。同理得到沥青-水-集料各层分子势能。最后对完成动力学模拟后模型的最后一帧文件进行相对浓度分析,获得沥青极性组分沿模型 Z 轴相对浓度分布曲线。

2.2 MD 计算参数

2.2.1 沥青-集料黏附功

黏附功是指将沥青-集料模型分解为沥青和集料 2 个独立模型所需的能量,计算公式为:

$$W_{\text{adhesion}} = (E_{\text{total}} - E_{\text{asphalt}} - E_{\text{aggregate}})/A \quad (1)$$

其中: W_{adhesion} 为黏附功,正值表现为两者之间存在排斥力,负值表现为两者之间存在吸引力^[13]; E_{total} 为沥青-集料模型总势能; E_{asphalt} 为沥青层势能; $E_{\text{aggregate}}$ 为集料层势能; A 为集料晶胞与沥青接触面积。

2.2.2 沥青-集料剥离功和能量比

剥离功是指水分使沥青从集料表面剥离过程所需的能量,计算公式为:

$$W_{\text{debonding_water}} = (\Delta E_{\text{inter_aw}} + \Delta E_{\text{inter_agw}} - \Delta E_{\text{inter_aag}})/A \quad (2)$$

其中: $W_{\text{debonding_water}}$ 为剥离功; $\Delta E_{\text{inter_aw}}$ 为沥青层与水分子层之间的界面黏附能; $\Delta E_{\text{inter_agw}}$ 为集料层与水分子层之间的界面黏附能; $\Delta E_{\text{inter_aag}}$ 为干燥条件下沥青层与集料层之间的界面黏附能; A 为界面接触面积。

当剥离功为负值时,表明该过程朝着热力学

平衡方向进行,即不需要向系统中额外添加能量,反应会自行发生,这与集料相对亲水性吻合。

参照文献[13]计算能量比 E_R ,通过 E_R 来评价沥青混合料抗水损害性能。 E_R 计算公式为:

$$E_R = W_{\text{adhesion}}/W_{\text{debonding_water}} \quad (3)$$

因为沥青混合料对水分的敏感性与干燥状态下黏附功成正比,与湿润状态下剥离功成反比,所以 E_R 越高,混合料水稳定性越好。根据文献[14]的研究,当 E_R 值大于 1.5 时,沥青混合料水稳定性较好;而水敏感性高的沥青混合料 E_R 值小于 0.5。

2.2.3 沥青分子聚集特征

在对沥青混合料界面模型进行动力学模拟时,沥青中极性组分会在集料表面通过分子取向排列构成吸附层,并生成极性力场,对非极性组分产生极性感应作用,使整个沥青胶团向集料表面吸附。而基质沥青由于自身黏聚力不足,无法在模拟过程中保持聚团状态。对比改性沥青体系模拟结果并结合文献[15]可知,沥青胶浆中极性组分的聚集特征对界面黏附性能有重要影响。为了量化沥青分子在界面模型中的聚集程度,绘制 298 K 下基质沥青体系极性组分相对浓度分布曲线,如图 3 所示。

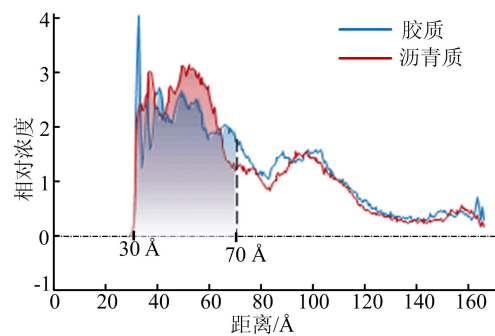


图 3 298 K 下基质沥青体系极性组分相对浓度分布曲线

在沥青集料界面选取 30~70 Å 范围^[16],将相对浓度分布曲线沿 Z 轴积分(以 298 K 为例),得到极性组分相对浓度参数,以评价改性剂对聚集行为的促进作用。同理在沥青-水-集料界面选取 40~80 Å 范围,并根据干、湿界面模型中极性组分聚集行为和分布情况,结合微观理论对改性机理做出解释。

3 结果与讨论

3.1 结果验证

MD 模拟计算得到界面黏附功和 E_R 值,如图 4 所示。

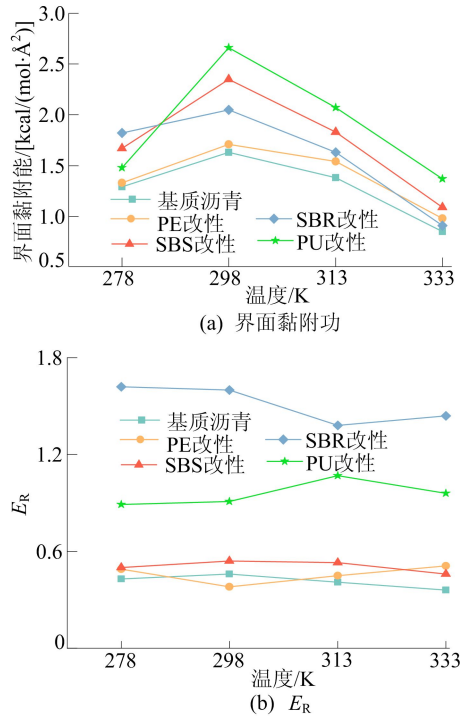


图 4 MD 模拟界面黏附性计算结果

为了验证模拟分析结论和方法的合理性,根

据《公路工程沥青及沥青混合料试验规程》(JTG E 20—2011)进行改性沥青混合料马歇尔稳定度试验。制备与模拟掺量相同的各改性沥青,并统一采用 AC-20 矿料级配,见表 3 所列。通过试验确定基质沥青、PE、SBS、SBR、PU 改性沥青用量分别为 4.9%、5.1%、4.5%、4.6%、4.7%。试验结果如图 5 所示。

由图 5 可知,相比基质沥青,各改性沥青混合料的马歇尔稳定度均有所提高,其中 SBS、PU 改性沥青马歇尔稳定度分别提升 24.4%、31.4%。结合图 4a 可知,这与 333 K 下模拟结果相似。沥青残留稳定度从大到小依次为 SBR 改性沥青、PU 改性沥青、SBS 改性沥青、PE 改性沥青、约等于基质沥青,SBR、PU 改性沥青混合料展现出较好的水稳定性,与模拟结果规律基本一致。

278、298、313、333 K 温度下界面极性组分相对浓度见表 4、表 5 所列。

由于改性剂种类不同,沥青胶浆中极性分子聚集程度差异较大,使沥青混合料展现出不同路用性能。

表 3 AC-20 沥青混合料级配

筛孔/mm	26.500	19.000	16.000	13.200	9.500	4.750	2.360	1.180	0.600	0.300	0.150	0.075
级配上线	100	90	78	62	50	26	16	12	8	5	4	3
通过率	100.0	95.0	85.0	71.0	61.0	41.0	30.0	22.5	16.0	11.0	8.5	5.0
级配下线	100	100	92	80	72	56	44	33	24	17	13	7

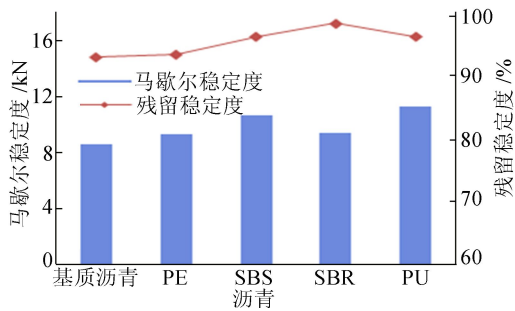


图 5 沥青混合料马歇尔稳定度实验结果

表 4 不同温度下沥青-集料界面极性分子相对浓度

沥青种类	沥青质				胶质			
	278 K	298 K	313 K	333 K	278 K	298 K	313 K	333 K
基质沥青	167	173	168	163	188	183	184	190
PE 改性	168	169	180	185	195	202	209	196
SBS 改性	185	223	214	208	205	245	244	229
SBR 改性	235	213	209	182	275	226	208	200
PU 改性	195	265	255	269	225	293	273	289

表 5 不同温度下沥青-水-集料界面极性分子相对浓度

沥青种类	沥青质				胶质			
	278 K	298 K	313 K	333 K	278 K	298 K	313 K	333 K
基质沥青	26	32	30	27	33	34	26	22
PE 改性	33	27	39	39	29	25	40	43
SBS 改性	29	31	35	27	37	41	31	21
SBR 改性	54	60	81	56	63	62	66	58
PU 改性	39	46	42	35	41	40	37	33

3.2 PE 改性沥青

由图 4 可知:PE 改性沥青黏附功随温度升高呈先上升后下降趋势,其值较基质沥青在 4 种温度下分别提高 2.8%、5.2%、11.7%、14.8%,幅度较小;PE 改性沥青混合料水稳定性较差,虽在 313、333 K 时略高于基质沥青,但在常温下其 ER 低于基质沥青。分析其原因如下。

1) 在 PE 改性沥青-集料模型界面处,链状 PE 分子使沥青胶团更易于抓住集料表面,增大

界面黏结强度,该模型界面屏幕快照如图 6 所示。

2) PE 与沥青相容性较好,根据相似相溶原理,PE 和饱和分结构相似,均为链状碳氢化合物,两者可以充分接触,形成相互贯穿的空间网络结构。由表 4 可知,在划定范围内 PE 改性沥青极性组分相对浓度略高于基质沥青。这说明该网络结构对极性组分的聚集吸附有促进作用,但是因为 PE 分子本身并不与极性分子产生交联,所以界面黏附性增强效果一般。

3) 由表 5 可知,当水分侵入混合料时,PE 改性沥青体系极性组分相对浓度参数与基质沥青体系相差无几。这说明由 PE 和饱和分分子形成的交联网络结构遇水后受到破坏,导致 PE 改性沥青混合料水稳定性较差。

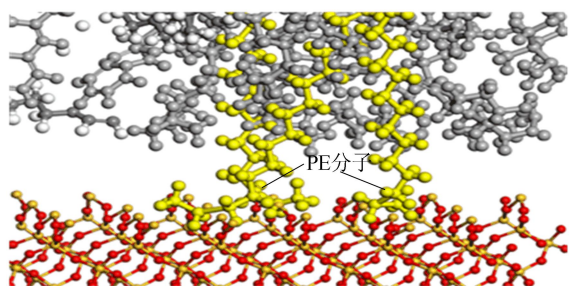


图 6 PE 改性沥青-集料模型界面屏幕快照

3.3 SBS 改性沥青

由图 4 可知:与基质沥青相比较,SBS 改性沥青体系界面黏附功有较大增强,且随着温度升高呈现先上升后下降趋势,在 298 K 时提高幅度最大为 44.4%;其 E_R 值仅分别提升 1.9%、13.2%、9.3%、5.4%。分析其原因如下。

1) SBS 分子促进极性组分向集料表面聚集。根据模拟结果,集料模型在 298 K 下极性组分相对浓度分布曲线如图 7 所示。由图 7 可知,该温度下 SBS 改性沥青体系中极性组分在 60~80 Å 范围内相对浓度明显高于基质沥青,对应表 4 中胶质组分和沥青质组分相对浓度分别增加 28.9%、33.9%。这意味着在混合料成型过程中,集料与 SBS 改性沥青之间结合更紧密,宏观表现出混合料黏附性增强。

2) SBS 分子中丁二烯的双键会和沥青中的活性基团反应,生成 SBS-沥青接枝物,促进改性剂与沥青相容,形成更稳定体系。同时根据沥青密度变化可知,在 298 K 时 SBS 改性沥青密度比基质沥青提高了 2.0%,这说明 SBS 使沥青中一部分轻质组分转化为重质组分。

3) 由表 5 可知,在水分侵入混合料后,SBS 改性沥青对极性组分聚集的促进作用减弱,其极性组分相对浓度与基质沥青基本持平。

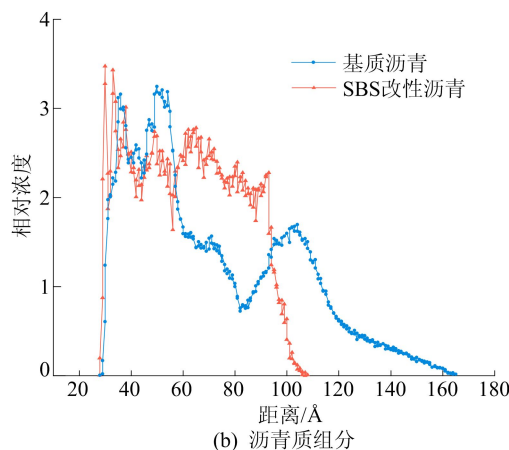
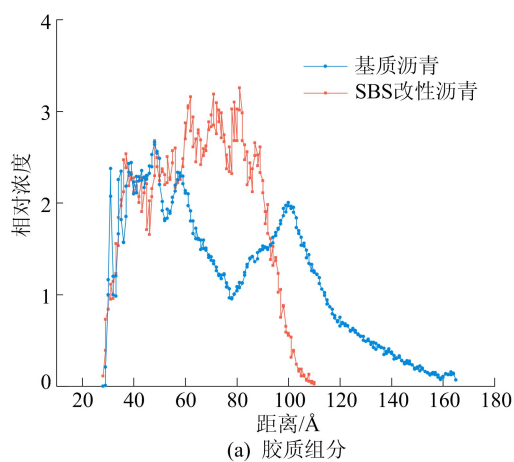


图 7 298 K 集料模型极性组分相对浓度分布曲线

3.4 SBR 改性沥青

由图 4 可知:SBR 改性沥青在低温 278 K 下黏附性提升较高,达到 40.7%,但随着温度上升效果减弱,高温 333 K 下仅提升 6.4%;SBR 改性沥青混合料水稳定性较好,在 4 种温度下 E_R 分别显著增大 276.5%、244.1%、235.8%、297.1%。分析其原因如下。

1) SBR 对极性组分有促进聚集作用,但效果弱于 SBS。两者物质组成均为苯乙烯和丁二烯,但 SBS 为线型嵌段式结构,主要官能团相对集中,而 SBR 中苯乙烯和丁二烯以 1:4 方式构成。由表 4 可知,SBR 对极性组分的聚集促进作用程度随温度升高而减小,与黏附性变化趋势一致。

2) SBR 分子在有水和无水模型中均出现自身聚集现象。在 MD 模拟过程中,其他 3 种改性剂分子皆均匀地分布在各自沥青胶浆体系中,而 SBR 分子则形成交联结构,且分布在沥青胶浆外

侧和界面接触区域,如图 8 所示。图 8 中紫色为 SBR 分子。

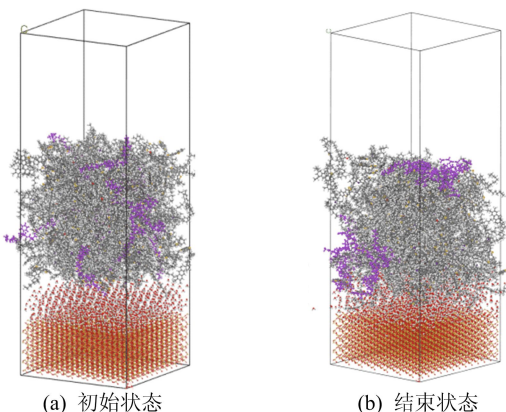


图 8 SBR 改性沥青-水-集料模型 MD 模拟初末屏幕快照

基质沥青和 SBR 改性沥青-水-集料模型 313 K 下极性组分相对浓度分布曲线如图 9 所示。

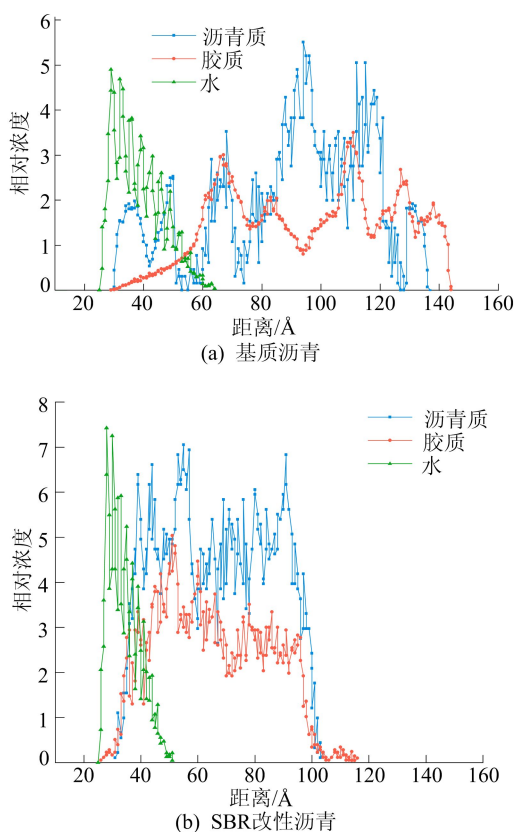


图 9 313 K 集料模型极性组分相对浓度分布曲线

由图 9 可知,SBR 改性沥青体系中水分子集中在 25~50 Å,与初始状态相比变化较小,同时沥青质和胶质大幅度向集料表面聚集吸附。基质沥青体系中水分子对其侵入超过 60 Å,且沥青质和胶质在界面模型中较为分散,在 40~80 Å 范围内相对浓度参数仅为 30、26,说明 SBR 胶网结构

可以在水分侵入混合料过程中保护沥青集料结合面。

3.5 PU 改性沥青

由图 4 可知:PU 改性沥青在 298、313、333 K 下均展现出较佳黏附性,界面黏附功分别较基质沥青提高 63.6%、50.1%、60.4%,但在 278 K 下仅提高 10.4%;针对混合料水稳定性,PU 改性沥青 E_R 随着温度升高分别增大 106.6%、96.3%、160.8%、164.5%,但与 E_R 大于 1.5 的较好水平仍有一定差距。分析其原因如下。

1) PU 分子依托沥青质组分形成的共价交联网络结构促进极性组分的聚集吸附。PU 是主链上含有重复氨基甲酸酯基团的大分子聚合物的总称,其化学活性主要表现在异氰酸酯基团上,其结构式如图 10 所示。而沥青质 A 中含有大量的亚氨基和羟基,其结构式如图 11 所示。—NCO 与—NH 反应生成脲基,与—OH 反应生成氨基甲酸酯,进而 PU 分子与沥青分子紧密结合,形成胶网结构。

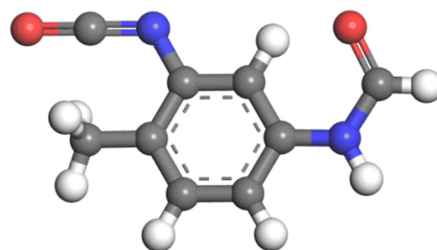


图 10 甲苯二异氰酸酯分子结构式

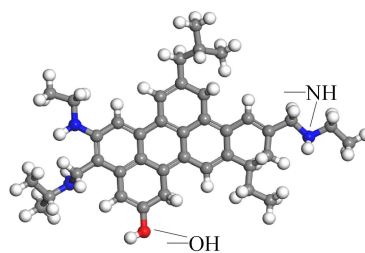


图 11 沥青质 A 分子结构式

2) 由表 4 可知,沥青质分子相对浓度有所增加,但胶质分子变化却很小。根据文献[17]可知,沥青质和胶质分子的极性官能团是实现与 PU 共价交联的最佳靶点。沥青组分中沥青质极性最大,胶质结构类似于沥青质,但分子量较小,极性次之,因此 PU 分子在混合料成型过程中导致了胶质的消耗和沥青质的相对聚集。

3) PU 改性沥青中脲基和酯基是 PU 分子与沥青质分子反应生成的,有水条件下稳定性不如

SBR 胶网结构,因此 PU 改性沥青混合料水稳定性优于基质沥青但逊于 SBR 改性沥青。

3.6 聚合物改性剂性能对比

本文对 4 种聚合物改性剂性能进行比较分析发现:4 种改性剂对沥青集料界面高温条件下黏附性增强顺序依次为 PU、SBS、SBR、PE;在低温条件下 SBR 改性作用突出,其他 3 种改性沥青虽较基质沥青有所增强但均逊色于 SBR 改性沥青;SBR 改性沥青混合料水稳定性最佳,PU 次之,PE 和 SBS 相对较弱。

通过 MD 模拟分析可知:PE 改性效果相对较弱,但因为结构和饱和分相似,所以具有与沥青良好的相容性;SBS 改性沥青在高温和低温条件下对界面黏附性均有较大增强,但其混合料水稳定性较弱;SBR 改性沥青低温条件下界面黏附性突出,且水稳定性强,但其黏附性随温度升高下降较快,适用于气候温和多雨地区;PU 作为近年来应用于沥青领域的新材料,综合性能较强,其高温条件下界面黏附能优于 SBS,同时水稳定性良好,适用于高温多雨等气候条件复杂的地区。

4 结 论

本文利用 MS 软件建立不同改性沥青-集料和改性沥青-水-集料模型,通过 MD 模拟计算沥青黏附功和 E_R ,并与基质沥青结果进行对比,以评价不同聚合物改性沥青适用条件。基于相对浓度分布,采用积分形式量化极性组分的聚集行为,结合微观理论分析其机理,得到以下结论。

1) PE 具有与沥青良好的相容性,但 PE 与饱和分分子形成的交联网络结构遇水后容易受到破坏,导致 PE 改性沥青混合料水稳定性较差;SBS 改性沥青能在温差较大的环境中保持较高的黏附性;SBR 改性沥青低温条件下黏附性突出,且水稳定性强,适用于低温多雨地区;PU 改性沥青综合性能较好,在高温多雨等气候条件复杂的环境中适用性较强。

2) MD 模拟结果与试验结果基本一致,基于模拟结果分析相对浓度曲线,可以得到沥青组分在不同工况下的变化规律,进而对聚合物改性沥青机理作出解释。通过在界面模型中划定极性组分聚集吸附范围,采用积分形式量化相对浓度,可为机理分析提供更客观、准确的数据支撑。

[参 考 文 献]

[1] 潘伶,张晋铭,吕志田,等.基于分子动力学两集料间沥青的

- 拉伸黏附机理[J]. 建筑材料学报,2021,24(5):1054-1059.
- [2] 方长青,李铁虎,郑长征,等.聚合物改性沥青的研究进展[J]. 材料导报,2006(8):55-57.
- [3] YAN K Z, YOU L Y, WANG D C. High-temperature performance of polymer-modified asphalt mixes: preliminary evaluation of the usefulness of standard technical index in polymer-modified asphalt[J]. *Polymers*, 2019, 11(9):1404.
- [4] 赵艳,李波,曹贵,等.基于表面能的氧化石墨烯改性沥青黏附性[J]. 建筑材料学报,2021,24(6):1341-1347.
- [5] 曹雪娟,苏玥,邓梅.基于分子动力学模拟的聚合物改性剂与沥青相互作用研究[J]. 化工新型材料,2021,49(9):234-239.
- [6] 汤文,王基双,吕悦晶.基于分子动力学的沥青自愈合行为研究[J]. 武汉科技大学学报,2020,43(2):123-127.
- [7] 任永祥,郝培文,赵超志,等.基于分子动力学的相变微胶囊与沥青相容性及增强机理研究[J]. 中国公路学报,2020,33(10):178-191.
- [8] DEREK D L, MICHAEL L G. High internal energies of proposed asphaltene structures[J]. *Energy & Fuels*, 2011, 25(8):3698-3705.
- [9] 苏曼曼,张洪亮,张永平,等. SBS 与沥青相容性及力学性能的分子动力学模拟[J]. 长安大学学报(自然科学版),2017,37(3):24-32.
- [10] LU P Z, HUANG S, SHEN Y, et al. Mechanical performance analysis of polyurethane-modified asphalt using molecular dynamics method[J]. *Polymer Engineering and Science*, 2021, 61(9):2323-2338.
- [11] 万钰,徐朔,吴文朋. PE 改性沥青混合料路用性能试验研究[J]. 公路工程,2021,46(2):212-216.
- [12] 杨国明,李昊,陈松,等. 丁苯橡胶含量对改性沥青高低温性能影响的研究[J]. 化工新型材料,2019,47(6):248-251.
- [13] XU G J, WANG H. Study of cohesion and adhesion properties of asphalt concrete with molecular dynamics simulation [J]. *Computational Materials Science*, 2016, 112:161-169.
- [14] BHASIN A, MASAD E, LITTLE D, et al. Limits on adhesive bond energy for improved resistance of hot-mix asphalt to moisture damage[J]. *Transportation Research Record*, 2006, 1970(1):2-13.
- [15] 方伟锋. LM-S 改性剂提高石油沥青与石料的黏附性能研究[D]. 上海:华东理工大学,2018.
- [16] 李池璇. 基于分子动力学的改性剂与沥青相容性及改性沥青黏附性研究[D]. 南京:南京林业大学,2021.
- [17] 李添帅,陆国阳,梁栋,等. 聚氨酯前驱体基化学改性沥青及其改性机理[J]. 中国公路学报,2021,34(10):45-59.

(责任编辑 张 镛)