

DOI:10.3969/j.issn.1003-5060.2026.06.016

不同缺陷结构下水化硅酸钙单轴拉伸性能研究

朱皓文¹, 丁兆东¹, 梁俊松², 周泽林²

(1. 合肥工业大学 土木与水利工程学院, 安徽 合肥 230009; 2. 中国十九冶集团有限公司, 四川 成都 610031)

摘 要:混凝土作为一种核心建筑材料,其力学性能很大程度上取决于水泥水化产物中水化硅酸钙(C-S-H)的性能。文章基于 Hamid 提出的无水托贝莫来石结构,通过随机去除硅链中的桥接硅四面体(bridging tetrahedra, BT)和配对硅四面体(paired tetrahedra, PT),构建了具有不同缺陷结构的 C-S-H 模型。采用此类模型进一步构建了不同钙硅摩尔比的 C-S-H 扩胞模型,通过几何结构的优化和分子动力学模拟获得不同缺陷结构下 C-S-H 的拉伸性能,并对 3 种不同方向上的抗拉性能进行比较。结果表明,不同的缺陷类型对 C-S-H 的力学性能具有一定程度的影响,为构建更精确的 C-S-H 分子模型提供了参考。

关键词:水化硅酸钙;缺陷;分子动力学;力学性能

中图分类号: TU528

文献标志码: A

文章编号: 1003-5060(2026)06-0830-07

Study of uniaxial tensile properties of calcium silicate hydrate with different defect structures

ZHU Haowen¹, DING Zhaodong¹, LIANG Junsong², ZHOU Zelin²

(1. School of Civil and Hydraulic Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China; 2. China 19th Metallurgical Group Co., Ltd., Chengdu 610031, China)

Abstract: Concrete, as a fundamental building material, largely owes its mechanical properties to the performance of calcium silicate hydrate(C-S-H), the principal product of cement hydration. Building upon the structure of anhydrous tobermorite proposed by Hamid, this study constructed C-S-H models with varying defect structures by randomly removing bridging tetrahedra(BT) and paired tetrahedra(PT) from the silicate chains. Subsequently, expanded cell models of C-S-H with different calcium-to-silicate ratios were developed based on these models. The tensile properties of C-S-H under different defect structures were obtained through optimization of geometric structures and molecular dynamics simulations, with a comparative analysis of tensile strength in three distinct directions. The results demonstrate that different types of defects have a significant impact on the mechanical properties of C-S-H, providing valuable insights for the development of more precise molecular models of C-S-H.

Key words: calcium silicate hydrate(C-S-H); defects; molecular dynamics; mechanical properties

0 引 言

混凝土材料的力学性能主要决定于水泥水化产物,而水泥水化产物中最重要的成分是水化硅酸钙(C-S-H)凝胶体,其占硬化水泥浆体体积的 60%~70%,对水泥基材料的力学性能起着决定

性的作用^[1-2]。

目前,原子显微技术和纳米压痕实验揭示了 C-S-H 凝胶微观黏聚力的特性,C-S-H 凝胶由微粒堆积而成^[3-4],原子显微技术研究发现,硅酸盐水化纳米粒子间的相互作用是水泥黏聚力的根源^[5]。C-S-H 粒子间的界面黏附压力因环境变化

收稿日期:2024-01-30;修回日期:2024-04-09

基金项目:国家自然科学基金资助项目(52278302);中国中冶非钢领域重大研发资助项目(中冶科技[2023]5号)

作者简介:朱皓文(1999—),男,湖南双峰人,合肥工业大学硕士生;

丁兆东(1986—),男,安徽无为,博士,合肥工业大学副教授,硕士生导师,通信作者,E-mail: dzd86@hfut.edu.cn.

而有所不同,纳米压痕实验则揭示了其微观硬度特性,研究指出 C-S-H 凝胶分为高密度和低密度区,其具有不同的硬度,其杨氏模量^[6]分别约为 31、21 GPa。然而,纳米压痕实验在提供微观以下层面上的研究受限。

为深入了解 C-S-H 的力学行为,研究者们开始关注其分子层面的黏聚力。通过核磁共振(nuclear magnetic resonance, NMR)^[7]、X 射线衍射(X-ray diffraction, XRD)^[8] 和小角中子散射(small-angle neutron scattering, SANS)^[9] 等多种实验方法,研究者们认为 C-S-H 凝胶与层状矿物 Hamid 的无水托贝莫来石类似^[10]。基于分子动力学,学者提出了多个模型来探索 C-S-H 在纳观结构的性质。文献[11]提出一个实用的 C-S-H 分子模型,并使用包括短程、极化和库仑相互作用描述原子间相互作用,能描述其纳观结构和力学特性;文献[12]发展 CSH-FF 力场模拟水泥系统结构原子间相互作用,该力场在模拟基于水泥的材料方面展示出了良好的适应性;文献[13]首次将钙硅摩尔比和桥接四面体(bridging tetrahedra, BT)与配对四面体(paired tetrahedra, PT)空位同时考虑,建立了计算框架来探索这些因素对平均硅酸盐链长度的影响。

对于特定空位比 α (BT 与 PT 的数量比)的 C-S-H (钙硅酸盐水化物)力学性能,当前研究领域内对其深入探究相对不足。 α 对 C-S-H 的宏观力学性能有着直接影响,具体而言,BT 和 PT 作为 C-S-H 结构中的关键构成部分,由于 C-S-H 的非晶性和结构的复杂性,准确理解并量化这些四面体空位比对力学性能的具体影响,仍然是一个挑战。现有研究往往集中在 C-S-H 的宏观性能表征上,而对其微观结构的动态变化和相应力学响应的研究相对较少, α 特定值对力学性能深入影响的研究也较少。

因此,在现有研究基础上,本文进一步细化了 C-S-H 的结构模型,通过控制删除 Hamid 的托贝莫来石模型中的 BT 和 PT,构建了基于托贝莫来石结构的不同缺陷类型的 C-S-H 模型^[14],采用文献[15]的分子动力学模拟对不同钙硅摩尔比的 C-S-H 轴向拉伸力学性能进行研究。研究结果揭示了不同缺陷类型对 C-S-H 力学性能的影响,为建立更精确的 C-S-H 分子模型提供参考。

1 结构模型的构建

对于 C-S-H 结构的建模,本文主要考虑其结构中的主要特征和参数,包括钙硅摩尔比、硅链层状结构分布及密度等。基于 Hamid 的 11-Å 无水托贝莫来石晶胞结构作为初始模型^[10],通过复制单元晶格结构形成大小为 $4a \times 7b \times 3c$ 超胞后,去除所有水分子作为基础结构,如图 1 所示。

该模型的钙硅摩尔比为 1.0,晶体结构为三斜晶体,空间群为 P1。单位晶胞的晶格参数如下: $a=51.73 \text{ Å}$ 、 $b=26.76 \text{ Å}$ 、 $c=68.31 \text{ Å}$ 、 $\alpha=90.0000^\circ$ 、 $\beta=90.0000^\circ$ 、 $\gamma=56.5099^\circ$ 。计算出的单位晶胞体积为 $78\,862.531\,1 \text{ Å}^3$ 。

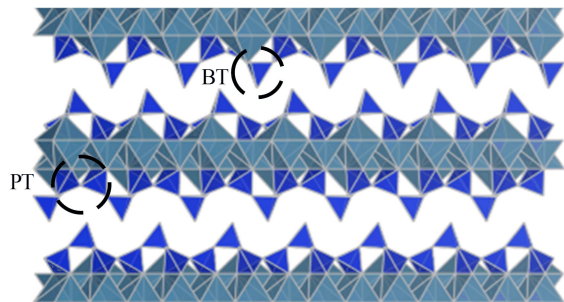


图1 Hamid 的 11-Å 无水托贝莫来石晶胞示意图

不同缺陷 C-S-H 分子结构模型的建立过程如图 2 所示。

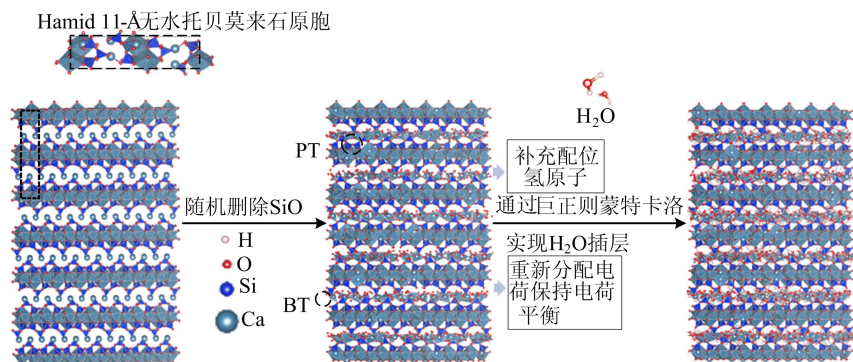


图2 C-S-H 模型建立流程

根据 dreierketten 规则^[16], 构建了不同钙硅摩尔比(1.2~2.0)的缺陷托贝莫来石模型。建模过程中, 移除选定的硅酸盐四面体中的氧化硅(包括 1 个硅原子和 1 个非桥接氧原子)。为实现电荷中性, 对配位不足的氧原子添加氢原子, 转变为羟基, 反映了水合反应和硅酸盐纳米团簇沉淀的特性。若模型电荷仍不平衡, 则在桥接氧原子、非桥接氧原子和羟基氧原子上均匀分布相反电荷以实现电中性^[13]。使用巨正则蒙特卡罗法于 300 K 的温度下, 实现水分子的动态插入^[9]。最后在等

温等体系综(NVT)和等温等压系综(NPT)中进行弛豫, 以获得最后的平衡结构^[13]。由于硅酸盐链中局部结构的差异, BT 与层间钙配位, 而 PT 与层间钙配位并与其共享氧原子, 最终形成了 dreierketten 链。而在实际的 C-S-H 结构中存在大量的硅酸盐四面体空位, 具有不规则的层状结构, 使得统一的相位规则进行缺陷表征变得极为困难。

为反映这些多样性缺陷, 本文通过随机去除 SiO, 构建了 3 种代表性缺陷模型, 如图 3 所示。

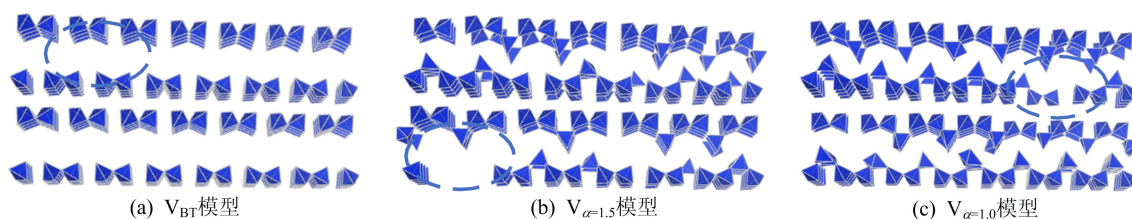


图 3 不同删除比率下 V_{BT} 、 $V_{\alpha=1.5}$ 和 $V_{\alpha=1.0}$ 的硅链结构模型

1) V_{BT} 模型为大量删除的 BT 的 C-S-H 模型。在钙硅摩尔比为 1.2 和 1.5 时, 仅删除 BT, 以模拟 C-S-H 结构中更高比例 BT 缺失情况。

2) $V_{\alpha=1.5}$ 模型为 BT 和 PT 的删除比率 $\alpha=1.5$ 的 C-S-H 模型, 即每删除 1.5 个 BT 时, 删除 1 个 PT, 以模拟 C-S-H 结构中 BT 和 PT 中的不均匀分布。

3) $V_{\alpha=1.0}$ 模型为 BT 和 PT 的删除比率 $\alpha=1.0$ 的 C-S-H 模型, 即等量删除 BT 和 PT 以模拟 BT 和 PT 均匀减少时 C-S-H 结构的特点。

2 模拟与计算

2.1 力场设置

为精确模拟 C-S-H 力学性能, 本文采用专为 C-S-H 结构设计的 CSH-FF 力场。该力场由 Shahsavari 等人开发, 已经在多个研究中证明其在描述 C-S-H 凝胶结构的能量和力学性质方面的有效性和准确性^[12], 这是在模拟 C-S-H 凝胶方面广泛应用的一种力场。CSH-FF 力场之所以被选用, 主要是由于它能够细致捕捉到 C-S-H 凝胶微观结构中原子间的相互作用, 这对于理解 C-S-H 的力学行为至关重要。

在该力场中, 本文使用的 C-S-H 结构的原子类型被细分为: 层间钙(Ca)、层内钙(Cw)、硅(Si)、羟基中的氧(Oh)、硅链中的桥接氧(Ob)、硅四面体或钙层中的非桥接氧(O)、水分子中的氧(Ow)、与羟基配对的氢原子(H)和水分子中的氢

(Hw)这 9 种类型。

为确保模拟结果的准确性和可靠性, 本文严格按照 CSH-FF 力场提供的参数进行模拟。每种原子类型之间的相互作用力都经过了严格的量化和验证, 以确保模拟过程中能量的准确计算和力学性质的合理预测。力场参数的信息和设置可参考文献^[13]。

2.2 拉伸模拟

本文中使用分子动力学模拟软件 LAMMPS 来探究不同钙硅摩尔比(1.2、1.5、1.7、2.0)下的 C-S-H 模型的力学性能^[17], 并通过 V_{BT} 、 $V_{\alpha=1.5}$ 、 $V_{\alpha=1.0}$ 这 3 种不同缺陷结构模型研究 BT 和 PT 的缺失对于 C-S-H 结构抗拉性能的影响。

模拟过程中, 为确保模型的稳定性, 通过共轭梯度法进行能量最小化, 并通过 NVT 和 NPT 系综对系统进行适当的温度和压力控制以达到热力学平衡, 获得稳定的结构。在系统达到稳定状态后, 本文对 C-S-H 模型在 3 个不同方向上进行等速率拉伸模拟, 应变率^[18]恒定为 0.002 ps^{-1} , 其中: x 方向与 C-S-H 的硅酸盐链平行; y 方向垂直于硅酸盐链; z 方向则垂直于硅酸盐层。在这 3 个方向上的拉伸模拟旨在揭示 C-S-H 结构在不同硅链取向下的力学响应和性能。

为了获得 C-S-H 结构的应力-应变关系, 对其进行单轴拉伸模拟。首先, 在 300 K 条件下对结构进行弛豫处理, 确保 x 、 y 、 z 方向上的外部压力耦合至 0, 并维持此状态 3 ns; 达到各向压力平

衡后,对 C-S-H 结构沿 x 方向实施拉伸,同时保持 y,z 方向的压力不变,在此过程中, x 方向的压力视作内部应力 σ_{xx} 且确保垂直拉伸方向的压力为 0,以允许垂直方向的非均匀弛豫,无任何限制。这一设置不仅保证了加载方向垂直的形变,还消除了人为限制造成的形变,有助于更准确地反映材料的泊松效应。整个实验过程中,对模型受力时的应力、应变数据进行详细记录,并基于此

数据分析材料的力学性质。这种精细的模拟方法能够深入理解 C-S-H 在 3 种不同缺陷结构下的抗拉性能。

3 力学性质分析

3.1 弹性模量

弹性模量的计算结果见表 1 所列,其平均值如图 4 所示。

表 1 不同钙硅摩尔比下 V_{BT} 、 $V_{\alpha=1.5}$ 和 $V_{\alpha=1.0}$ 模型拉伸过程中的弹性模量和体积模量

单位:GPa

钙硅摩尔比	模型	弹性模量						体积模量
		C_{11}	C_{22}	C_{33}	C_{44}	C_{55}	C_{66}	
1.2	V_{BT}	149.41	174.96	115.20	34.21	36.64	51.70	81.78
	$V_{\alpha=1.5}$	158.02	172.00	117.43	35.47	43.96	48.99	81.77
	$V_{\alpha=1.0}$	162.19	157.14	106.94	30.47	39.14	45.18	77.72
1.5	V_{BT}	132.09	154.54	131.94	40.33	35.27	47.48	77.76
	$V_{\alpha=1.5}$	148.19	145.90	124.14	39.36	39.75	46.70	78.18
	$V_{\alpha=1.0}$	153.73	145.39	124.22	40.24	42.79	45.73	78.03
1.5	V_{BT}	135.71	141.69	131.67	40.34	38.41	45.31	76.46
	$V_{\alpha=1.5}$	127.59	127.03	118.72	37.78	37.36	39.35	70.41
	$V_{\alpha=1.0}$	139.37	134.09	125.00	38.57	40.56	43.92	75.50
2.0	V_{BT}	126.58	132.70	123.71	41.81	39.30	42.41	72.20
	$V_{\alpha=1.5}$	131.54	129.55	124.91	41.27	39.23	41.13	72.67
	$V_{\alpha=1.0}$	129.59	126.74	123.59	41.29	40.65	44.61	72.46

由表 1 和图 4 可知,3 种缺陷模型(V_{BT} , $V_{\alpha=1.5}$, $V_{\alpha=1.0}$)的弹性常数 C_{11} 、 C_{22} 、 C_{55} 、 C_{66} 和体积模量平均值在钙硅摩尔比为 1.2 时均最高,分别为 156.54、168.03、39.91、48.62、80.42 GPa,并随着钙硅摩尔比增大而逐渐降低。

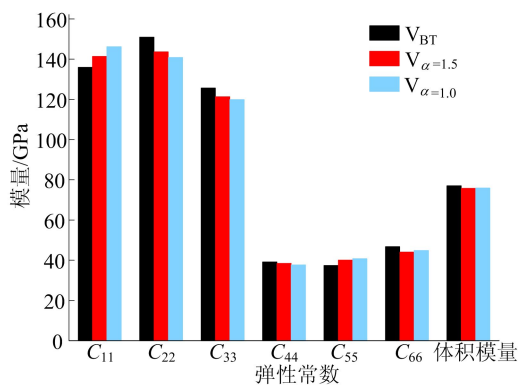


图 4 V_{BT} 、 $V_{\alpha=1.5}$ 和 $V_{\alpha=1.0}$ 模型的平均弹性模量和体积模量

V_{BT} 模型的弹性常数 C_{22} 、 C_{33} 、 C_{44} 、 C_{66} 的平均值均高于 $V_{\alpha=1.5}$ 和 $V_{\alpha=1.0}$ 模型。在不同钙硅摩尔比和不同缺陷模型下的弹性模量有显著差异。例如,在钙硅摩尔比为 1.2 的 V_{BT} 模型下, C_{11} 达到 149.41 GPa,而在钙硅摩尔比为 2.0 时的弹性模量降至 126.58 GPa。该现象验证了钙硅摩尔比

的增加可能导致 C-S-H 结构的化学键松弛和结构松散,影响其弹性模量,类似结果在文献[19-20]的研究中也得到了验证。

进一步分析不同模型下的弹性模量变化,发现 $V_{\alpha=1.0}$ 模型在某些弹性常数(如 C_{11} 和 C_{55})高于其他模型,这可能由于更多 BT 的存在保留了硅链结构的完整性使其在沿 x 方向上刚性增强,而 x 方向也是垂直于 yOz 平面,从而使其弹性常数 C_{11} 和 C_{55} 较高。而 V_{BT} 模型的弹性常数 C_{22} 、 C_{33} 、 C_{44} 和 C_{66} 上表现较高,可能是由于 BT 的缺失保留更多的 PT 使得结构刚度增强。

3.2 抗拉强度

通过拉伸模拟不同钙硅摩尔比下 V_{BT} 、 $V_{\alpha=1.5}$ 和 $V_{\alpha=1.0}$ 模型 3 个方向拉伸过程中的抗拉强度和峰值应变,来研究不同钙硅摩尔比以及 3 种缺陷模型对结构抗拉性能的影响,具体数据见表 2 所列。

当钙硅摩尔比为 1.2 时,C-S-H 的抗拉强度在 x 、 y 、 z 方向上的均值分别为 4.97、5.39、2.78 GPa,明显高于钙硅摩尔比为 1.5、1.7、2.0 时模型的抗拉强度,并随着钙硅摩尔比上升逐渐降低。这表明随着钙硅摩尔比增加,会破坏硅酸盐链的完整性,使得硅链结构变得松散,导致抗拉

强度的降低。

对于 C-S-H 结构的抗拉强度分析,进一步揭示了钙硅摩尔比对 3 种不同缺陷模型的显著影响。在 y 方向上,3 种模型的抗拉强度差异最为明显,平均最大差值达到 3.52 GPa,超过了 x 方向的 3.22 GPa 和 z 方向的 1.51 GPa,说明钙硅摩尔比对 y 方向拉伸力学性能的影响更大。并且,在不同钙硅摩尔比下,C-S-H 结构在 y 方向上

展现出最高的平均抗拉强度 3.31 GPa,而 x 、 z 方向的平均抗拉强度分别为 3.06、1.93 GPa,说明 C-S-H 结构在 y 方向上具有最好的抗拉性能。此外,在不同钙硅摩尔比下 x 、 y 、 z 方向上的峰值应变在平均值上没有显著差异。这表明虽然不同方向上的抗拉强度受到钙硅摩尔比和缺陷模型的影响,但材料在达到最大应力前的形变能力则相对稳定。

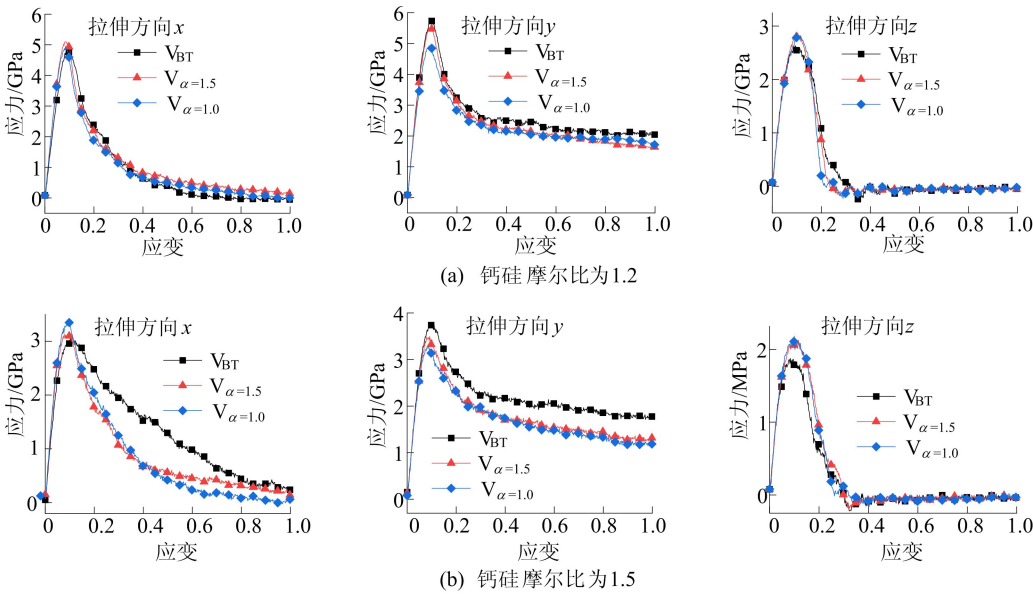
表 2 不同钙硅摩尔比下 V_{BT} 、 $V_{\alpha=1.5}$ 和 $V_{\alpha=1.0}$ 模型各方向拉伸过程中的抗拉强度和峰值应变

钙硅摩尔比	模型	x 方向		y 方向		z 方向	
		抗拉强度/GPa	峰值应变	抗拉强度/GPa	峰值应变	抗拉强度/GPa	峰值应变
1.2	V_{BT}	4.85	0.09	5.73	0.10	2.63	0.09
	$V_{\alpha=1.5}$	5.10	0.08	5.51	0.09	2.87	0.10
	$V_{\alpha=1.0}$	4.95	0.08	4.94	0.09	2.83	0.11
1.5	V_{BT}	3.10	0.11	3.77	0.10	1.88	0.08
	$V_{\alpha=1.5}$	3.14	0.08	3.49	0.09	2.18	0.10
	$V_{\alpha=1.0}$	3.35	0.10	3.28	0.09	2.14	0.11
1.7	V_{BT}	2.57	0.10	2.93	0.10	1.65	0.09
	$V_{\alpha=1.5}$	2.07	0.10	2.14	0.10	1.50	0.08
	$V_{\alpha=1.0}$	2.33	0.09	2.35	0.09	1.67	0.10
2.0	V_{BT}	1.75	0.08	1.99	0.10	1.36	0.08
	$V_{\alpha=1.5}$	1.75	0.08	1.87	0.10	1.24	0.10
	$V_{\alpha=1.0}$	1.73	0.09	1.74	0.10	1.21	0.08

基于 3 种缺陷结构在相同钙硅摩尔比下和不同钙硅摩尔比下的 3 个方向拉伸应力-应变曲线如图 5、图 6 所示。

由图 5、图 6 可知,不同钙硅摩尔比的 C-S-H 样品在各个方向上具有不同的承载能力。当钙硅摩尔比为 1.2 时, $V_{\alpha=1.5}$ 模型在 x 、 z 方向抗拉强度分别为 5.10、2.87 GPa,均高于其他模型。

当钙硅摩尔比为 1.5 时, V_{BT} 、 $V_{\alpha=1.5}$ 、 $V_{\alpha=1.0}$ 模型的最高抗拉强度分别在 x 方向为 3.35 GPa、 y 方向为 3.77 GPa、 z 方向为 2.18 GPa,呈现出了较大的差异性,原因可能是当钙硅摩尔比为 1.2、1.5 时,结构删除的 SiO 较少,并不能很明显地展现出不同 C-S-H 缺陷结构在抗拉性能上的差异。



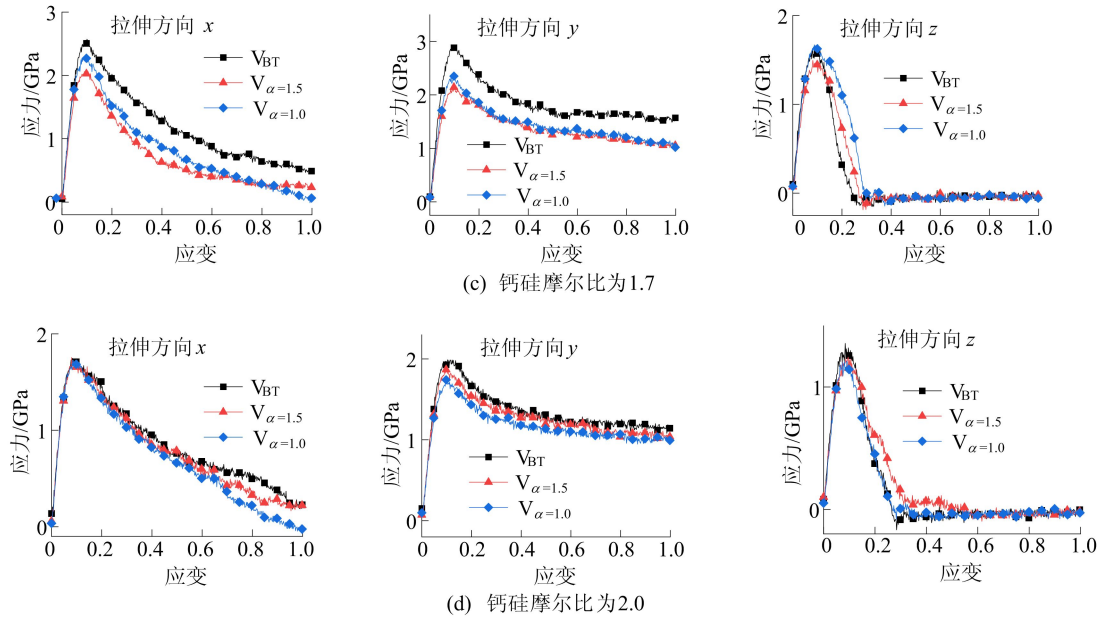


图5 V_{BT} 、 $V_{\alpha=1.5}$ 和 $V_{\alpha=1.0}$ 模型的各方向拉伸应力-应变曲线

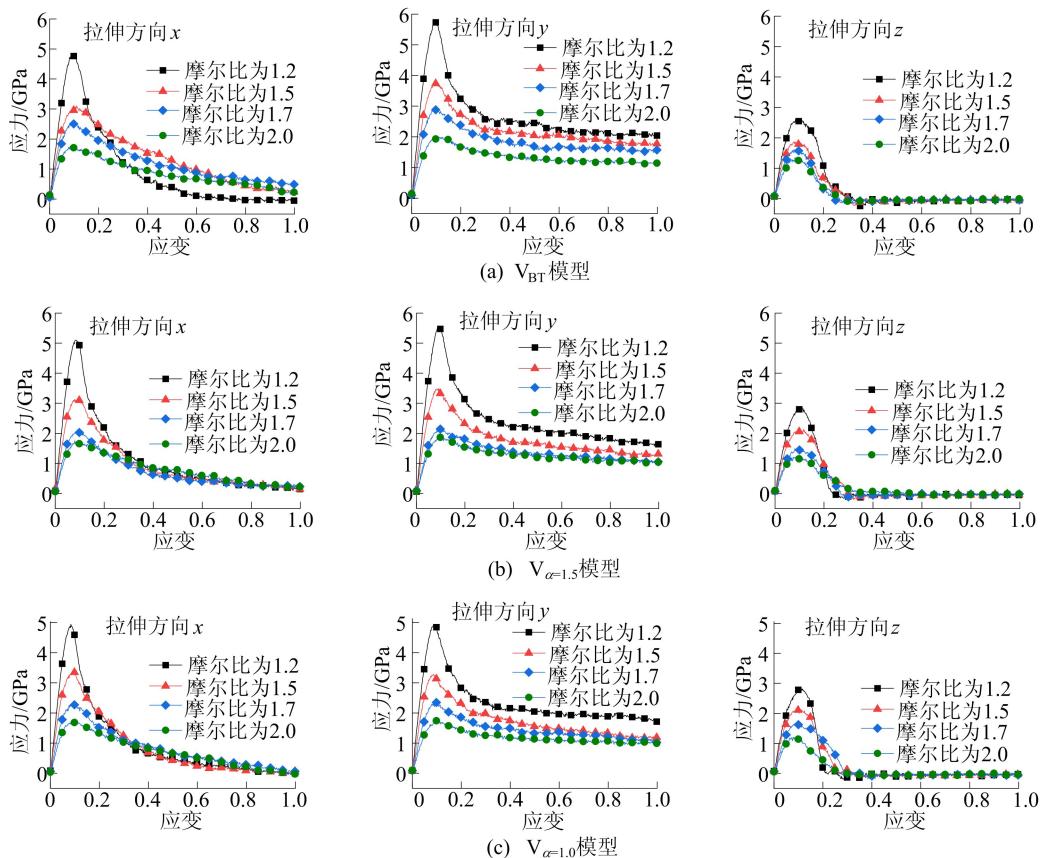


图6 V_{BT} 、 $V_{\alpha=1.5}$ 和 $V_{\alpha=1.0}$ 模型在不同钙硅摩尔比下的各方向拉伸应力-应变曲线

当钙硅摩尔比进一步提高至 1.7 时, V_{BT} 模型在 x 、 y 、 z 方向的抗拉强度分别为 2.57、2.93、1.65 GPa, 均高于另外 2 种模型, 展现出最高的抗拉强度, 且这一趋势在钙硅摩尔比为 2.0 时依然保持。这些结果说明, 具有较高钙硅摩尔比 (1.7~2.0) 时的 C-S-H 微观结构中, 删除大量

BT 的 V_{BT} 结构模型在各个方向都具有最好的抗拉性能。另外, 从图 5 和图 6 还可以看出, 在 y 方向上所有钙硅摩尔比下的 V_{BT} 模型的抗拉强度均最高, 且具有较大的差异性。 V_{BT} 模型意味着结构中保留了更多的 PT, 表明在高钙硅摩尔比时, PT 结构的存在能够更好保持 C-S-H 结构的完整

性,且能提升各个方向上的抗拉强度,特别在 y 方向的拉伸中对于提升结构的抗拉性能更为显著,因此,C-S-H 的抗拉性能与其内部的 BT 和 PT 结构的完整性密切相关。

作为本文模拟结果的参考,文献[21]通过分子动力学模拟研究 C-S-H 在不同钙硅摩尔比下的抗拉强度,发现当钙硅摩尔比为 1.2 时 C-S-H 在 x 方向上抗拉强度为 3.20 GPa, y 、 z 方向分别为 5.42、2.08 GPa,而在钙硅摩尔比增加到 1.67 时, x 、 y 、 z 方向上的抗拉强度分别降低到 3.05、3.39、2.37 GPa,趋势与本文类似。

4 结 论

1) 当钙硅摩尔比为 1.2 时抗拉强度最高。随着钙硅摩尔比增加,C-S-H 结构的抗拉强度和弹性模量呈现出明显的递减趋势,且在 y 方向上的抗拉强度最高。

2) C-S-H 结构中更多 BT 的存在能提高 x 方向的弹性模量,更多 PT 的存在能够提升 y 、 z 方向的弹性模量和整体刚度。

3) 当钙硅摩尔比为 1.7 和 2.0 时,更多 PT 结构的存在能够更好保持 C-S-H 结构的完整性,提升结构在各方向的抗拉强度。

[参 考 文 献]

- [1] BAUCHY M, WANG B, WANG M, et al. Fracture toughness anomalies: viewpoint of topological constraint theory[J]. *Acta Materialia*, 2016, 121: 234-239.
- [2] WANG J, HAN B, LI Z, et al. Effect Investigation of Nanofillers on C-S-H Gel Structure with Si NMR[J]. *Journal of Materials in Civil Engineering*, 2019, 31(1): 04018352.
- [3] JENNINGS H M. A model for the microstructure of calcium silicate hydrate in cement paste[J]. *Cement and concrete research*, 2000, 30(1): 101-116.
- [4] JENNINGS H M. Refinements to colloid model of C-S-H in cement; CM-II [J]. *Cement and Concrete Research*, 2008, 38(3): 275-289.
- [5] LESKO S, LESNIEWSKA E, NONAT A, et al. Investigation by atomic force microscopy of forces at the origin of cement cohesion[J]. *Ultramicroscopy*, 2001, 86(1/2): 11-21.
- [6] CONSTANTINIDES G, ULM F J. The effect of two types of C-S-H on the elasticity of cement-based materials; results from nanoindentation and micromechanical modeling[J]. *Cement and Concrete Research*, 2004, 34(1): 67-80.
- [7] CONG X, KIRKPATRICK R J. ^{29}Si MAS NMR study of the structure of calcium silicate hydrate[J]. *Advanced Cement Based Materials*, 1996, 3(3/4): 144-156.
- [8] JANIK J, KURDOWSKI W, PODSIADŁY R, et al. Fractal structure of C-S-H and tobermorite phases[J]. *Acta Physica Polonica A*, 2001, 100(4): 529-537.
- [9] 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.
- [10] HAMID S. The crystal structure of the 11 Å natural tobermorite $\text{Ca}_{2.25}[\text{Si}_3\text{O}_{7.5}(\text{OH})_{1.5}] \cdot \text{H}_2\text{O}$ [J]. *Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials*, 1981, 154 (3/4): 189-198.
- [11] PELLENQ R J M, 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.
- [12] SHAHSAVARI R, PELLENQ R J M, ULM F J. Empirical force fields for complex hydrated calcium-silicate layered materials[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2011, 13(3): 1002-1011.
- [13] CHIANG Y, CHANG S W. Bridging the gap between NMR measured mean silicate chain length and nano-scale silicate polymorphism of calcium silicate hydrates[J]. *Cement and Concrete Research*, 2021, 140: 106268.
- [14] KOVAČEVIĆ G, PERSSON B, NICOLEAU L, et al. Atomistic modeling of crystal structure of $\text{Ca}_{1.67}\text{SiH}_x$ [J]. *Cement and Concrete Research*, 2015, 67: 197-203.
- [15] WU H, PAN J, WANG J. Molecular dynamics simulation study on dynamic mechanical properties of C-S-H with diverse Ca/Si ratios[J]. *Materials Today Communications*, 2022, 31: 103755.
- [16] RICHARDSON I G. The nature of C-S-H in hardened cements[J]. *Cement and Concrete Research*, 1999, 29(8): 1131-1147.
- [17] KONG L T, BARTELS G, CAMPANA C, et al. Implementation of Green's function molecular dynamics; an extension to LAMMPS[J]. *Computer Physics Communications*, 2009, 180(6): 1004-1110.
- [18] ZHUANG S, LU J, RAVICHANDRAN G. Shock wave response of a zirconium-based bulk metallic glass and its composite[J]. *Applied Physics Letters*, 2002, 80(24): 4522-4524.
- [19] HOU D, ZHANG J, LI Z, et al. Uniaxial tension study of calcium silicate hydrate (C-S-H): structure, dynamics and mechanical properties[J]. *Materials and Structures*, 2014, 48(11): 3811-3824.
- [20] FU J, BERNARD F, KAMALI-BERNARD S. Assessment of the elastic properties of amorphous calcium silicates hydrates (I) and (II) structures by molecular dynamics simulation [J]. *Molecular Simulation*, 2018, 44(4): 285-299.
- [21] 林伟辉, 付甲, 王志华, 等. 不同钙硅比水化硅酸钙力学性能的分子动力学模拟[J]. *材料导报*, 2017, 31(20): 158-163, 169.

(责任编辑 吴 亮)