

## 基于分子动力学模拟的路用相变材料选择

刘福军<sup>1</sup>, 田鑫<sup>2,3</sup>, 梁美琛<sup>3</sup>, 郭猛<sup>3</sup>

(1.中国公路学会,北京市 100011;2.中建三局基础设施建设投资有限公司,湖北 武汉 430064;

3.北京工业大学,北京市 100124)

**摘要:**相变材料在沥青路面调温方面具有很大的应用价值,为了选择合适的路用相变材料,该文借助分子动力学模拟技术对月桂酸分子和聚乙二醇的分子进行模拟运算,并通过试验研究对模拟结果进行验证。研究发现:分子动力学模拟可以高效、便捷地比较相变材料的性能,聚乙二醇在分子密度、内聚能密度、溶解度参数、导热率等指标上均优于月桂酸,更适合用于沥青路面相变材料。

**关键词:**道路工程;相变材料;分子动力学模拟;调温效果

**中图分类号:**U414

**文献标志码:**A

### 0 前言

沥青路面兼具施工便捷、高强低噪、行车舒畅、养护方便等特点,在中国各等级公路路面建设中得到了广泛应用<sup>[1]</sup>。沥青虽然在沥青混合料中占比不多,但起到了胶结骨料、矿粉的作用。沥青是一种受温度影响较大的温敏材料,在温度较低时为弹性体特征,在温度较高时为黏流态特征<sup>[2]</sup>,在环境温度极高或极低时都易发生车辙、坑槽、开裂等病害<sup>[3]</sup>,同时会由于温度变化引起高、低应力循环使沥青路面变硬变脆,加速了沥青路面病害的出现<sup>[4]</sup>。为了缓解温度变化对沥青路面的不良影响,国内外学者做了大量的研究,如Nukunya等<sup>[5]</sup>提出通过设计新的沥青路面级配,来提高沥青路面应对外界高温的能力;Qin等<sup>[6]</sup>研究了一种热反射涂料,可有效切断外界热量的传播,起到降低沥青路面温度的目的;Norman等<sup>[7]</sup>则研究使用加铺密封涂层和覆盖层来提高沥青路面低温性能,克服路面裂缝。这些方法在一定程度上有利于抑制沥青路面由于温度变化引发的病害,但都是在已有路面基础上通过热反射或加快热传播等被动的方式,没有提供主动的温度调节作用。因此,国

内外学者仍在探索一种创新、高效的沥青路面温度调节方法。

近年来,研究人员多次将相变储能技术应用在沥青路面中,通过降低或升高沥青路面的极端温度,来减小温度波动对沥青路面造成的伤害<sup>[8]</sup>。相变材料(Phase Change Material,简称PCM)可以通过自身相态变化,在外界温度发生变化时吸收、释放热量,来保持材料自身的温度恒定,具有优异的温度调控能力<sup>[9]</sup>,在空调系统<sup>[10]</sup>、纺织<sup>[11]</sup>、食品包装<sup>[12]</sup>、建筑<sup>[13]</sup>等领域都得到了广泛应用。PCM的广泛应用,给沥青路面调温方法也提供了新的思路,Zhang等<sup>[14]</sup>研究发现相变材料具有良好的高温稳定性,加入沥青后沥青的导热系数以及热扩散系数都有明显的提高,同时降低了沥青的比热和热敏性,温度梯度也有所下降;Kong等<sup>[15]</sup>研究了月桂酸(Lauric Acid,简称LA)对沥青性能的影响,发现沥青与LA具有良好的相容性,LA的蓄放热性能较强,使沥青更能应对外界环境的极端温度变化,提高了沥青的耐久性和可靠性;Ren等<sup>[16]</sup>发现相变材料具有良好的耐热性、耐酸性、耐碱性和良好的物理性,相变材料中包含的活性炭不与沥青存在化学反应,对沥青性能影响不大,能够满足沥青路面使用寿命的要求;龙振英<sup>[17]</sup>研究

收稿日期:2021-05-18

基金项目:国家自然科学基金资助项目(编号:52078018);国家自然科学基金青年基金资助项目(编号:51808016);中国科协青年人才托举工程项目(编号:2018QNRC001)

作者简介:刘福军,男,硕士,高级工程师.E-mail:1131301591@qq.com

了聚乙二醇(Polyethylene Glycol,简称PEG)作为相变材料对沥青的影响,发现PEG与沥青有较好的相容性,PEG的加入对沥青的黏度有一定的影响,也使得沥青混合料的延度和温敏性有所降低;李俊<sup>[18]</sup>发现相变材料的添加可以减缓沥青混合料的升、降温速度,减小了极端温度的出现次数,也减短了极端温度的出现时间,起到了调控路面温度的作用。

然而,相变材料虽然在道路领域的研究还处于初级阶段,但在建筑、食品包装等领域已有较多的研究,当前应用的相变材料多种多样,不同相变材料在沥青路面的应用效果也有很大的差别,如石蜡类相变材料的化学性质在试验中不发生变化,热稳定性较好,但石蜡对沥青及沥青混合料性能有极为复杂的影响,不宜再进一步掺加,因此石蜡在道路行业应用较差;部分脂肪酸类材料不能承受190℃以上的高温,在沥青混合料拌和过程中会丧失储热能力,因此适用性也一般<sup>[19]</sup>。水合盐类相变材料具有良好的导热性能以及低廉的成本,但其都存在明显的相分离和过冷现象,在冷热循环作用下,会失去储热能力,应用效果也不佳<sup>[20]</sup>。因此,选择出几种适用于沥青路面的相变材料具有一定的现实意义。随着计算机技术的发展,利用分子模拟软件在分子层面上对相变材料的各项性能以及对沥青材料各方面性能的影响进行研究,也可以成为选择合适路用相变材料的新颖、便捷手段。

本文以分子动力学模拟为主要研究手段,分析不同类型相变材料在道路行业的应用前景,并选择两种典型相变材料进行分子模型构建,根据不同相变材料分子模型计算得到的相对密度、溶解度参数、导热率等性能指标,比较得到一种适用于沥青材料的高性能相变材料,供沥青路面使用时选择,同时也可为以后相变材料的选择提供一种更为简便、快捷的方式。

## 1 分子动力学模拟方法

分子动力学(Molecular Dynamics,简称MD)是一种基于牛顿力学原理提出的分子模拟方法,结合了物理、化学和数学等多项技术。MD对研究目标的整个运动进行模拟,再在运动系统中随机选择不同运动阶段的样本来计算构型积分,在构型积分的基

础上,从分子等微观角度完成对研究对象热力学、动力学性质等微观性质的计算研究<sup>[21]</sup>。本研究所用的MD方法,就是通过计算机模拟粒子的运动过程,基于统计力学的方法来解决动力学问题。MD模拟可以作为宏观试验的辅助,通过对运动方程的求解,模拟并分析由电子及中心核形成的体系中各个粒子的受力情况,结合运动理论和量子方法来确定粒子在某个随机时刻的运动状态,进而可以推断出物质的宏观性质<sup>[22]</sup>。

本研究使用的MD软件为美国Accelrys公司开发的Material Studio(MS)7.0。MS软件中主要使用的Amorphous Cell模块可以预测材料的主要性质(如状态方程,内聚能量密度),从而可以快速、精确绘制分子结构,搭建材料的结构模型。Discover模块以Compass力场为运算基础,通过Discover Tools的Minimizer工具可以完成最小化分子模型能量的优化过程,以便后续计算。Forcite模块是MS中分子动力学模拟程序,可以对能量最小化的分子模型进行退火处理以进一步优化结构分子模型,并进行分子动力学模拟计算,得到分子内聚能、溶解度参数等。GULP模块以Dreiding力场为基础,对物质进行声子谱模拟计算,进而预测其导热率。

## 2 路用相变材料筛选

### 2.1 相变材料分类

当前使用的相变材料因分类方式的不同而多种多样,主要的分类方法如下:

(1)按相变材料的储能方式不同,相变材料可分为液-气相变、固-气相变、固-固相变和固-液相变4种类型。前两种相变材料在相变过程中会由固态或液态变为气态,气态材料在实际应用过程中不易于收集和控制,很难满足相变材料的循环使用,而且在相变过程中材料发生了较大的体积变化,在沥青路面应用中并不适合。而固-固相变材料和固-液相变材料则可以避免这种情况的发生,固-固相变材料在发挥作用前后都是固态,体积变化较小,只是在改变晶型时相应释放或吸收热量。虽然固-液相变材料在变为液体时存在渗漏现象,但现有研究通过微胶囊、封装等方法进行了有效控制,在蓄能方面的研究较多,在道路领域也有很大的应用前景。

(2) 按相变材料的相变温度范围不同,相变材料可分为高温相变材料、中温相变材料和低温相变材料。不同相变材料的应用情况根据沥青路面的使用环境温度范围不同而不同,可以依据相变温度范围选择合适的相变材料。

(3) 按相变材料组成的不同,可以分为有机相变材料、无机相变材料和复合相变材料,这也是最为常用的相变材料分类方式。无机相变材料中包括金属合金、化合物和结晶水合盐等。结晶水合盐的相变温度宽、价格低廉、导热系数大、单位体积熔化潜热高(86~328 kJ/kg)、密度大,但这类材料存在成核性能差,有过冷现象以及不溶于结晶水而析出,沉于底部,出现相分离现象,因此在相变储能中的应用并不广泛,在道路领域中的使用存在一定困难。无机化合物潜热容较小,在应用过程中会对环境和人体健康造成危害,通常认为它们不适合在相变储能中应用。金属合金熔点高、导热性好、相变过程体积变化小,但是它们通常在极高温度时使用,不适合道路所处环境的温度范围。有机相变材料是当前研究应用最多的储能材料。石蜡类有机相变材料具有较高的潜热(60~269 kJ/kg),较宽的相变温度范围(20~70 ℃),在吸放热的过程中,蒸气压力较小且不存在相分离现象,但其导热能力较低[0.2 W/(m·℃)左右],相变前后体积发生较大变化,还有可燃的风险,尤其因为蜡含量对沥青路用性能有极为复杂的作用效果,因此在沥青路面中的使用受到限制。有机相变材料还包括聚乙二醇类、脂类、脂肪酸类等非石蜡类,它们热学性质好,与沥青相容性较好,但也存在导热系数低、成本较高等问题。

2.2 路用控温相变材料技术要求

应用在实际道路工程中的相变材料需满足一般沥青混凝土路面的施工技术要求,相变材料主要起调节路面温度的作用,对热力性质有较高要求,一般需要满足:① 合理相变温度。相变材料应用于道路工程中时,其相变温度应满足道路所处环境的温度范围,以便更好地减轻道路工程病害;② 高储能能力。相变材料加入的目的就是吸收和释放热量,缓解沥青路面的温度变化,因此良好的储热能力是基本要求。高的相变储能能力保证了单位体积相变材料可以吸收和释放的热量,可以减少所需相变材料的体积;③ 高比热容。比热容较高可以高效吸热、放

热、对沥青路面有较高的温度调节能力;④ 良好导热性能。对热量的传导能力是温度控制的主要手段,可以提高温度调节的效率;⑤ 良好热稳定性。相变材料的热稳定性是由该相变材料发生分解温度决定。在环境温度高于该相变材料开始分解的温度的情况下,相变材料就不能维持原有的相变性能,失去其应用价值。

除此之外,对于相变材料的物理、化学性质也有一定的要求:① 高密度,无过冷和相分离现象;② 相变前后体积变化小和蒸气压力低;③ 与道路原有组成材料间有良好的相容性,同时有长期的化学稳定性,不易发生降解或与其他材料间存在化学变化;④ 相变材料还应具有良好的安全性,来源广泛,易获性和经济性。

综上所述,相变材料种类繁多,在应用于道路领域时还有较多的技术要求。本研究根据相关技术要求,对不同种类相变材料进行了对比,结果如表1所示。

表1 相变材料性能对比

技术指标	单位	石蜡类 (石蜡)	非石蜡类 (脂肪酸、醇类、 聚乙二醇)	无机类 (水合盐、化合 物、金属)
熔点范围	℃	20~70	16~200	-33~117
相变潜热	kJ/kg	60~269	140~230	86~328
导热系数	W/(m·K)	0.2	0.13~0.15	0.49~1.22
热稳定性		较好	好	差
密度	kg/m <sup>3</sup>	760	850~1 240	1 450~2 100
相分离现象		不存在	不存在	存在
过冷现象		不存在	不存在	存在
化学性质		稳定	稳定	—
经济成本		较低	较高,石蜡类3倍	低
与沥青相容性		良好	良好	一般
腐蚀性		无	无	有
相变体积变化		较大	较小	较小

从表1可以看出:无机类相变材料成核性低、存在过冷现象、相变不协调、热稳定性差、相变过程中材料分离,不适用于沥青路面的研究。有机石蜡类材料导热效率较低,相变过程前后体积变化大,有机非石蜡类相变材料具有热性能良好、不存在相分离及过冷现象、性能稳定,并且与沥青有较好相容性。作为沥青及沥青混合料添加剂,有机相变材料应是最佳选择。其中,有机非石蜡类相变材料代表性物



质 PEG、PA 相变温度范围宽(58~64 ℃),相变潜热高(190~220 J/g),热稳定性良好、相变前后体积变化小,初步认为是合适的路用控温相变材料,下文以这两种相变材料为研究对象,通过分子动力学模拟进行选择。

### 3 路用相变材料分子动力学模拟

#### 3.1 月桂酸(PA)的分子动力学模拟

PA 是一种常见的饱和脂肪酸,现有研究已经推断出其准确的分子结构,本研究利用 Materials Studio 的 Material Visualizer 模块中的分子结构绘制工具构建出 PA 的三维结构模型。使用 Amorphous Cell Tools 模块在温度设置为 298 K(24.86 ℃)下进一步优化,建立具有合理构造的 PA 分子结构模型,将分子数量设置为 1,创建一个周期性单元格,即一个单元格里只有一个 PA 分子(图 1)。再使用 Discover Tools 的 Minimizer 工具进行分子模型能量最小化的优化过程,以便后续计算。

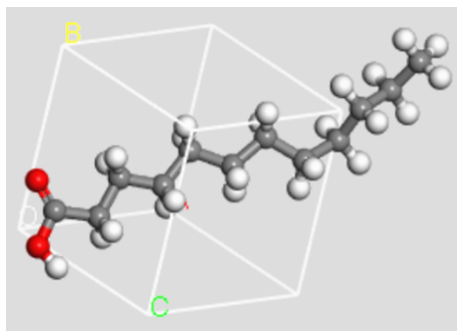


图 1 PA 分子的 Amorphous Cell 模型

在经过能量最小化后得到的分子模型还不是 PA 的最优分子结构模型,还需要采用 Forcite 模块里面的 Anneal 工具进行退火处理。退火过程中,初始温度设置为 300 K(26.85 ℃),中间温度设置为 500 K(226.85 ℃),每段步长 100 K(-173.15 ℃),共进行 10 次循环计算,结果如图 2 所示。在 10 次循环过程中,分子模型能量有不小的波动。

退火处理后,PA 的分子模型得到了进一步优化,接下来可以使用 Forcite 模块中的 Forcite Dynamics 功能对 PA 分子模型进行模拟计算。选择分子量、压强和温度都不变的 NPT 系综,设置的温度为 298 K(24.85 ℃),压强选择常压 0.000 1 GPa,持续时间为

$200 \times 10^{-12}$  s。

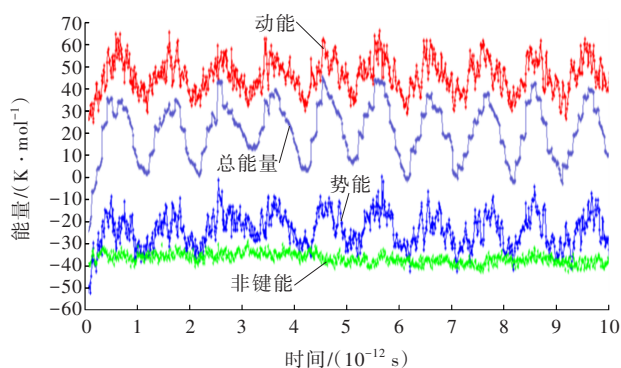


图 2 PA 分子退火过程能量变化

经过分子动力学模拟,通过 Forcite/analysis 可以得到 PA 分子在分子动力学模拟过程中的相对密度的变化情况如图 3 所示。经过  $200 \times 10^{-12}$  s 的模拟过程得到的 PA 分子密度为  $0.865 \text{ g/cm}^3$  左右,经过与真实的 PA 密度( $0.883 \text{ g/cm}^3$ )对比发现,只有 2% 的误差,说明了该分子模型基本符合真实性的预期,对 PA 的实际性能有一定的映照能力。

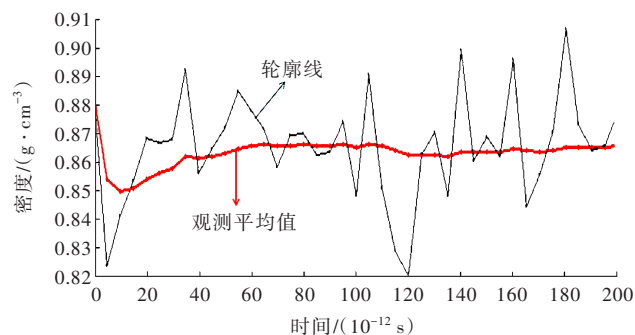


图 3 PA 分子密度

现已证实了 PA 分子模型的准确性,下一步将进行 PA 热力学性能的模拟计算。内聚能密度是指单位体积内每摩尔材料克服分子间作用力气化时所需要的能量,一般而言,内聚能密度越大,聚合物分子间作用力越强,热力学性能越好,在沥青路面中可以发挥出更好的蓄放热能力<sup>[23]</sup>。溶解度参数是衡量相变材料与沥青分子相容性的一项物理常数,溶解度参数越接近,则其相容性越好,制备的相变沥青也具有更好的储存稳定性。在 Forcite 模块中运行 Cohesive Energy Density 功能,得到 PA 分子的内聚能密度和溶解度参数如表 2 所示。从表 2 可以看出:PA 内聚能密度为  $2.353 \times 10^8 \text{ J/m}^3$ ,其溶解度参数为  $15.305(\text{J/cm}^3)^{0.5}$ 。

表2 PA分子的内聚能密度和溶解度参数

项目	内聚能密度/ (J·m <sup>-3</sup> )	内聚能密度误 差/(J·m <sup>-3</sup> )	溶解度参数/ (J·cm <sup>-3</sup> ) <sup>0.5</sup>	溶解度参数误 差/(J·cm <sup>-3</sup> ) <sup>0.5</sup>
总计	2.353×10 <sup>8</sup>	1.025×10 <sup>7</sup>	15.305	0.330
范德华作用	2.196×10 <sup>8</sup>	9.138×10 <sup>6</sup>	14.787	0.304
静电交互作用	5.187×10 <sup>6</sup>	1.181×10 <sup>6</sup>	2.052	0.312

导热率体现了材料对热量的传导能力,这也是相变材料温度控制的主要实现手段之一,导热率越大、温度调节效率越高,相变材料应用价值也越高。否则,不能及时、有效地调节沥青路面温度,将不能更好地缓解温度病害。对PA分子模型进行进一步分析,研究使用GULP模块,力场选择Dreiding力场对PA进行声子谱模拟计算,进而计算PA的导热率。首先使用GULP/Geometry Optimization进行几何优化。再在温度设置为200~500 K(-73.15~226.85℃),温度步长为50 K(-223.15℃)的条件下模拟计算导热率随温度的变化,得到PA导热率为0.2 W/(m·K)左右,且在温度变化过程中,PA的导热率几乎没有变化,可见PA的导热率不受温度波动的影响,热性质也相对稳定。

3.2 聚乙二醇(PEG)分子模型的构建

PEG是一种常见的有机化合物,与许多有机物组分有良好的相溶性。根据PEG已经得到的精确分子结构,利用Materials Studio的Material Visualizer模块中的分子结构绘制工具构建出PEG中重复单元的全原子模型(图4)。之后,选择Build/Build Polymers/Repeat Unit分别定义好首尾原子,再选择Build/Build Polymers/Random Copolymer构建链长为35的PEG分子模型。然后使用Amorphous Cell Tools模块在温度设置为298 K(24.85℃)下建立具有合理构造的PEG分子结构模型,将分子数量设置为1,创建一个周期性单元格,即一个单元格里只有一个PEG分子(图5)。然后使用Discover Tools的Minimizer工具进行分子模型能量最小化的优化过程,以便后续计算。

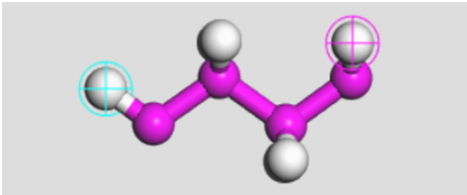


图4 PEG重复单元

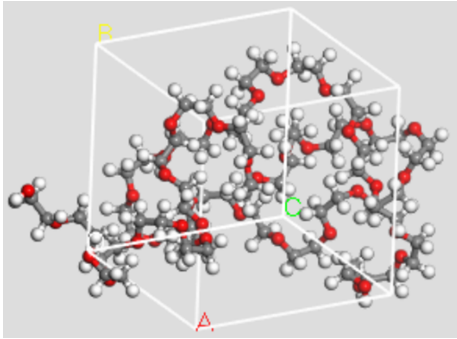


图5 PEG分子的Amorphous Cell模型

经过能量最小化后得到的分子模型还需要采用Forcite模块里面的Anneal工具来进行退火处理,初始温度设置为300 K(26.85℃),中间温度设置为500 K(226.85℃),每段步长100 K(-173.15℃),共进行10次循环计算。

退火处理后的分子模型得到了进一步优化,将该分子模型进行分子动力学运算。选择Forcite Dynamics功能对PEG分子进行分子动力学模拟计算。选择分子量、压强和温度都不变的NPT系综,设置的温度为298 K(24.85℃),压强选择常压0.1 MPa,持续时间为200×10<sup>-12</sup> s。

经过分子动力学模拟,通过Forcite/Analysis可以得到PEG分子在分子动力学模拟过程中相对密度的变化情况(图6)。经过200×10<sup>-12</sup> s的模拟过程得到的PEG分子密度为1.14 g/cm<sup>3</sup>左右,与真实的PEG密度(1.15 g/cm<sup>3</sup>)只有0.9%的误差,说明了该分子模型基本符合真实性的预期,对PEG的实际性能有一定的映照能力。

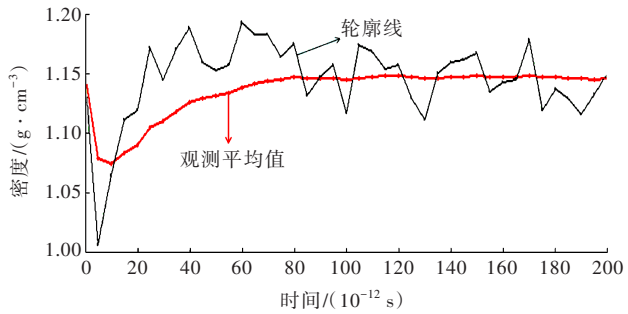


图6 PEG分子密度

验证PEG分子模型的精确性后,对其性能进行模拟计算。在Forcite模块中运行Cohesive Energy Density功能可以得到PEG分子的内聚能密度(图6)和溶解度参数(表3)。由表3可知:所得PEG内聚能密度为3.455×10<sup>8</sup> J/m<sup>3</sup>,其溶解度参数为

$18.561 (\text{J}/\text{cm}^3)^{0.5}$ 。此外,溶解度参数越接近的两种物质其相溶性越好,PEG 的溶解度参数接近于大部分沥青材料,可以认为 PEG 与沥青材料有更好的相溶性。

表 3 PEG 分子的内聚能密度和溶解度参数

项目	内聚能密度/ ( $\text{J} \cdot \text{m}^{-3}$ )	内聚能密度误 差/( $\text{J} \cdot \text{m}^{-3}$ )	溶解度参数/ ( $\text{J} \cdot \text{cm}^{-3}$ ) <sup>0.5</sup>	溶解度参数误 差/( $\text{J} \cdot \text{cm}^{-3}$ ) <sup>0.5</sup>
总计	$3.455 \times 10^8$	$1.116 \times 10^7$	18.561	0.319
范德华作用	$2.683 \times 10^8$	$8.731 \times 10^6$	16.356	0.279
静电交互作用	$5.941 \times 10^6$	$4.316 \times 10^6$	7.655	0.289

对 PEG 分子模型做进一步的分析,分析方法、过程、条件与 PA 分子相同。得到的 PEG 导热率为  $0.3 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$  左右,和 PA 相似,在温度变化过程中,导热率几乎没有变化,可见 PEG 的导热率不受温度波动的影响,热性质也相对稳定。

通过模拟结果可以直观地发现,虽然 PA 同样是较为适用的路用相变材料,但与 PEG 相比,各项指标仍存在一定的差距。PEG 具有良好的蓄放热能力、导热率大、温度调节效率高等特点,且与沥青相溶性较好,制备的相变沥青具有良好的储存稳定性,可以及时、有效地调节沥青路面温度、缓解温度病害,在路用相变材料中具有更强的适用性。

#### 4 路用相变材料储放热性能验证

以 5% 的掺量将聚乙二醇加入基质沥青中,然后在  $175^\circ\text{C}$  下,通过高扭矩搅拌器以  $2\,000 \text{ r}/\text{min}$  的速度,机械搅拌  $30 \text{ min}$  得到 PEG 相变沥青。采用 DSC 200F3 差示扫描量热仪,保护气和冲扫气流量均为高纯氮,速率为  $20 \text{ mL}/\text{min}$ ,升降温速率均为  $2^\circ\text{C}/\text{min}$ ,对基质沥青及相变沥青进行测试。基质沥青样品及相变沥青样品的 DSC 热流量-温度曲线如图 7、8 所示。

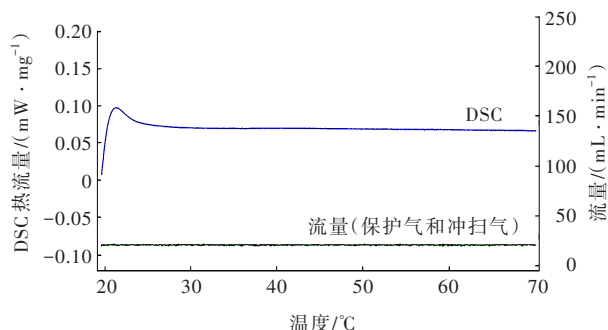


图 7 基质沥青 DSC 热流量-温度曲线

由图 7 可知:基质沥青在温度上升过程中热流量曲线没有明显变化,说明基质沥青不存在相变特性,易于受到外界温度变化的影响。而从图 8 中可以看出:在沥青中添加了 5% 的 PEG 后有明显特征峰出现。当温度升高至  $37.4^\circ\text{C}$  时,相变沥青开始发生相变吸热,在  $43.8^\circ\text{C}$  处达到峰值,温度为  $46.0^\circ\text{C}$  时吸热结束,潜热值为  $3.755 \text{ J}/\text{g}$ 。可见相变沥青的相变温度域为  $37.4 \sim 46.0^\circ\text{C}$ ,聚乙二醇可以稳定存在于基质沥青中,并发挥相变潜热的功能,当外界温度发生变化时,相变沥青可以通过自身相态变化来调节温度,使沥青路面保持在恒定温度,减少温度病害的发生。

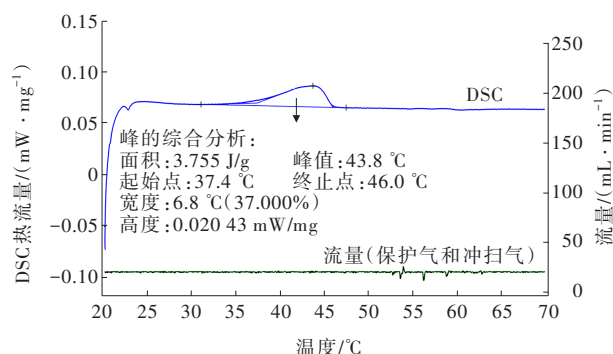


图 8 相变沥青 DSC 热流量-温度曲线

#### 5 结论

相变材料在沥青路面混合料中的应用有可能成为一种调节极端温度的有效方法,这种新型材料在道路工程领域中应用前景广阔。本文以分子动力学模拟为主要研究手段,分析不同类型相变材料在道路行业的应用前景,并对月桂酸分子和聚乙二醇分子进行分子模拟,通过分子密度、内聚能密度、溶解度参数、导热率等指标进行性能比较,得到以下主要结论:

(1) 相变材料对沥青路面温度有良好的调控作用。其中,有机相变材料蓄放热能力强、与沥青的相溶性好、性能稳定、不存在过冷和相分离现象,是研究沥青路面相变材料的最佳选择。

(2) 月桂酸和聚乙二醇是典型的有机相变材料,聚乙二醇在分子密度、内聚能密度、溶解度参数、导热率等指标上均优于月桂酸,聚乙二醇密度大、与沥青相溶好且能够更快地进行温度传导,更适合用作沥青路面相变材料。

(3) 分子动力学模拟手段可以省去复杂的试验过程,高效、便捷地比较不同相变材料的性能,可为路用相变材料的选择提供新的思路。

#### 参考文献:

- [1] 胡新顺.关于公路工程沥青路面施工技术分析[J].绿色环保建材,2019(3):115,117.
- [2] AMIRKHANIAN A N, XIAO F, AMIRKHANIAN S N. Evaluation of high temperature rheological characteristics of asphalt binder with carbon nano particles[J]. Journal of Testing and Evaluation, 2011, 39(4): 583-591.
- [3] KHODAI A, FALLAH S, MOGHADAS NEJAD F. Effects of geosynthetics on reduction of reflection cracking in asphalt overlays[J]. Geotextiles and Geomembranes, 2008, 27(1): 1-8.
- [4] ELKASHEF M, WILLIAMS R C, COCHRAN E. Investigation of fatigue and thermal cracking behavior of rejuvenated reclaimed asphalt pavement binders and mixtures[J]. International Journal of Fatigue, 2018, 108(1): 90-95.
- [5] NUKUNYA B, ROQUE R, TIA M, et al. Effect of aggregate structure on rutting potential of dense-graded asphalt mixtures[J]. Transportation Research Record, 2002, 1789(1): 136-145.
- [6] QIN Y. A review on the development of cool pavements to mitigate urban heat island effect[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2015, 52: 445-459.
- [7] NORMAN R, "SKIP" Brown. Solution for distressed pavements and crack reflection[J]. Transportation Research Record, 2003, 1819(1): 313-317.
- [8] SI W, ZHOU X Y, MA B, et al. The mechanism of different thermoregulation types of composite shape-stabilized phase change materials used in asphalt pavement[J]. Construction and Building Materials, 2015, 98: 547-558.
- [9] GUO J, XIANG H X, WANG Q Q, et al. Preparation of poly (decaglycerol-co-ethylene glycol) copolymer as phase change material[J]. Energy and Buildings, 2012, 48(1): 206-210.
- [10] ZALBA B, MARÍN J M, CABEZA F L, et al. Review on thermal energy storage with phase change: materials, heat transfer analysis and applications[J]. Applied Thermal Engineering, 2003, 23(3): 251-283.
- [11] LAZCANO M A G, YU W D. Thermal performance and flammability of phase change material for medium and elevated temperatures for textile application[J]. Journal of Thermal Analysis & Calorimetry, 2014, 117(1): 9-17.
- [12] JOHNSTON J H, GRINDROD J E, DODDS M, et al. The use and performance of a nano-structured calcium silicate phase change material for thermal buffering in food packaging[J]. Appita Journal, 2008, 61(5): 359-363.
- [13] PASUPATHY A, VELRAJ R, SEENIRAJ R V. Phase change material-based building architecture for thermal management in residential and commercial establishments [J]. Renewable & Sustainable Energy Reviews, 2008, 12(1): 39-64.
- [14] ZHANG D, CHEN M Z, WU S P, et al. Preparation of expanded graphite/polyethylene glycol composite phase change material for thermoregulation of asphalt binder[J]. Construction and Building Materials, 2018, 169: 513-521.
- [15] KONG W B, LIU Z M, YANG Y Y, et al. Preparation and characterizations of asphalt/lauric acid blends phase change materials for potential building materials[J]. Construction and Building Materials, 2017, 152: 568-575.
- [16] REN J P, MA B, SI W, et al. Preparation and analysis of composite phase change material used in asphalt mixture by sol-gel method[J]. Construction and Building Materials, 2014, 71: 53-62.
- [17] 龙振英.相变材料在道路工程中的应用前景分析[J].中国新技术新产品, 2017(15): 70-71.
- [18] 李俊.自调温沥青混合料性能研究[D].西安:长安大学, 2012.
- [19] 张一博,朱洪洲,李菁若,等.储热降温沥青路面用相变材料的选择[J].郑州大学学报(工学版), 2012, 33(3): 10-14, 18.
- [20] FELDMAN D, SHAPIRO M M, BANU D, et al. Fatty acids and their mixtures as phase-change materials for thermal energy storage[J]. Solar Energy Materials, 1989, 18(3/4): 201-216.
- [21] 张晖,张秉坚,梁世强,等.微孔中简单流体粘度的分子动力学模拟及关联模型[J].物理化学学报, 2003, 19(4): 352-355.
- [22] 杨仕清,张文旭,彭斌,等.氢在Nd晶体中行为的分子动力学模拟[J].原子与分子物理学报, 2000, 17(2): 279-282.
- [23] 葛静远,付可欣,谢军,等.DGEBA/OSC共混改性环氧树脂热力学性能的分子模拟与实验研究[J].绝缘材料, 2021, 54(3): 42-48.