Mater. Rep. B, 2020, Vol. 34, No. 8
DOI: 10.11896/cldb.19080033
http://www.mater-rep.com　http://www.mr-int.net

[补充信息]

水化硅酸钙层间水吸附规律及其对分子结构的影响

童涛涛，李宗利✉，杜向琴，李 波，刘恒杰

西北农林科技大学旱区农业水土工程教育部重点实验室，杨凌 712100

[Supplementary Information]

Adsorption Law of Interlayer Water of Calcium Silicate Hydrate and Its Effect on the Molecular Structure

TONG Taotao, LI Zongli✉, DU Xiangqin, LI Bo, LIU Hengjie

Key Laboratory of Agricultural Soil and Water Engineering in Arid and Semiarid Areas of Ministry of Education, Northwest A & F University, Yangling 712100, China

C-S-H 初始模型的建立

应用 Materials Studio 软件建立本工作的模型，详细步骤为：

（1）将 Hamid 的 1.1 nm Tobermorite 晶体作为 C-S-H 模型的初始结构，并建立 4×4×1 的超胞；

（2）将硅链按 Q_n 分布进行断链，使晶体中的 Q_0=10%，Q_1=67%，Q_2=23%；

（3）删除晶胞中-OH 基团，并使 C-S-H 晶体的钙硅比为 1.70；

（4）采用 ClayFF 力场对模型进行几何优化。

吸附等温线的获取

在 Materials Studio 软件的 Sorption 模块中，采用 ClayFF 力场和广义蒙特卡罗法（GCMC）模拟 C-S-H 对水分子的吸附。模拟的温度分别为 280 K、285 K、290 K、295 K、300 K、305 K、310 K、315 K、320 K。模拟过程的平衡步数和生产步数分别为 10^7、 8×10^7，此设置的运行结果的水分子加入步数与删除步数比值接近 1，即吸附达到平衡。

获取单一温度的吸附等温线，首先利用 Antoine 方程计算此温度下水的饱和蒸汽压，然后在 0 到饱和蒸汽压之间选取 10 个压强，分别模拟得到此温度各个压强下 C-S-H 模型对水分子的吸附量，再拟合得到不同温度的吸附等温线。

吸附系数公式获取

Arrhenius 公式为：

$$b = b_0 + e^{\frac{-E}{RT}} \tag{S1}$$

式中：b 为吸附系数；b_0 为常数；E 为吸附热，可视为与温度无关的常数；R 为气体常数。将式（S1）两边取对数得：

$$\ln b = \ln b_0 - \frac{E}{R}\frac{1}{T} \tag{S2}$$

由式（S2）可见，ln$b$ 与 1/T 呈线性关系。故可通过温度 T 和吸附系数 b 拟合得到吸附系数的公

✉ bebe@nwsuaf.edu.cn

式。

C-S-H 构型分析过程

基于 Forcite 模块将不同覆盖率的 C-S-H 模型在 NTP 系综下进行 500 ps 弛豫。

首先根据弛豫后的模型计算晶体的体积，分析晶体体积和密度的变化规律。然后对各模型进行 Concenreation profile 分析，选取的方向为（0，1，0），即为 C-S-H 晶体分层的方向。最后对各模型进行径向分布分析。将晶体中 Si、Ca、O（不包括水分子中的 O）分别设置组。选取的 Cutoff 为 15 Å，Interval 为 0.1 Å。此设置得到的径向分布图具有较好的精度和清晰的峰值差异。

✉ bebe@nwsuaf.edu.cn