

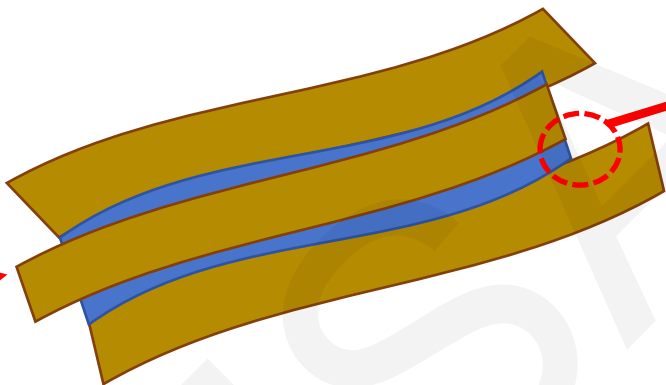
A molecular dynamics simulation study on the tensile and compressive behavior of hydrated kaolinite

Ming LU, Qiufeng DIAO, Yuanyuan ZHENG

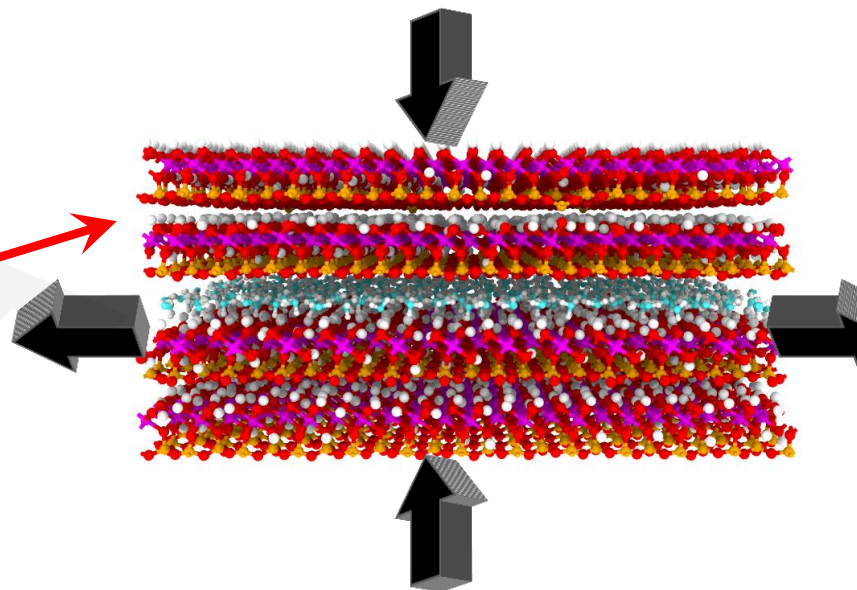
Cite this as: Ming LU, Qiufeng DIAO, Yuanyuan ZHENG, 2025. A molecular dynamics simulation study on the tensile and compressive behavior of hydrated kaolinite. *Journal of Zhejiang University-SCIENCE A (Applied Physics & Engineering)*, 26(2):166-176. <https://doi.org/10.1631/jzus.A2300645>



深海深地工程

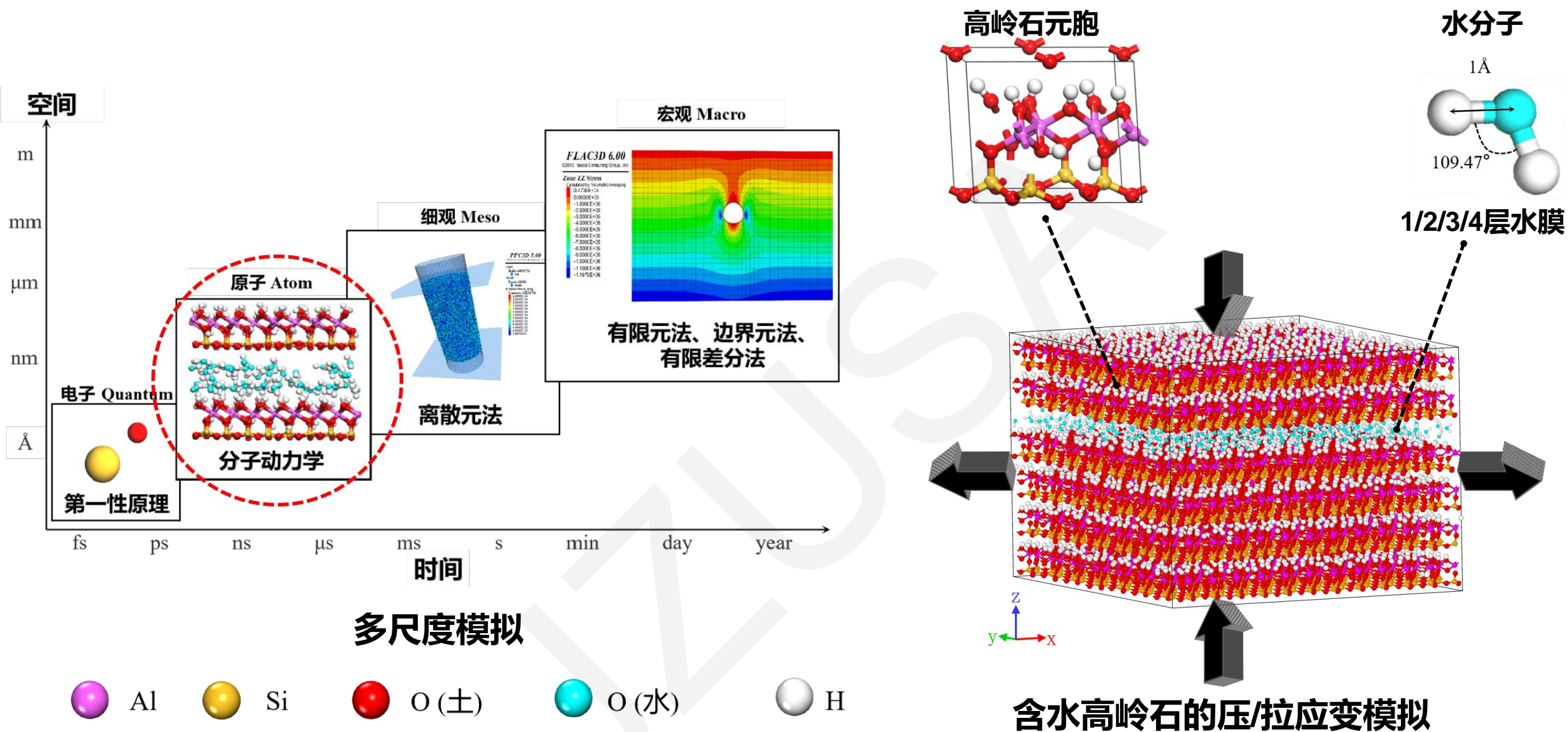


细观土颗粒



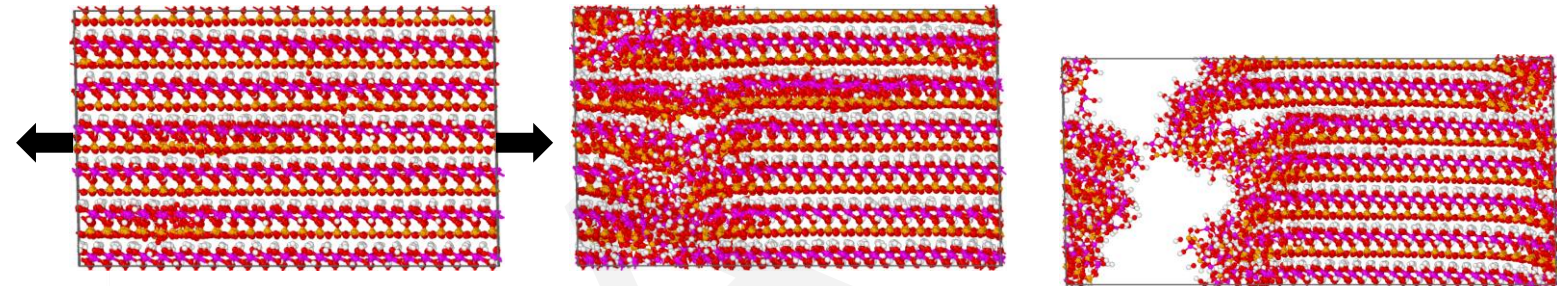
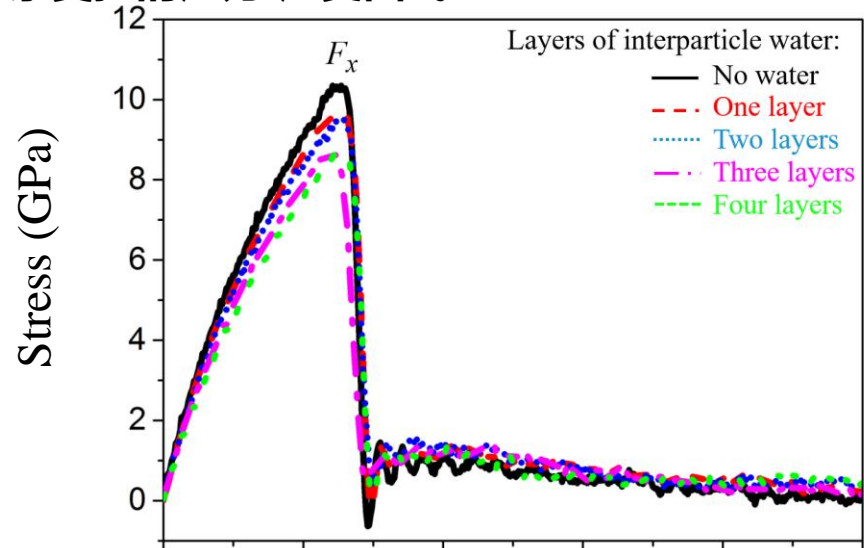
微观黏土矿物

在深海深地工程当中，岩土基底往往承受着极高的拉、压作用而存在一定危险隐患。究其原因，是其中软弱成分——黏土矿物在水和外力的耦合作用下而失稳，甚至出现结构性破坏。所以，探查含水黏土矿物在承受高应力作用下的破坏现象，对重大工程的防灾减灾，以及验证黏土材料的可靠性极其重要。

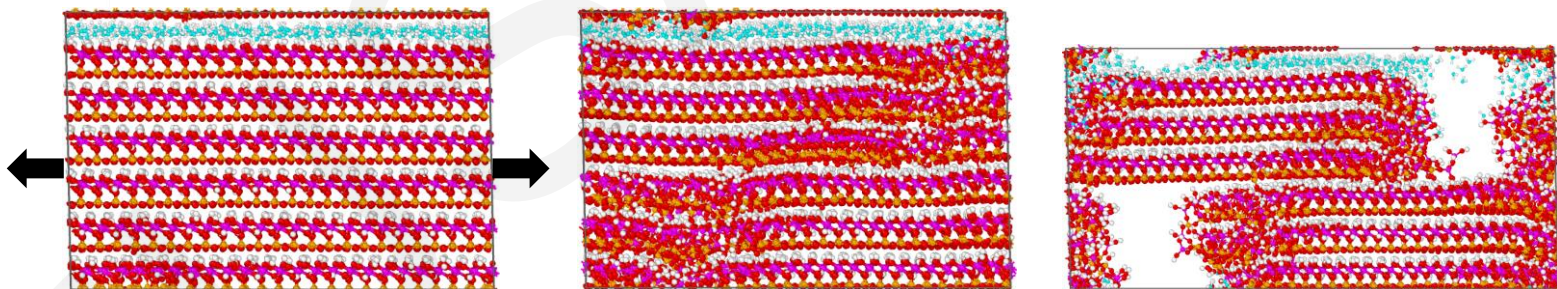


如今，关于土体破坏的宏观试验和宏、细观模拟已经很多，但对纳米尺度的含水黏土矿物的受压、拉研究还很缺乏。基于此，本文以分子动力学为基础，以微观的含水高岭石为对象，研究其在的恒定应变率 ($\varepsilon = 10^{-4} \text{fs}^{-1}$) 作用下的结构破坏现象和力学响应。

体系受拉的应力-应变曲线：

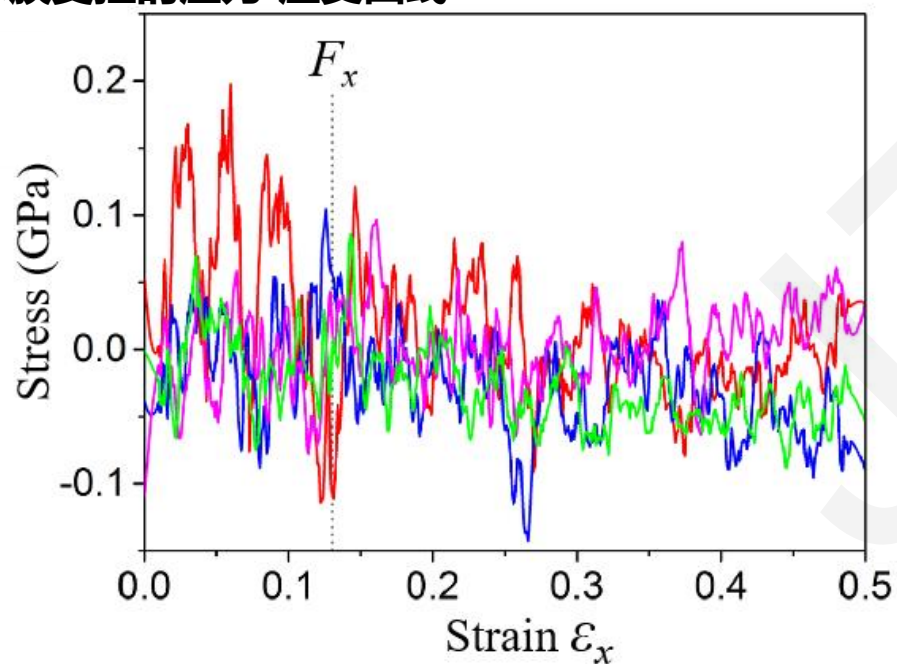


干燥高岭石被拉断



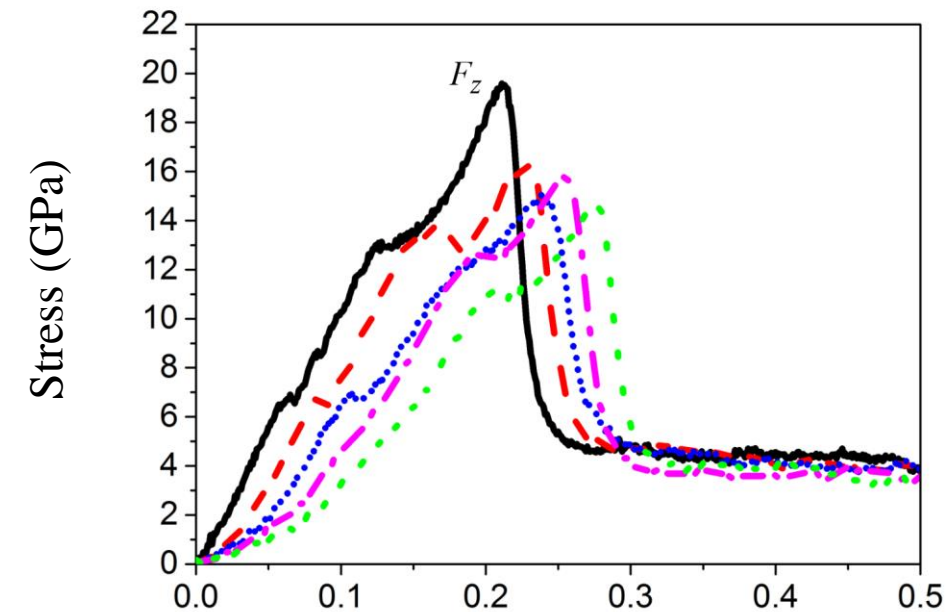
含水高岭石被拉断

水膜受拉的应力-应变曲线：

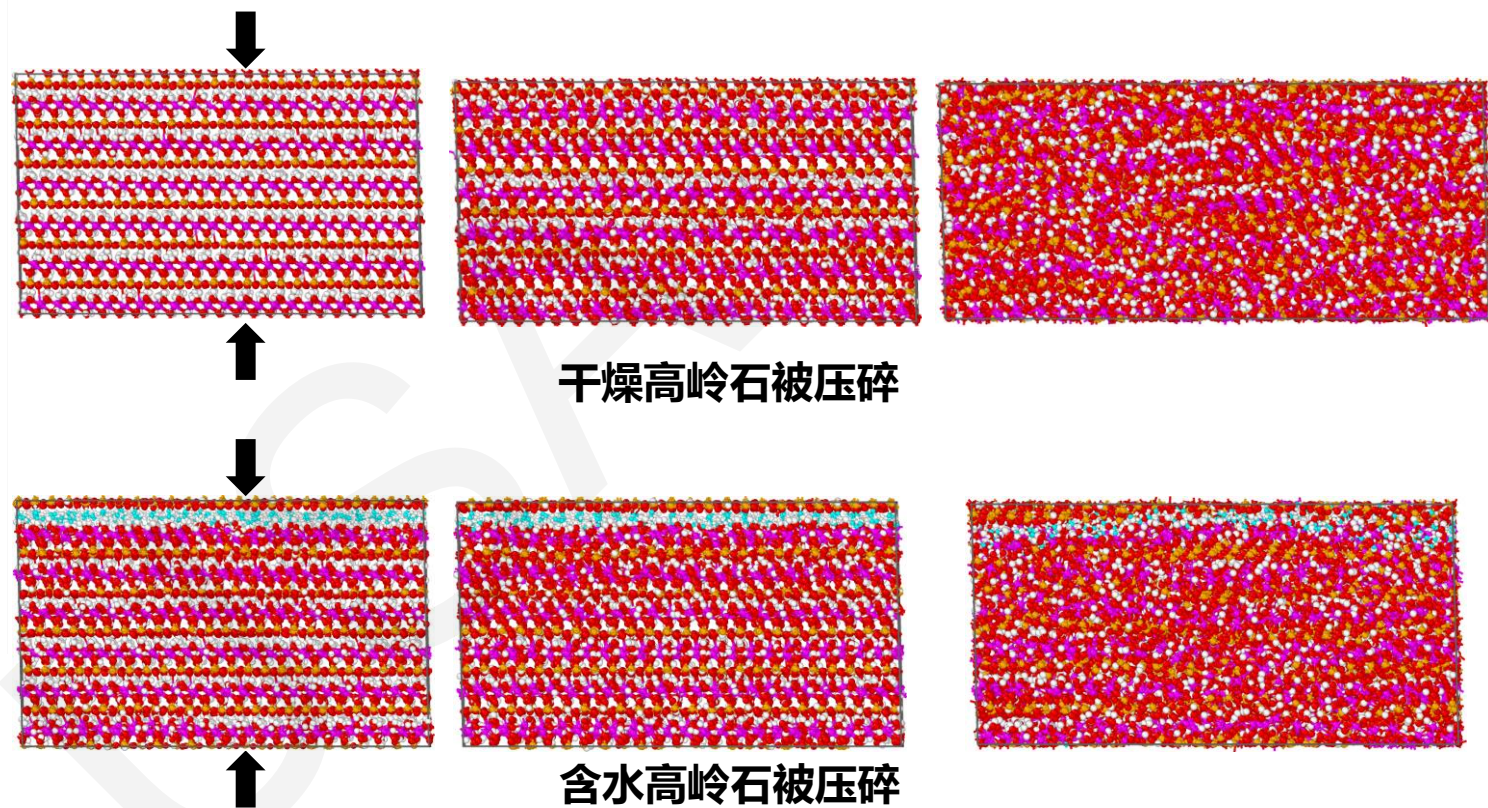
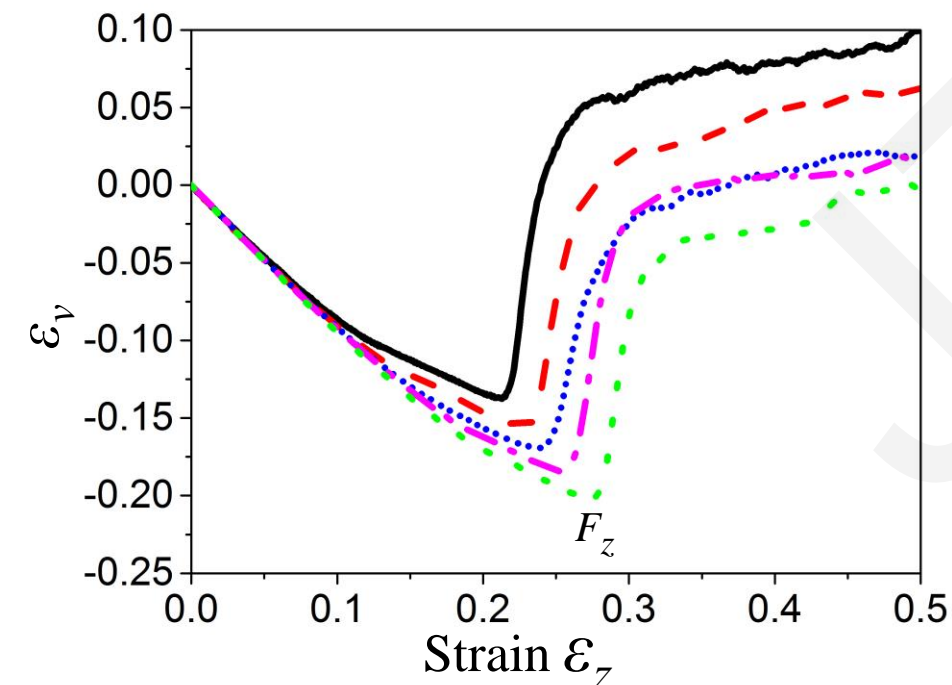


由体系受拉的应力-应变可知，相比于干燥高岭石的极限抗拉强度，水膜的加入使得高岭石强度削弱了8.12%~27.53%。由截图可见，高岭石的破坏主要是因为矿物内部的共价键被拉断。单独求出粒间水膜的应力-应变曲线图可推测出含水高岭石的削弱机理，即水膜的低密度和无序排列使体系失去稳定性，且水膜越厚，水分子扩散性越高，整个体系的抗拉强度越低。

体系受压的应力-应变曲线：

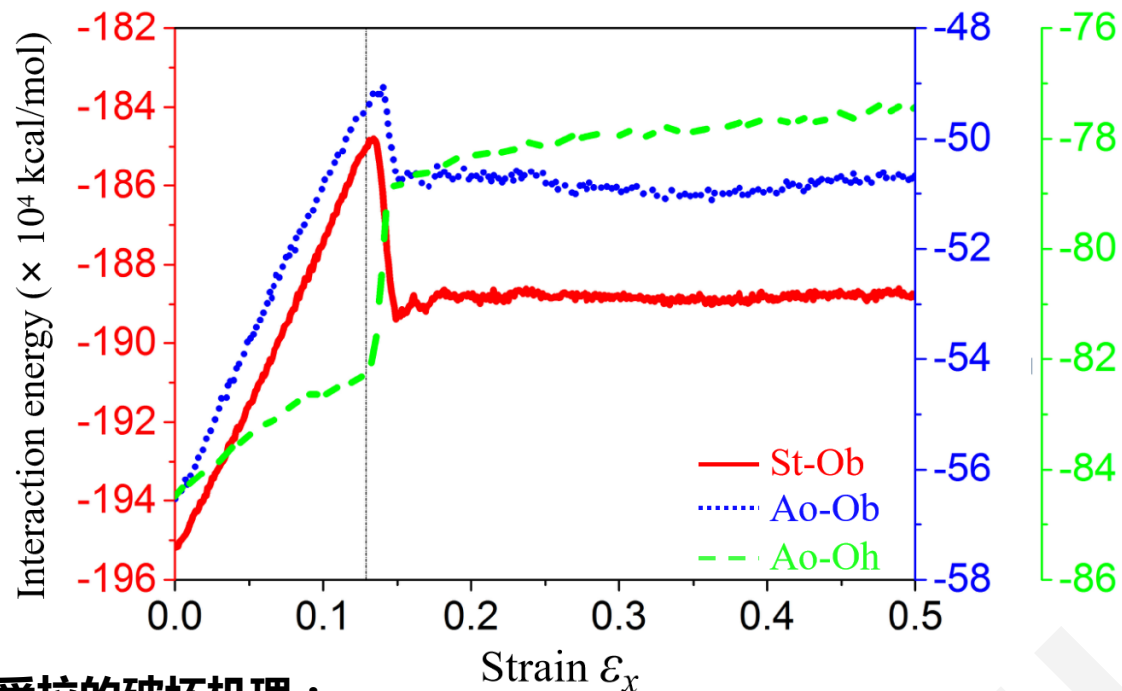


水膜受压的体积变化：



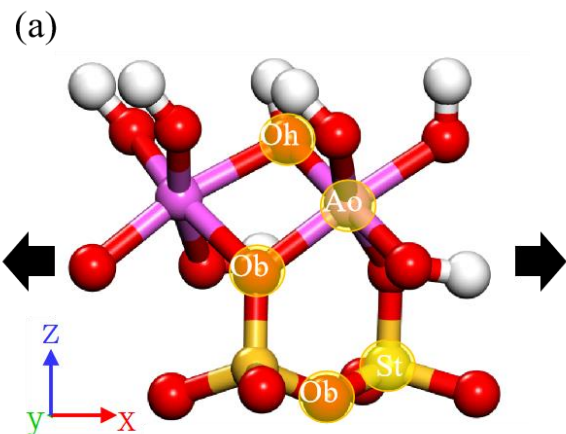
对于受压的应力情况，粒间水膜使得高岭石强度削减了15.71% ~ 26.02%。由截图可见压缩作用使得水膜和土一起被压碎。由水膜受压时的体应变可以得出水膜对高岭石的抗压强度的削弱机理：1.水膜增加了整个体系的体积，从而减小了应力；2.水膜使得原本紧密的层状结构分成了两部分，当受压时，两部分黏土很难接触而难以传递有效应力。

不同原子对的相互作用能：

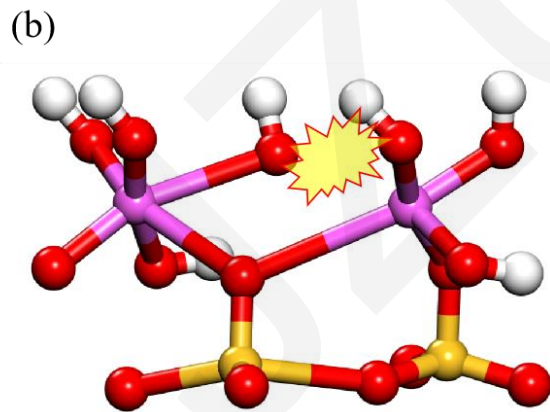


在CLAFF力场中，硅氧键和铝氧键蕴藏在原子的相互作用能之中。基于此，分析了三种原子对 (St···Ob, Ao···Ob, Ao···Oh) 的相互作用能，从曲线突变的先后顺序可知，高岭石受拉破坏由铝氧八面体的铝氧（羟基氧）共价键 Ao···Oh 的断裂引发，随后是硅氧共价键 St···Ob 和铝氧（桥接氧）共价键 Ao···Ob。

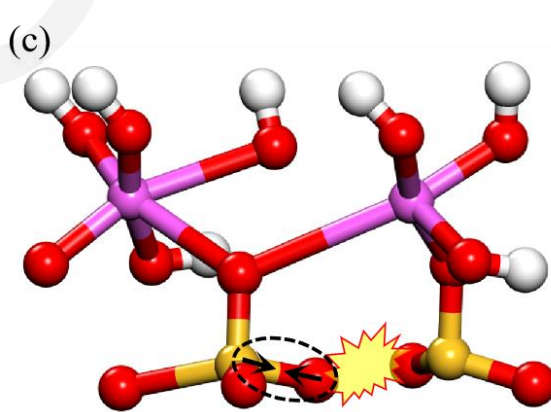
受拉的破坏机理：



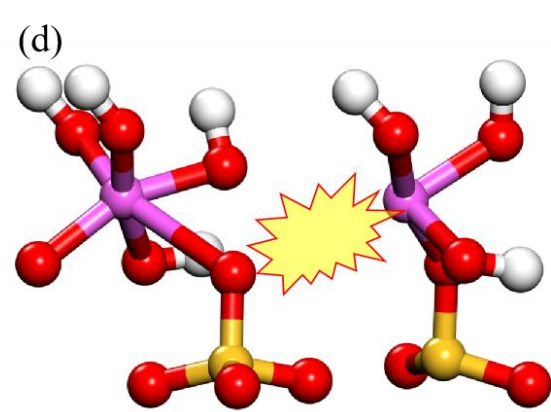
Uniaxial strain along the x -direction was applied on the kaolinite mineral, and Ao···Ob, Ao···Oh and St···Ob bonds were stretched.



Ao···Oh bond was first broken but no rebound.

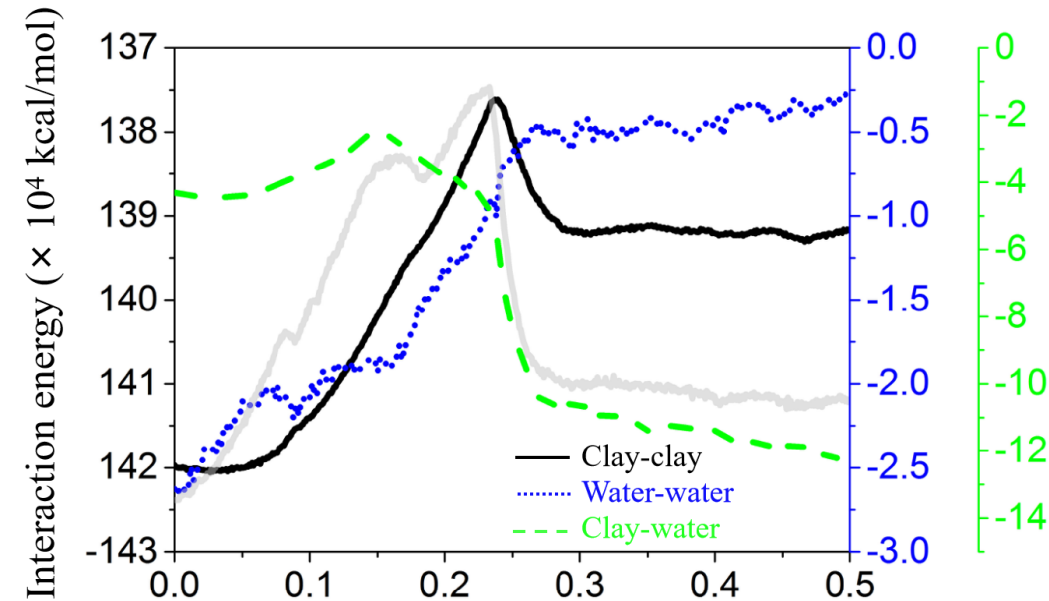


St···Ob bond was broken and rebounded simultaneously

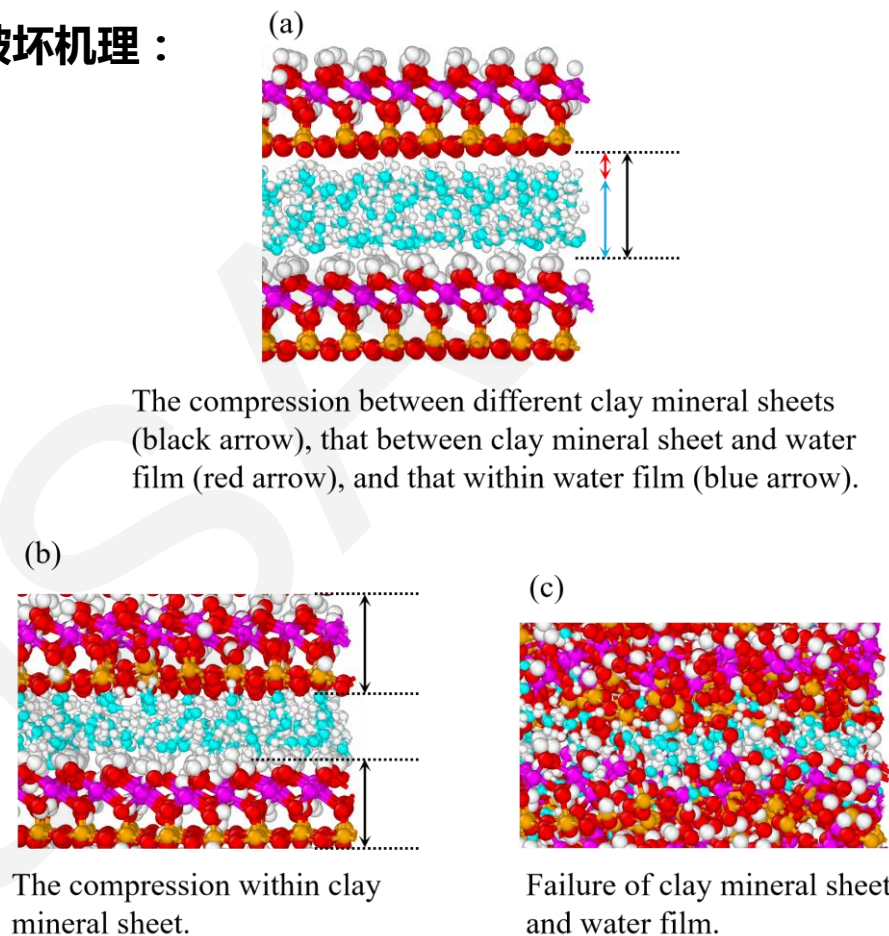


Ao···Ob bond was broken but no rebound.

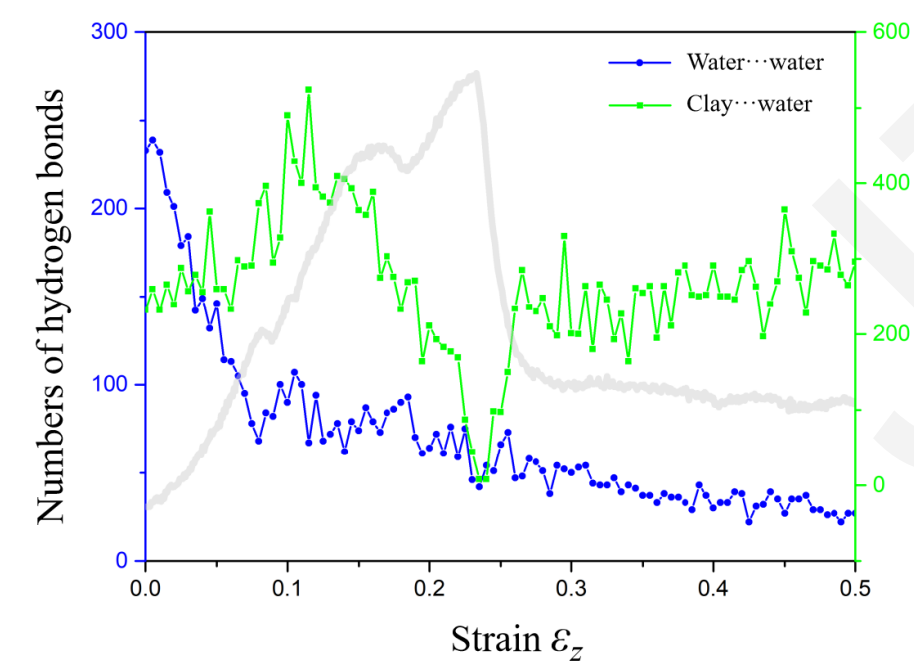
不同原子对的相互作用能：



受压时的破坏机理：



氢键：



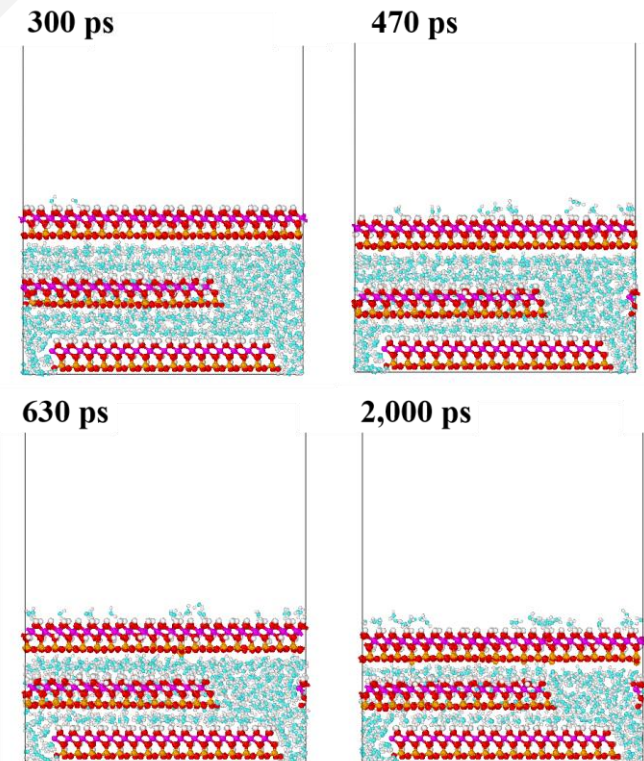
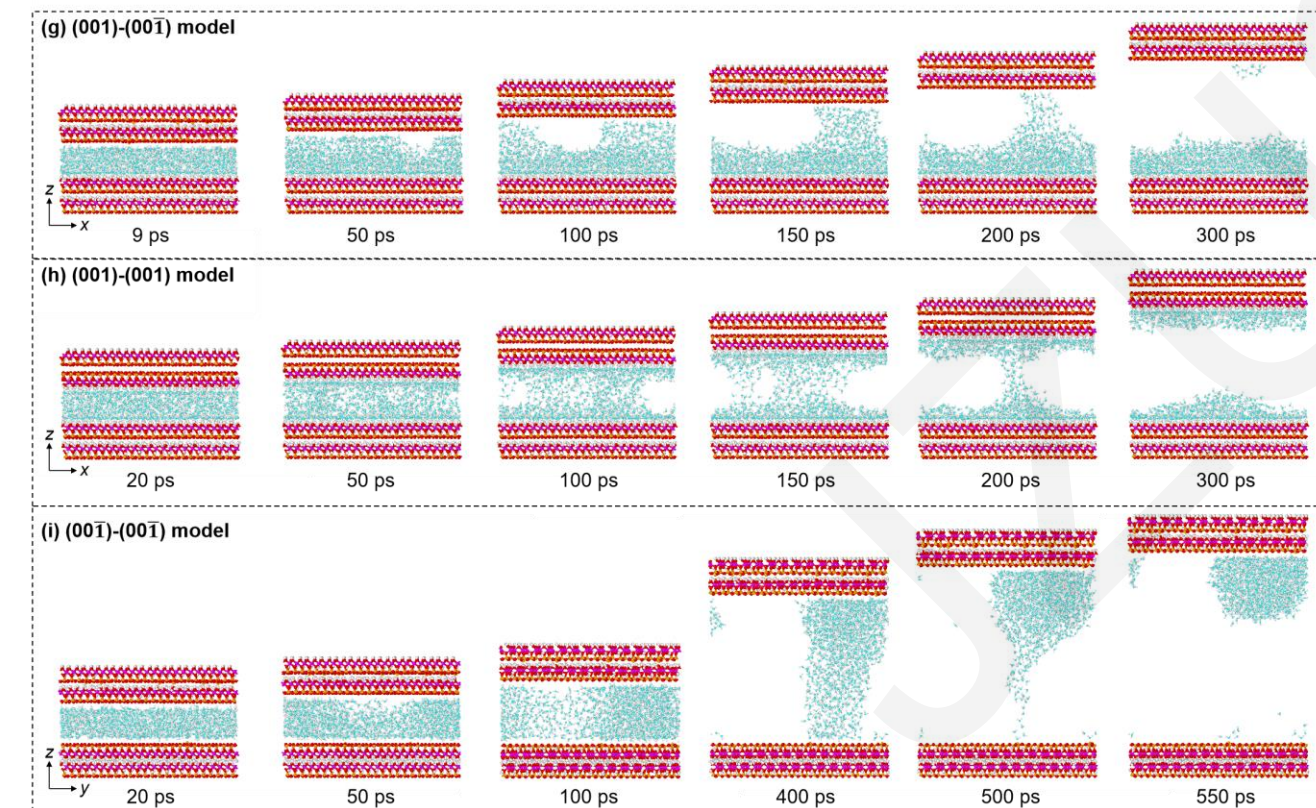
同样，分析了不同组分的相互作用能（clay-clay, water-water, clay-water），并结合氢键（water···water, clay···water）的变化可以推测出含水高岭石的受压破坏机理，即压缩首先造成水膜的压缩，随后是矿物内部的压缩，从而导致高岭石的压碎破坏。

另外，在随后的研究中，我们探索了更多含水高岭石在受拉、受压时的有趣现象，比如在沿着z方向拉伸时的水桥连接，含排水孔隙时的固结排水等，更多内容可见作者其他论文：

Lu, M., Zheng, Y., Yin, Z., 2025. Investigating the consolidation of kaolinite with Molecular Dynamics: The micro effective stress principle. *Applied Surface Science*. 690, 162653.

Lu, M., Zheng, Y., Yin, Z., 2024. From sedimentation to consolidation of kaolinite: a molecular dynamic study. *Computers and Geotechnics*. 170, 106285.

Lu, M., Zheng, Y., Yin, Z., 2024. A molecular dynamics study on the softening of kaolinite in water: weakening of tensile property during stretching and disintegration of structure during soaking. *Computers and Geotechnics*. 173, 106562.



含水高岭石沿z方向的拉伸

含排水孔隙的高岭石的固结



郑媛媛
本文通讯作者



陆明
本文第一作者



刁秋凤
本文共同作者