

一、项目名称

高性能混凝土材料微结构调控与增韧机理研究

二、提名单位意见及提名等级

我单位认真审阅了该项目提名书及其附件材料， 确认全部申报材料真实有效， 相关栏目均符合山东省自然科学奖励的填写要求。

混凝土材料基因结构解码与性能调控是混凝土材料设计中最具挑战的难题。本项目将混凝土材料的设计深入到纳米层次，解码混凝土材料的基因结构缺陷与形成机制，探明了纳米材料对混凝土基因缺陷的修复机制，揭示了纳米材料分散规律与调控机制，最终建立了适用于混凝土体系高性能纳米复合材料的设计方法。研究成果为高性能混凝土的设计与制备提供了理论与技术基础。项目共发表 SCI 论文 168 篇，授权国际发明专利 3 项，应邀为 Cement and Concrete Research（混凝土领域排名第一）杂志撰写主题综述，为 Springer 出版社撰写混凝土领域首部分子模拟的英文专著 1 部（2019 年出版），5 篇代表性论著发表在在《Carbon》《Composites Part B: Engineering》《Cement and Concrete Composites》等本领域著名 SCI 期刊，1 篇入选本领域近十年 ESITop1%高被引论文。项目组成员中 1 人获得混凝土领域终身成就奖亚瑟-安德森奖，1 人入选土木学届全球前 150 位高引用研究人员，1 人入选中组部青年千人计划。

参照山东省自然科学奖授奖条件，提名该项目为 2021 年度山东省自然科学二等奖。

三、项目简介

高铁、隧道、桥梁、岛礁等大型混凝土基础设施和重大工程，不可避免地受到环境荷载、疲劳和腐蚀作用以及材料老化等多重因素的不利影响，进而导致结构损伤、抗力衰减乃至灾难性事故。提升混凝土材料性能对于有效保障土木工程结构安全性与耐久性，有重要的经济社会意义。

当前工程实践对于混凝土材料的设计多依赖于传统半经验模型，其大都基于宏观尺度考量，未能充分挖掘微观、纳观尺度的材料特征，因此存在抗拉强度低、极限应变小、脆性大等诸多问题，制约着混凝土材料的实际服役性能与寿命。从本源上讲，混凝土宏观性能劣化是其“基因结构”---关键水化粘结相（水化硅酸钙C-S-H）的分子结构缺陷所诱发。借助于先进的纳米科技，在分子尺度修复混凝土基因结构缺陷，是调控混凝土微结构与性能提升的前沿方法，受到国际水泥混凝土届的广泛关注。然而，C-S-H具有结晶度、化学组分与聚合度等复杂多变的纳米属性，而纳米材料在混凝土水化环境中难分散、易团聚、腐蚀劣化严重等不相容问题，为混凝土基因结构解码与纳米调控带来巨大挑战，严重阻滞了纳米科技对混凝土的设计与应用。本项目将混凝土材料的设计深入到纳米层次，解码混凝土材料的基因结构缺陷与形成机制，探明了纳米材料对混凝土基因缺陷的修复机制，揭示了纳米材料分散规律与调控机制，最终建立了适用于混凝土体系高性能纳米复合材料的设计方法。

四、代表性论文专著目录

- 1、侯东帅*、赵铁军、马红岩、李宗津 (2015). Reactive molecular

simulation on water confined in the nanopores of the calcium silicate hydrate gel: structure, reactivity, and mechanical properties. The Journal of Physical Chemistry C, 119(3), 1346-1358.

2、侯东帅、李宗津*、赵铁军、张鹏 (2015). Water transport in the nano-pore of the calcium silicate phase: reactivity, structure and dynamics. Physical Chemistry Chemical Physics, 17(2), 1411-1423.

3、侯东帅、芦泽宇*、李翔宇、马红岩、李宗津(2017). Reactive molecular dynamics and experimental study of graphene-cement composites: Structure, dynamics and reinforcement mechanisms. Carbon, 115, 188-208.

4、侯东帅*、李涛、王攀* (2018). Molecular Dynamics Study on the Structure and Dynamics of NaCl Solution Transport in the Nanometer Channel of CASH Gel. ACS Sustainable Chemistry & Engineering, 6, 9498-9509.

5、孙国星、梁瑞、张津瑞*、李宗津、翁禄涛 (2017). Mechanism of cement paste reinforced by ultra-high molecular weight polyethylene powder and thermotropic liquid crystalline copolyester fiber with enhanced mechanical properties. Cement and Concrete Composites, 78, 57-62.

五、主要完成人情况

1. 姓名：侯东帅，排序：1/5，职务：副院长，职称：教授，工作单位：青岛理工大学，完成单位：青岛理工大学，对本项目主要学

术贡献：全面负责本项目研究工作，提出总体技术思路、课题研究方向及技术方法。解码了混凝土材料基因结构及纳米材料的调控机制，阐明了碳纳米材料在水泥基体系中分散及调控规律，开创了适用于混凝土体系高性能纳米复合材料设计方法。

2. 姓名：张津瑞，排序：2/5，职务：无，职称：副教授，工作单位：天津大学，完成单位：天津大学，对本项目主要学术贡献：建立了适用于水泥基体系的纳米材料分散方法，解决了有机/无机杂化的界面化学结合问题，设计出优异机械性能的水泥/高分子/氧化石墨烯三元复合材料。

3. 姓名：李宗津，排序：3/5，职务：无，职称：教授，工作单位：青岛理工大学，完成单位：青岛理工大学，对本项目主要学术贡献：通过矿料粒径的级配设计、调控氧化石墨烯裹覆工艺与矿料预养护制度控制，解决了限制纳米材料应用的调控机理与分散等关键问题。

4. 姓名：赵铁军，排序：4/5，职务：副校长，职称：教授，工作单位：青岛理工大学，完成单位：青岛理工大学，对本项目主要学术贡献：探明了纳米混凝土材料在严酷工程环境中应用的工作特性，掌握了纳米改性混凝土系统的作用机理与影响规律。

5. 姓名：王攀，排序：5/5，职务：无，职称：副教授，工作单位：青岛理工大学，完成单位：青岛理工大学，对本项目主要学术贡献：开发了适用于水泥体系的化学反应力场，构建了切合实际的C-S-H分子动力学模型，揭示了以硅链缩聚反应为主导的水化反应机

理与硅链结构缺陷形成机制。