

不同湿度条件下泥岩结构多尺度演变机制研究

Multi-scale structural evolution mechanisms of mudstone under different moisture conditions

期刊：	中国科学: 技术科学
稿件ID：	SST-2025-0360.R2
稿件栏目：	论文
作者提交日期：	2026-02-04
参与作者列表：	李长冬, 孟杰, 张功基, 代佩玄, 孙欣爽
关键词：	水分变化, 泥岩结构, 黏土矿物, 多尺度响应, 结构演变
英文关键词：	moisture variation, mudstone structure, clay minerals, multi-scale response, structural evolution
学科领域：	岩土工程
专题：	

For Review Only

中国科学: 技术科学 2025 年 第**卷 第*期: ** ~ **
SCIENTIA SINICA Technologica tech.scichina.com
《中国科学》杂志社 SCIENCE CHINA PRESS

论 文

不同湿度条件下泥岩结构多尺度演变机制研究

李长冬①②*, 孟杰①, 张功基②, 代佩玄①, 孙欣爽②

① 中国地质大学(武汉)工程学院, 湖北 武汉 430074;
② 中国地质大学(武汉)湖北巴东地质灾害国家野外科学观测研究站, 湖北 武汉 430074
* E-mail: lichangdong@cug.edu.cn

收稿日期: 2025-; 接受日期: 2025- ; 网络出版日期: 2025-
教育部基础学科和交叉学科突破计划(编号: JYB2025XDXM911), 国家自然科学基金重大项目课题(编号: 42090054), 中国博士后科学基金（2025M780439）, 博士后基金湖北联合资助(编号: 2025T046HB), 湖北省自然科学基金(编号: 2022CFA002、2025AFB380)资助

摘要 气态水分变化是加速泥岩结构风化与破坏的关键驱动因素. 然而, 受限于其细粒组构的复杂性, 界面变形向宏观结构破坏的跨尺度演变机制尚缺乏系统揭示. 为此, 本研究选取两类组构差异显著的侏罗系泥岩, 基于界面理论, 结合分子模拟、核磁共振与纳米 CT 扫描等多尺度方法, 探究湿度驱动下泥岩结构的多尺度响应机制. 研究表明: 宏观尺度上, 两类泥岩均在相对湿度较高(RH ≥ 75%)条件下表现出不同程度的体积膨胀与强度衰减; 微细观尺度上, 膨胀性黏土矿物与致密矿物骨架的协同作用促使孔裂隙网络在水分驱动下发生“贯通效应”, 进而形成贯通性结构并增强孔隙连通性, 诱发潜在破坏面; 分子尺度上, 亲水表面的“势陷效应”强化了水分子的吸附与迁移能力, 驱动孔隙结构拓展与局部变形积累. 研究基于跨尺度方法分析, 揭示了由分子尺度不可逆变形主导的结构演化路径, 深化了对软岩“界面驱动-结构演变-力学响应”耦合机制的认识.

关键词 水分变化, 泥岩结构, 黏土矿物, 多尺度响应, 结构演变

1 引言

水分变化是加速岩石结构风化及破坏的重要驱动因素[1,2], 尤其对于广泛分布且富含黏土矿物的泥岩[3,4]、页岩[5]和砂岩[6,7]等岩性, 其结构对环境中水分变化呈现了高度敏感特性. 气态水(湿度环境)作为关键的水分存在形式, 广泛分布于孔隙网络中, 并在水分迁移过程中发挥着重要作用. 不同于受导水裂隙控制的液态水渗流, 其迁移范围主要由大气扩散作用控制[8,9], 因而更为广泛. 这种特性决定了气态水是低渗透性岩石内部水分运移的主要形式[10,11], 不仅可以渗透至岩石深层, 还因湿度环境频繁波动而加速孔隙网络的动态演化, 进而显著改变岩石内部结构[12].

为深入探究湿度驱动的岩石弱化机制, 已有研究在室内试验、数值模拟与理论推导等方面开展了工作[13,14], 例如, 在理论与模拟方面, Huang 等[15]基于有限离散元法(FDEM)构建了湿度扩散-变形-断裂耦合模型, 揭示了红层泥岩吸湿膨胀过程中剪切裂缝的形成及其对高湿环境下隧道膨胀破坏的影响. Luo 等[16]进一步将深度卷积神经网络与 FDEM 耦合, 构建了湿度场与岩石应力场的快速预测模型, 从而提升了对湿度驱动破坏机制的模拟效率. 程树范等[17]通过湿度应力计算方法表明, 黏土岩在吸水过程中

引用格式: 李长冬, 孟杰, 张功基, 等. 不同湿度条件下泥岩结构多尺度演变机制研究. 中国科学: 技术科学, 2025

© 2025《中国科学》杂志社 www.scichina.com

不仅表现出明显的膨胀特性，也呈现出吸水软化的行为. 然而，这些宏观连续介质模型主要关注整体力学响应[18]，尚难阐明湿度对岩石微观及细观结构变化的具体影响机制.

近年来，为弥补宏观理论与模拟的不足，诸多学者开展了大量室内微细观试验：Geng 等[19]通过声发射信号(AE)监测发现，泥岩中的黏土矿物在每次湿热循环过程中吸水并发生不均匀变形，导致孔隙网络扩展和吸水率逐渐增加. Zhao 等[20]结合 SEM 与 AE，表明在高湿环境下，亲水性矿物的膨胀会削弱颗粒间的连接强度，导致颗粒排列紊乱并促进微裂缝的萌生与扩展，从而在加载前便出现初始损伤. Xing[21]通过系统的水蒸气吸附试验发现，页岩中有机质和黏土矿物对吸湿过程均具有显著正向影响. 对于不同岩性，尽管研究已形成一个明确共识：黏土矿物的存在显著加剧了岩石的脆弱性. 但仍然具有“黑箱/灰箱”过程的因果关系，导致黏土矿物作用产生争议[22,23]，例如 Siegesmund 等人[24]通过 XRD、阳离子交换容量和 SEM 等综合分析指出，砂岩与灰岩的结构损伤主要由极具膨胀性的蒙脱石与水作用引起，然而 Wang 等[25]的定量 X 射线衍射分析表明，岩石中膨胀性蒙脱石的含量与表观膨胀压力的关系较弱，而膨胀性较弱的伊/蒙混层的含量与表观膨胀压力高度相关. 这不仅反映不同尺度组构关系的复杂性[26-28]，也突出了核心挑战：如何基于高精度的多尺度方法，揭示从矿物-水界面的分子效应，到微/细尺度孔隙结构的动态演化，再到传递与放大至宏观力学效应，以系统阐述湿度驱动下岩石弱化过程.

鉴于富含黏土矿物岩石普遍存在细粒性和非均质性，单一测试方法难以准确表征其复杂结构. 本研究选取两种不同组构特征的侏罗系泥岩为研究对象，通过分子动力学(MD)模拟、核磁共振(NMR)技术与纳米 CT 扫描等技术，构建跨尺度、高精度的可视化综合结构表征方法. 旨在通过对比分析不同组构泥岩的结构响应差异，从原子尺度到孔隙尺度，再到宏观结构尺度，系统性地阐明水分对泥岩结构演变的跨尺度作用机制，以期深化对湿度驱动岩石结构弱化过程的基础认知.

2 试样与多尺度方法

选取两种组构特征显著不同的侏罗系泥岩作为研究对象，分别取自湖北秭归地区(ZG 泥岩)与重庆地区(CQ 泥岩). 二者在矿物组成、干密度及结构致密性方面存在本质差异，为开展对比性结构演化研究提供了典型样本.

为系统揭示水-岩相互作用机理，本研究采用了一套多尺度试验与模拟相结合的研究方案(如图 1 所示)：首先，针对以上样本同步开展侧限膨胀与单轴压缩测试，分别获取泥岩的宏观膨胀性与单轴抗压

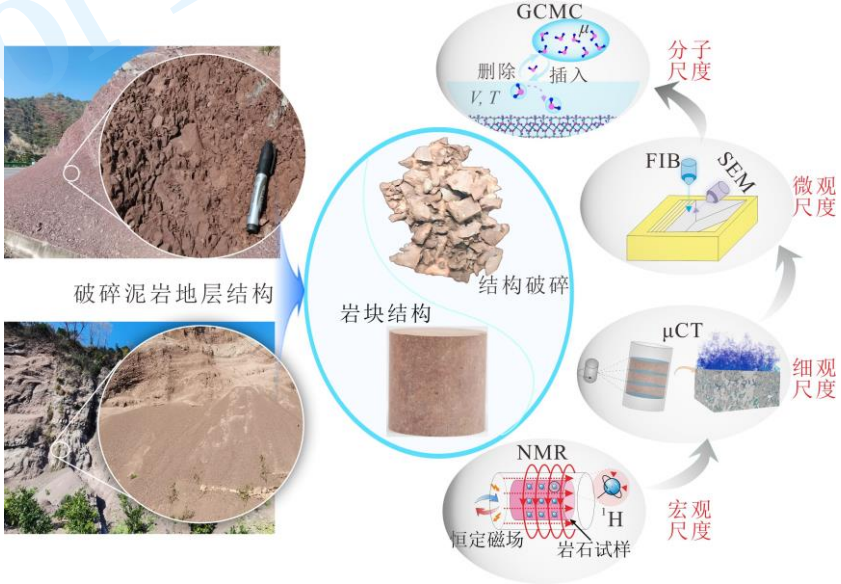


图 1 岩石结构多尺度可视化方法

Figure 1 Multi-scale visualization methods for rock structure.

强度随湿度增长的变化特征; 然后, 对不同湿度下泥岩内部水分分布及其流动性进行二维(T_1-T_2)NMR 细观表征, 以关联水作用下泥岩微-宏观结构的演化响应; 在细微观尺度上, 采用连续 Nano-CT 扫描获取不同泥岩的微观结构特征及二者对于湿度变化的差异连续演化过程, 并进一步结合聚焦离子束扫描电子显微镜 (focused ion beam-scanning electron microscope, FIB-SEM)试验, 对以干密度主导下黏土团聚结构诱发的微观演化提供证据;综合上述试验现象分析, 通过巨正则蒙特卡洛(grand canonical Monte Carlo, GCMC)与 MD 模拟, 阐释了上述试验现象分子至原子尺度的界面作用机理.

2.1 试样

样品从整块泥岩岩体中通过非冲击式推进定点钻探方式获取[29], 并采用干燥线切割法进行二次制备: 核磁共振测试试样尺寸为 Φ50 mm × 50 mm; CT 扫描分析试样尺寸为 Φ5 mm × 5 mm; FIB-SEM 观测试样尺寸为 Φ10 mm × 5 mm. 同时, 按照国际岩石力学学会(ISRM)的要求, 加工了用于力学性能测试的 Φ50 mm × 100 mm 标准圆柱试样. 其中, ZG 泥岩干密度为 2.5 g/cm³, CQ 泥岩干密度为 2.1 g/cm³. XRD 测试结果如图 2 所示, 两种泥岩的主要矿物为石英与黏土矿物. 具体而言, ZG 泥岩的黏土矿物以伊利石(15.3%)与伊/蒙混层(9.4%)为主, 不含蒙脱石;而 CQ 泥岩中蒙脱石含量为 12.3%, 同时也含有一定量的伊利石(6.3%)与伊/蒙混层(9.5%). 此外, 两种泥岩中均含有少量菱铁矿、黄铁矿等杂质矿物, 归类为“其他”.

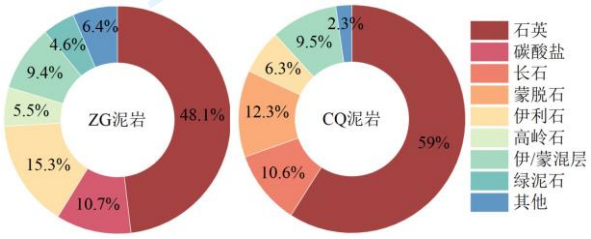


图 2 泥岩矿物成分

Figure 2 Mineralogical composition of the mudstone.

为研究不同湿度对泥岩性质的影响, 将所有样品均置于含有饱和盐溶液的小型干燥器中进行湿度平衡处理(试样与盐溶液不发生直接接触), 利用盐的潮解点控制相对湿度(relative humidity, RH). 试验共设置 5 组平行条件, 如表 1 所示, 为在有效区分不同试验组间差异的基础上, 进行湿度变化影响的规律分析. 设置了 11.31 %至 100%之间的五种相对湿度梯度, 每种盐溶液均由纯度大于 99%的盐试剂与去离子水配置成的饱和溶液.

表 1 不同溶液对应的相对湿度与溶解度

Table 1 Relative humidity and solubility corresponding to different salt solutions.

溶液	相对湿度 (%)	溶解度/g (20 ℃)
LiCl	11.31	83.5
$MgCl_2$	33.07	54.6
NaBr	59.14	90.8
NaCl	75	35.9
H_2O	100	/

2.2 核磁共振水信号

为揭示不同湿度环境下泥岩中水的赋存状态与束缚特征, 本研究采用苏州纽迈 MacroMR12-150H-I 低场核磁共振分析仪, 对样品在控湿条件下的氢核弛豫信号进行测试. 通过反演获得的纵向弛豫时间(T_1)与横向弛豫时间(T_2)分布, 可定性区分泥岩内结合水与自由水组分及其随相对湿度变化的迁移规律.

在多孔介质中, 水分子受矿物表面吸附力、范德华力和静电作用的限制, 运动受限导致 T_2 显著缩短, 而 T_1 主要受分子运动频率与拉莫尔频率匹配影响, 受限制较小. 二者的比值 T_1/T_2 可反映水分束缚程度, 结合水通常表现为 $T_2 < T_1$. 其横向弛豫过程可由下式表征[30]:

$$\frac{1}{T_2} \approx \rho_2 \frac{S}{V} + \frac{1}{T_{2,bulk}}, \tag{1}$$

其中, ρ_2 为表面弛豫率, S/V 为孔隙比表面积与体积之比. T_2 与等效孔径 r 近似满足 $T_2 \propto r/\rho_2$, 可用于表征孔隙尺度及其在吸湿过程中的演化. 而根据 Bloembergen-Purcell-Pound(BPP)理论模型, 可将 T_1 与 T_2 与双极相互作用的相关时间联系起来[31]:

$$\frac{1}{T_1} = \left(\frac{6}{20}\right) \times \left(\frac{h\gamma^4}{2\pi r^6}\right) \times \left(\frac{\tau_c}{1+\omega_0^2\tau_c^2} + \frac{4\tau_c}{1+4\omega_0^2\tau_c^2}\right), \tag{2}$$

$$\frac{1}{T_2} = \left(\frac{3}{20}\right) \times \left(\frac{h\gamma^4}{2\pi r^6}\right) \times \left(3\tau_c + \frac{5\tau_c}{1+\omega_0^2\tau_c^2} + \frac{2\tau_c}{1+4\omega_0^2\tau_c^2}\right), \tag{3}$$

其中, γ 为相互作用核的旋磁比; r 为相互作用核的自旋距离; τ_c 为关联时间; ω_0 为拉莫尔频率. 而关联时间可根据 Stokes−Einstein 方程得到[32]:

$$\frac{1}{\tau_c}=\frac{3K_{\mathrm{B}}T}{4\pi\eta r_{\mathrm{g}}^{3}}, \tag{4}$$

其中, K_{B}为玻尔兹曼常数, η为流体的动态粘度, r_{g}为斯托克斯半径. 当水分子(氢核)处于接近各向同性的液态时: $\omega_0\tau_{\mathrm{c}}\ll 1$且$T_1/T_2\approx 1$; 而当水分子(氢核)为固态或被强烈吸附的类固态, 难以移动时: $\omega_0\tau_{\mathrm{c}}\gg 1$且$T_1/T_2\gg 1$[33]. 而在此基础上, 可通过$T_1$-$T_2$图谱对岩石中不同的水分状态进行定性区分.

2.3 高精度 CT 与 FIB-SEM

采用纳米级 μCT 技术, 利用蔡斯 xradia-520-Versa 3D x 射线显微镜进行试验. 该显微镜采用两级放大技术, 理论最高空间分辨率 500 nm. 扫描过程中, 将待扫描样品固定在垂直杆上端, 扫描时垂直杆随旋转轴旋转, 以实现多角度成像. 对泥岩试样在不同水分环境(恒湿度控制)下进行分阶段或连续扫描, 获取三维裂纹与孔隙网络的动态演化图像. 该技术能够直观呈现泥岩试样内部孔裂隙结构在水分作用下的时空变化过程, 并支持对 500 nm 以上尺度裂纹分布、孔隙体积分数及其连通性等关键指标进行定量分析.

进一步采用 FIB-SEM 对泥岩内部结构断面特征进行表征. 先在中低倍 SEM 下对样品进行大面积预观测, 从而获取样品表面的整体矿物组成与结构性质, 在此基础上, 选择了结构较为一致且均匀的两处区域进行观测. 利用高能 Ga^{+}离子束剥离样品表层, 并结合 SEM 获取代表性断面图像, 从而识别黏土团聚体的粒径分布、颗粒排列、孔隙边界及微裂隙初始形态.

2.4 分子模拟

为揭示不同湿度作用下矿物界面水的吸附特征, 采用 GCMC 方法, 从分子尺度进一步探究湿度环境下结构演变的机制. 主要针对蒙脱石与石英进行层间吸附与表面吸附模拟, 蒙脱石模型参考 Skipper 等人[34]: $Na_{0.75}(Si_{7.75}Al_{0.25})(Al_{3.25}Mg_{0.75})O_{20}(OH)_4\cdot nH_2O$, 单位晶胞晶格常数 $\alpha=90°$, $\beta=99°$, $\gamma=90°$; 如图 3 所示, 干燥单晶大小为 $a\approx 5.23$ Å, $b\approx 9.06$ Å, $c\approx 9.60$. 构建了 $4a\times 2b\times 2c$ 蒙脱石超晶胞模型, 用于模拟吸湿膨胀过程, 水分子的吸附被限定在两个蒙脱石片的层间区域. 同时, 构建了 $20a\times 12b\times 2c$ 蒙脱石(001)表面超晶胞模型, 用于表面吸附模拟. 此外, 参考 Levien 等人[35]构建石英模型, 其单位晶胞的晶格常数 $\alpha=90°$, $\beta=90°$, $\gamma=120°$; $a\approx 4.913$ Å, $b\approx 4.913$ Å, $c\approx 5.4052$ Å. 如图 3 所示, 石英单晶经过$\begin{pmatrix}1&0&0\\1&2&0\\0&0&1\end{pmatrix}$晶格矩阵变换后, 构建了 $20a\times 13b\times 4c$ 石英(001)表面超晶胞模型, 并采用 ClayFF 力场开展吸附模拟[36].

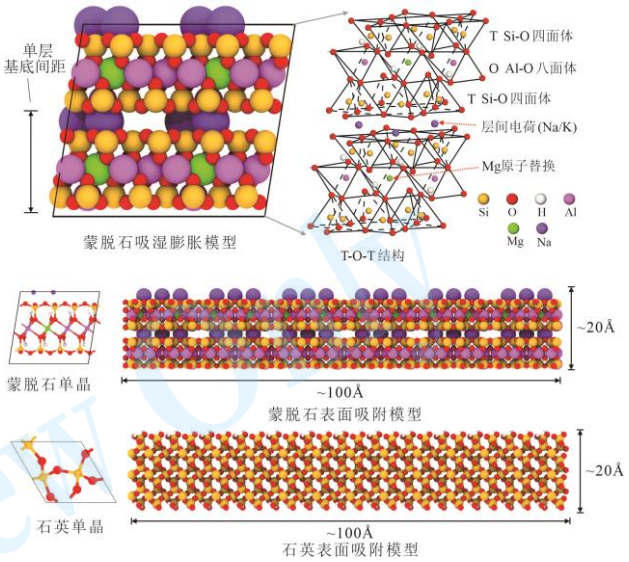


图 3 蒙脱石与石英分子模型

Figure 3 Molecular models of montmorillonite and quartz.

所有的吸附均通过 GCMC 完成, 并耦合 NPT 系综进行弛豫. GCMC 在给定化学势、体积和温度(巨正则系综, μVT)的条件下直接描述开放体系的含水量调控, 适用于表征孔隙的吸湿行为. 模拟将创建一个具有恒定化学势的虚拟理想“气库”(一旦系统的化学势被指定, 将不会发生改变, 仅进行粒子交换来调整自身的状态). 并基于马尔可夫链随机采样, 通过插入、删除或移动水分子并依概率准则接受或拒绝新构型, 使体系逐步达到与理想“气库”之间的热力学平衡(如图 1 所示), 从而获得界面水的空间分布及吸附统计特征. 在模拟过程中, 随机移动或旋转吸附在表面的水分子的接受概率为[37]:

$$P_{acc(M\to M')}=\min\left(1,\exp\left\{-\beta\left[U\left(M'^{N}\right)+U\left(M^{N}\right)\right]\right\}\right), \tag{5}$$

随机插入水分子的接受概率如下:

$$P_{acc(N\to N+1)}=\min\left(1,\frac{V}{\alpha^{3}(N+1)}\exp\left\{\beta\left[\mu-U(N+1)+U(N)\right]\right\}\right), \tag{6}$$

随机删除水分子的接受概率如下:

$$P_{acc(N\to N+1)}=\min\left(1,\frac{\alpha^3 N}{V}\exp\left\{\beta\left[\mu+U\left(N-1\right)-E\left(N\right)\right]\right\}\right),(7)$$

式中 P 是接受概率; U 是势能; β 是波尔兹曼因子; α 是粒子的德布罗意波长; V 是系统体积; μ 是粒子的化学势. 平移/旋转动作确保粒子之间的内部平衡, 而插入/删除维持系统与其周围环境之间的化学势平衡. 如表 2 所示, 不同湿度下的化学势参考 Liu 等人[38]的研究结果.

表 2 不同相对湿度下化学势

Table 2 Chemical potential under different relative humidity conditions.

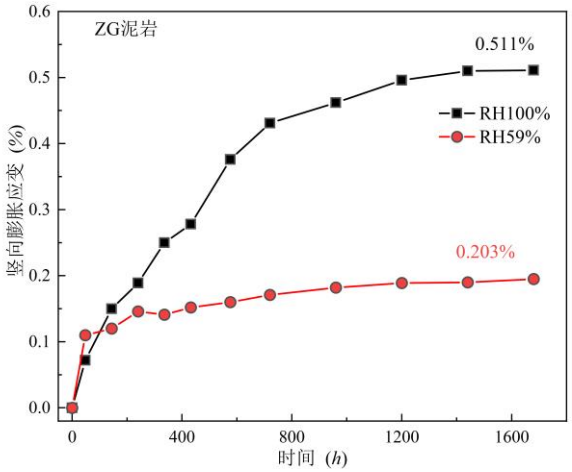
温度(K)	压强(Pa)	相对湿度(%)	化学势(kJ/mol)
298	315.8	10(~11.31)	-51.247
298	947.4	30(~33.07)	-48.526
298	1894.8	60(~59.14)	-46.809
298	2210.6	75	-46.262
298	3158	100	-45.543

注: "~"表示取试验近似值, 75%湿度通过插值得到

3 结果

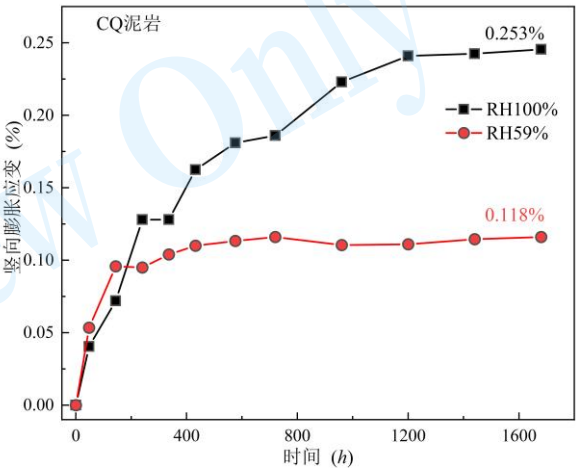
3.1 宏观变形与力学特性

针对两种不同的泥岩(ZG、CQ)通过长时间的观测, ZG 与 CQ 泥岩在高湿度(RH = 100%)与中等湿度(RH = 59%)条件下均表现出可识别的膨胀变形, 而在低湿度(RH = 11%)条件下膨胀响应不显著. 如图 4 所示, ZG 泥岩在 RH = 100%时膨胀率稳定于 0.511%, 显著高于 CQ 泥岩的 0.253%. 两类泥岩膨胀均主要出现在中高湿度区间, 表明宏观膨胀的触发不仅与"是否含有膨胀性矿物"相关, 更取决于矿物水化膨胀潜势与孔隙结构约束条件的共同作用. 一方面, 蒙脱石及伊-蒙混层等可水化黏土决定了微观层间水化与界面吸附的变形来源, 另一方面, 较高的干密度与微孔比例会增强受限膨胀条件下的分离压力及膨胀压力累积, 使微观变形更易传递并放大为宏观应变与界面开裂. 在高微孔比例岩石中, 即使较低的膨胀性矿物, 分离压力仍可能主导湿胀. 同时, 位于粒间接触或微孔壁面的可膨胀黏土更易引发开裂, 而位于大孔隙中的黏土在膨胀时, 其变形可被周围空间所容纳, 宏观上往往不产生显著损伤.



(a) 不同湿度下 ZG 泥岩的膨胀特性

(a) Swelling behavior of ZG mudstone under different RH;



(b) 不同湿度下 CQ 泥岩的膨胀特性

(b) Swelling behavior of CQ mudstone under different RH;

图 4 湿度环境下泥岩的膨胀特性

Figure 4 Swelling behavior of mudstones under different RH.

如图 5 所示, 两种泥岩的单轴抗压强度随湿度升高整体呈下降趋势. 而 ZG 泥岩干态初始强度较低, 表明其原始承载骨架相对较弱; 同时其干密度较高、孔隙空间更受限, 使吸湿诱发的体变更易在孔隙边界与颗粒接触处累积, 并在宏观尺度上表现为更大的湿胀(图 4). 相比之下, CQ 泥岩虽含蒙脱石, 但其结构相对疏松、孔隙空间更为充裕, 吸湿体变在一定程度上可被容纳与分散, 因此宏观膨胀幅值相对较小. 在此背景下, 低湿度阶段(RH = 11%)两类泥岩膨胀不显著, 结构骨架总体稳定, 强度基本保持不变; 当湿度进入中高区间(RH ≥ 59%)后, 宏观湿胀开始出现, 并随 RH 增强, 吸湿引起的体变在孔隙边界与

颗粒接触处逐步累积，从而削弱颗粒接触的有效承载与界面约束，使结构趋于松动，并伴随微尺度开裂或分离，最终表现为单轴抗压强度的降低.

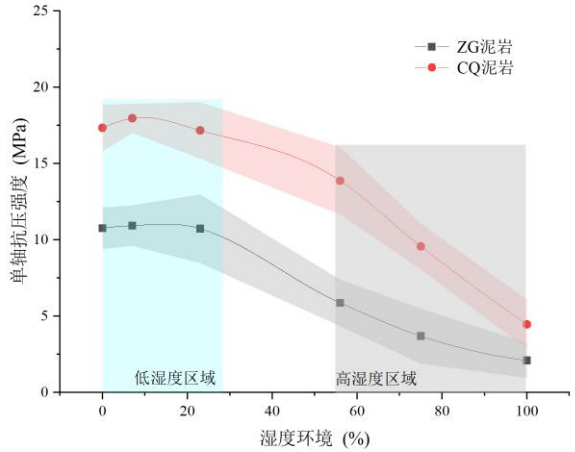


图 5　不同湿度下泥岩的单轴抗压强度

Figure 5　Uniaxial compressive strength of mudstones under different RH.

3.2 水分布特性

为从机制层面阐释湿度条件下泥岩结构劣化的成因，对其内部水分的分布行为展开分析. 泥岩是具有多种固体表面的多孔介质系统，湿度环境下其水分分布涉及复杂的热力学过程. 气态水的吸附平衡可由经典的开尔文方程进行计算[39]:

$$RT\ln\left(\frac{p^v}{p_\infty}\right)=-\frac{2\nabla^l\gamma^{lv}}{r_{cap}}, \tag{8}$$

式中 R 为理想气体常数, T 为热力学温度, γ 为水的表面张力, r 为孔隙半径, p^v 为实际水蒸气压力, p_∞为饱和水蒸气压力, ∇ 为水的摩尔体积. 该方程基于接触角为 0(即绝对亲水)这一关键假设，从而得出在恒温下，孔径大小是影响气态水凝结的关键因素，而与固体表面无关. 但在泥岩中，富含的黏土矿物、石英等虽具有亲水表面，但其接触角不为 0. 因而重新考虑接触角进行开尔文方程的推导在泥岩等岩石系统中更具有通用性:

$$RT\ln(\frac{p^v}{p_\infty})=-\frac{2\nabla^l\cos\theta\gamma^{lv}}{r_{cap}}+\nabla^l(p^v-p_\infty), \tag{9}$$

式中 θ 为接触角. 如图 6 所示，基于这一公式各接触角曲线呈现了相对湿度对孔径分布的依赖性. 这种依赖性同时体现了湿度环境下泥岩内部的水分分布特性，即孔径越小且接触角越小的亲水表面吸附水分子的能力越强，并随着二者增加而逐渐降低. 在相对湿度低于 60%的环境下，仅有孔径小于 2 nm 的黏土矿物层间孔隙可凝结水分子；而在大于 10 nm 孔径中，只有在相对湿度超过 90%的情况下水分才能在发生凝结. 这指示了泥岩中的微观组分或结构对水分存在优势效应，例如，蒙脱石具有亲水性表面及可用于气态水吸附的微孔或更大的比表面积，为气态水的吸附与凝结提供了充足的条件，并最可能作为与水发生相互作用的点位.

为揭示热力学判据与矿物组分差异关联，进一步开展了重量法吸附对比试验，选取同质量的蒙脱石粉末(纯度 ＞99%)、伊利石粉末(纯度 ＞99%)及其他泥岩粉末(黏土矿物-石英等混合物)，采用 Hiden Isochema 智能重力分析仪 IGA-100 在室温条件下测试吸湿增重；样品经超高真空预处理去除初始水分后，通过逐级调控水蒸气分压(对应 RH)记录质量变化，直至各阶段达到恒定质量(仪器微天平分辨率 0.1 μg、动态称量范围 0-200 mg).

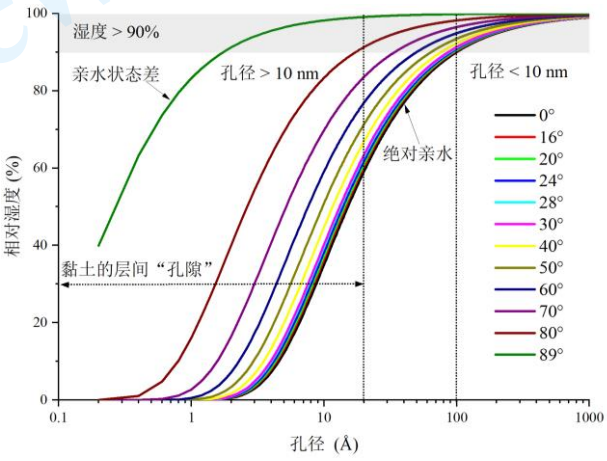


图 6　不同湿度与孔径凝结关系曲线

Figure 6　Relationship curves between RH and pore-size condensation.

结果显示(图 7)，蒙脱石吸附量随湿度升高显著增加，表明其具有更高的吸附容量与更强的吸湿特性；相比之下，伊利石及泥岩粉末吸附量较低且变化更缓，说明矿物类型及其表面-孔结构差异可显著调制吸湿响应幅度. 同时在试验过程中发现，当湿度超过约 40% 后，样品达到吸附平衡的时间显著延长(单次连续测试周期内难以获得稳定平衡值)，考虑到

粉末样品由颗粒堆积形成，其松散的孔隙网络导致吸湿过程由早期的快速表面吸附逐步转变为受孔隙结构与传质路径限制的慢过程阶段；由此表明，在相对致密的结构性泥岩中，气态水的吸附与凝结过程可能受优势赋存表面及其与孔隙网络的耦合约束所控制.

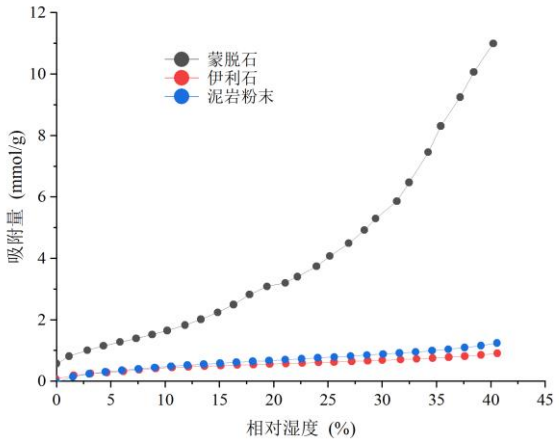


图 7　湿度环境下不同矿物动态吸附特性

Figure 7　Dynamic adsorption behavior of different minerals under varying humidity conditions.

为进一步揭示水分状态与流动性特征，综合参考 Yuan 等人[40]与 Zhang 等人[41]的研究结果，利用 T_1-T_2 分布对泥岩内部自由水、弱束缚水与结合水进行定性区分(图 8). 泥岩中水分的信号强度随着湿度降低呈现显著下降趋势，表明泥岩所吸附的水分子含量逐渐减少. 在高湿度(100%)环境下，两种泥岩的峰值信号较高，水主要以自由水与部分弱束缚水形成存在，T_1/T_2 峰值质心主要位于 1~3 之间，且 CQ 泥岩质心(T_2 ≈ 0.5 ms)相较 ZG 泥岩(T_2 ≈ 0.28 ms)靠右，表明其赋存水自由程度更高，流动性更强. 而中湿度环境(59%)下两种泥岩水分信号明显降低，质心位置向左下侧偏移，T_1/T_2 峰值分布范围增大，水分状态接近于黏土矿物表面的结合水或弱束缚水，流动性下降. 而当湿度进一步降低时，两种泥岩的 T_1/T_2 分布峰值仅发生信号降低与较小的质心偏移，表明该湿度变化对于泥岩水分状态的影响较低，在 33%的湿度环境下，泥岩依然能够完成强束缚的结合水吸附.

然而，不同于 ZG 泥岩宏观的高膨胀性，CQ 泥岩在不同湿度下，反而表现出更强的吸湿能力与水分信号，指示了该宏观膨胀似乎不能简单归因于其内部组分的吸湿膨胀过程. 正如 Tan 等人[42]研究指出，黏土矿物的膨胀存在着双重效应性，即膨胀开裂与膨胀愈合. 这种吸湿能力与膨胀性能间表现出的显著差异仍需深入探索，因而进一步采用 Nano-CT 对极端湿度变化下泥岩结构的演变进行了可视化与量化研究.

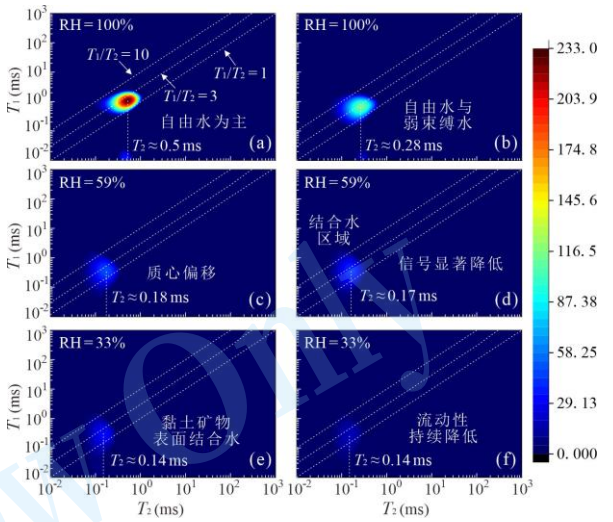


图 8　不同湿度环境下泥岩的流动性变化. (a, c, e) CQ 泥岩; (b, d, f) ZG 泥岩

Figure 8　Variations in mudstone fluidity under different RH. (a, c, e) CQ mudstone; (b, d, f) ZG mudstone.

3.3　孔-裂隙演化特征

Nano-CT 扫描揭示了湿度环境下泥岩复杂细粒组构的孔-裂隙演化特征，将数据图像导入 Avizo 软件进行采用基于灰度的交互式阈值分割准确提取孔隙. 对提取的孔隙网络进行三维重建. 最后，采用等效孔径量化三维孔-裂隙结构，该模型为每一个独立的孔隙单元计算其体积，并反算为具有相同体积的球体直径，将该直径定义为该孔隙单元的等效孔径. 等效孔径的计算基于: $\sqrt[3]{Volume/\pi}$，其中 *Volume* 代表单个(连通)孔-裂隙体积. 如图 9 (a)所示，0.7 μm 的扫描精度下，ZG 泥岩呈现基质胶结构，较大的石英颗粒被致密的黏土基质所包裹. 黏土矿物形成的致密基质无法区分，仅可见零星分布的低密度区，切片内显示亮度较低的“蜂窝”结构，这些结构内聚集的孔隙难以被逐个进行识别，因而在三维重构中呈现出类孔隙的大孔结构. 受到湿度环境变化的影响时，这些低密度结构并未对湿度表现出敏感性，在作用

前后不发生明显的变化. 然而, 致密基质与石英颗粒胶结界面对湿度表现出异常迅速的敏感性, 其在作用前后发生显著开裂, 并进一步向外延伸, 形成了贯穿整体的裂隙结构. 界面开裂行为主要归因于其两侧差异性的膨胀性能, 石英属于具有显著稳定性的非膨胀矿物, 而致密的黏土基质吸水后具有较强的变形趋势, 这种变形趋势无法与石英颗粒共同发生, 继而将在界面处产生裂隙, 最终造成了结构的塑性破坏.

孔隙率较高的 CQ 泥岩呈现出对湿度环境变化的弱敏感性. 如图 9(b)所示, CQ 泥岩切面上颗粒分明, 呈现接近于颗粒胶结的胶结结构, 细长的石英颗粒相接, 形成明显的大孔隙且未被杂基填充. 三维重构结果表明其孔隙几乎整体连通, 但存在少许不与孔隙网络连通的孤立孔隙. 湿度变幅作用前后, CQ 泥岩的微观结构几乎不发生显著变化(劣化), 仅在部分区域存在微小改变.

此外, 为定量分析湿度变化条件下孔裂隙变化特征, 表 3 计算统计了分形维数、孔隙数量等孔隙结构参数. 其中, 分形维数采用盒计数法计算[43], 用以定量描述孔隙空间的复杂程度和表面的粗糙度. 分形维数越大, 表明孔隙结构越复杂, 空间填充能力及异质性越强. 各项参数均由阈值分割后的孔隙网络数据计算得出. 等效半径标准差反映孔隙尺寸分布的离散程度, 标准差越大, 说明孔隙尺寸跨度越大孔隙结构“分散性”特征越显著. 孔隙数量及连通孔隙占比衡量孔隙发育的规模程度. 平均孔喉半径比为孔隙半径与连接喉道半径的比值. 该值越大表明

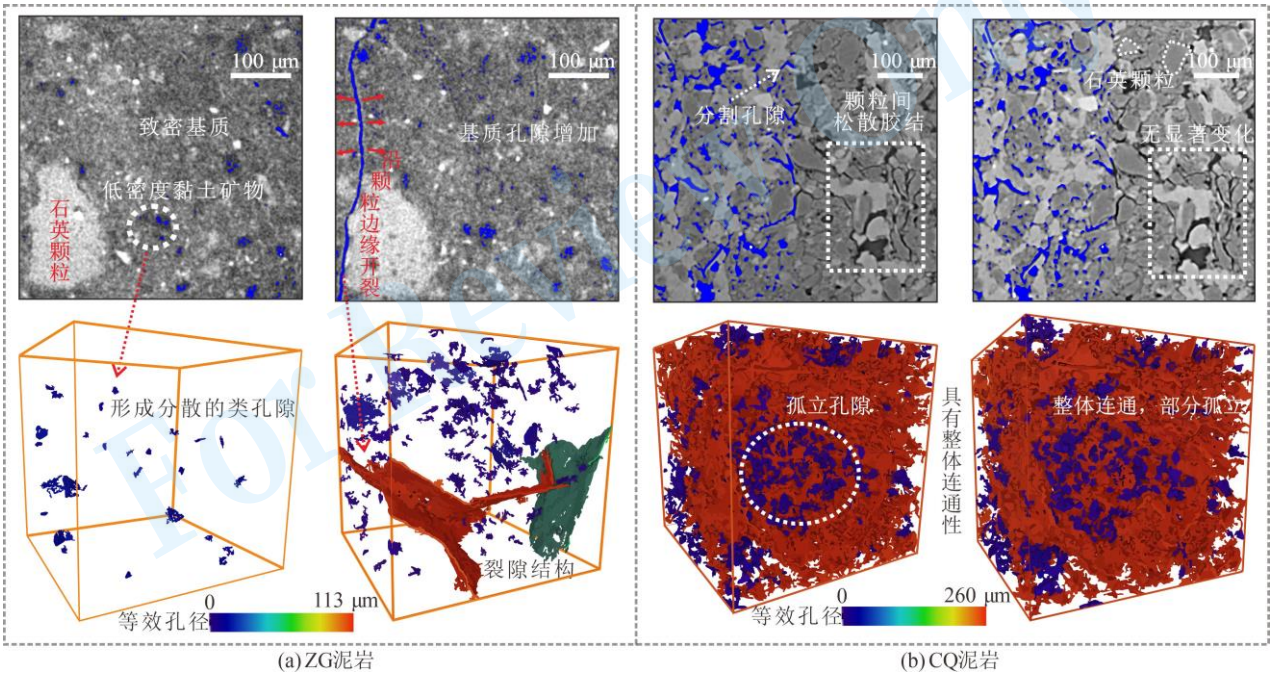


图 9　基于原位扫描与 3D 重建的湿度变化下泥岩微观结构响应特征

Figure 9　Microscale structural responses of mudstone to humidity variations based on in situ scanning and 3D reconstruction.

表 3　基于 CT 图像的孔隙结构参数统计

Table 3　Statistics of pore-structure parameters based on CT images.

样品	分形维数	孔隙数量	等效半径标准差	连通孔隙占比	平均孔喉半径比	配位数变异系数
ZG1	1.453	33	2.844	不连通	不连通	不连通
ZG2	2.044	195	8.830	0.703	1.163	0.690
CQ1	2.435	596	9.730	0.929	1.706	0.831
CQ2	2.451	617	9.794	0.933	1.556	0.820

“大孔细喉”现象越明显，影响流体运移. 配位数是指单个孔隙连接的喉道数量，其变异系数即标准差与均值的比值，用以量化孔隙网络连接方式的非均匀性.

对比不同湿度孔隙结构参数，低湿度环境下的ZG 泥岩(ZG1)表现出极度致密的特征，孔隙数量少且孔隙率低，整体不连通，分形维数较低，缺乏有效的内部孔隙空间. 湿度 100%状态下，ZG 泥岩的各项孔隙参数均显著增高(ZG2)，孔隙数量增多且出现连通裂隙，不同湿度下 ZG 泥岩孔隙结构发生显著变化；CQ 泥岩在低湿度状态下具有较多的孔隙数量(CQ1)，连通孔隙占比高达 0.929，表明其内部存在一个高度复杂且异质分布的孔隙网络. CQ 泥岩的各参数在湿度 100%条件下(CQ2)较低湿度状态变化微小，这表明黏土矿物吸水后的体积增量优先向这些原有的分散孔隙内部充填，表现为 CQ 泥岩膨胀敏感性低.

3.4 微观变形机制

如图 10 通过压汞试验[46]表明，ZG 泥岩与 CQ 泥岩的孔隙特性存在显著差异. ZG 泥岩具有较低的总孔隙率(约 3.304%)，孔径主要集中于 7-20 nm 范围内，表现出高度致密性；而 CQ 泥岩的孔隙率较高(29.933%)，孔径分布范围宽广(7-1000 nm)，并在 60 nm 左右集中.

在低湿度范围(相对湿度 15-20%)，泥岩孔隙经历“孔隙填充阶段”. 此阶段，水分子优先填充体积较小的纳米孔或孔喉，形成单层或极薄的吸附水膜. 基于前述 Kelvin 方程，凝结阈值对孔径项 $1/r$ 更敏感；而阳离子通过润湿性项 $\cos\theta$ 的影响属于系数调制. 图 10(c)所示,由于常见层间阳离子体系在强亲水区间的接触角差异有限($\theta \approx 15°$-$30°$)[44]，使得 $\cos\theta$ 的变化幅度较小，因此在早期凝结阶段阳离子类型对阈值的影响相对较小.

当湿度进一步升高(> 20%)时，泥岩进入“层间变形阶段”. 此阶段，蒙脱石的层间开始吸附更多水分子，导致层间距增大并产生结构膨胀. 界面能向应变能的转化是这一过程的主要驱动力，表现为黏土片层的“可恢复”变形趋势：湿度降低时，吸附水部分脱离，层间距可回缩，显示出一定程度的可逆性. 此外，蒙脱石层间形成的有序水化层随湿度增加逐渐衰减，表明其对水分子的束缚力有限，水分子会向更大孔隙转移，导致层间膨胀趋于饱和并非无限增长.

从微观机制角度看，单个黏土晶层吸附水分子后产生的层间距变化十分有限(通常在亚纳米至数纳米范围内)；然而，当晶层数达到数千层级时，这种微尺度的变形通过晶层间力学相互作用被逐渐

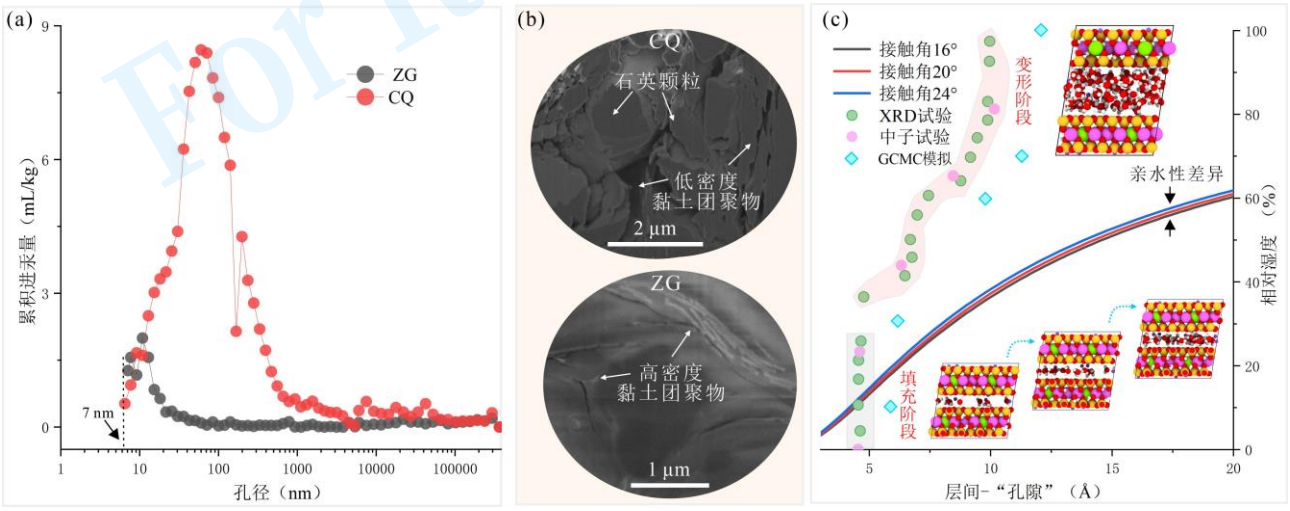


图 10　湿度环境下不同组构吸附变形特性. (a) 孔径分布，压汞数据引自文献[46]; (b) FIB-SEM 团聚结构; (c) 不同湿度下黏土变形特性, XRD、中子试验数据引自文献[47].

Figure 10　Adsorption-induced deformation characteristics of mudstones with different microfabrics under humidity conditions. (a) Pore-size distribution, mercury intrusion porosimetry data are reproduced from Reference[46]; (b) Agglomerated microstructure observed by FIB-SEM; (c) Clay deformation characteristics under different relative humidities, XRD and neutron experimental data are reproduced from Reference[47].

累积并逐级放大. 尤其在 ZG 泥岩纳米级致密孔隙结构内,水化层增厚使层间相互作用与颗粒接触状态更易发生协同软化, 表现为结构力学参数快速衰减[45], 颗粒间作用减弱, 团聚体骨架稳定性随之降低, 从而使宏观膨胀更集中、更容易被放大. 相比之下, CQ 泥岩具有更宽的孔径分布与更充足的孔隙空间, 单个晶层厚度变化所对应的局部应变更容易被分配到多尺度孔隙网络中并被“稀释”, 从而降低了变形在结构上的集中累积效应, 宏观膨胀响应相对减弱. 因此, 即使两类泥岩的晶层数量处于相近量级, CQ 泥岩仍可能表现出更弱的整体宏观变形.

黏土矿物的晶层数量及其堆叠/团聚结构是控制泥岩宏观变形机制的关键因素: 致密的晶层堆叠与受限孔隙结构更容易导致变形集中并快速累积放大, 而疏松的堆叠与宽孔隙分布弱化了矿物吸水引起的膨胀效应.

4 驱动机制讨论

现有研究普遍将泥岩在湿度作用下的软化、破坏归因于黏土矿物的吸水膨胀, 但这一认识长期停留在宏观现象层面, 对其深层物理机制缺乏系统解释[48]. 随着多尺度测试手段的发展, 岩石力学领域逐渐认识到[49]: 泥岩劣化过程本质上是一个从界面-孔隙-结构面的多级耦合体系. 然而, 由于泥岩成分细粒化、组构非均质以及细观过程的时空尺度小, 传统实验技术(如 CT、SEM)的分辨率难以捕捉界面吸附、层间滑移与微裂隙激活等关键环节, 宏观软化现象与微观机制之间的因果链条仍然模糊.

分子尺度模拟为揭示泥岩湿致劣化的初始驱动力提供了必要的微观视角(图 11). 在界面尺度, 水分子在不同矿物表面的吸附行为呈现显著差异. 以石英界面为例(图 11 b), 水分子密度剖面中仅在距表面极近区域出现一处较弱的密度峰, 且对应的界面势能谷较浅, 表明水分子在石英表面主要以物理吸附和氢键束缚为主, 其驻留时间短、易发生解吸和重排. 这类吸附水多表现为薄层弱结合水, 对层间间距与矿物骨架的结构扰动有限, 因此石英遇水后宏观结构通常保持稳定. 相比之下, 蒙脱石界面呈现出显著不同的水分子分层结构(图 11 c). 在距 001 晶面约 5-10 Å 范围内, 水分子密度呈现明显的多级振荡, 且其对应的界面势能谷深度明显增大, 形成多处“势陷”结构. 这些势陷能够稳定捕获水分子, 促使其在界面处形成高密度、低迁移性的强结合水层, 该吸附层导致晶层间的可逆或不可逆膨胀.

在较大孔隙中, 流体填充通常伴随明显的液-气界面, 毛细压力成为主要驱动因素, 孔隙形变主要由表面张力引起的毛细力调控. 而在亚纳米级孔隙中, 孔径与流体分子尺度相当, 界面效应显著削弱, 流体呈连续吸附填充, 吸附能量主导孔壁与流体间的相互作用, 从而控制孔隙结构的局部变形. 因此, 孔隙尺寸决定了能量主导机制, 即大孔隙以毛细能量为主, 小孔隙以吸附能量为主.而映射到岩石试样尺度, 不同泥岩在矿物组成与结构致密性上存在差异, 低至中等 RH 阶段水分主要以表面吸附/束缚形式赋存(如图 8); 当进入高 RH 区间后, 孔隙凝结与连通水显著增强, 孔隙网络连通性与结构致密程度控制, 并与这进一步的表明膨胀差异并非由“膨胀性矿物含量”单一决定, 而与水分赋存形态及其在孔隙结构特征

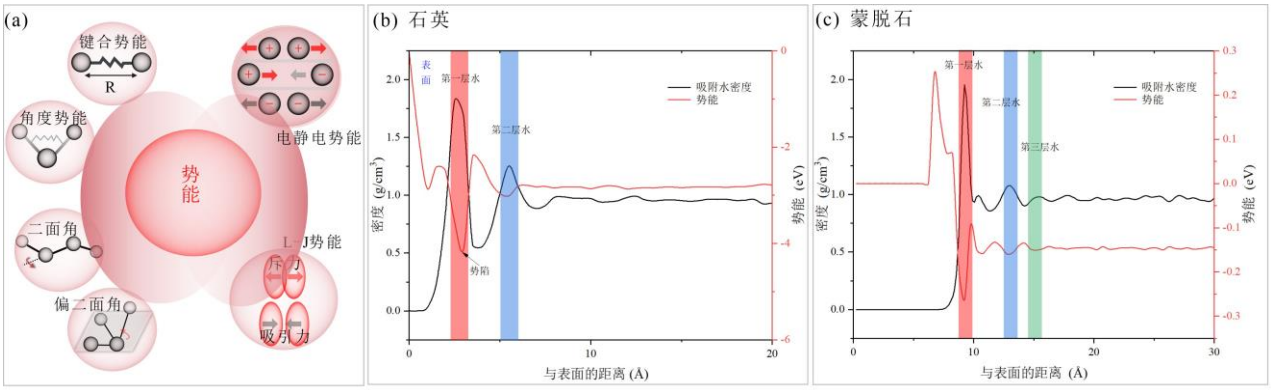


图 11 层间吸附密度与势能分布特征

Figure 11 Interlayer adsorption density and potential energy distributions.

有关, 其中矿物组成控制吸附位点与束缚水演化, 而结构越致密、孔隙越受限, 吸湿体变产生的能量越难在孔隙内耗散, 膨胀势能越大. 另一方面, 初始强度较低的样品其承载骨架相对较弱, 对湿胀变形的约束能力更有限. FIB-SEM 的团聚体/界面特征以及 nano-CT 的初始孔裂隙网络差异为上述结构约束差异提供了进一步的证据.

综上, 泥岩的湿致劣化并非单一的吸水膨胀过程, 而是矿物界面过程主导吸湿起始与束缚水演化, 结构致密性主导可动水连通与孔裂隙扩展, 两者共同调制宏观膨胀与强度变化的差异. 本研究通过在分子尺度与孔隙尺度上的机制细化, 深化了对泥岩从表界面过程到结构面演化的系统认知.

5 结论

本研究针对两种典型泥岩(ZG 和 CQ), 通过跨尺度高精度表征与模拟分析, 系统揭示了泥岩从分子-界面到孔隙-裂隙以及宏观力学破坏的演变机制. 研究得出以下主要结论:

(1) 宏观尺度: 湿度驱动泥岩弱化机制呈现显著的结构性差异. ZG 泥岩在致密结构与较弱初始承载骨架的共同约束下, 吸湿诱发体变更易集中累积并传递放大, 因而膨胀敏感性更强; 尽管 CQ 泥岩膨胀性矿物含量较高并在吸湿初期呈现较强的膨胀趋势, 但低密度结构使其整体湿度响应较弱, 宏观膨胀幅值较低.

(2) 微观/细观尺度: 孔隙裂隙网络的动态演化模式受岩石结构特征主导. 致密结构的 ZG 泥岩, 在湿度作用下表现出明显的界面裂隙萌生与扩展效应, 主要集中在黏土基质与石英颗粒界面附近形成贯通性裂隙, 导致结构整体快速劣化; 而孔隙率较高且颗粒分散的 CQ 泥岩则表现出弱敏感性, 湿度升高虽增加孔隙水含量, 但其孔隙网络本身连通性较好, 仅在局部产生微小膨胀和局部结构弱化.

(3) 分子/界面尺度: 界面势能“势陷效应”与水化膨胀机理是湿度驱动岩石劣化的基础. 泥岩中的蒙脱石与石英表面对水分子的吸附均表现出显著的势能驱动特征, 蒙脱石层间在湿度增加时优先捕获水分子形成高度稳定的有序吸附水层, 并引起层间距的膨胀变化, 体现出界面能与应变能之间的可逆转化特性.

参考文献

1 Eppes M C, Keanini R. Mechanical weathering and rock erosion by climate-dependent subcritical cracking. Rev Geophys, 2017, 55: 470-508

2 Birien T, Gauthier F. Influence of climate-dependent variables on deformation and differential erosion of stratified sedimentary rocks. Geomorphology, 2023, 421: 108518

3 Yu F, Tong K W, Fu Z H, et al. Multi-scale deformation characteristics and mechanism of red-bed mudstone in dry-wet environment. Front Earth Sci, 2022, 10: 2296-6463

4 Wang L, Bornert M, Héripré E, et al. Microscale insight into the influence of humidity on the mechanical behavior of mudstones. J Geophys Res Solid Earth, 2015, 120: 3173-3186

5 Liu X X, Li Y, Fan Z J, et al. Energy evolution and failure characteristics of single fissure carbonaceous shale under drying-wetting cycles (in Chinese). Rock Soil Mech, 2022, 43: 1761–1771 [刘新喜, 李玉, 范子坚, 等. 干湿循环作用下单裂隙炭质页岩能量演化与破坏特征研究. 岩土力学, 2022, 43: 1761–1771]

6 Chen W, Wan W, Zhao Y L, et al. Uniaxial compression damage and crack propagation features of parallel double-fissure sandstones under high-humidity environments (in Chinese). Chin J Geotech Eng, 2021, 43: 2094–2104 [陈伟, 万文, 赵延林, 等. 高湿环境平行双裂隙砂岩单轴压缩破坏及裂纹扩展特性. 岩土工程学报, 2021, 43: 2094–2104]

7 Meng J, Li C, Zhou J Q, et al. Multiscale evolution mechanism of sandstone under wet-dry cycles of deionized water: From molecular scale to macroscopic scale. J Rock Mech Geotech Eng, 2023, 15: 1171–1185

8 Ouyang K G, Jiang X W, Ma C, et al. Formation and transformation of condensate water inside rocks: Insight into source of rock moisture affecting weathering (in Chinese). Earth Sci Front, 2023, 30: 506–513 [欧阳恺皋, 蒋小伟, 马策, 等. 岩体表层凝结水的形成与转化规律: 对岩石风化水分来源的指示意义. 地学前缘, 2023, 30: 506–513]

9 Mcbain J W, Ferguson J. On the nature of the influence of humidity changes upon the composition of building materials. J Phys Chem,

For Review Only

1927, 31: 564–590
10 Tiennot M, Fortin J. Moisture-induced elastic weakening and wave propagation in a clay-bearing sandstone. Geotech Lett, 2020, 10: 424–428
11 Weiss T, Siegesmund S, Kirchner D, et al. Insolation weathering and hygric dilatation: two competitive factors in stone degradation. Environ Geol, 2004, 46: 402–413
12 Li Y, Leith K, Perras M A, et al. Digital image correlation–based analysis of hygroscopic expansion in Herrnholz granite. Int J Rock Mech Min Sci, 2021, 146: 104859
13 Li Y, Leith K, Perras M A, et al. Effect of ambient humidity on the elasticity and deformation of unweathered granite. J Geophys Res Solid Earth, 2022, 127: e2022JB024004
14 Wong L N Y, Maruvanchery V, Liu G. Water effects on rock strength and stiffness degradation. Acta Geotech, 2016, 11: 713–737
15 Huang K, Dai Z J, Yan C Z, et al. Numerical study on the swelling and failure of red-layer mudstone subgrade caused by humidity diffusion. Comput Geotech, 2023, 156: 105272
16 Luo Z Q, Yan C Z, Ke W H, et al. A surrogate model based on deep convolutional neural networks for solving deformation caused by moisture diffusion. Eng Anal Bound Elem, 2023, 157: 353–373
17 Cheng S F, Ye Y, Zeng Y W, et al. Numerical simulation research on the slake of clay rocks caused by drying-shrinkage and wetting-expansion based on FDEM (in Chinese). Chin J Rock Mech Eng, 2023, 42: 2068–2080 [程树范, 叶阳, 曾亚武, 等. 干缩、湿胀作用下黏土岩崩解的 FDEM 模拟. 岩石力学与工程学报, 2023, 42: 2068–2080]
18 Huang K, Yu F, Zhang W, et al. Experimental and numerical simulation study on the influence of gaseous water on the mechanical properties of Red-Layer mudstone in Central Sichuan. Rock Mech Rock Eng, 2023, 56: 3159–3178
19 Geng J S, Sun Q, Li H E, et al. Deterioration of mudstone exposed to cyclic hygrothermal conditions based on thermoacoustic emission. Constr Build Mater, 2023, 386: 131581
20 Zhao Z H, Liu H, Gao X J, et al. Meso-macro damage deterioration of weakly cemented red sandstone under the coupling effect of high-humidity and uniaxial loading. Eng Fail Anal, 2023, 143: 106911
21 Xing Y J, Xiao X M, Cheng P, et al. Water adsorption performance of over-mature shale and its relationship with organic and inorganic nanopores: A case study of Lower Cambrian shale from the Sichuan Basin, China. Petrol Sci, 2025, 22: 977–997
22 Zeng L, Guo Y, Zha H Y, et al. Study on fracturing characteristics of silty mudstone under moisture-thermo-mechanical loading conditions (in Chinese). J Hunan Univ (Nat Sci), 2024, 51: 126–136 [曾铃, 郭雨, 查焕奕, 等. 湿热力作用下粉砂质泥岩开裂特性研究. 湖南大学学报(自然科学版), 2024, 51: 126–136]
23 Elert K, Rodriguez-Navarro C. Degradation and conservation of clay-containing stone: A review. Constr Build Mater, 2022, 330: 127226
24 Siegesmund S, Gross C J, Dohrmann R, et al. Moisture expansion of tuff stones and sandstones. Environ Earth Sci, 2023, 82: 146
25 Wang C R, Talandier J, Skoczylas F. Swelling and Fluid Transport of Re-sealed Callovo-Oxfordian Claystone. Rock Mech Rock Eng, 2022, 55: 1143–1158
26 Wang S J. Geological nature of rock and its deduction for rock mechanics (in Chinese). Chin J Rock Mech Eng, 2009, 28: 433–450 [王思敬. 论岩石的地质本质性及其岩石力学演绎. 岩石力学与工程学报, 2009, 28: 433–450]
27 Gao Y, Wang M, Li Y Y, et al. Multi-scale pore structure characterization of lacustrine Fine-Grained mixed sedimentary rocks and its controlling factors: A case study of Lucaogou formation in Jimusar Sag. Energy Fuels, 2022 37, 977–992
28 Zhao F, Qi C Z, Kunitskikh A, et al. Effect of physical and mechanical properties on crack propagation and dynamic strength of rocks with multiscale cracks. Int J Geomech, 2025, 25. https://doi.org/10.1061/IJGNAI.GMENG-10881
29 ASTM Committee D-18 on Soil and Rock. Standard practices for preparing rock core as cylindrical test specimens and verifying conformance to dimensional and shape tolerances. ASTM International, 2008
30 Coates G R, Xiao L Z, Prammer M G. NMR Logging Principles and Applications. Beijing: Petroleum Industry Press, 2007 [美科茨, 肖立志, 普拉莫尔. 核磁共振测井原理与应用. 北京: 石油工业出版社, 2007]
31 Besghini D, Mauri M, Simonutti R. Time Domain NMR in Polymer Science: From the Laboratory to the Industry. Appl Sci, 2019, 9: 1801
32 Li Z S, Yao Y B, Zhu X G. Revealing fluid dynamics in unconventional reservoir rocks: A novel approach of T1-T2 analysis. Geosci Front, 2026, 17: 102186
33 Fleury M, Romero-Sarmiento M. Characterization of shales using T1-T2 NMR maps. J Petrol Sci Eng, 2016, 137: 55–62
34 Skipper N T, Chang F R C, Sposito G. Monte Carlo Simulation of Interlayer Molecular Structure in Swelling Clay Minerals. 1. Methodology. Clays Clay Miner, 1995, 43: 285–293
35 Levien L, Prewitt C T, Weidner D J. Structure and elastic properties of quartz at pressure. Am Mineral, 1980, 65: 920–930

For Review Only

36 Cygan R T, Liang J J, Kalinichev A G. Molecular Models of Hydroxide, Oxyhydroxide, and Clay Phases and the Development of a General Force Field. J Phys Chem B, 2004, 108: 1255–1266

37 Frenkel D, Smit B. Understanding molecular simulation: from algorithms to applications. Elsevier, 2023

38 Liu Z, Li W, Li S. High-efficiency prediction of water adsorption performance of porous adsorbents by lattice grand canonical Monte Carlo molecular simulation. RSC Appl Interfaces, 2025, 2: 230–242

39 Shaw D J. Introduction to Colloid and Surface Chemistry, 4th ed. Beijing World Publishing Corporation, 1998

40 Yuan Y J, Rezaee R, Zhou M F, et al. A comprehensive review on shale studies with emphasis on nuclear magnetic resonance (NMR) technique. Gas Sci Eng, 2023, 120: 205163

41 Zhang P F, Lu S F, Li J Q, et al. 1D and 2D Nuclear magnetic resonance (NMR) relaxation behaviors of protons in clay, kerogen and oil-bearing shale rocks. Mar Pet Geol, 2020, 114: 104210

42 Tan Y, Zhou G P, Zhang H Y, et al. Effect of drying cracks on swelling and self-healing of bentonite-sand blocks used as engineered barriers for radioactive waste disposal. J Rock Mech Geotech Eng, 2024, 16: 1776–1787

43 Falconer K. Fractal Geometry: Mathematical Foundations and Applications. John Wiley & Sons, 2013

44 Meng J, Li C D, Zhang S, et al. New computational method for calculating of water droplet-clay contact angles: Based on molecular dynamics. Appl Clay Sci, 2024, 252, 107343

45 Zheng Y, Zaoui A. Mechanical behavior in hydrated Na-montmorillonite clay. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 2018, 505: 582–590

46 Zhang G J, Li C D, Meng J, et al. Investigating the rapid deterioration of mudstone structures in contact with water. J Rock Mech Geotech Eng, 2025

47 Devineau K, Bihannic I, Michot L, et al. In situ neutron diffraction analysis of the influence of geometric confinement on crystalline swelling of montmorillonite. Appl Clay Sci, 2006, 31: 76–84

48 Xie Q Y, Huang Q B, Kang X S, et al. Study on the effect of water on the shear behavior and microstructure of red mudstone. Sci Rep, 2024, 14: 29858–29858

49 Guan H, Ren Y, Ling S X, et al. Microstructure and water-swelling mechanism of red-bed mudstone in the Xining region, Northeastern Tibetan Plateau. J Rock Mech Geotech Eng, 2024, 16, 2537–2551

Multi-scale structural evolution mechanisms of mudstone under different moisture conditions

LI ChangDong[1,2], MENG Jie[1], ZHANG GongJi[2], DAI PeiXuan[1] & SUN XinShuang[2]

[1] *Faculty of Engineering, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China;*
[2] *Badong National Observation and Research Station of Geohazards, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China*

Vapor-phase moisture variation is a key driving factor accelerating the weathering and degradation of mudstone structures. However, due to the complexity of its fine-grained fabric, the cross-scale coupling mechanism from interfacial deformation to macroscopic structural weakening remains insufficiently understood. This study investigates two Jurassic mudstones with markedly different microfabrics and, grounded in interfacial theory, integrates molecular simulations, nuclear magnetic resonance (NMR), and nano-CT scanning to elucidate the multiscale structural responses of mudstone under humidity perturbations. The results indicate that: at the macroscopic scale, both mudstones exhibit pronounced volumetric swelling and strength reduction under high relative humidity (RH ≥ 75%); at the micro–mesoscopic scale, the coupled action between expansive clay minerals and the dense mineral framework facilitates a humidity-induced “penetration effect” within the pore–fracture network, forming throughgoing structures that enhance pore connectivity and predispose potential failure planes; at the molecular scale, a hydrophilic-surface potential-well (trapping) effect strengthens water adsorption and transport, driving pore-space expansion and the accumulation of localized deformation. Integrating these cross-scale observations, this study delineates a structural evolution pathway dominated by molecular-scale irreversible

For Review Only

deformation, thereby advancing the mechanistic understanding of the coupled “interface-driven processes–structural evolution–mechanical response” in soft rocks. Through a cross-scale analytical framework, this study reveals a structural evolution pathway dominated by irreversible deformation at the molecular scale, thereby advancing the mechanistic understanding of the coupled “interface-driven structural evolution and mechanical response” in soft rocks.

moisture variation; mudstone structure; clay minerals; multi-scale response; structural evolution
doi: 10.1360/N

For Review Only