

碱激发胶凝材料碳足迹核算及低碳设计

罗 凯¹, 叶家元¹, 任雪红¹, 罗忠涛², 陈家俊¹, 闫福璐¹, 陈绍良¹, 张文生¹

(1. 中国建筑材料科学研究总院有限公司, 水泥科学与新型建筑材料研究院, 北京 100024;

2. 郑州大学材料科学与工程学院, 郑州 450001)

摘 要: 在“双碳”战略背景下, 具备低碳属性的碱激发胶凝材料备受关注, 但其生产生命周期碳排放评估体系尚未完善。针对碱激发胶凝材料低碳定义的模糊性及碳足迹核算方法缺失的问题, 提出了一种涵盖原材料处理、运输及生产生命周期的碳足迹核算方法。以赤泥为主要硅铝质前驱体, 系统探究了激发剂种类(Na_2CO_3 、 NaOH 、 $\text{Na}_2\text{O}\cdot 2\text{SiO}_2$)及掺量对碳排放与力学性能的影响规律。结果表明, 采用 Na_2CO_3 为激发剂可显著降低碳排放, 其低碳优势源于低能耗生产工艺。通过响应面法优化设计, 开发出赤泥基碱激发胶凝材料最优配比(Na_2CO_3 质量掺量 5.54%、赤泥 35.56%、矿渣 57.22%、水泥 7.22%), 其碳排放为 $228 \text{ kg CO}_2/\text{t}$ 碱激发胶凝材料(AACM), 28 d 抗压强度达 58.5 MPa。该方法为碱激发胶凝材料的低碳化设计提供了理论依据与技术支持。

关键词: 碱激发胶凝材料; 赤泥; 碳足迹核算; 力学性能; 响应面法

中图分类号: TQ177 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2026)05-1536-09

网络出版时间: 2025-07-29



碱激发胶凝材料(AACM)是由碱性激发剂(Na_2CO_3 、 NaOH 、 $\text{Na}_2\text{O}\cdot 2\text{SiO}_2$ 等)与硅铝质前驱体(具有碱活性硅铝结构的固体颗粒, 如矿渣、赤泥、粉煤灰、偏高岭土等)在合适的条件下反应得到的一种非晶到准晶态的三维网络状凝胶结构的无机胶凝材料^[1-2]。由于该材料以工业固废为主要原料, 且制备过程无须经历高温煅烧, 具有显著的节能减排特征, 被认为是一种碳排放远低于普通硅酸盐水泥的低碳胶凝材料^[3-4]。目前, 该材料的制备工艺体系已趋于成熟, 相关技术参数对材料性能的影响规律已得到系统阐释。在碱性激发剂种类及掺量、水玻璃模数调控、养护制度优化等关键工艺参数方面, 以及基于 $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 摩尔比、 $\text{M}_2\text{O}/\text{SiO}_2$ (或 $\text{M}_2\text{O}/\text{Al}_2\text{O}_3$) 碱度系数、 $\text{H}_2\text{O}/\text{M}_2\text{O}$ 液相环境参数等组成的多元配比设计方面, 均已建立明确的构效关系模型^[5-7]。但是对于其生产生命周期过程中碳排放量具体数值的计算, 及以碳排放为具体指标的 AACM 配比设计手段鲜有研究报道。

AACM 中, 激发剂的使用主要是为了加速反应

过程并诱导前驱体形成不溶性的凝胶相^[8-9]。常见的激发剂中, NaOH 是一种易潮解、易变质, 具有强腐蚀性的强碱, 通常由苛化法和电解法制得。 NaOH 激发胶凝材料属于强碱激发, 它具有提高碱激发体系的 pH 值和促进钙、硅、铝等离子溶出的双重作用, 使 AACM 具有良好的力学性能^[10-13]。但 NaOH 同时有非常明显的缺点, 如生产成本低、生产过程能耗高, 碳排放因子达到 $3.3 \text{ t CO}_2/\text{t NaOH}$ 。硅酸钠是一种具有腐蚀性、强刺激性的强碱弱酸盐, 是 AACM 体系中最常用的激发剂之一^[14-15]。其工业生产通常是将石英砂和碳酸钠在 1400°C 左右的温度下熔融而成^[15], 生产过程能耗高, 碳排放因子达到 $1.8 \text{ t CO}_2/\text{t Na}_2\text{O}\cdot 2\text{SiO}_2$ 。碳酸钠是一种易溶于水的白色粉末, 水溶液呈弱碱性, 作为激发剂在 AACM 体系表现出了巨大的潜力^[16-17]。碳酸钠来源广泛, 可以从矿物钠中提炼, 也可以从天然含钠碳酸盐卤水中提炼, 因此全球碳酸钠资源取之不尽, 比 NaOH 或硅酸钠的生产成本便宜了 2~3 倍。碳酸钠生产过程中的碳排放因子为 $0.79 \text{ t CO}_2/\text{t Na}_2\text{CO}_3$, 具有显著的低碳

收稿日期: 2025-03-07。 修订日期: 2025-04-16。

基金项目: 国家“十四五”重点研发计划(2022YFC3803102); 国家自然科学基金面上项目(52472037)。

第一作者: 罗 凯(1993—), 男, 博士。

通信作者: 张文生(1969—), 男, 博士, 教授。

Received date: 2025-03-07. Revised date: 2025-04-16.

First author: LUO Kai (1993—), male, Ph.D.

E-mail: kailuokai@163.com

Correspondent author: ZHANG Wensheng (1969—), male, Ph. D., Professor.

E-mail: wensheng_zhang01@163.com

属性^[18-19]。此外,为保证 AACM 力学性能(对标 P·O 42.5R 水泥),其激发剂组分(以 Na_2O 含量计)占比通常介于 8%~16%(质量分数)^[20-21],因此激发剂的种类和用量直接影响了 AACM 的生产成本和低碳属性。

研究表明,采用强碱性工业废渣作为 AACM 前驱体^[22-23],可降低其体系内激发剂的掺量,从而降低碳排放。此外,赤泥是氧化铝工业排放的固体废弃物,根据氧化铝的不同生产工艺分为烧结法赤泥、拜耳法赤泥和联合法赤泥,因 Fe_2O_3 含量较高而显现出褐色或红色,因 Na_2O 较高其 pH 值一般可达到 10~13,属于强碱性工业废渣,于 2010 年被列为大宗工业废渣^[24-25]。因此,以赤泥作为 AACM 前驱体,可为 AACM 提供内源碱,从而减少外掺碱的用量^[17]。

综上所述,本工作提出了囊括 AACM 原材料处理、运输及生产环节的碳足迹核算方法。并以赤泥为内源碱,探究了赤泥及外源碱(Na_2CO_3 、 NaOH 、 $\text{Na}_2\text{O} \cdot 2\text{SiO}_2$)对 AACM 碳排放的影响规律,提出了以碳排放为具体指标的赤泥基 AACM 低碳设计方法。以期为 AACM 的低碳化设计提供新方法。

1 实验

所用赤泥为拜耳法赤泥,取自上海百奥恒新材料有限公司,经压滤暴晒后含水率为 30.0%,其化学组成见表 1,以 SiO_2 、 Al_2O_3 、 CaO 和 Fe_2O_3 为主,XRD 分析表明,该赤泥中主要结晶相为赤铁矿、方解石、钙钛矿等,如图 1 所示。

表 1 原材料化学组成
Table 1 Chemical composition of raw materials

Component	$\text{Na}_2\text{O}(\text{eq})$	MgO	Al_2O_3	SiO_2	P_2O_5	SO_3	K_2O	CaO	TiO_2	V_2O_5	MnO	Fe_2O_3	Others	LOI
Red mud	2.45	2.89	18.85	21.42	0.18	3.30	0.09	13.56	3.21	1.71	0.03	22.63	0.95	8.62
Cement	0.22	3.28	4.11	18.77	0.08	3.85	0.88	62.82	0.36		0.06	3.36	0.24	1.96
GBFS	0.46	9.11	16.32	30.52	0.02	2.27	0.40	38.44	0.82		0.52	0.31	0.12	0.68

w is mass fraction. LOI is loss on ignition. eq is equivalent.

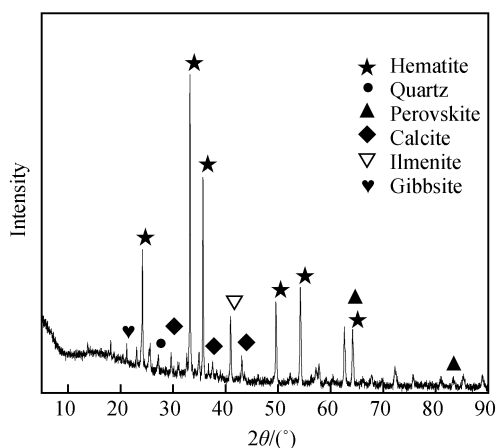


图 1 赤泥的 XRD 谱
Fig. 1 XRD pattern of red mud

所用普通硅酸盐水泥均为 P·I 42.5 水泥,购自中国建筑材料科学研究总院,其初凝时间为 110 min,终凝时间为 178 min,标准稠度用水量为 0.245;其成分主要以 CaO 、 SiO_2 、 Al_2O_3 和 MgO 为主,化学组成见表 1。XRD 分析表明,其主要矿物相为 C_3A 、 C_3S 、 C_2S 和 C_4AF (见图 2)。

所用粒化高炉矿渣(GBFS),取自上海百奥恒新材料有限公司,含水率为 10.5%,其成分主要以 CaO 、 SiO_2 、 Al_2O_3 和 MgO 为主,化学组成见表 1。XRD 分析表明,矿渣主要由非晶态玻璃体组成(见图 3)。

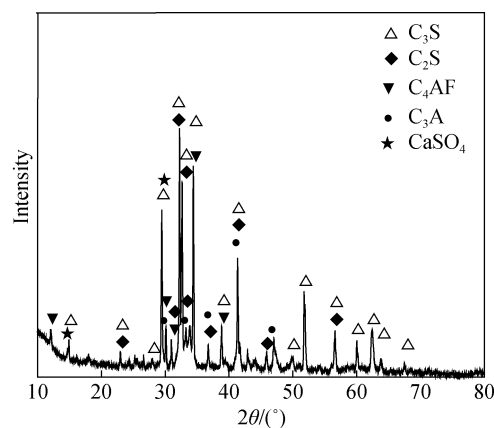


图 2 水泥的 XRD 谱
Fig. 2 XRD pattern of cement

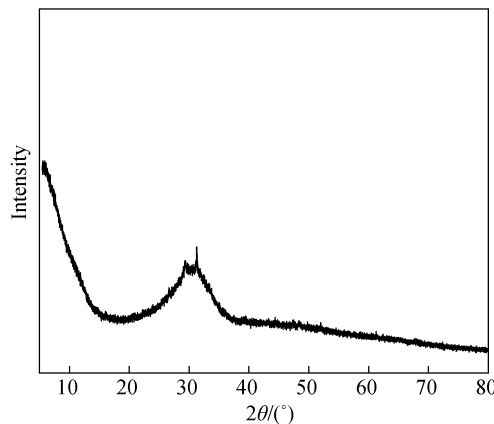


图 3 GBFS 的 XRD 谱
Fig. 3 XRD pattern of GBFS

Na_2CO_3 (分析纯), 购自国药集团化学试剂有限公司, 用于 AACM 的制备。AACM 的制备测试按 GB/T 17671—2021《水泥胶砂强度检验方法(ISO 法)》执行。

物相分析采用德国布鲁克(Bruker) AXS 公司 D8 ADVANCE 型 X 射线衍射仪($\text{Cu-K}\alpha$ 辐射源, 最大功率 18 kW), 配备石墨单色器。测试参数设定为: 管电压 40 kV, 管电流 100 mA, 扫描范围 $5^\circ\sim 80^\circ(2\theta)$, 扫描速率 $8^\circ/\text{min}$, 步进增量 0.02° 。化学成分分析使用赛默飞世尔科技(Thermo Fisher Scientific) ARL 型 X 射线荧光光谱仪(XRF), 测试前将粉末试样[粒径 <200 目($74\ \mu\text{m}$)]压制成片状试样, 确保样品表面平整度满足测试要求。

2 碱激发胶凝材料生产生命周期碳足迹

2.1 生产生命周期系统边界建立

基于 AACM 生产制备过程, 界定从原材料获取到成品生成的“从摇篮到大门”系统边界^[26–27], 具体划分为原材料获取(A_m)、原材料运输(A_t)及生产(A_p) 3 个阶段, 如图 4 所示。其中原材料的获取阶段包括原材料生产、开采等; 原材料的运输阶段为所需所有原材料运输过程中所产生的碳排放; 生产阶段包括烘干、均化、粉磨、入库及打包等过程; 生产生命周期碳排放按照式(1)~式(4)计算, 其中功能单位定义为生产 1 t AACM。

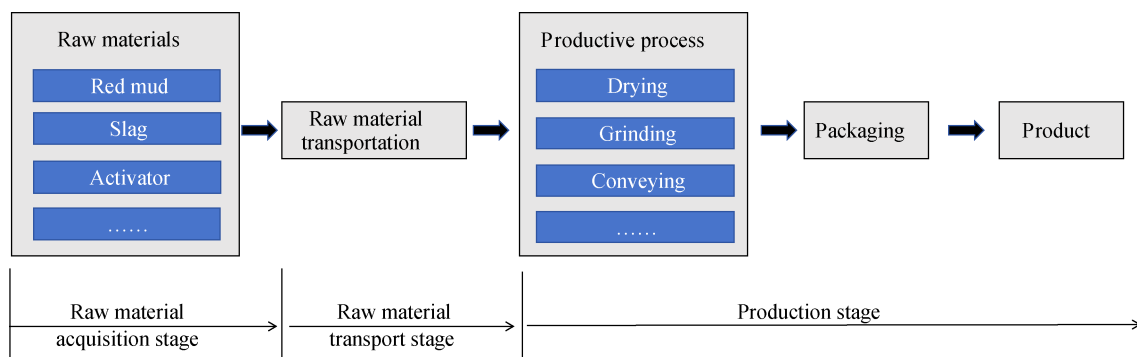


图 4 AACM 生产生命周期系统边界图

Fig. 4 Life cycle system boundary diagram of AACM production process

$$A = A_m + A_t + A_p \quad (1)$$

$$A_m = \sum_{j=1}^n A_{m,j} \quad (2)$$

$$A_t = \sum_i A_{t,n,x} \times A_{t,d,x} \times A_{t,f,x} \times A_{t,i} \quad (3)$$

$$A_p = \sum_{z=1}^n A_{p,z} \quad (4)$$

式中, A 为碱激发胶凝材料产品碳足迹, 单位为千克二氧化碳当量($\text{kg CO}_2/\text{t AACM}$); j 为原材料种类; i 为燃料种类; $A_{t,n,x}$ 为原材料的运输趟数(型号为 x 的车辆); $A_{t,d,x}$ 为由型号为 x 的车辆运输原材料的距离(km); $A_{t,f,x}$ 为型号为 x 的运输车辆的特定燃料消耗量($\text{t}/100\ \text{km}$, 或 $\text{L}/100\ \text{km}$); $A_{t,i}$ 为燃料 i 的排放因子($\text{kg CO}_2/\text{GJ}$); $A_{p,z}$ 为生产过程 z 所产生的碳排放量($\text{kgCO}_2/\text{t AACM}$)。

1) 原材料获取阶段

因碱激发胶凝材料前驱体主要为固体废弃物(如矿渣、赤泥等), 该类原材料上游过程碳排放可忽略(根据 GB/T 51366—2019 中 6.2.5 中规定^[28])。

因此, 仅需计算能够产生碳排放的原材料(如硅酸盐水泥、激发剂等)。依据硅酸盐水泥熟料的生产工艺可得每吨普通硅酸盐水泥熟料的碳排放量为 $878\ \text{kg CO}_2/\text{t}$; 依据相应化学激发剂的生产标准可分别获得 Na_2CO_3 、 NaOH 、 $\text{Na}_2\text{O} \cdot 2\text{SiO}_2$ 生产过程的碳排放量(见表 2)。

表 2 原材料阶段的碳排放因子

Table 2 Unit CO_2 emissions of raw materials

Raw materials	Clinker	Na_2CO_3	NaOH	$\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{SiO}_2$	$\text{Na}_2\text{O} \cdot 2\text{SiO}_2$
Unit product/ (kg CO_2 per t)	878	798	3343	1680	1314

2) 原材料运输阶段

运输阶段主要与运输方式(包括公路运输、铁路运输、船运等)及运输距离相关, 其中公路运输过程中的单位碳排放主要与运输车辆型号、燃油种类相关, 铁路运输(中国市场平均)碳排放因子为 $0.010\ \text{kg CO}_2/(\text{t} \cdot \text{km})$, 船运碳排放因子主要与货船种类相关, 具体碳排放因子参考 GB/T 51366—2019^[28]。

3) 产品生产阶段

生产阶段的工艺流程主要为烘干、配料、均化、粉磨与入库等步骤。该阶段的碳排放与原材料类型、原材料含水率、设备型号、粉磨工艺及产品包装方式等有关。该阶段中各个工艺流程的碳排放总和即为产品生产阶段碳排放(A_p)。

2.2 赤泥基碱激发胶凝材料生产生命周期碳排放计算

为对比同一产线内,以工业固废赤泥、粒化高炉矿渣及普通硅酸盐水泥熟料为前驱体,以 Na_2CO_3 、 NaOH 和 $\text{Na}_2\text{O} \cdot 2\text{SiO}_2$ 为激发剂制备的碱激发胶凝材料生产生命周期碳排放,据此设计低碳碱激发胶凝材料。在原材料运输阶段:本工作选取重型柴油货车运输(载重 46 t)[碳排放因子为 $0.057 \text{ kg CO}_2/(\text{t} \cdot \text{km})$],默认运输距离为 1000 km。产品生产阶段:赤泥、粒化高炉矿渣烘干过程的碳排放,由该阶段中烘干机、排风机等设备的耗电量

估算,依据实际生产数据,含水率在 10%~13%的粒化高炉矿渣在烘干过程中的耗电约为 $11.5 \text{ kW} \cdot \text{h}/(1 \text{ t 湿料})^{[29]}$;使用规格为 $\phi 3 \text{ m} \times 28 \text{ m}$ 、转速为 $2.45 \sim 4.20 \text{ r/min}$ 、斜度为 3.5%的烘干机,烘干高含水率赤泥过程中的耗电约为 $35.0 \text{ kW} \cdot \text{h}/(1 \text{ t 湿料})$ (数据取自上海百奥恒新材料有限公司焦作生产线)。工艺流程中的配料、均化、粉磨与入库等步骤的碳排放,参照某西南水泥厂在相同工艺流程中的耗电[约为 $33 \text{ kW} \cdot \text{h}/(1 \text{ t 水泥})]$ 估算。中国各省电网平均碳排放因子约为 $0.536 6 \text{ kg CO}_2/(\text{kW} \cdot \text{h})$ (2022 年中国电力平均二氧化碳排放因子)。

基于 AACM 生产生命周期碳排放计算方法[式(1)~式(4)],可得赤泥基 AACM 生产生命周期碳排放量。由图 5a~图 5c 可见,由于赤泥含水率达到 30%,其占比越大,赤泥基 AACM 碳排放量越高。此外,激发剂的种类及掺量(以 Na_2O 含量计)也是影响该类材料碳排放的关键因素之一。 Na_2CO_3 、 NaOH 、

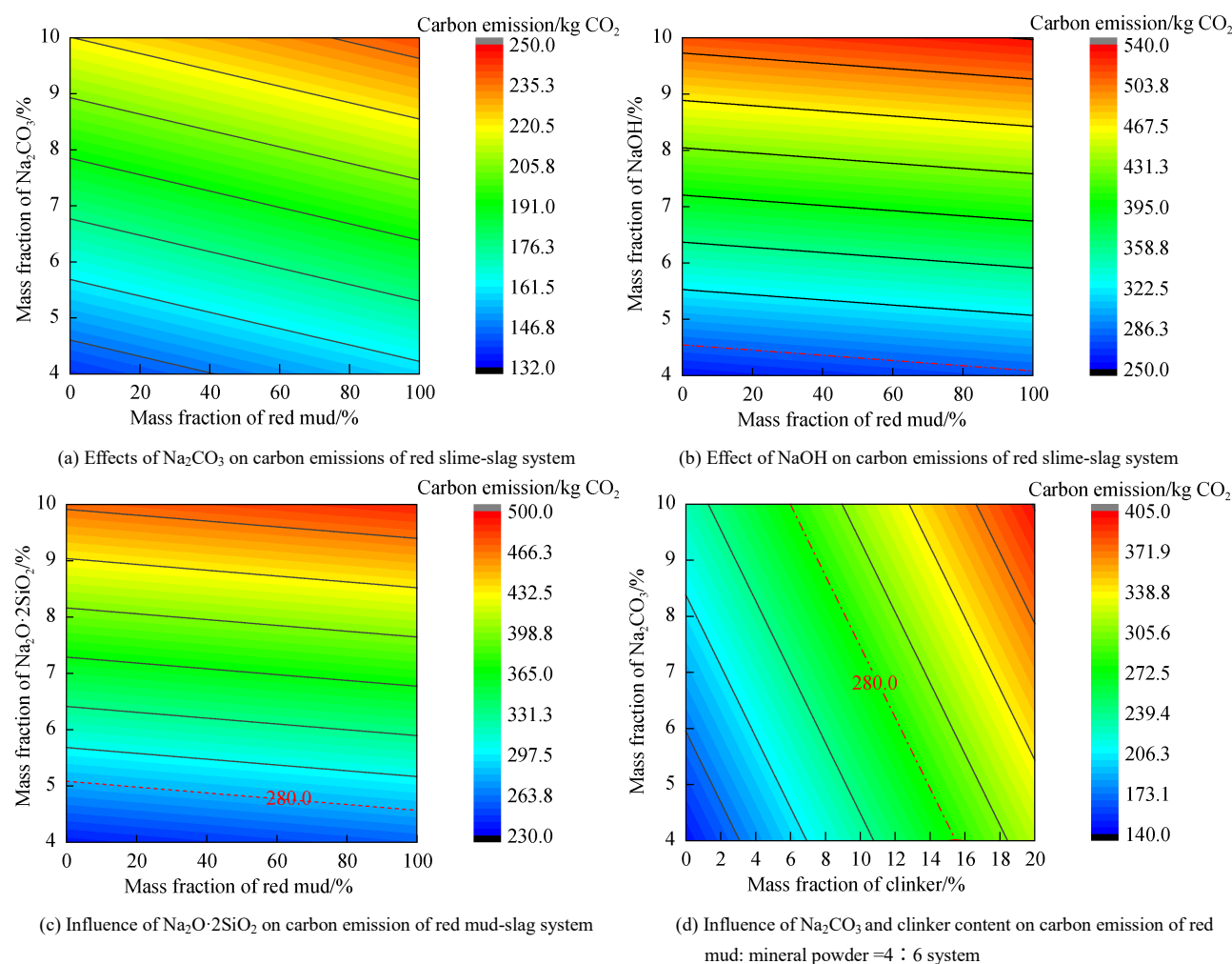


图 5 碱激发胶凝材料生产生命周期碳排放

Fig. 5 Carbon emissions during the production cycle of AACM

$\text{Na}_2\text{O} \cdot 2\text{SiO}_2$ 3 种激发剂中, Na_2CO_3 激发的胶凝材料具有显著的低碳优势。在赤泥:矿渣为 4:6、激发剂为 Na_2CO_3 条件下, 计算了熟料掺量对体系碳排放的影响(见图 5d)。为保证该体系 CO_2 排放 $< 280 \text{ kg CO}_2/\text{t AACM}$ (AACM 的碳排放量被认为较传统水泥基材料可减少 50%~75%^[30]), 在确保该类材料力学性能的同时实现低碳属性, 本工作进一步将目标收紧至 $280 \text{ kg CO}_2/\text{t AACM}$ 。在 Na_2CO_3 掺量高于 4%(质量分数, 以 Na_2O 含量计)条件下, 体系水泥熟料占比不应超过 15%。

3 赤泥基碱激发胶凝低碳设计

3.1 响应面法优化设计

基于赤泥基 AACM 的生产生命周期碳足迹评估及成本分析, 本工作以 Na_2CO_3 作为激发剂。为满足体系二氧化碳排放量低于 $280 \text{ kg CO}_2/\text{t AACM}$ 的约束条件, 设定水泥熟料掺量上限为 10%(质量分数, 本工作的力学性能试验中因 P·I 42.5 水泥的熟料占比达 95%, 故以 P·I 42.5 水泥替代熟料)。同时, 通过控制赤泥掺量在 50%以内以降低原材料烘干阶段的碳排放。采用响应面法(Box-Behnken)设计实验方案, 以胶砂 28 d 抗压强度为响应值, 选取 Na_2CO_3 掺量(以 Na_2O 计, X_1)、赤泥掺量(X_2)和水泥掺量(X_3)为自变量, 借助 Design-Expert 8.0.6 软件构建三因素三水平(编码值: -1, 0, +1)的实验矩阵, 具体参数设置见表 3, 试验设计与测试结果详见表 4。

通过对试验数据进行多元回归分析, 建立 28 d 抗压强度的二次多项式回归模型:

$$Y = -621.925 \text{ } 00 + 213.675 \text{ } 00X_1 + 3.885 \text{ } 00X_2 + 6.382 \text{ } 50X_3 - 0.005 \text{ } 000 \text{ } 00X_1X_2 - 0.320 \text{ } 00X_1X_3 - 0.044 \text{ } 500X_2X_3 - 19.200 \text{ } 00X_1^2 - 0.048 \text{ } 750X_2^2 - 0.196 \text{ } 00X_3^2$$

模型显著性检验(见表 5)显示, 回归方程 F 值的 P 值 < 0.01 , 证实该模型具有统计学显著性($\alpha = 0.01$)。进一步方差分析(见表 6)表明: 决定系数 $R^2 = 0.9674$, 校正决定系数 Adjusted $R^2 = 0.99256$, 说明 96.74% 的响应值变异可由模型解释, 且模型预测值与实际值相关性显著; 变异系数 C.V. = 3.23% ($< 10\%$) 与信噪比 12.025 (> 4) 共同验证了试验系统具有优良的重复性与精确度。

表 3 Box-Behnken 试验设计因素水平

Table 3 Level of design factors of Box-Behnken experiment

Level	$X_1/\%$	$X_2/\%$	$X_3/\%$
-1	5.0	30	0
0	5.5	40	5
1	6.0	50	10

表 4 设计与测试结果

Table 4 Design and results

Number	X_1	X_2	X_3	Y: 28 d compressive strength/MPa
1	0	0	0	58.1
2	0	0	0	58.1
3	-1	1	0	45.1
4	-1	-1	0	50.1
5	0	0	0	58.1
6	0	1	-1	41.9
7	0	0	0	58.1
8	1	0	1	50.4
9	0	1	1	49.2
10	1	-1	0	51.8
11	-1	0	1	52.3
12	-1	0	-1	44.8
13	0	-1	-1	43.0
14	1	1	0	46.7
15	1	0	-1	46.1
16	0	0	0	58.1
17	0	-1	1	59.2

表 5 回归模型 ANOVA 分析

Table 5 ANOVA analysis of regression model

Source	Sum of squares	DF	Mean square	F -value	P -value	Significance
Model	568.46	9	63.16	23.10	0.0002	**
X_1	0.57	1	0.57	0.21	0.6617	
X_2	63.37	1	63.37	23.18	0.0019	**
X_3	27.00	1	27.00	9.88	0.0163	*
X_1X_2	0.0025	1	0.0025	0.0009144	0.9767	
X_1X_3	2.56	1	2.56	0.94	0.3654	
X_2X_3	19.80	1	19.80	7.24	0.0310	*
X_1^2	97.01	1	97.01	35.48	0.0006	**
X_2^2	100.07	1	100.07	36.60	0.0005	**
X_3^2	101.09	1	101.09	36.98	0.0005	**
Partial error	19.14	7	2.73			
Missing fit	19.14	3	6.38			
Pure error	0	4	0			
Total	587.60	16				

* indicates a significant impact ($P < 0.05$). ** indicates a highly significant impact ($P < 0.01$). DF is degree of freedom.

表 6 拟合模型的方差分析结果

Table 6 Results of variance analysis of fitted models

Response	C.V./%	R^2	Adjusted R^2	Adeq precision	Source model
Y	3.23	0.9674	0.9256	12.025	Quadratic

C.V. is coefficient of variation.

3.2 响应面分析

基于响应面模型, 绘制 28 d 抗压强度与三因素交互作用的 3D 响应曲面及二维等高线图(见图 6~图 8)。当固定任一因素于中心点水平时, 曲面梯度与等高线密度直观表征余下 2 个因素的交互效应强度。由图 6 可见, 当水泥掺量固定于 5% ($X_3 = 0$) 时,

赤泥掺量(X_2)的响应曲面梯度显著高于 Na_2CO_3 掺量(X_1),表明赤泥掺量对抗压强度的影响占主导地位,此结论与方差分析中 X_2 的 F 值显著高于 X_1 的结果

(见表 5)相印证。图 7 为 Na_2CO_3 掺量与水泥掺量的交互曲面,当赤泥掺量保持在零水平(40%)时,28 d 抗压强度随 Na_2CO_3 掺量和水泥掺量的增加均呈现

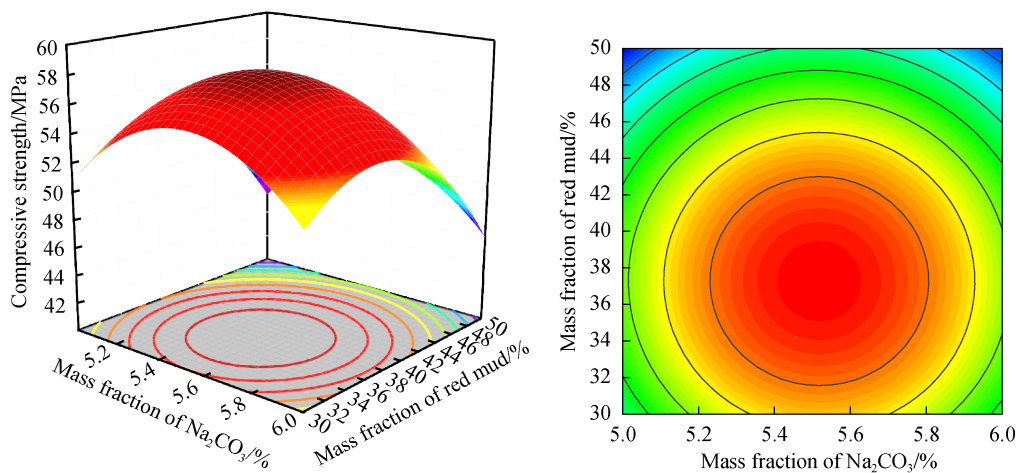


图 6 Na_2CO_3 和赤泥对 AACM 胶砂 28 d 抗压强度的交互影响
Fig. 6 Interaction effect of Na_2CO_3 and red mud on 28 d compressive strength

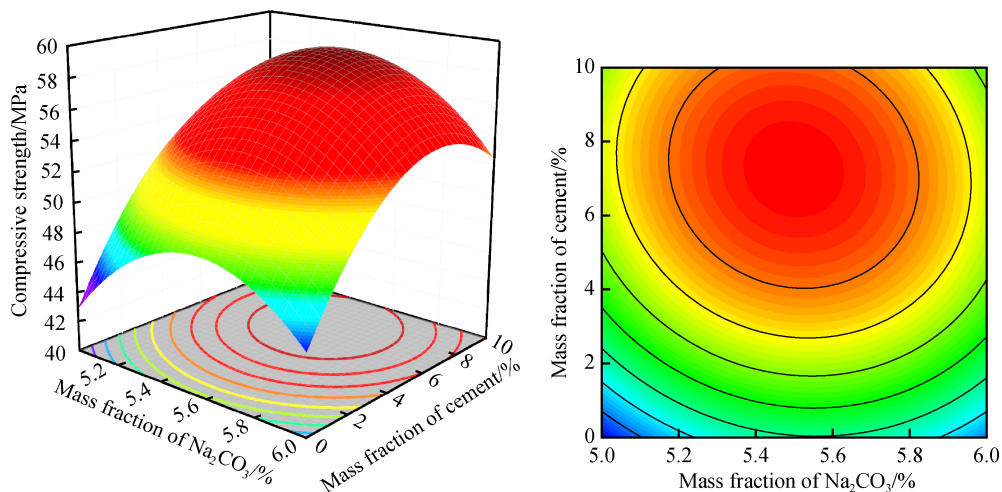


图 7 Na_2CO_3 和水泥对 AACM 胶砂 28 d 抗压强度的交互影响
Fig. 7 Interaction effect of Na_2CO_3 and cement on 28 d compressive strength

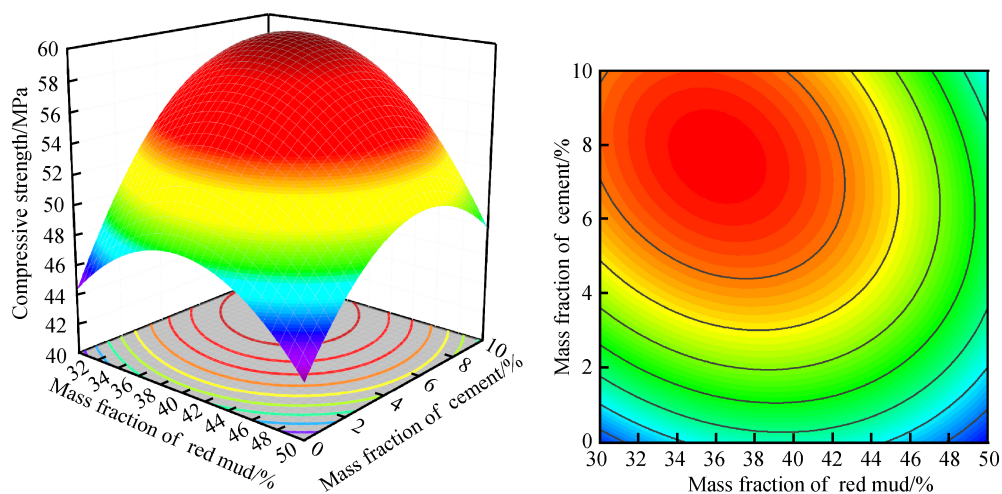


图 8 赤泥和水泥对 AACM 胶砂 28 d 抗压强度的交互影响
Fig. 8 Interaction effect of red mud and cement on 28 d compressive strength

先增加后降低的趋势,其中 Na_2CO_3 掺量在 5.54%~5.56%之间、水泥掺量在 6%~8%之间时,28 d 抗压强度达到峰值。图 8 为 Na_2CO_3 掺量在零水平(5.5%)时,赤泥掺量和水泥掺量这 2 种因素的交互作用对 28 d 抗压强度的影响规律,与图 6 和图 7 相比,图 8 的响应曲面表现出更为显著的扭曲特征,且等高线的曲率达到最大,说明赤泥掺量和水泥掺量有显著的交互作用。

通过响应面优化模块设定 28 d 抗压强度最大化为目标函数,获得理论最优配比为: Na_2CO_3 外掺量 5.54%、赤泥掺量 35.56%、矿渣掺量 57.22%、水泥掺量 7.22%。平行验证试验测得该配比下 28 d 抗压强度均值为 58.5 MPa,与模型预测值 59.7 MPa 的相对误差仅为 2.01%(<5%),进一步证实模型具备工程应用可靠性。在该配比中,高碱含量[如表 1 所示,赤泥中 $\text{Na}_2\text{O}(\text{eq})$ 含量为 2.45%]的赤泥为体系提供了丰富的内源碱,减少了对外源碱的依赖;GBFS 的非晶相结构(见图 3)赋予其高碱反应活性,在 Na_2CO_3 激发下快速释放 Ca^{2+} 和 SiO_4^{4-} ,促进凝胶的形成,从而提升强度;水泥中 C_3S 、 C_2S 等矿物水化后可提供额外的 $\text{Ca}(\text{OH})_2$,能够进一步提高体系 pH 值,加速矿渣玻璃体的解聚,增强基体界面过渡区密实度,从而保证 AACM 的力学性能。此外,经碳足迹核算(方法见第 2 节),该优化配对应应的碳排放量为 228 kg $\text{CO}_2/\text{t AACM}$,为低碳胶凝材料体系设计提供了定量依据。

4 结论

本工作通过构建 AACM 生产生命周期碳足迹核算模型,结合响应面法优化设计,揭示了激发剂类型与配比对材料低碳化与力学性能的协同调控机制,主要结论如下:

1) 建立了涵盖原材料获取、运输及生产阶段的“摇篮到大门”碳足迹核算体系,量化了赤泥基 AACM 前驱体及激发剂类型对碳排放的贡献权重,为低碳胶凝材料评价提供了量化依据。

2) 赤泥作为内源碱可有效降低外源激发剂的用量,结合 Na_2CO_3 的低碳特性(碳排放因子为 0.79 t CO_2/t),显著削减了体系碳排放。当赤泥占比 $\leq 50\%$ 、水泥熟料掺量 $\leq 10\%$ 时,材料碳排放可降至 280 kg $\text{CO}_2/\text{t AACM}$ 以下,验证了“固废资源化—低碳工艺”协同路径的可行性。

3) 基于响应面法的低碳设计表明,赤泥-矿渣体系最优配比下(Na_2CO_3 掺量 5.54%、赤泥 35.56%、

矿渣 57.22%、水泥 7.22%),胶凝材料 28 d 抗压强度达 58.5 MPa,碳排放为 228 kg $\text{CO}_2/\text{t AACM}$,兼具高强度与低碳特性,性能对标 P·O 42.5R 水泥。

4) 本工作验证了工业固废赤泥在低碳胶凝材料中的应用潜力,为氧化铝行业固废资源化及建材行业碳中和目标提供了创新性的解决方案。

参考文献:

- [1] BÍLEK V, NOVOTNÝ R, KOPLÍK J, et al. Philosophy of rational mixture proportioning of alkali-activated materials validated by the hydration kinetics of alkali-activated slag and its microstructure[J]. Cem Concr Res, 2023, 168: 107139.
- [2] KHALIFA A Z, CIZER Ö, PONTIKES Y, et al. Advances in alkali-activation of clay minerals[J]. Cem Concr Res, 2020, 132: 106050.
- [3] JIANG D D, SHI C J, ZHANG Z H. Recent progress in understanding setting and hardening of alkali-activated slag (AAS) materials[J]. Cem Concr Compos, 2022, 134: 104795.
- [4] LU C F, ZHANG Z H, HU J, et al. Effects of anionic species of activators on the rheological properties and early gel characteristics of alkali-activated slag paste[J]. Cem Concr Res, 2022, 162: 106968.
- [5] YE J Y, ZHANG W S, SHI D. Properties of an aged geopolymer synthesized from calcined ore-dressing tailing of bauxite and slag[J]. Cem Concr Res, 2017, 100: 23–31.
- [6] SHI D, YE J Y, ZHANG W S, et al. Properties, mineralogy and microstructure evolution of 4-year calcium silicate slag-based alkali-activated materials[J]. Cem Concr Compos, 2023, 136: 104857.
- [7] LI C, SUN H H, LI L T. A review: The comparison between alkali-activated slag (Si+Ca) and metakaolin (Si+Al) cements[J]. Cem Concr Res, 2010, 40(9): 1341–1349.
- [8] PROVIS J L, VAN DEVENTER J S J. Geopolymerisation kinetics. 2. reaction kinetic modelling[J]. Chem Eng Sci, 2007, 62(9): 2318–2329.
- [9] LUO K, YE J Y, ZHANG W S, et al. Leaching kinetics and reactivity regulation of red mud in an NaOH solution[J]. Constr Build Mater, 2024, 421: 135750.
- [10] HUANG Z X, WANG Q, LU J M. The effects of cations and concentration on reaction mechanism of alkali-activated blast furnace ferronickel slag[J]. Compos Part B Eng, 2022, 236: 109825.
- [11] XIAO Q Y, TANG Z, XIANG Y, et al. Early age reaction, rheological properties, and environment impact of NaOH-activated fly ash mixtures at ambient environment[J]. J Build Eng, 2024, 88: 109145.
- [12] 李静, 陈东彬, 余其俊, 等. 矿渣在不同浓度氢氧化钠溶液中的反应过程[J]. 硅酸盐学报, 2024, 52(5): 1508–1519.
LI Jing, CHEN Dongbin, YU Qijun, et al. J Chin Ceram Soc, 2024, 52(5): 1508–1519.
- [13] DELGADO-PLANA P, GARCÍA-DÍAZ A, BUENO-RODRÍGUEZ S, et al. Influence of NaOH molarity and Portland cement addition on performance of alkali activated cements based in silicomanganese slags[J]. Constr Build Mater, 2023, 407: 133544.
- [14] 安百富, 王家乐, 贾磊, 等. 粉煤灰-水泥-硅酸钠型充填材料强度特性研究[J]. 地下空间与工程学报, 2024, 20(S2): 732–740.
AN Baifu, WANG Jiale, JIA Lei, et al. Chin J Undergr Space Eng, 2024, 20(S2): 732–740.
- [15] ALNAHHAL M F, HAMDAN A, HAJIMOHAMMADI A, et al. Hydrothermal synthesis of sodium silicate from rice husk ash: Effect of synthesis on silicate structure and transport properties of

- alkali-activated concrete[J]. *Cem Concr Res*, 2024, 178: 107461.
- [16] 蒋明岫, 李飞, 周理安, 等. 碳酸钠、氢氧化钠与水玻璃复合激发对地聚物胶凝材料性能的影响[J]. *硅酸盐通报*, 2024, 43(3): 929–937.
- JIANG Mingshen, LI Fei, ZHOU Li'an, et al. *Bull Chin Ceram Soc*, 2024, 43(3): 929–937.
- [17] LUO K, ZHANG W S, YE J Y, et al. Mechanism of Na_2CO_3 on early properties of red mud-based alkali-activated cementitious materials[J]. *Constr Build Mater*, 2024, 449: 138369.
- [18] YANG J H, ZHENG X Y, MA Y, et al. Effect of Na_2CO_3 on the tensile creep of slag-fly ash systems activated with Na_2SiO_3 [J]. *Cem Concr Compos*, 2023, 140: 105110.
- [19] BURCIAGA-DÍAZ O, BETANCOURT-CASTILLO I E, MONTES-ESCOBEDO M E, et al. One-part pastes and mortars of $\text{CaO-Na}_2\text{CO}_3$ activated blast furnace slag: Microstructural evolution, cost and CO_2 emissions[J]. *Constr Build Mater*, 2023, 368: 130431.
- [20] 叶家元. 活化铝土矿选尾矿制备碱激发胶凝材料及其性能变化机制[D]. 北京: 中国建筑材料科学研究总院, 2015.
- YE Jiayuan. A geopolymer synthesized from calcined ore-dressing tailing of bauxite and the mechanism of performance evolution[D]. Beijing: China Building Materials Research Institute, 2015.
- [21] 张未. 循环流化床粉煤灰-高炉渣-赤泥基胶凝材料不安定组分稳定化及协同利用研究[D]. 北京: 北京科技大学, 2023.
- ZHANG Wei. Stabilization and synergistic utilization of unstable components in circulating fluidized bed fly ash-blast furnace slag-red mud based cementitious materials[D]. Beijing: University of Science and Technology Beijing, 2023.
- [22] TIAN K G, WANG Y S, DONG B Q, et al. Engineering and micro-properties of alkali-activated slag pastes with Bayer red mud[J]. *Constr Build Mater*, 2022, 351: 128869.
- [23] LIU R X, POON C S. Utilization of red mud derived from bauxite in self-compacting concrete[J]. *J Clean Prod*, 2016, 112: 384–391.
- [24] HUANG X, LI J S, JIANG W H, et al. Recycling of phosphogypsum and red mud in low carbon and green cementitious materials for vertical barrier[J]. *Sci Total Environ*, 2022, 838: 155925.
- [25] ADEDIRAN A, YLINIEMI J, MOUKANNAA S, et al. Enhancing the thermal stability of alkali-activated Fe-rich fayalite slag-based mortars by incorporating ladle and blast furnace slags: Physical, mechanical and structural changes[J]. *Cem Concr Res*, 2023, 166: 107098.
- [26] 中国标准化研究院、清华大学、中国科学院生态环境研究中心等. GB/T 24040—2008 环境管理 生命周期评价 原则与框架[S]. 北京: 中国标准出版社, 2008.
- [27] 中国建筑材料联合会、上海百奥恒新材料有限公司、北京工业大学等. GB/T 44716—2024 建筑材料低碳评估方法[S]. 北京: 中国标准出版社, 2025.
- [28] 中华人民共和国住房和城乡建设部. GB/T 51366—2019 建筑碳排放计算标准[S]. 北京: 中国建筑工业出版社, 2019.
- [29] 黄志文. 水泥窑矿渣烘干机热源改造技术探讨[J]. *中国水泥*, 2021(7): 90–91.
- HUANG Zhiwen. *China Cem*, 2021(7): 90–91.
- [30] YANG K H, SONG J K, SONG K I. Assessment of CO_2 reduction of alkali-activated concrete[J]. *J Clean Prod*, 2013, 39: 265–272.

作者贡献声明:

- 罗 凯: 设计论文框架、撰写论文、负责实验设计与数据分析
叶家元: 提出研究方向、完善论文框架、修订论文
任雪红: 参与数据分析、修订论文
罗忠涛: 参与实验设计与数据分析
陈家俊: 参与实验测试、数据处理
闫福瑞: 参与文献调研与图表绘制
陈绍良: 参与实验测试与数据整理
张文学: 论文整体把关、提出修改意见、提供理论指导

Low-Carbon Design and Carbon Footprint Calculation of Alkali-Activated Cementitious Materials

LUO Kai¹, YE Jiayuan¹, REN Xuehong¹, LUO Zhongtao², CHEN Jiajun¹, YAN Fulu¹, CHEN Shaoliang¹, ZHANG Wensheng¹

(1. Institute of Cement Science and New Building Materials, China Building Materials Academy, Beijing 100024, China;

2. School of Materials Science and Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China)

Extended Abstract

Introduction As the second largest global carbon dioxide emission source, the cement industry contributes approximately 8% of total anthropogenic carbon emissions. Under the “dual-carbon” strategic framework, developing novel low-carbon cementitious materials emerges as a research priority in civil engineering. Alkali-activated cementitious materials (AACM) are regarded as a promising alternative to conventional Portland cement due to their advantages of eliminating high-temperature calcination and utilizing industrial solid wastes. However, the existing research predominantly focuses on material performance optimization, while the definition of their “low-carbon” attributes remains limited to raw material substitution, lacking a systematic life cycle carbon emission accounting framework. No scientific evaluation methods or quantitative models are established to assess carbon footprint disparities among different activator systems (*i.e.*, carbonate, hydroxide, and silicate). Furthermore, red mud—a massive solid waste generated by the alumina industry with global annual emissions exceeding 150 million tons exhibits natural compatibility with alkali-activated systems due to its high alkali metal content. Nevertheless, the existing studies predominantly emphasize its reactivity activation, while neglecting the development of integrated low-carbon processing technologies. Establishing systematic carbon accounting methodologies and elucidating the coupling mechanisms among activators, carbon emissions, and mechanical properties become critical scientific challenges for advancing the engineering applications of alkali-activated materials.

Methods In the AACM production framework, the study defined a “cradle-to-gate” system boundary spanning from raw material

acquisition to final product formation. This boundary was divided into three distinct phases, *i.e.*, raw material acquisition stage (Am), encompasses processes such as raw material production, mining, and extraction, and raw material transportation stage (At). Accounts for carbon emissions generate during the transportation of all required raw materials. Production stage (Ap) includes operational steps such as drying, homogenization, grinding, storage, and packaging. The investigation specifically employed red mud as an intrinsic alkali source, focusing on elucidating the influence patterns of both red mud and external alkalis (*i.e.*, Na_2CO_3 , NaOH , and $\text{Na}_2\text{O}\cdot 2\text{SiO}_2$) on the carbon emissions of AACM. Response surface methodology (RSM) with the Box-Behnken design was employed to optimize mix parameters (*i.e.*, Na_2CO_3 dosage, red mud content, and cement content), conducting multi-factor interaction analysis with dual objectives, *i.e.*, 28-d compressive strength and carbon emissions.

To compare the life cycle carbon emissions of AACM production in the same production line with industrial solid waste (*i.e.*, red mud), granulated blast furnace slag, and ordinary Portland cement clinker as precursors, as well as Na_2CO_3 , NaOH , and $\text{Na}_2\text{O}\cdot 2\text{SiO}_2$ as activators and to design low-carbon AACM, the following parameters were established. For the raw material transportation phase, heavy-duty diesel trucks (46-ton payload) with a carbon emission factor of $0.057 \text{ kg CO}_2/(\text{t}\cdot\text{km})$ were selected, assuming a default transportation distance of 1000 km. For the production phase, the carbon emissions from drying red mud and granulated blast furnace slag were estimated based on electricity consumption of drying equipment and exhaust fans. The field data indicated that drying granulated blast furnace slag with 10%–13% moisture content required approximately $11.5 \text{ kW}\cdot\text{h}$ per ton of wet material. For high-moisture red mud drying (using a $\Phi 3 \text{ m}\times 28 \text{ m}$ rotary dryer with 2.45–4.20 r/min rotation speed and 3.5% slope), the energy consumption reached $35.0 \text{ kW}\cdot\text{h}$ per ton of wet material (data from Shanghai Bai Ao Heng New Materials Co., Ltd., China). Carbon emissions from material batching, grinding, and homogenization processes were estimated using reference power consumption data (*i.e.*, $\approx 33 \text{ kW}\cdot\text{h}$ per ton of cement) from a plant of Southwest Cement Co., Ltd., China. The average carbon emission factor of China's regional power grids was adopted as $0.5366 \text{ kg CO}_2/(\text{kW}\cdot\text{h})$ (2022 national average electricity CO_2 emission factor).

Results and discussion This study proposes a life cycle carbon footprint accounting model for AACM production, reveals the synergistic regulation mechanism of activator types and mix proportions on the material low-carbon characteristics and mechanical performance through response surface methodology-based optimization design and establishes a cradle-to-gate carbon footprint accounting system covering raw material acquisition, transportation, and production stages. The contribution weights of red mud-based AACM precursors and activator types to carbon emissions are quantified, providing a quantitative basis for evaluating low-carbon cementitious materials. As an endogenous alkali source, red mud can effectively reduce the dosage of external activators. Coupled with the low-carbon characteristics of Na_2CO_3 (carbon emission factor: $0.79 \text{ t CO}_2/\text{t}$), this significantly reduces the system's carbon emissions. At a red mud content of $\leq 50\%$ and a cement clinker dosage of $\leq 10\%$, the material's carbon emissions can reduce to below 280 kg CO_2 per ton of AACM, validating a feasibility of the synergistic pathway of solid waste recycling–low-carbon process. The low-carbon design based on the RSM demonstrates that in the optimal mix proportion of the red mud-slag system (with 5.54% Na_2CO_3 dosage, 35.56% red mud, 57.22% slag, and 7.22% cement), the cementitious material achieves a 28-d compressive strength of 58.5 MPa and a carbon emission of 228 kg CO_2 per ton of AACM. This system exhibits both high strength and low-carbon characteristics, with performance comparable to Portland cement P·O 42.5R. In this mix proportion, red mud with a high alkali content provides abundant endogenous alkali to the system, reducing reliance on exogenous alkali. The amorphous phase structure of blast furnace slag endows it with a high alkali reactivity, enabling a rapid release of Ca^{2+} and SiO_4^{4-} under Na_2CO_3 activation to promote gel formation and enhance strength. The hydration of minerals such as C_3S and C_2S in cement generates additional $\text{Ca}(\text{OH})_2$, further elevating the pH value of the system. This accelerates the depolymerization of slag vitreous phases and enhances the compactness of the matrix interfacial transition zone, thereby ensuring the mechanical performance of the AACM.

Conclusions This study could pioneer the integration of red mud's intrinsic alkali properties with low-carbon activators, proposing a holistic “low-carbon design–carbon accounting–performance optimization” methodology. The framework provided a theoretical support for industrial applications of alkali-activated materials, offering dual benefits, *i.e.*, large-scale red mud consumption in the alumina industry and a technical pathway for achieving the “dual carbon” goals in construction materials.

Keywords alkali-activated cementitious materials; red mud; carbon footprint accounting; mechanical properties; response surface methodology