

力学所在复杂流体中纳米颗粒活化跳跃扩散研究中获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/11189.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

纳米颗粒在高聚物、生物粘液等复杂流体中的扩散运动有重要应用背景，被认为是药物运输的关键物理机制之一。高聚物等复杂流体具有微观非均匀结构，导致纳米颗粒扩散运动出现反常特征。以往研究认为，对于稀释高聚物溶液（dilute polymer solution），纳米颗粒的扩散主要受限于高聚物形成的网络尺寸，当纳米颗粒直径小于网格尺寸时，发生穿透高聚物网络的跳跃行为，称为跳跃扩散（hopping diffusion）。该种长位移的跳跃行为，可能会在比较拥挤的微环境中发挥强化输运作用；随高聚物浓度上升，其溶液中网络尺寸减小。现有理论认为在纠缠高聚物溶液（entangled polymer solution）中纳米颗粒的跳跃扩散不再发生。

中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室微纳流体力学课题组对该问题开展研究。研究人员通过调节高聚物浓度范围，使实验涵盖稀释溶液和纠缠溶液。在前期工作中（Xue et al. Probing Non-Gaussianity in Confined Diffusion of Nanoparticles, J. Phys. Chem. Letters, 2016, 7: 514），结合均方位移MSD和位移概率密度分布DPD，确认稀释高聚物溶液中普通跳跃扩散的统计特征。针对纠缠高聚物溶液中纳米颗粒扩散运动的特征及其机理开展研究。研究发现，在高浓度状态下，即使当纠缠高聚物溶液网络结构特征空间尺度（tube diameter d_t ）比纳米颗粒尺度小时，纳米颗粒运动仍会出现间歇性的大位移（图1a），导致DPD的肥尾分布（图1b，肥尾部分代表更高概率观测到大位移）。由于纳米颗粒尺度较大（ $d > d_t$ ），普通的跳跃扩散无法解释此现象，研究人员认为纳米颗粒要发生活化以克服周围网络结构的束缚，此机制称为活化跳跃（activated hopping）。与稀释溶液中大位移跳跃现象比较稳定出现不同，若使用非高斯系数 a 表示肥尾程度的大小，纠缠溶液中大位移跳跃仅发生在微观网络弛豫时间 t_e 和宏观溶液弛豫时间 t_{rep} 之间（图1c， a 越大表示肥尾程度越高）。通过测量，研究人员描述活化跳跃发生的特征时间 t_{hop} ，建立无量纲标度率 $t_{hop}/t_e \sim \exp(d/d_t)$ （图1d）。该无量纲关系显示出纠缠高聚物溶液中的活化现象发生频率符合 Boltzmann 关系及 Arrhenius 活化关系的描述，且在高聚物溶液中，活化现象需克服的自由能垒符合 $\Delta G \sim k_B T (d/d_t)$ 。

该研究提出纠缠高聚物溶液中发生活化跳跃的可能性，首次通过实验系统描述其运动特征，发展活化跳跃特征时间的标度率；提出拥挤生物微环境中强化纳米颗粒运输的新机制，通过特征弛豫时间与活化跳跃时间的竞争，给出判断复杂流体中活化跳跃发生的理论判据。

相关研究成果以Diffusion of Nanoparticles with Activated Hopping in Crowded Polymer Solutions为题，发表在Nano Letters

上。研究工作得到国家自然科学基金，中科院战略性先导科技专项（B类）、前沿科学重点研究项目的资助。

纳米颗粒在纠缠高聚物溶液中的活化跳跃运动特征

研究团队单位：力学研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发