
高分子多层次聚集态结构的理论模拟研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/3039.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！

高分子多层次聚集态结构的理论模拟研究获进展。高分子材料是国民经济和国家安全不可或缺的重要保证材料。高分子的聚集态结构决定高分子材料的使用性能，因此，发展有效的理论模拟方法及算法，深入理解高分子的多层次聚集态结构转变规律，进而明晰高分子聚集态结构和材料物理化学性质之间的关系，是实现高性能及高功能材料自下而上设计的关键手段，具有特别重要的科学意义和实际价值。

中国科学院长春应用化学研究所科研人员深入系统地研究了嵌段高分子在熔体以及溶液条件下的多层次聚集态结构演化及形成机理，在三维空间建立了含刚性嵌段的自洽场理论模型以及能够有效描述高分子补丁粒子软硬度及各向异性特征的高效计算机模拟模型，解决了传统高分子模拟方法中效率低、普适性差等问题，揭示了含刚性嵌段的高分子有序聚集态结构形成的微观机理，提出利用嵌段高分子在溶液中聚集形成补丁粒子的新思路，并阐明了补丁粒子聚集态结构的调控规律，为高分子凝聚态结构的理论预测和纳米新材料的设计与开发提供了重要的理论指导。日前，由研究员孙昭艳等完成的成果荣获2018年吉林省自然科学奖一等奖。

他们建立了三维空间的格子自洽场理论方法，揭示了含刚性嵌段的多嵌段、多组分共聚物的有序聚集态结构，阐明了刚性嵌段在分子水平上的排列方式及其物理本质；发展了针对柔性嵌段高分子相行为研究的自洽场理论，开展了具有复杂链拓扑结构嵌段高分子聚集态结构演变的理论模拟研究，阐释了链拓扑结构对嵌段高分子聚集态结构的调控规律，明晰了有序-有序结构转变的物理成因；发展了粗粒化分子动力学模拟方法，提出了利用多嵌段共聚物在溶液中聚集制备高对称性补丁粒子的新手段，获得了具有不同对称性的补丁粒子，明晰了这些补丁粒子的形成机理；建立了有效描述高分子软补丁粒子的高效计算机模拟模型，预测了软补丁粒子形成的高级有序结构，提出通过改变粒子硬度及表面相互作用来调控聚集态结构的新思路。在SCI收录期刊发表8篇代表性论文，SCI统计他人引用193次，20篇核心论文，SCI统计他人引用298次。

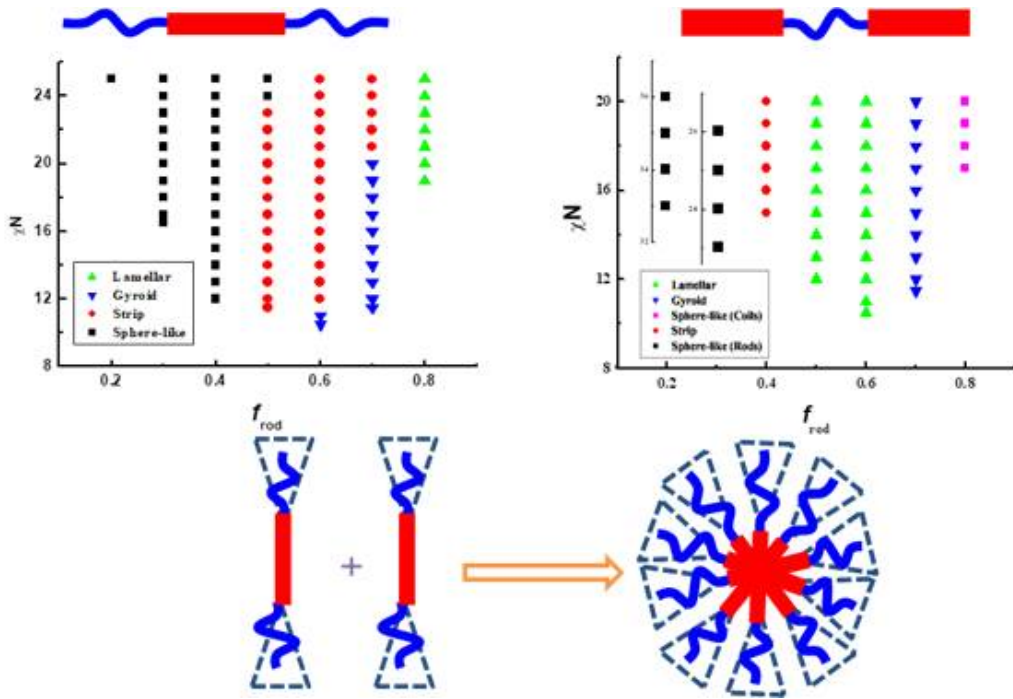


图1：含刚性嵌段高分子的理论预测相图及嵌段排列

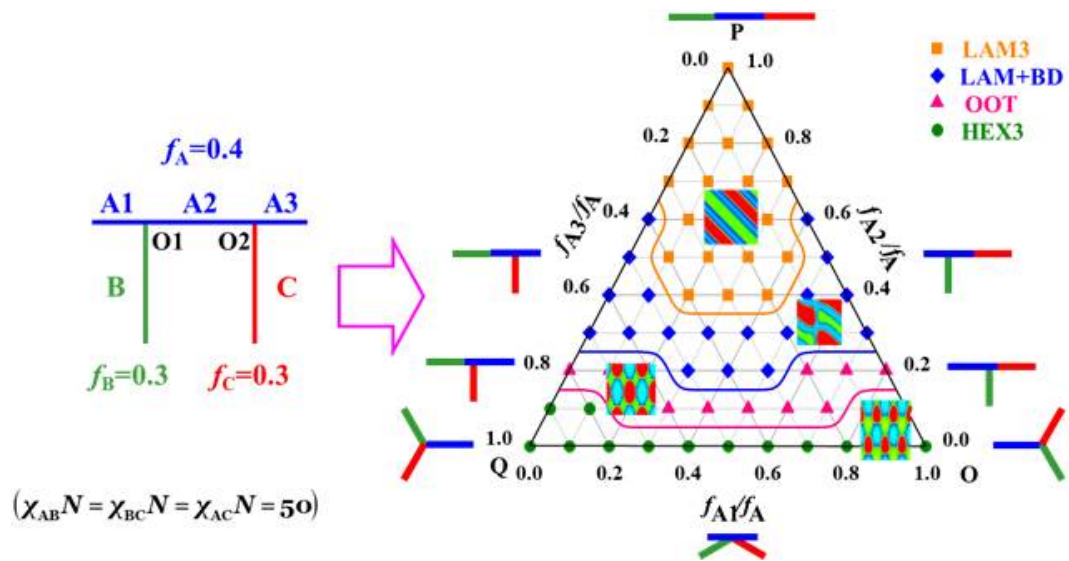


图2：链结构对高分子聚集态结构影响规律的理论预测相图

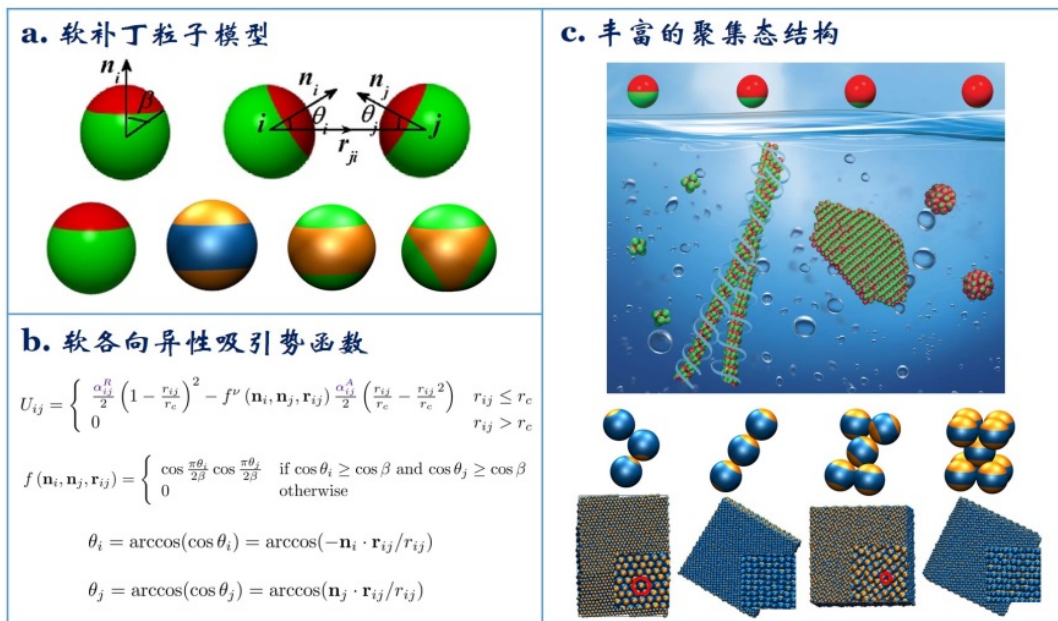


图3：高分子软补丁粒子模型及其聚集态结构的理论预测

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