
“机器学习”为多功能全亲水界面材料设计提供新思路

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/42257.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！

“机器学习”为多功能全亲水界面材料设计提供新思路。近日，大连理工大学教授韩璐璐团队在机器学习赋能自分层功能涂层研究中取得新进展。团队建立了差异相互作用驱动的自分层机制，使全亲水涂层在不依赖疏水屏障和强界面能差异的条件下，实现结构稳定性与快速界面水传输的协同，相关成果发表在《先进功能材料》。

自分层涂层材料通过不同组分的空间分层在单一界面中集成润湿调控、抗污染、分离和生物界面调节等功能，在油水分离、水处理、抗污染表面和生物材料界面等领域具有广泛应用潜力。传统自分层涂层通常依赖表面能差异、聚合物不相容性或疏水组分实现不同组分的界面分层，但这类分层机制往往伴随内部应力积累，并可能因形成疏水屏障而限制水分子快速传输。如何在保持涂层结构稳定性的同时，实现高效界面水传输，一直是自分层界面材料领域面临的重要挑战。

针对这一问题，团队受到无膜细胞器动态分层结构的启发，提出了差异相互作用驱动的自分层机制。团队以单宁酸（TA）与二元共聚物为材料体系，建立了一步式高通量制备与机器学习稳定性预测相结合的材料筛选平台。基于614个TA-共聚物涂层构建实验数据集，并利用机器学习对6300种TA-共聚物理论配方进行预测筛选，最终获得稳定性达到99.8%的优选配方。随后，团队结合配方组成与分子相互作用分析发现，涂层稳定性并非取决于分子间作用力的增强，而是与相互作用强度及其差异程度密切相关。该研究进一步表明，机器学习不仅能够用于大规模配方稳定性预测，还能够辅助识别材料组成与涂层稳定性之间的构效关系，为自分层功能材料的理性设计提供数据驱动的指导。

在此基础上，研究团队筛选获得了超亲水TA/PSA自分层涂层。该体系采用一步式制备方法，可直接构筑于不同类型基底表面，在无需引入传统疏水屏障的情况下兼顾结构稳定性与快速界面水传输。在大孔基底上实现了超过99%的油水分离效率，水流量最高达到 $1.8 \times 10^5 \text{ L} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{bar}^{-1}$ ，优于同类型已报道材料。并且，对于高黏度原油/水体系，水回收率超过90%。此外，该涂层表现出抗污和抗凝血性能，体现了其在复杂油水分离及血液接触界面中的多功能应用潜力。

通过融合仿生层级组织、高通量材料筛选与机器学习预测，本研究为稳定、高效传质的多功能全亲水界面材料设计提供了新思路，为其在油水分离、界面抗污及生物界面调控等领域的应用奠定了基础。（来源：中国科学报孙丹宁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/adfm.77477>

作者：韩璐璐等 来源：《先进功能材料》

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](https://www.iikx.com)转发