

利用多物理场仿真研究水凝胶与超分子作用

潘绍丰, 栾兴龙, 安琪*

1. 中国地址大学（北京），材料科学与工程学院。北京市海淀区学院路29号，100083

简介:生物体一些活性因子受到调节，从而产生动态的时空浓度梯度，这是非常重要的一个过程。

本研究工作受扩散过程中快速可逆的超分子结合作用调控浓度梯度的启发，探究在接有环糊精的水凝胶基质中，客体分子偶氮苯的扩散受超分子结合的影响。

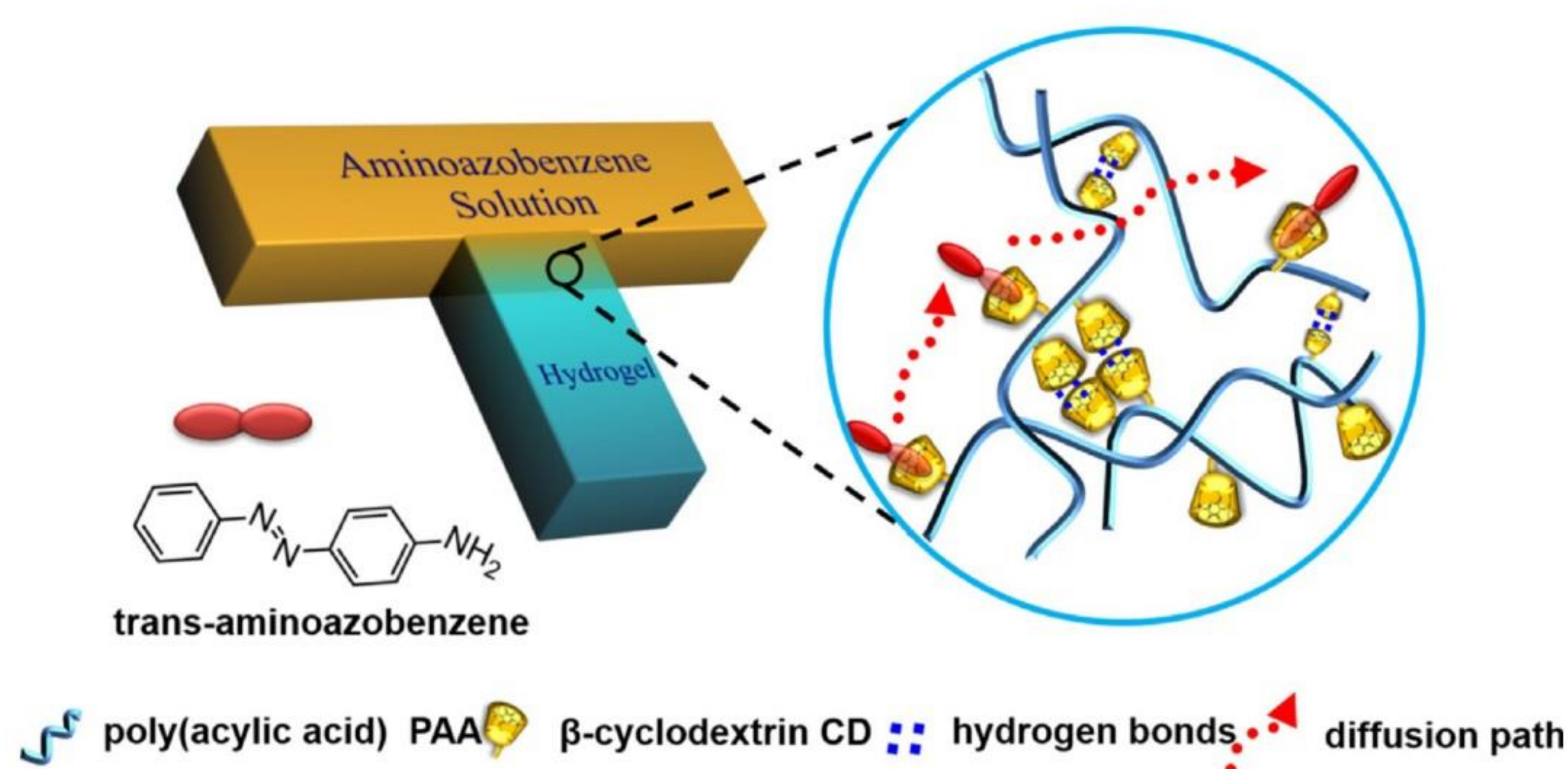


图 1. 对氨基偶氮苯在beta-CD接枝PAA水凝胶中的扩散行为

计算方法:

模拟过程运用了COMSOL Multiphysics 5.2中化学反应工程下的稀物质传递模块。

其中用到了如下的扩散公式:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_i \nabla c_i) = 0$$

建立一个长5mm、宽2mm、高0.5mm的三维几何体，作为水凝胶基底的模型。然后将2*0.5mm截面的某一面设置为具有恒定浓度的边界，其物质为对氨基偶氮苯，作为对氨基偶氮苯溶液与水凝胶的边界。

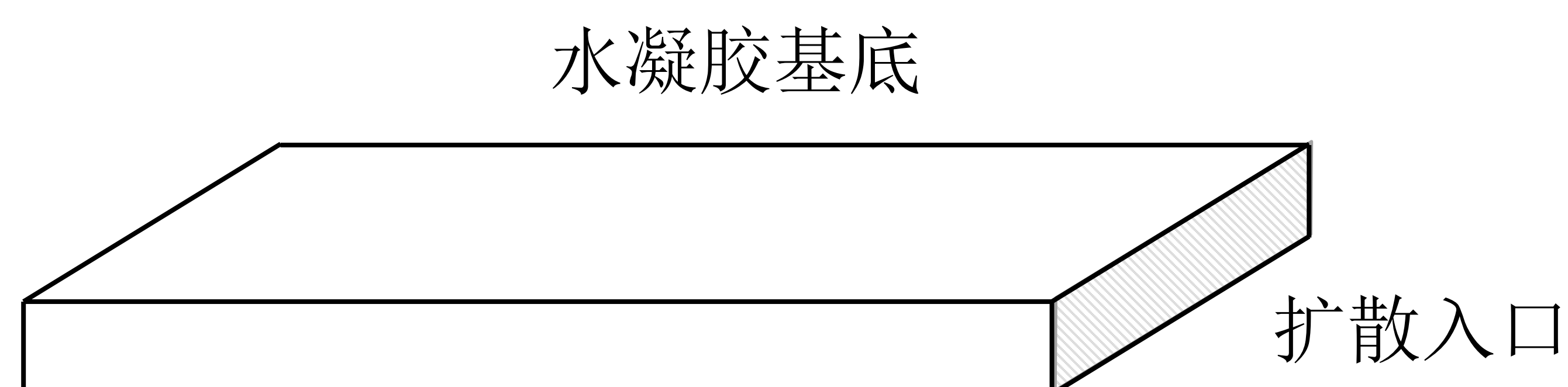


图 2. 水凝胶基底的几何模型

结果:仿真结果对比了扩散系数分别为 $5.0 \times 10^{-11} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ （对应反式对氨基偶氮苯）以及 $1.0 \times 10^{-10} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ （对应常规扩散）对应的扩散行为的差别，可以看出，前者经过90小时后仍然能够保持生物体尺度（4mm）上的浓度梯度分布，而后者已经很微弱了。

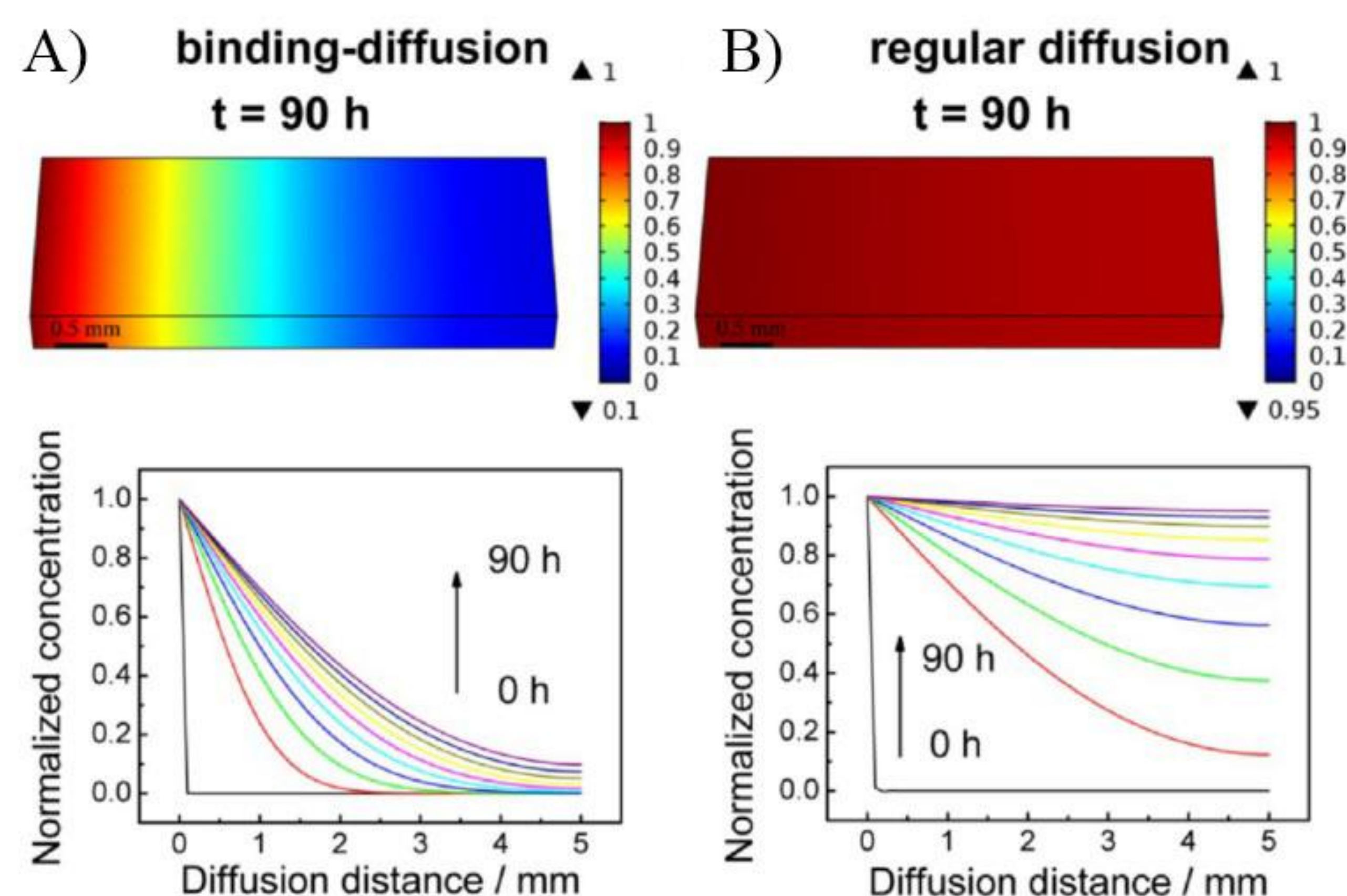


图 3. A) 90小时的反式对氨基偶氮苯的扩散模拟（上），以及对应的时空浓度曲线（下）； B) 90小时的常规扩散模拟（上），以及对应的时空浓度曲线（下）。

结论:通过仿真研究工作，我们认识到在超分子作用的调控下，扩散行为本身可以表现出较为理想的时空浓度梯度。该特性可以应用于一些人造仿生材料，并且可以加深人们对于生物体内超分子与扩散之间深层关系的理解。

参考文献:

1. X. L. Luan, Y. H. Zhang, J. Wu, P. Jonkheijm, G. T. Li, L. Jiang, J. Huskens, Q. An, ChemistryOpen 2016, 5, 331-338.