第 四 季 度 工 作 报 告

（2018.10-2018.12）

http://ps-lab.ciac.cas.cn

目　　录

一、研究工作进展..... 1

主要论文.....1

主要进展.....4

二、学术交流..... 27

高分子科学系列讲座.....27

交流活动.....29

高分子物理与化学国家重点实验室（长春）

2019年2月2日

一、研究工作进展

实验室 2018 年四季度在 *SOFT MATTER, POLYMER, POLYM CHEM-UK, ORG ELECTRON, MACROMOLECULES, J PHYS CHEM B, MATER CHEM C, J MATER CHEM B, IND ENG CHEM RES, COMPOS SCI TECHNOL, CHEM SCI, CHEM MATER, CARBOHYD POLYM, ANGEW CHEM INT EDIT, ADV MATER INTERFACES, ADV MATER* 等 SCI 收录杂志上发表学术论文 69 篇，其中影响因子大于 3 的 22 篇(实验室为第一单位)。

主要论文

1. Sandwich-like fibers/sponge composite combining chemotherapy and hemostasis for efficient post-operative prevention of tumor recurrence and metastasis

   Zhiyun Zhang, Gaizhen Kuang, Shan Zong, Shi Liu, Haihua Xiao, Xuesi Chen, Dongfang Zhou*, Yubin Huang*

   ADV MATER, 30(49), 1803217, 2018

2. Mechanism and effect of polar styrenes on scandium-catalyzed copolymerization with ethylene

   Bo Liu, Kening Qiao, Jian Fang, Tiantian Wang, Zichuan Wang, Dongtao Liu, Zhigang Xie, Laurent Maron*, Dongmei Cui*

   ANGEW CHEM INT EDIT, 57(45), 14896-14901, 2018

3. Vertical step-growth polymerization driven by electrochemicalstimuli from an electrode

   Jian Zhang, Jia Du, Jinxin Wang, Yanfang Wang, Chang Wei, Mao Li*

   ANGEW CHEM INT EDIT, 57(51), 16698-16702, 2018

4. Nanoscale mixed-component metal-organic frameworks with photosensitizer spatial-arrangement-dependent photochemistry for multimodal-imaging-guided photothermal therapy

   Xiaohua Zheng, Lei Wang*, Ming Liu, Pengpeng Lei, Feng Liu, Zhigang Xie*

   CHEM MATER, 30(19), 6867-6876, 2018

5. Realization of high-power-efficiency white electroluminescence from a single polymer by energy-level engineering

   Shiyang Shao, Shumeng Wang, Xiushang Xu, Yun Yang, Jianhong Lv, Junqiao Ding*, Lixiang Wang*, Xiabin Jing, Fosong Wang

   CHEM SCI, 9(46), 8656-8664,2018

6. Triazatruxene-based small molecules with thermally activated delayed fluorescence, aggregation-induced emission and mechanochromic luminescence properties for solution-processable nondoped OLEDs
   Yonghong Chen, Shumeng Wang, Xiaofu Wu, Yuxiang Xu, Hua Li, Yang Liu, Hui Tong*, Lixiang Wang*
   J MATER CHEM C, 6(46), 12503-12508, 2018
7. Spontaneous form II to I transition in low molar mass polybutene-1 at crystallization temperature reveals stabilization role of intercrystalline links and entanglements for metastable form ii crystals
   Yongna Qiao, Fei Yang, Ying Lu , Peiru Liu, Yuesheng Li, Yongfeng Men*
   MACROMOLECULES, 51(20), 8298-8305, 2018
8. Red-emitting thermally activated delayed fluorescence polymers with poly(fluorene-co-3,3 '-dimethyl diphenyl ether) as the backbone
   Yun Yang, Lei Zhao, Shumeng Wang*, Junqiao Ding*, Lixiang Wang
   MACROMOLECULES, 51(23), 9933-9942, 2018
9. Strain sensing behaviors of stretchable conductive polymer composites loaded with different dimensional conductive fillers
   Jianwen Chen, Hua Li, Qizhou Yu, Yanming Hu, Xihua Cui, Yutian Zhu*, Wei Jiang*
   COMPOS SCI TECHNOL, 168, 388-396, 2018
10. Strategy to improve the characterization of chitosan by size exclusion chromatography coupled with multi angle laser light scattering
    Yu Kang, Xiaoxue Wu, Xiangling Ji*, Shuqin Bo, Yonggang Liu*
    CARBOHYD POLYM, 202, 99-105, 2018
11. Copolymerization of ethylene with styrene catalyzed by a scandium catalyst
    Shihui Li, Meiyan Wang, Dongmei Cui*
    POLYM CHEM-UK, 9(38), 4757-4763, 2018
12. One-step solvent-free strategy for covalently attached, substrate-independent transparent slippery coating
    Guangyu Zhang, Bang Liang, Zhenxing Zhong, Yan Huang, Zhaohui Su*
    ADV MATER INTERFACES, 5(20), 1800646, 2018

13. A study of polyethylene glycol backfilling for enhancing target recognition using QCM-D and DPI
Yanqiu Du, Jing Jin*, Wei Jiang*
J MATER CHEM B, 6(39), 6217-6224, 2018

14. Bacterial adaptability of enzyme and pH dual-responsive surface for infection resistance
Xianghong Wang, Lingjie Song*, Jie Zhao, Rongtao Zhou, Shifang Luan*, Yubin Huang, Jinghua Yin, AtherFarooq Khan
J MATER CHEM B, 6(46), 7710-7718, 2018

15. General patchy ellipsoidal particle model for the aggregation behaviors of shape- and/or surface-anisotropic building blocks
Zhanwei Li, Youliang Zhu*, Zhongyuan Lu, Zhaoyan Sun*
SOFT MATTER, 14(37), 7625-7633, 2018

16. Solid solution phenomenon in the amorphous conjugated polymer: Fullerene bulk heterojunction structure
Chi Yan, , Bei Wang, Bo Yu, Haibo Wang, Zhiyuan Xie∗
ORG ELECTRON, 62, 1-4, 2018

17. High-efficiency ternary polymer solar cells employing the solid solution as the donor phase
Chi Yana, Qingqing Yang, Bei Wang, Bo Yua, Haibo Wang, Zhiyuan Xie∗
ORG ELECTRON, 63, 109-113, 2018

18. Deep-blue emitting poly(2’,3’,6’,7’-tetraoctyl-2,7-spirosilabifluorene) simultaneously with good color purity and high external quantum efficiency
Xiushang Xu, Keyan Bai, Junqiao Ding∗, Lixiang Wang*
ORG ELECTRON, 59, 77-83, 2018

19. In-situ cooling of adsorbed water to control cellular structure of polypropylene composite foam during CO2 batch foaming process
Minggang Li, Jian Qiu, Haiping Xing, Donglei Fan, Song Wang, Sanxi Li, Zhiwei Jiang∗, Tao Tang*
POLYMER, 155, 116-128, 2018

20. Direct formation of form I' crystals in polybutene-1/polypropylene blend enhanced by cold crystallization

    Zhenxing Zhong, Huan Ge, Zhaohui Su*

    POLYMER, 156, 30-38, 2018

21. Ion polarizabilities in binary liquid mixtures of water/organic solvents

    Minglun Li, Yuyuan Lu*, Lijia An

    J PHYS CHEM B, 122(43), 10023-10030, 2018

22. Subsequent but independent cavitation processes in isotactic polypropylene during stretching at small- and large-strain regimes

    Dong Lyu, Ran Chen, Ying Lu, Yongfeng Men*

    IND ENG CHEM RES, 57(27), 8927-8937, 2018

主要进展

1. Sandwich-like fibers/sponge composite combining chemotherapy and hemostasis for efficient post-operative prevention of tumor recurrence and metastasis

Zhiyun Zhang, Gaizhen Kuang, Shan Zong, Shi Liu, Haihua Xiao, Xuesi Chen, Dongfang Zhou*, Yubin Huang*

ADV MATER, 30(49), 1803217, 2018

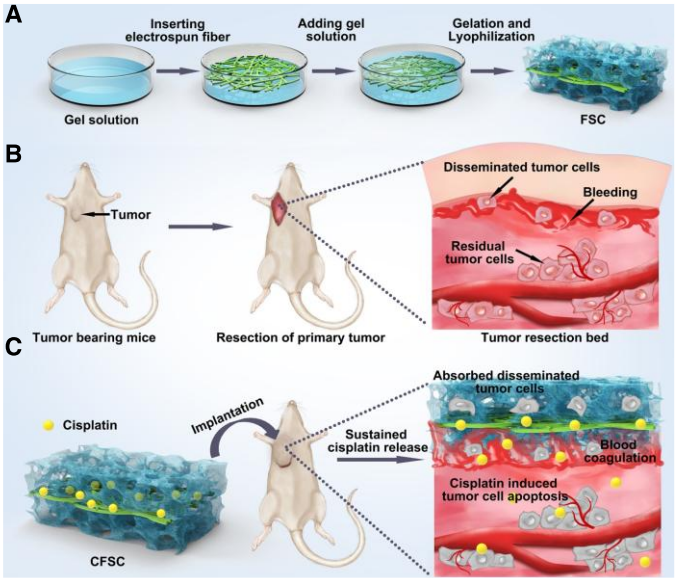
研究进展：手术切除是早期肿瘤治疗的主要手段，但肿瘤术后易出现复发与转移。传统观念认为，手术切缘残存的肿瘤细胞是肿瘤复发的主要原因。最新研究表明，不可避免的术中出血可将肿瘤细胞扩散在手术部位的血液，甚至进入全身血液循环增加循环肿瘤细胞数目，进而提高术后肿瘤原位复发和远处转移的风险。药物输送系统由于可提高肿瘤部位药物浓度、减少全身不良反应等优势广泛用于肿瘤治疗，但此前的研究均未关注到术中出血。基于此，我们尝试制备兼具止血与抗肿瘤的多功能材料用于肿瘤术后治疗。

研究内容：首先通过静电纺丝技术制备担载顺铂的 PLGA/明胶纳米纤维，然后将纤维置于明胶/壳聚糖溶液之间，冻干后得到三明治结构样电纺纤维/止血海绵复合物。体外与体内止血实验均表明所制备的复合物的止血效果明显优于市售的医用明胶海绵。将未载药复合物植入小鼠肝叶之间，材料引起的异物反应温和，无明显肝脏毒性，对血液系统无明显影响，且材料在体内逐渐降解。相对于单纯的纤维，电纺纤维/止血海绵复合物在体内外释放实验中均未出现明显的突释。组织分布可见药物主要分布在肿瘤部位，且能长时间维持较高浓度。分别

建立小鼠皮下 H22 肝癌模型和皮下 4T1-GFP 乳腺癌模型，均发现载药复合物组可显著降低复发率，无明显的系统不良反应。且 4T1-GFP 乳腺癌模型表现出载药复合物可明显降低肿瘤远处转移率。

主要科技创新与学术贡献：基于术中出血对术后肿瘤复发和转移的影响，首次制备了兼具止血与抗肿瘤的多功能材料。该体系不仅能有效止血，而且能吸附由于术中出血所扩散的肿瘤细胞，持续释放的铂药对手术切缘残存的肿瘤细胞以及吸附于材料中的肿瘤细胞进行杀伤，从而达到防复发转移的效果。该植入型材料避免了术后给药，可明显增加患者的依从性，在肿瘤术后治疗方面具有重要的研究价值。

国内外影响：本文制备了多功能的三明治结构样电纺纤维/止血海绵复合物，可同时实现术中止血与术后防肿瘤复发转移。该材料为肿瘤术后治疗提供了一个新的思路，对制备安全有效的多功能材料有一定指导意义。



Advanced Materials, 2018, **30**, 1803217.

2. Mechanism and effect of polar styrenes on scandium-catalyzed copolymerization with ethylene

Bo Liu, Kening Qiao, Jian Fang, Tiantian Wang, Zichuan Wang, Dongtao Liu, Zhigang Xie, Laurent Maron*, Dongmei Cui*

ANGEW CHEM INT EDIT, 57(45), 14896-14901, 2018

乙烯和极性单体共聚合是改善聚乙烯表面性质最直接的方法。然而，共聚单体中的极性基团常常毒化金属催化剂。因此，极性单体的插入不仅导致得到用途有限的低分子量聚合物，而且大幅降低聚合活性。上述问题大大降低了共聚合方法的实用性。通过二十多年的努力，

人们开发出一系列策略，如利用大位阻取代基团对极性基团进行屏蔽、引入长链基团将极性基团进行隔离、选用弱亲氧性的后过渡金属配合物做催化剂，已能够合成出高极性单体含量、高分子量的共聚物。然而，极性基团与中心金属配位使得乙烯难以插入，进而导致共聚合活性大幅降低的问题仍未解决。因此，如何提高聚合活性使共聚合的方法更具实用性，无疑将是乙烯和极性单体配位共聚合需要克服的难题。

我们对芴吡啶金属钪配合物催化乙烯/极性苯乙烯共聚合进行了系统研究，发现极性苯乙烯单体中给电子取代基团，如甲硫基、甲氧基等，导致共聚合活性大幅降低。令人出乎意料的是，乙烯和含有吸电子氟取代基的氟苯乙烯（2-氟苯乙烯、4-氟苯乙烯）共聚时，其聚合活性比乙烯、氟苯乙烯均聚合的活性还高。进一步选用 4-三氟甲氧基苯乙烯，2-氟-6-甲氧基苯乙烯作为共聚单体，发现即使单体中含有可与中心金属配位的氧原子（这通常导致聚合活性大幅降低），吸电子取代基团的引入也可大幅提高聚合活性。这一结果引起了我们的研究兴趣，因此，以乙烯/苯乙烯共聚合为模型反应进行了详细研究。通过对在不同温度、极性苯乙烯浓度下得到的共聚物核磁碳分析发现，当极性苯乙烯孤立插入时，可使聚合活性提高，然而，极性苯乙烯连续插入将导致聚合活性降低。此外，连续聚乙烯序列的长度不超过三个重复结构单元。DFT 计算表明，链末端及倒数第二个 4-氟苯乙烯中的苯环可与中心金属通过 ^{3} 和 ^{6} 的方式配位，导致乙烯的插入能降低；随着乙烯的插入，苯环与中心金属的配位作用消失，乙烯的插入能升高。这是因为苯乙烯上的吸电取代基团以苯环/中心金属的相互作用为介质，通过诱导效应增强了中心金属的亲电性，使乙烯的聚合活性提高。

上述发现为解决乙烯/极性单体共聚中极性单体导致聚合活性降低的瓶颈问题提供了新思路。此外，利用极性苯乙烯作为共聚单体，为合成功能化聚乙烯提供了新方向。

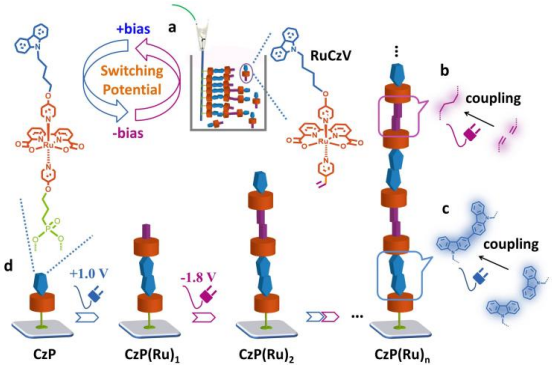
3. Vertical step-growth polymerization driven by electrochemicalstimuli from an electrode

Jian Zhang, Jia Du, Jinxin Wang, Yanfang Wang, Chang Wei, Mao Li*

ANGEW CHEM INT EDIT, 57(51), 16698-16702, 2018

通常电化学氧化和电化学还原反应被分别用于高分子的电化学合成。电化学反应进行时同时激发至少 2 个反应位点在电极表面直接制备聚合物薄膜，但是这类电化学制备的高分子的分子量分布和序列结构是不可控的。课题组首次同时利用电化学氧化和还原反应，基于电极上的自组装电活性单分子，通过简单地控制正负偏压，实现了单个反应单体可控的逐步聚合反应，并且通过紫外可见吸收光谱电化学的数据得到了验证。通过自组装单层的电化学活性单元的氧

化或者还原功能的改变，可以控制聚合物的序列结构。由于电化学反应在电极界面的双电层限制（一般认为小于 20 nm），目前这类聚合得到的聚合物长度接近 20 nm。由于咔唑 3,6-位偶联氧化强度的依赖性，这种聚合反应的拓扑结构也是可以控制的。原理上，这种聚合可以实现不同金属配合物反应单体的序列可控聚合，同时在单分子尺度上控制超薄膜的厚度。



Angew. Chem. Int. Ed. 57, 16698–16702, 2018

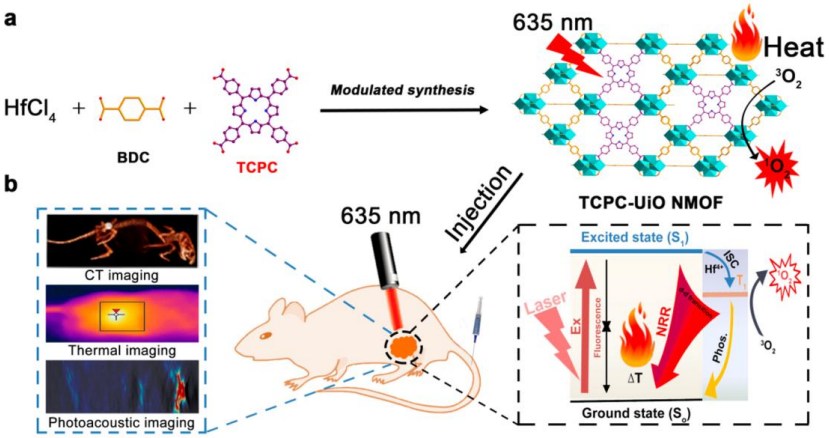
4. Nanoscale mixed-component metal-organic frameworks with photosensitizer spatial-arrangement-dependent photochemistry for multimodal-imaging-guided photothermal therapy

Xiaohua Zheng, Lei Wang*, Ming Liu, Pengpeng Lei, Feng Liu, Zhigang Xie*

CHEM MATER, 30(19), 6867-6876, 2018

光敏剂辅助的光疗，进一步分为光动力疗法（PDT）和光热疗法疗法（PTT），是一种很有前景的癌症治疗方法，其相对安全和具有微创的功能。这些治疗基于吸收照射光能量并转移到向周围的组织产生细胞毒性的活性氧（ROS）用于 PDT 治疗，或诱导局部升温用于 PTT 的热疗。自从第一个光敏剂（PS），Photofrin，被批准用于临床试验以来，卟啉衍生物及其纳米体系已被广泛研究。但是，PDT 的氧依赖性特征如何大大降低了由于肿瘤局部缺氧导致的治疗效果。金属有机骨架（MOFs）及其纳米尺度形式（NMOFs），由无机金属节点和有机配体形成的周期网络结构，可以将具有光活性的 PS 引入其骨架或孔道中，成为很有前景的治疗平台。框架的限制作用可能会抑制这些 PSs 的自猝灭和分子振动。很多基于卟啉的具有高 ROS 产生效率的 NMOF 被合成出来，最近，混合组分 MOF 或多元 MOF（MTV-MOF）的制备引起了很多人的兴趣，将多个组分引进一个结晶结构而不改变拓扑结构，这种混合成分 MOF 的出现大大增加了传统 MOF 的多样性和多功能性。混合的组分 MOF 巧妙地叠加每个组件的物理化学物质，可以实现一个完整的性能，这比每个单个组件或它们简单的加合物具

有更好的效果。混合组分策略一般要求配体衍生物具有相同的几何构型。在此，基于二氢卟酚的NMOF，称为TCPC-UiO，通过混合成分策略（TCPC，四齿材料）被制备出来。该TCPC-UiO的光化学特性及其多模式成像引导的光热抗肿瘤治疗用途被充分研究（图 1）。Hf-UiO-66 作为 Zr-UiO-66 的同构结构，由 12 个连接的构筑物构成，化学稳定性高、耐受能力强，可引入具有不同几何形状的第二配体-四齿的二氢卟酚（TCPC）以改善其光化学性质。除了 CT 成像的强 X 射线衰减能力之外，Hf 的高 Z 元素原子具有较大的自旋轨道耦合常数，可以弱化单线态到三线态禁阻，从而有效地增强系间穿越（ISC），这有利于光疗。该工作是第一次试图深入调查 TCPC-UiO 的异质特征及其光疗性能的可能的相关性。与基于二氢卟酚的通常具有增强的 PDT 的 NMOF 体系不同，我们得到的 TCPC-UiO NMOF 的光热行为在其治疗效果中占主要地位。这个纳米治疗平台不仅避免了氧气依赖性的 PDT 的严重缺陷，也为 NMOF 在生物领域的应用提供了有价值参考。



Chem. Mater. 30, 6867−6876, 2018

实验结果表明：得到的 TCPC-UiO 纳米颗粒，是较好的光热材料，并且具有 CT/光声成像能力，可用于成像指导的癌症治疗。抑瘤实验结果表明，无论是瘤内给药还是静脉给药，激光照射都能有效抑制肿瘤的生长。

5. Realization of high-power-efficiency white electroluminescence from a single polymer by energy-level engineering

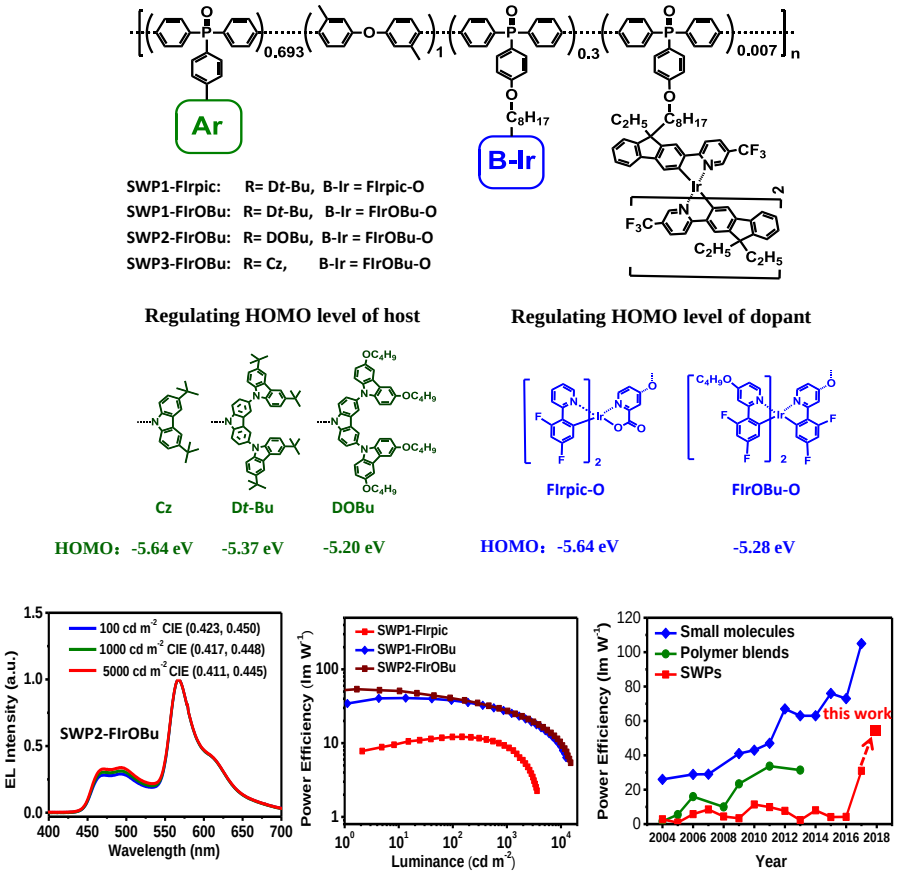
Shiyang Shao, Shumeng Wang, Xiushang Xu, Yun Yang, Jianhong Lv, Junqiao Ding*, Lixiang Wang*, Xiabin Jing, Fosong Wang

CHEM SCI, 9(46), 8656-8664,2018

单一高分子白光材料是被认为是实现白光高分子的两大途径之一。根据发光单元的激发

态特性，已形成全荧光型、荧光/磷光混合型和全磷光型单一高分子白光材料三种材料体系。其中，全磷光型单一高分子白光材料的所有发光单元均能同时利用单线态和三线态激子，具有高达 100%的内量子效率，是发展高效单一高分子白光材料的有效途径。但全磷光型单一高分子白光材料面临的问题在于器件驱动电压偏高，功率效率较低（<15 lm/W），距离实际应用（40-70 lm/W）尚有较大差距。

有鉴于此，本年度我们采用高 HOMO 能级的双极性聚芳醚高分子作为主体材料，以高 HOMO 能级的蓝光铱配合物和短激发态寿命的黄光铱配合物为掺杂剂，发展了具有低驱动电压和高功率效率特点的全磷光单一高分子白光材料，实现了器件功率效率的突破。通过采用烷氧基取代的蓝光掺杂剂提高其 HOMO 能级（从-5.76 eV 到-5.28 eV）至与高分子主体材料的 HOMO 能级（-5.20 eV）相匹配消除空穴散射效应，同时利用主体材料与电极材料（HOMO=-5.20 eV）的能级匹配消除空穴注入势垒，有效解决了全磷光型单一高分子白光材料器件驱动电压较高（>3.0 V）的问题，获得了启亮电压为 2.8 V、功率效率为 52.1 lm/W 的器件性能。



Chem. Sci., 2018, 9, 8656

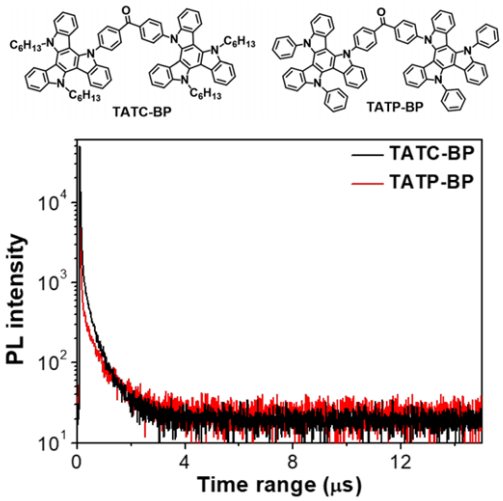
6. Triazatruxene-based small molecules with thermally activated delayed fluorescence, aggregation-induced emission and mechanochromic luminescence properties for solution-processable nondoped OLEDs

Yonghong Chen, Shumeng Wang, Xiaofu Wu, Yuxiang Xu, Hua Li, Yang Liu, Hui Tong*, Lixiang Wang*

J MATER CHEM C, 6(46), 12503-12508, 2018

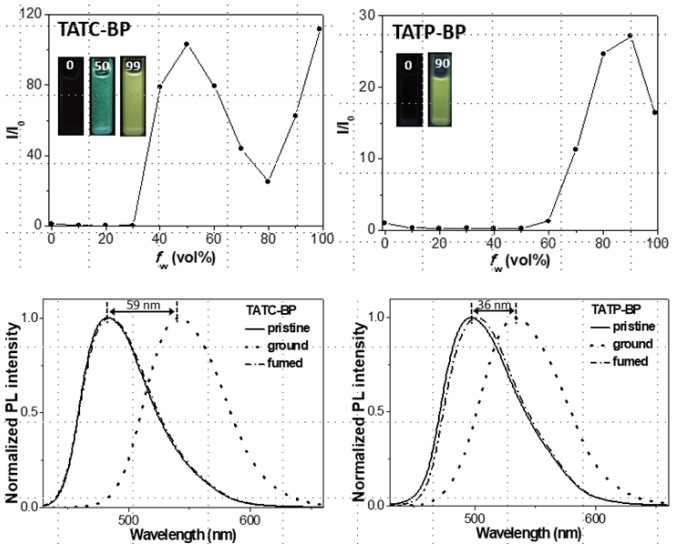
热活化延迟荧光(TADF)材料能利用第一激发三重态(T_1)重新生成的单重态(S_1)的辐射跃迁发射荧光，在电致激发中，最高具有 100%的激子利用率。目前 TADF 材料中，常使用咔唑、吖啶作为给体单元。相比于咔唑、吖啶，三聚吲哚具有更强的刚性结构，能抑制非辐射衰减过程。同时，三聚吲哚具有更强的给电子能力，与受体单元的扭转角也更大，有利于 HOMO、LUMO 的分离，实现小的ΔE_{ST}。三聚吲哚作为给体单元应用于蒸镀型 TADF 材料已经实现了 31.4%的外量子效率，充分证明了三聚吲哚作为 TADF 给体单元的发展潜力。然而，将三聚吲哚用于溶液加工型 TADF 材料的研究却未见报道。

我们采用了一种新的分子设计策略：以二苯甲酮为受体单元，三聚吲哚为给体单元，构建 D-A-D 扭曲结构的 TADF 小分子材料。这样的设计有两个主要优点：其一，D-A-D 扭曲结构有利于减弱分子间作用力，进而减弱激子浓度淬灭效应；其二，三聚吲哚外围可以引入不同的取代基，进而调节分子的光电性能。我们合成了两种不同取代基的 TADF 分子：烷基链作为取代基的 TATC-BP 和苯环作为取代基的 TATP-BP。由于外围苯环的存在，相比于 TATC-BP，TATP-BP 具有更弱的分子间作用力，这导致了两种材料不同的光电行为。



研究发现两分子同时具有 TADF、聚集诱导发射(AIE)、力致变色(MCL)行为。TATC-BP、TATP-BP 具有不同的 AIE 和 MCL 行为。TATC-BP 在 AIE 实验中呈现出颜色的变化及较明显

的 MCL 行为（研磨前后发射峰位变化 59 nm）。TATP-BP 在 AIE 实验中没有颜色的变化，研磨前后发射峰位变化也仅为 36nm。相比于 TATC-BP，TATP-BP 在非掺杂器件中体现出更低程度的效率滚降。非掺杂器件 TATC-BP 的最高 EQE 为 5.9％，1000 cd m^{-2} 下 roll-off 为 18.6%。TATP-BP 的最高 EQE 为 6.0％，1000 cd m^{-2} 下 roll-off 为 3.3%。掺杂器件中，两种材料均表现出较高的 EQE (15.9%, 15.4%) 和较低的 roll-off (1000 cd m^{-2} 下 roll-off 为 3.8%, 7.8%)。



J. Mater. Chem. C, 2018, 6, 12503—12508

7. Spontaneous form II to I transition in low molar mass polybutene-1 at crystallization temperature reveals stabilization role of intercrystalline links and entanglements for metastable form ii crystals

Yongna Qiao, Fei Yang, Ying Lu , Peiru Liu, Yuesheng Li, Yongfeng Men*

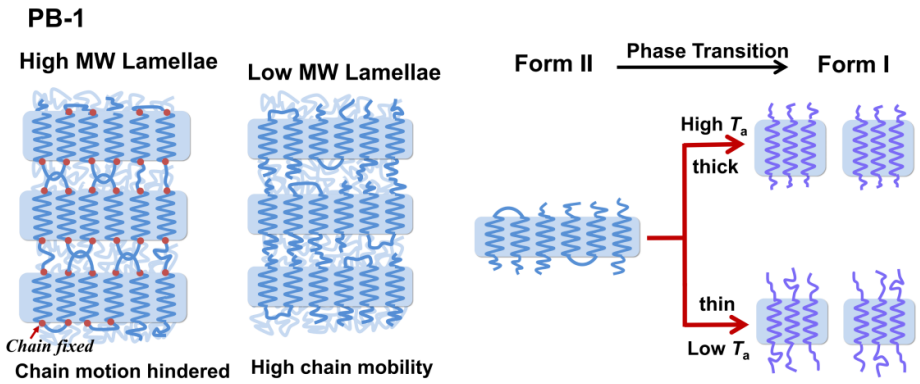
MACROMOLECULES, 51(20), 8298-8305, 2018

聚丁烯-1（PB-1）主要用作管材和薄膜，具有质韧、不生锈、耐磨损、无毒、出色的耐高温蠕变性等特点。但加工过程中其熔体降温结晶总是得到亚稳态的晶型 II，室温放置数周可自发转变为稳定态晶型 I，晶型的不稳定给其在注塑方面的应用带来了很大问题，加快晶型转变并研究其内部机理是解决问题的关键。门永锋研究组前期的研究表明，在常规分子量的工业样品中，从晶型 II 的结晶温度 Tc 到晶型转变退火温度 Tl 的降温中，晶区在链段方向的收缩较小，而非晶区具有较大的热膨胀系数，表现出较大程度的收缩，可通过片晶间联系分子产生对片晶法相方向的内应力，这种沿链方向的应力可以促进晶型 II 向晶型 I 的转变。片晶间联系分子和从 Tc 到 Tl 之间的温差（过冷度）可保证内应力的产生与传递，是确保 PB-1

快速进行 II 到 I 晶型转变的重要因素。

门永锋研究组使用了几乎不可能形成片晶间联系分子的短链低分子量 PB-1（Mw = 8203 g/mol）样品，使过冷熔体在晶型 II 的结晶温度下放置 15 分钟或 3 小时，该过程不存在由温差带来的对晶型转变的热力学驱动力，观察其结晶及晶型转变行为。发现完全不含有片晶间联系分子的低分子量 PB-1 样品在晶型 II 的结晶温度下可直接发生 II 到 I 的晶型转变，并表现出相对常规高分子量样品较快的转变速率。这个结果揭露了晶型转变中颠覆传统认知的两个很重要的方面：1) 晶型转变中的成核势垒很低，可通过热涨落过程克服，2) 高分子量样品中的片晶间联系分子有效地阻碍了晶区中链段的平移运动，使非晶区链段的松弛变得缓慢，其作用实为稳定化亚稳态晶型 II。

在低分子量的样品中，由于结晶后长周期远大于熔体中的无规线团尺寸，片晶间联系分子和缠结的含量极少，这类分子对晶区链段运动的束缚作用被移除，在晶型转变中晶区链段可以自身最大的程度运动重排，表现出明显较大的转变速率。



Macromolecules, 51(20), 8298-8305, 2018

在低分子量 PB-1 的晶型转变对退火温度的依赖性研究中，发现相同条件结晶所得的晶型 II 在不同的温度退火进行固固相转变得到的晶型 I 片晶厚度不同，高温退火可得较厚的晶型 I，这是由于热力学总是倾向于生成更厚的晶体以获得更大的自由能下降，而只有在更高的温度下，更长的链才可获得克服生长势垒的运动能力，进行足够快速的晶型转变。

8. Red-emitting thermally activated delayed fluorescence polymers with poly(fluorene-co-3,3'-dimethyl diphenyl ether) as the backbone

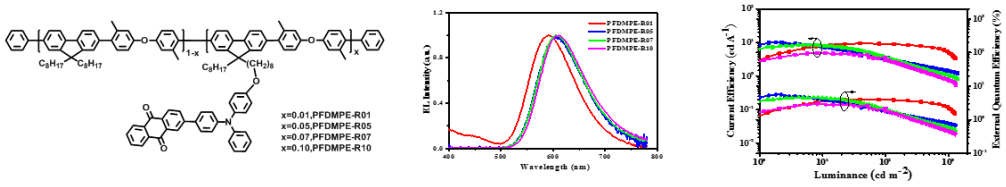
Yun Yang, Lei Zhao, Shumeng Wang*, Junqiao Ding*, Lixiang Wang

MACROMOLECULES, 51(23), 9933-9942, 2018

热活化延迟荧光材料是第三代发光材料，因其具有较小的单/三线态能极差(ΔEST)，应

用到有机发光二极管(OLED)中，电激发产生的三线态激子能够有效地反向系间窜越到单线态，从而实现 100%的内量子效率，既突破了第一代发光材料内量子效率 25%的限制，又能避免第二代发光材料贵金属的利用。这类 TADF 小分子一般采用真空蒸镀工艺来制备器件，存在材料损耗严重、工艺复杂，成本较高等问题。因此，面向低成本的印刷 OLED 显示，发展具有良好溶液加工性能的 TADF 聚合物，引起了学术界和产业界极大的研究兴趣。但是，目前报道的 TADF 高分子发射集中在 470 - 600 nm 区间，缺少 600 nm 以上的 TADF 高分子，而 600nm 以上的发射在面板显示中起着重要的作用。

为了实现红光 TADF 高分子，我们的策略是采用主客体互相影响较小的侧链型聚合物结构：采用三苯胺为给体，蒽醌为受体作为热活化延迟荧光单元（TPA-AQ），通过烷基链以侧链的形式接到主链上，主链同时起到主体的作用。这样的设计有两个主要优点：其一，主链采取了二甲基二苯醚扭曲的结构，提高主体的三线态能级，抑制三线态能量回传，利于提高效率；其二，所选客体的吸收光谱和主体的发射光谱具有较好的重叠，利于主体到客体的能量转移。我们通过 suzuki 聚合合成了一些列含有不同发光单元比例的红光 TADF 聚合物 PFDMPE-Rs，其中红光单元含量为 5%的聚合物 PFDMPE-R05，器件性能最佳。其非掺杂器件，最大电流效率为 10.3 cd / A， 最大外量子效率为 5.62%， 突破了传统荧光 5%的局限，最大发射为 606 nm，色坐标为(0.57, 0.42)，实现了发光波长大于 600 nm 的红光发射。



Macromolecules **2018**, *51, 9933−9942*

9. Strain sensing behaviors of stretchable conductive polymer composites loaded with different dimensional conductive fillers

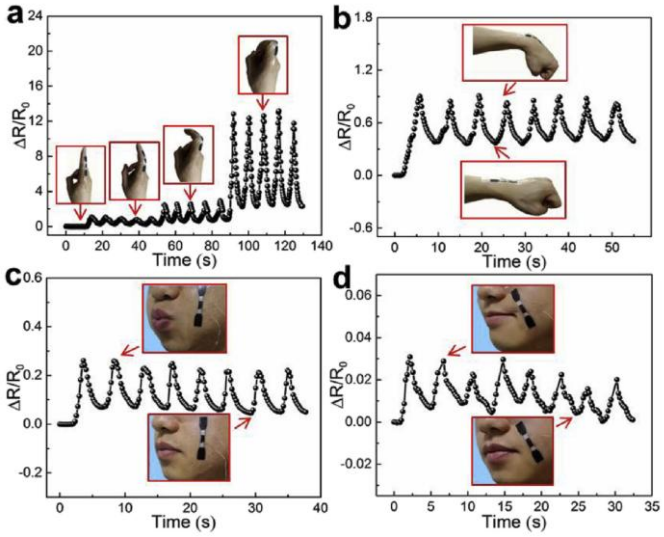
Jianwen Chen, Hua Li, Qizhou Yu, Yanming Hu, Xihua Cui, Yutian Zhu*, Wei Jiang*

COMPOS SCI TECHNOL, 168, 388-396, 2018

高分子导电复合材料（CPCs）在拉伸作用下，内部导电网络发生相应改变,材料导电性能也随之改变，具有敏感的应变响应行为，因此可用作应变传感材料,并广泛应用于可穿戴器械、电子皮肤、人体健康监测等领域。虽然 CPCs 拥有十分优异的特性（如加工容易、成本较低等），但在应变传感材料应用中仍有许多基本问题尚未清晰，如应变过程中导电网络如何

演变及其影响因素。这些未解决的基本问题极大的限制了高分子基应变传感材料的应用与推广。

针对以上问题，我们制备了零维的炭黑（CB）、一维的碳纳米管（CNTs）以及二者不同质量比的 CNTs/CB 杂化填料填充的异戊橡胶基（IR）高分子导电复合材料，并对材料的应变传感行为进行研究。我们发现，CB/IR 复合材料内的导电网络较松散，CB-CB 的接触点在拉伸和回复过程中极易被破坏和修复，因此，CB 填充 IR 复合材料的灵敏性较高，应变传感行为的重复性较好。然而，CB/IR 复合材料的缺陷是导电逾渗阈值较高，加工性能较差。CNTs 具有大的长径比，在高分子基中极易形成导电网络，材料的导电性能优异。然而，导电网络中存在的缠结现象又使其材料的应变灵敏性低，应变传感行为的重复性较差。CNTs/CB/IR 材料弥补了 CNTs/IR 材料的应变灵敏性低、应变传感行为的重复性较差和 CB/IR 材料的导电性能差等缺点，并且能够灵敏的监测到人体关节运动和面部表情变化，可作为应变传感材料应用于可穿戴器械领域，如图所示。



Compos. Sci. Technol. 168, 388–396, 2018

10. Strategy to improve the characterization of chitosan by size exclusion chromatography coupled with multi angle laser light scattering

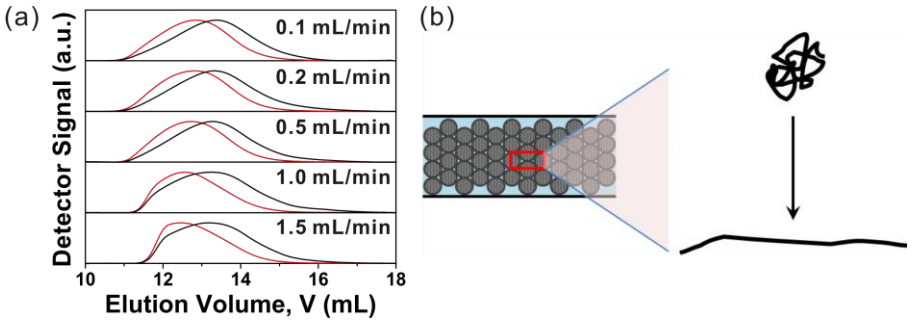
Yu Kang, Xiaoxue Wu, Xiangling Ji*, Shuqin Bo, Yonggang Liu*

CARBOHYD POLYM, 202, 99-105, 2018

壳聚糖具有良好的生物相容性、生物可降解性和生物活性，是一类重要的天然高分子。通常利用体积排除色谱（SEC）表征壳聚糖的分子量和分子量分布，文献中已有一些报道。然而壳聚糖是一种聚电解质，其分离条件与中性高分子不同，为了准确表征壳聚糖的分子量

和构象，必须优化壳聚糖的 SEC 分离条件。

通过表征分子量为 33–427 kg/mol 的 10 个壳聚糖的分子量，优化高分子进样浓度和流动相流速，建立了利用体积排除色谱与多角激光光散射联用（SEC-MALLS）准确测定壳聚糖分子量的方法。发现：（1）壳聚糖进样浓度必须低至 0.1-0.2 mg/mL，以避免色谱柱超载；（2）对于所用的填充 8 微米填料的色谱柱，流动相流速不能超过 0.5 mL/min；（3）在高流速下，高分子量壳聚糖的分子量分布会发生偏移；（4）高分子量壳聚糖的异常流出行为是由于色谱分离模式发生了从体积排除色谱到障碍色谱的转变，源于壳聚糖分子链在流经色谱柱时发生的从无规线团到伸直链的构象转变。



Carbohydrate Polymers, 202, 99-105, **2018**

结果表明：对于分子构象比中性高分子更加扩展的壳聚糖，SEC 必须在合适的进样浓度和流动相流速下，方可得到样品准确的分子量和分子量分布，这一结果对于其它聚电解质的表征也具有重要的参考意义。

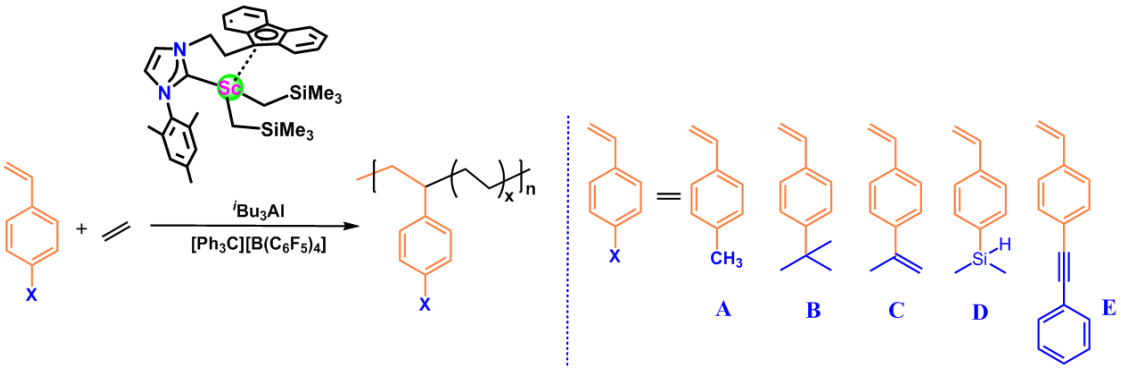
11. Copolymerization of ethylene with styrene catalyzed by a scandium catalyst

Shihui Li, Meiyan Wang, Dongmei Cui*

POLYM CHEM-UK, 9(38), 4757-4763, 2018

乙烯和苯乙烯类单体是世界生产量和消费量非常大的两类单体，由这两类单体构成的聚合物更是占据了人类工作和生活的方方面面。为此，人们一直想将这两类单体进行共聚合，制备各种乙烯-苯乙烯类共聚物。但是，乙烯和苯乙烯类单体的聚合活性差异如此之大，以至于通常的自由基聚合法、阳离子和阴离子聚合法以及利用齐格勒-纳塔催化体系的配位聚合法，都无法使乙烯和苯乙烯类单体有效共聚合。直到 1997 年，陶氏化学才利用限制几何构型茂钛催化剂首次实现了乙烯与苯乙烯的准无规共聚合，之后一系列钛锆类催化体系被开发出来。2004 年日本的侯召民课题组，利用单茂钪稀土催化剂首次实现了乙烯与苯乙烯的间规立构、无规共聚合。但是，能够催化乙烯与苯乙烯准无规共聚合的稀土催化体系，一直没有

被开发出来。在本工作中，我们发现限制几何构型稀土钪催化剂，对苯乙烯均聚合几乎没有催化活性，但是其能够催化乙烯与苯乙烯类单体准无规共聚合，从而制备出一系列不同苯乙烯含量的乙烯-苯乙烯无规共聚物。



工作创新点主要表现在：1）报道了首例乙烯与苯乙烯准无规共聚合稀土催化体系；2）合成了一系列乙烯-苯乙烯类单体准无规共聚物。

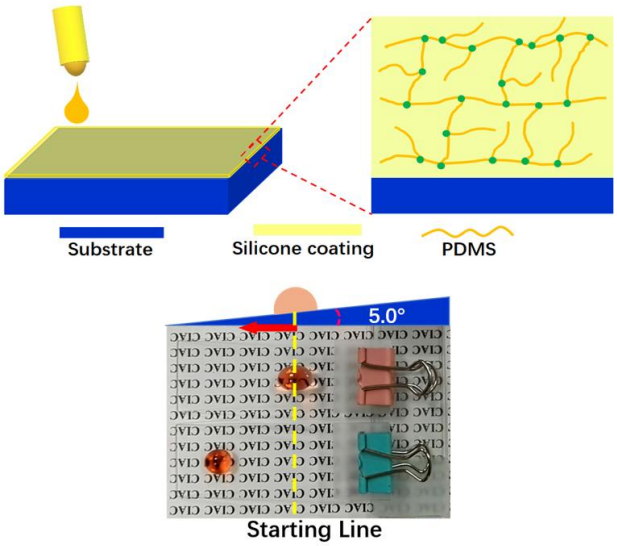
12. One-step solvent-free strategy for covalently attached, substrate-independent transparent slippery coating

Guangyu Zhang, Bang Liang, Zhenxing Zhong, Yan Huang, Zhaohui Su*

ADV MATER INTERFACES, 5(20), 1800646, 2018

润湿性是固体材料表面的重要性质，液体灌注型超滑表面材料是新近出现的具有特殊润湿性材料，在仿生、抗污、抗雾、抗冰、抗指纹、传热、生物材料等许多方面的应用具有重要意义，得到了广泛的关注，成为材料科学领域的一个热点。但由于灌注的液体容易流失，导致表面的润湿性质发生退化，而且文献报道的构建方法大多比较复杂，并只适用于特定的基底材料、缺乏普适性，因此难以实际应用。

我们报道了的一种简单的方法，能够快速地使不同材料的表面具有水滴超滑性。利用单、双乙烯基封端的 PDMS 与含氢硅油的交联作用，在不锈钢、铝片、玻璃、聚碳酸酯等材料表面能够一步形成透明的交联复合物薄膜，其中单端固定在基底骨架上的 PDMS 分子，与骨架材料的适宜硬度相结合，使材料表面具有低迟滞疏水效应。该方法使用的 PDMS 及含氢硅油等原料均是商业化产品，液体分子与骨架之间采用化学键链接，不会流失，因此表面润湿性长期稳定；制备过程无需使用任何有机溶剂，完全无毒、绿色、环保。制备时不需要复杂的仪器设备，整个反应只需一小时即可完成，简单快速。而且由于涂层无色透明的特性，这种薄膜也可以作为防水涂层在透明材料表面沉积使用。



13. A study of polyethylene glycol backfilling for enhancing target recognition using QCM-D and DPI

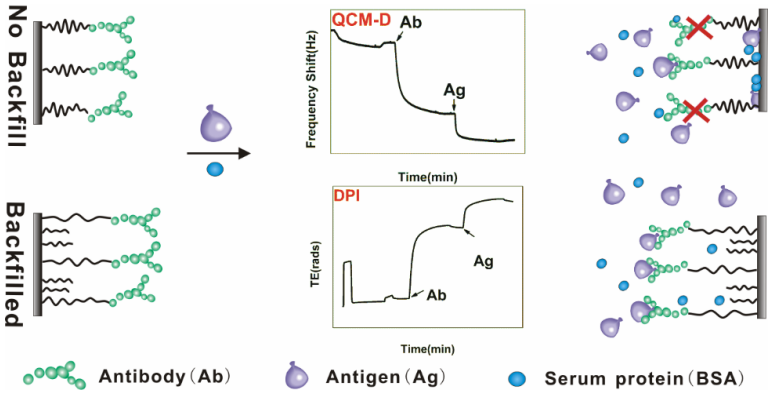
Yanqiu Du, Jing Jin*, Wei Jiang*

J MATER CHEM B, 6(39), 6217-6224, 2018

载体种类的广泛性、形貌的多样性以及多种功能化方法的可选择性使得功能化载体在靶向给药、药物释放、特异性识别等领域有着巨大潜在应用。当粒子与生物环境（如血液）接触时，体液中存在的蛋白质（如血清白蛋白和免疫球蛋白等）能够在粒子表面形成吸附的蛋白质分子层，即蛋白质电晕现象。这些电晕蛋白质掩饰纳米粒子，使其丧失特异功能。因此，如何保持固定在载体表面特异性蛋白质的活性的同时减小其他血浆蛋白质的电晕现象，是当前制备功能化载体的核心科学问题。

基于以上存在的问题，我们的研究思路就是在复杂的生理环境体系中，设计构建功能性载体时，考虑两个重要的问题：一个方面是维持功能蛋白的天然构象，另一方面是减少非特异性蛋白的吸附。PEG 具有无毒，强的亲水性，分子链柔顺等特点，被选作是改善生物相容性的绝佳聚合物。实验设计中选用长链 PEG 和短链 PEG 结合构建双功能载体。长链 PEG 位于平台的上层，用于维持生物分子天然构象，保持其生物活性。短链的 PEG 位于平台的下层，用于回填载体表面裸露的地方，减少非特异性蛋白吸附，维持生物分子功能性。结果表明，双功能层的载体表面能够在复杂的环境下，得到高性能载体：长链 PEG_{24} 用于固定生物分子，维持其天然构象，远离载体表面；短链 PEG_4 用于回填空白的载体表面，减少非特异性蛋白的吸附。研究发现，载体的生物活性与 PEG_4 和 PEG_{24} 比例密切相关，即随着回填短链 PEG 含量的增大，蛋白的生物活性越好；在 PEG_4:PEG_{24}=9:1，双功能层生物分子活性达到最优，

对于双功能性载体构建提出关键性因素。同时，对于较为复杂的干扰蛋白 BSA 存在条件下，回填的短链可以在一定程度上维持抗体的特异性识别能力。这种双功能层的构建思想，可以直接推广至 SEBS 和聚丙烯等聚烯烃体系，为聚烯烃材料的生物功能化及酶联免疫分析奠定了基础。



J. Mater. Chem. B, 6, 6217-6224, 2018

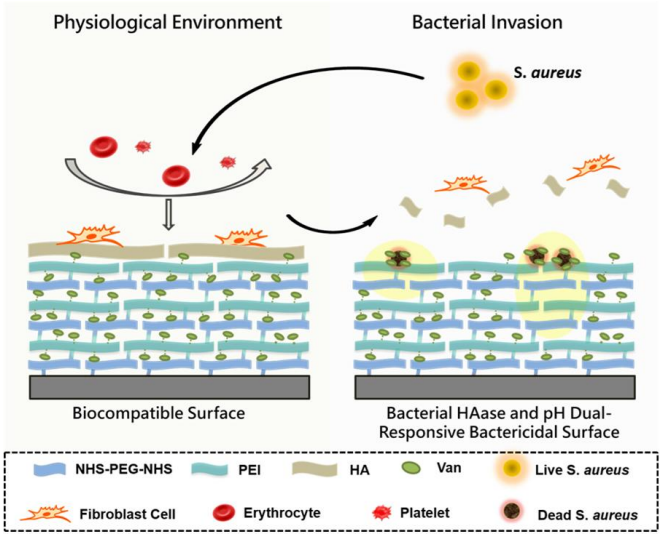
14. Bacterial adaptability of enzyme and pH dual-responsive surface for infection resistance

Xianghong Wang, Lingjie Song*, Jie Zhao, Rongtao Zhou, Shifang Luan*, Yubin Huang, Jinghua Yin, AtherFarooq Khan

J MATER CHEM B, 6(46), 7710-7718, 2018

病原性细菌所引发的感染严重威胁人类健康和社会发展。耐药菌的产生极大增加了治愈的难度，成为全球人类健康的重要挑战。目前，抗生素的使用仍然是人类对抗细菌感染的强有力武器。常用的抗生素负载方式主要有物理负载和静电吸附等。但它们均存在着生理环境下稳定性差（离子强度、盐浓度），抗生素易渗出，易诱发细菌产生耐药性，降低疗效等问题。因此，精确控制抗生素释放量，是减少耐药菌产生和提高治疗效果的有效策略。

我们利用细菌在局部表面粘附时会造成局部区域的酸化以及细菌在繁殖中分泌的透明质酸酶等特性，通过层层自组装，β-羧酸酰胺键固定万古霉素(Van)，静电吸附透明质酸(HA)等步骤，构建出具有生物相容性-细菌酶/pH 响应型智能杀菌表面。该表面在正常生理条件下，由于表层 HA 的存在，具有较好的生物相容性；一旦细菌感染发生，细菌分泌的透明质酸酶(HAase)量以及表面局部酸化程度会自动诱发表层 HA 的降解以及 β-羧酸酰胺键断裂，按需释放出 Van 杀菌，且可以避免抗生素的过量使用，降低耐药菌产生的机率。



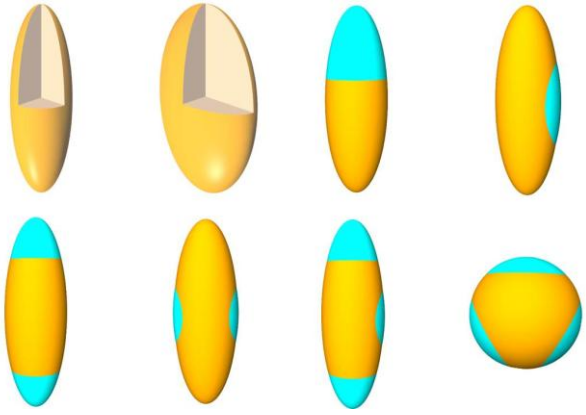
J. Mater. Chem. B, 2018, 6, 7710—7718

15. General patchy ellipsoidal particle model for the aggregation behaviors of shape- and/or surface-anisotropic building blocks

Zhanwei Li, Youliang Zhu*, Zhongyuan Lu, Zhaoyan Sun*

SOFT MATTER, 14(37), 7625-7633, 2018

如何合理设计并制备得到具有特殊功能的纳米结构始终是材料科学的核心目标之一。各向异性构筑基元为新材料设计和开发注入了新的活力。针对同时具有形状和表面各向异性特性的聚合物胶体体系，基于最通用的二轴 Gay-Berne 模型和 Kern-Frenkel 模型，我们发展了一系列简单、通用且高效的补丁椭球粒子模型。我们的模型能够非常有效地模拟二轴椭球粒子体系以及不同长径比椭球粒子的混合体系。而且，椭球粒子表面的补丁数目、补丁比例和补丁排列方式同样是任意可调的。该模拟模型及方法为各向异性软物质体系自组装、液晶以及结晶行为研究提供了一套切实可行的模拟方案。



Soft Matter, **2018**, 14, 7625-7633

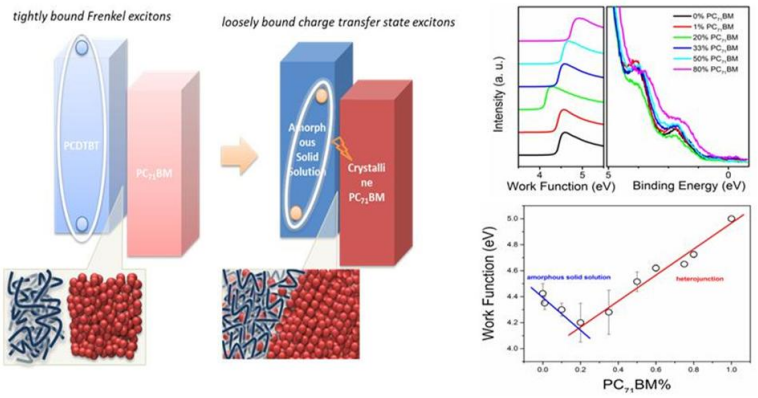
16. Solid solution phenomenon in the amorphous conjugated polymer: Fullerene bulk heterojunction structure

Chi Yan, , Bei Wang, Bo Yu, Haibo Wang, Zhiyuan Xie*

ORG ELECTRON, 62, 1-4, 2018

聚合物太阳能电池研究初期，科学家普遍认为，体相异质结是由给-受体两种材料相互混合后发生相分离，从而形成连续的互传网络结构。随着研究的深入，越来越多的实验现象不能用这个简单的模型进行合理的解释。研究人员发现，体相异质结的微观组成可能要比已有的模型更为复杂。随着研究的深入，大量的研究结果表明，聚合物和富勒烯衍生物之间存在着可混性，这与聚合物和富勒烯衍生物是否结晶无关。这种结论表明，在体相异质结中，除了存在给/受体各自形成的纯相以外，还存在一种新的结构。进一步的研究结果表明，相比于聚合物和富勒烯衍生物，这种新的结构的许多性质，如载流子迁移率，能级，吸收/发射光谱等都发生了明显的变化。这个新结构可能在决定有机太阳能电池性能方面起到非常重要的作用

为了研究固溶体的性质，本工作以经典的的无定形共轭聚合物 PCDTBT 作为给体材料，并与 $PC_{71}BM$ 结合形成体相异质结结构，利用紫外光电子能谱和电化学循环伏安方法，证明这种新的结构是一种由富勒烯衍生物溶解在聚合物中形成的固溶体，并研究其吸收和光致发光等性质。通过制备场效应晶体管和肖特基二极管可以分别得到 PCDTBT：$PC_{71}BM$ 固溶体中载流子的类型，迁移率和载流子浓度。进一步通过电导-温度依赖关系可以得到其中载流子的传输方式以及相应的活化能。通过制备与 C_{60} 组成的双层太阳能电池研究其光伏性质，并建立电学性质与光伏性质之间的联系。



• PCDTBT与少量$PC_{71}BM$共混可形成固溶体结构，导致体系有效功函数降低。

• 进一步增加$PC_{71}BM$含量形成固溶体/ $PC_{71}BM$相分离结构，体系功函数升高。

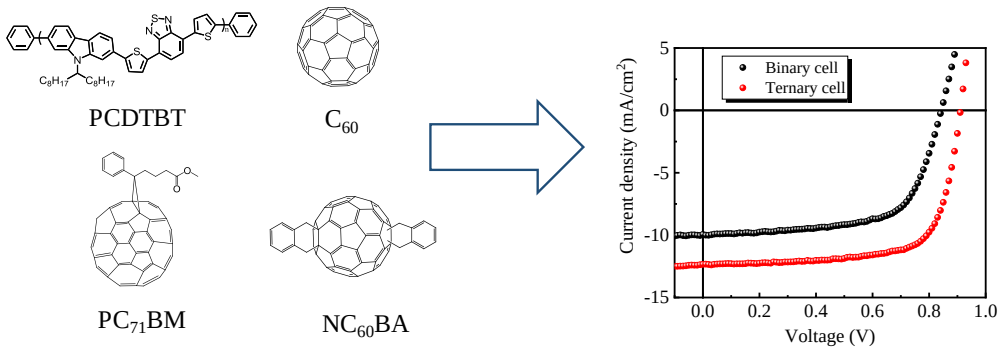
结果发现，PCDTBT：$PC_{71}BM$ 固溶体的 $PC_{71}BM$ 含量低于 20%，与纯 PCDTBT 的性质明显不同。与纯 PCDTBT 薄膜相比，PCDTBT：PC71BM 固溶体薄膜具有更低的 HOMO 能级，更高的载流子迁移率，更低的陷阱密度。众所周知，报道的高效 PCDTBT：$PC_{71}BM$ 体相异质结聚合物太阳能电池通常在 $PC_{71}BM$：PCDTBT 比率大于 3：1 的情况下实现。基于这些结果，我们推测 $PC_{71}BM$ 的一部分与 PCDTBT 良好地混合以形成固溶体相，而其它 $PC_{71}BM$ 在 PCDTBT：$PC_{71}BM$ 体相异质结聚合物太阳能电池中形成纯 $PC_{71}BM$ 相。此外，是 PCDTBT：$PC_{71}BM$ 固溶体，而不是纯 PCDTBT 作为给体相与 $PC_{71}BM$ 相形成互穿网络。PCDTBT：$PC_{71}BM$ 固溶体相有利于增加 V_{OC} 并增强电荷收集，从而导致 PCDTBT：$PC_{71}BM$ 体相异质结聚合物太阳能电池的高 PCE。

17. High-efficiency ternary polymer solar cells employing the solid solution as the donor phase

Chi Yana, Qingqing Yang, Bei Wang, Bo Yua, Haibo Wang, Zhiyuan Xie∗

ORG ELECTRON, 63, 109-113, 2018

传统观点认为，在典型的体相异质结体系中，给体和受体为纳米级纯相分离。目前，聚合物/富勒烯衍生物之间共混性已得到学术界的普遍认可，其中，聚合物的自由体积足够大，能够容纳富勒烯衍生物的插入。聚合物主链与富勒烯衍生物碳球之间的足够强的相互作用以及热力学和动力学的推动，是形成两者共混的基础。研究也发现，富勒烯衍生物中碳球的大小，聚合物和富勒烯衍生物中侧链的长短和空间位阻等，都会影响两者之间共混性。特别是富勒烯衍生物的结晶性能对两者共混性能影响巨大。其中，非晶的富勒烯衍生物更容易溶进聚合物内，而结晶的富勒烯衍生物倾向于析出形成纯相。此外，研究人员还对这种共混后的产物的性能，进行了各种分析、测试和表征，研究了其能级的变化，载流子传输性能，激子产生和分离，吸收和发射光谱的改变，以及对相分离形态结构的影响等诸多方面。我们最近的研究发现，无定形给体聚合物，PCDTBT，当 $PC_{71}BM$ 的质量分数在共混膜中不超过 20%时，可与结晶 PCDTBT 形成固溶体。与纯 PCDTBT 薄膜相比，这种 PCDTBT：$PC_{71}BM$ 固溶体显示出更深的 HOMO 能级和更优异的电荷传输性能，并且进一步推测在实际中 PCDTBT：$PC_{71}BM$ 固溶体代替纯 PCDTBT 与 $PC_{71}BM$ 形成互穿网络体异质结聚合物太阳能电池。基于这一想法，用一种具有更优异电性能的新型固溶体取代 PCDTBT：$PC_{71}BM$ 体异质结聚合物太阳能电池中的 PCDTBT：PC71BM 固溶体可进一步提高其光伏性能。



我们研究了 PCDTBT 和无定形富勒烯双加合物，氢化萘基-C_{60} 双加合物（$NC_{60}BA$）形成的的新固溶体。发现基于 $NC_{60}BA$ 的固溶体可以有效地提高所得膜的载流子密度，而基于 $PC_{71}BM$ 的固溶体可以增强激子的解离。最后，在 PCDTBT：$PC_{71}B$ 体异质结聚合物太阳能电池中引入少量非晶 $NC_{60}BA$ 组成三元体异质结聚合物太阳能电池，其功率转换效率接近 8%。

18. Deep-blue emitting poly(2',3',6',7'-tetraoctyl-2,7-spirosilabifluorene) simultaneously with good color purity and high external quantum efficiency

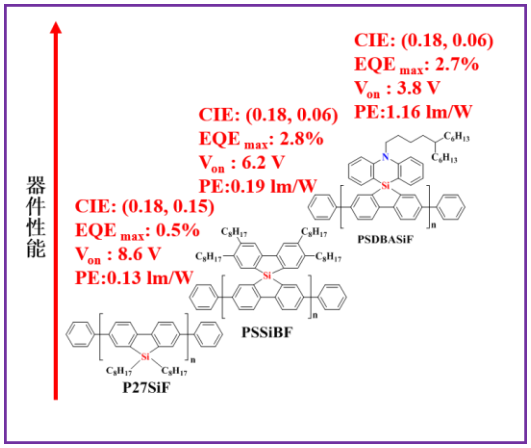
Xiushang Xu, Keyan Bai, Junqiao Ding*, Lixiang Wang*

ORG ELECTRON, 59, 77-83, 2018

聚螺硅芴具有优秀的光谱稳定性，是一类有应用潜力的蓝光高分子材料。但是碳-硅键键长大于碳-碳键，导致分子易于聚集，发光光谱出现长波的拖尾现象，荧光量子效率低，蓝光色纯度差。利用螺位连接可以增大分子间距离、减少分子聚集的结构特点，发展了系列深蓝光螺硅芴高分子发光材料, 具体内容如下：

1.采用螺位连接抑制分子间聚集的策略，设计合成了聚 2,3,7,8-四辛基-5,5-螺硅芴蓝光高分子 PSSiBF。和模型高分子 P27SiF 相比，色坐标由(0.18, 0.15)蓝移到（0.16, 0.06），实现了深蓝光发射，优化后器件的最大外量子效率达到 2.8%。

2.针对 PSSiBF 空穴注入势垒过大的问题，通过氮杂原子的引入，设计合成了蓝光高分子 PSDBASiF，HOMO 能级由-6.10 eV 提高至-5.62 eV 。在保证色坐标基本不变的前提下，PSDBASiF 器件实现了低驱动电压和高功率效率，启亮电压为 3.8 V，功率效率为 1.16 lm/W;



Jounal of Material Chemistry C, 2018,**6**, 9599-9606　Organic Electronics, 2018, **59**, 77–83

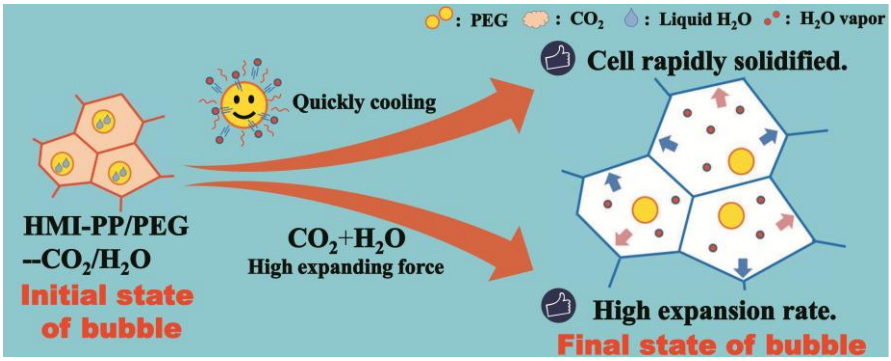
19. In-situ cooling of adsorbed water to control cellular structure of polypropylene composite foam during CO2 batch foaming process

Minggang Li, Jian Qiu, Haiping Xing, Donglei Fan, Song Wang, Sanxi Li, Zhiwei Jiang*, Tao Tang*

POLYMER, 155, 116-128, 2018

聚丙烯（PP）泡沫具有使用温度高、比模量大、可降解的特点，是聚乙烯和聚苯乙烯泡沫的良好代替品。目前，针对 PP 发泡的研究报道主要侧重于对熔体强度及发泡过程成核与生长的控制，对于发泡过程中冷却定型阶段的控制问题的关注与研究很少。实际上，由于 PP 为结晶型聚合物，其 CO_2 发泡的冷却定型阶段较非晶型聚合物更难以控制。目前国际上 CO_2 静态（釜式和模压）发泡生产 PP 泡沫，一次发泡倍率难以超过 40 倍；挤出发泡制备的泡沫片材厚度难以超过 5mm。出现这些限制的主要原因是发泡后泡孔结构的形成使导热系数明显降低，其内部热量不能及时移除，导致泡孔出现并孔或塌陷。因此，探索发泡体内原位冷却方法，调控 PP-CO_2 发泡的冷却定型过程，对于发泡材料的基础研究和实际应用均具有重要意义。

本文在高熔融指数聚丙烯（HMI-PP）中分别加入三种亲水填料，用釜式法进行发泡。结果表明亲水填料的加入起到发泡成核的作用并增强 HMI-PP 复合粘度和储能模量，这有助于提高泡沫的稳定。值得注意的是，由于含有亲水物使 PP 复合物发泡过程中具有吸水性，导致 PP 中发泡剂(CO_2 +水)总吸附量明显增加。因此，与纯 PP(如 HMI-PP)相比，HMI-PP/亲水填料复合材料的体积膨胀率显著提高。另外，在发泡过程中，吸收水迅速蒸发吸热，有助于减少泡沫样品内部温度，促进泡沫的硬化并最终稳定泡孔壁，防止泡孔的合并和崩溃。因此，在釜式发泡过程中，PP 中亲水物的加入，明显改善 PP 的可发泡性能，提高发泡倍率，改善泡孔结构，提高泡沫内外层均匀性。



Polymer. 155, 116-128, 2018

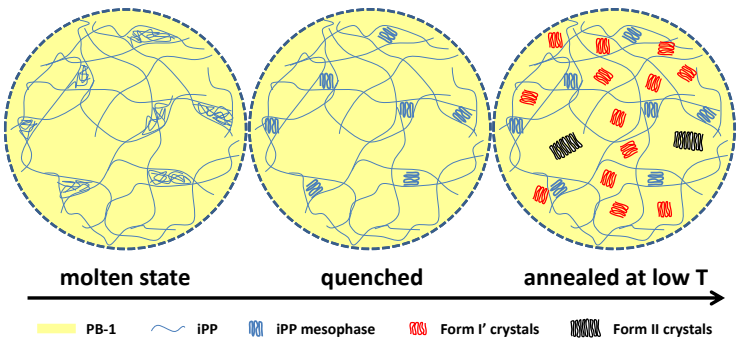
20. Direct formation of form I' crystals in polybutene-1/polypropylene blend enhanced by cold crystallization

Zhenxing Zhong, Huan Ge, Zhaohui Su*

POLYMER, 156, 30-38, 2018

聚-1 丁烯(PB-1)具有突出的抗蠕变性、耐环境应力开裂性以及优异的抗冲击性能，广泛应用于管材、薄膜、纤维和电缆绝缘体材料等领域。但是 PB-1 材料从熔体状态结晶会形成不稳定的晶型 II，在室温放置过程中会自发的转变为晶型 I，转化过程很慢且伴随材料收缩变形等问题，所以加速其晶型转化或者直接从熔体降温形成晶型 I 或 I'具有重要意义。人们发现可以简单地通过与聚丙烯（iPP）共混使 PB-1 直接形成晶型 I'，但只有加入大量的 iPP（一般多于 50% wt）才有明显的效果，因此其实际意义有限。另一方面，PB-1/iPP 共混体系的结晶行为非常复杂，iPP 影响晶型 I'形成的机理仍然有待于进一步的研究。

我们用少量的 iPP（10% wt）与 PB-1 共混，对其进行两步退火，通过冷结晶成功地使其中的 PB-1 主要形成晶型 I'。我们用原位红外光谱方法跟踪共混体系的结构演化过程，发现 iPP 对 PB-1 的空间限制是导致其形成晶型 I'的主要原因，如图所示。该方法只需加入少量的 iPP 就能抑制晶型 II 的生长，使 PB-1 形成晶型 I'为主的结构，因此具有良好的应用前景。



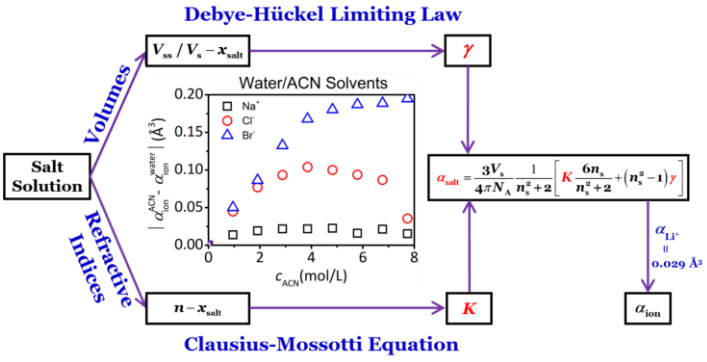
21. Ion polarizabilities in binary liquid mixtures of water/organic solvents

Minglun Li, Yuyuan Lu*, Lijia An

J PHYS CHEM B, 122(43), 10023-10030, 2018

离子极化率在物理化学、大气科学和生物物理学当中扮演着非常重要的角色。特别地，溶液中离子极化率对于理解“特殊离子效应”也有非常重要的作用。最近，我们根据 Debye–Hückel 极限定律和 Clausius–Mossotti 方程，提出了一种全新的精准测量溶液中离子极化率的方法，该方法比传统直接外推法的准确度提高了约 20%。众所周知，溶液中无机盐及其离子的极化率受溶剂影响较为显著，溶剂效应直接影响其在实际药物分离和萃取等领域的应用。然而，到目前为止，还没有完整准确地测定离子在水–有机物混合溶剂中极化率的研究工作。

在本文中，基于 Clausius-Mossott 方程的线性表达式和 Debye-Hückel 极限定律，测量了水-乙腈、水-丙酮和水-乙醇三种溶剂中，水-有机物体积比为 9.5：0.5、9:1、8.5:1.5、8:2、7.5:2.5、7:3、6.5:3.5 和 6:4 时，LiCl、NaCl、NaBr、KBr 和 $MgSO_4$ 五种无机盐的极化率。发现随着溶剂中有机物含量增加，无机盐极化率数值呈现出非线性趋势。对于含 Cl^-的无机盐其极化率随着随 c 的变大先变大后变小；对于含 Br^-的无机盐其极化率随着随 c 的变大先变大后不变；对于 $MgSO_4$ 其极化率与 c 正相关。设定 Li^+离子极化率数值为参考数值后，得到 Cl^-、Na^+和 Br^-离子在相应溶剂中的数值，对于阴离子极化率数值，仍然呈现与包含其无机盐极化率相似的非单调变化趋势，可以看出对于无机盐溶液中极化率阴离子对其贡献占主导，而对于阳离子 Na^+得极化率数值 c 的无关。以上研究结果对共混溶液中电解质性质的理解提供了关键性的实验数据。



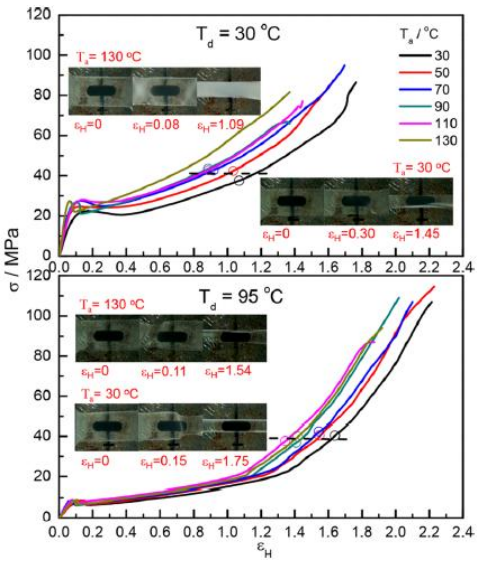
J. Phys. Chem. B 122, 10023 2018.

22. Subsequent but independent cavitation processes in isotactic polypropylene during stretching at small- and large-strain regimes

Dong Lyu, Ran Chen, Ying Lu, Yongfeng Men*

IND ENG CHEM RES, 57(27), 8927-8937, 2018

由于等规聚丙烯在低温拉伸时，往往会在屈服点前后出现应力发白行为。此应力发白行为产生后不会消失，一直伴随至材料断裂。由于大形变应力发白是发生在小形变发白之后，在前期的研究工作中聚丙烯材料均在高温下拉伸，避免了小形变应力发白行为。为了阐述小形变应力发白对大形变应力发白的影响，我们选用不同分子量的等规聚丙烯，制备不同温度下退火的样品（30-130℃），此后，于 30-125℃ 范围内拉伸该系列样品。发现分子量较小及退火温度较高的样品，在低温拉伸时，于小形变处容易出现发白。分子量较大且退火温度较低的样品，在高温下拉伸可以避免小形变发白产生。但是，大形变应力发白在任何条件下都能发生。通过计算各种条件下大形变应力发白行为所需的临界宏观应力，发现宏观应力只受等规聚丙烯分子量影响，与退火温度及拉伸温度无关。表明小形变应力发白行为对大形变应力发白并无影响。具体如下图所示：



由前期工作可知，大形变应力发白是由于体系内高度取向的非晶网络结构中纤维/微纤间承受应力的系带分子的断裂而造成的。小形变产生的空洞虽然一直存在于体系中，但是这些空洞并不属于高度取向的非晶网络结构的组成部分，即它们不对非晶网络结构的受力造成影响。因此，小形变产生的空洞最终对大形变应力发白行为并无影响。此结果表明材料在小形变处产生的空洞，其能在体系内稳定而不引起材料网络结构的破坏，因而不导致材料宏观上的破坏。

二、学术交流

高分子科学系列讲座

➲ **PSLAB283-PS2018-13**



报告题目：高效柔性太阳能电池及稳定性研究

报 告 人：李耀文　教授

报告人单位：苏州大学

报告时间：2018 年 12 月 20 日（星期四）上午 9:00

报告内容：柔性有机、钙钛矿太阳能电池是第三代太阳能电池一个重要研究领域，相关产品也是目前光伏市场的一个空白，并具有广阔的市场空间。本报告将重点围绕制备高效率、高稳定性的柔性太阳能电池的关键科学问题进行探讨。具体包括（1）发展了多种可作为有机/钙钛矿太阳能电池活性层的钝化层及界面层的功能性富勒烯材料，实现低温制备柔性太阳能电池的关键技术；（2）发展了新型网格银/高电导聚合物柔性透明复合电极材料，解决了传统柔性 ITO 电极的一系列瓶颈问题。上述工作不但有效地提高了电池效率和稳定性，也为大面积和低温柔性制备有机/钙钛矿光伏器件奠定了基础，特别是在柔性太阳能电池方面，多次创造了 10.04%（有机）、11.5%（有机）、14.2%和 18.1%（钙钛矿）的世界最高效率。（3）通过发展无机钙钛矿/有机叠层电池、全无机钙钛矿太阳能电池有效解决太阳能电池的光、热、湿度稳定性问题。

➲ **PSLAB284-PS2018-14**



报告题目：醌型有机光电功能材料研究

报 告 人：朱晓张　研究员

报告人单位：中国科学院化学研究所

报告时间：2018 年 12 月 20 日（星期四）上午 10:00

报告内容：上世纪导电高分子的发现引发了有机光电研究热潮，有机光电材料是本领域研究的核心课题，是有机光电器件性能不断提升的主要推动力。对于芳香型有机光电功能材料而言，具有醌式结构的亚稳态极化子或激发态是其光电性质的本源；醌式分子不同于芳香分子表现出独特的光电性能，如刚性平面结构，窄带隙、强吸收，高电子亲和势和独特双自由基性质等。噻吩

并[3,4-*b*]并噻吩（TbT）由于独特的并环方式，其噻吩亚单元具有阶梯式芳香性，因此可以显著增强有机共轭分子的醌式共振并有效调控其能级结构。本报告将介绍我们近期基于 TbT 构筑基元在醌型有机光电功能材料方面取得系统研究进展[1]，主要包括：TbT 醌式增强效应的起源[2]，高荧光量子产率近红外荧光材料[3]，两维π-拓展高性能醌式 *n*-型半导体（热电）材料[4]以及分子光伏给受体材料[5]。

[1] *Acc. Chem. Res.* **2017**, *50*, 1342. [2] *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 10357. [3] *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 11294. [4] *Adv. Mater.* **2016**, *28*, 8456. [5] (a) *Nat. Energy* **2018**, *3*, 952. (b) *Adv. Mater.* **2017**, *29*, 1704510.

➲ **PSLAB285-PS2018-15**



报告题目：Controlled synthesis of graphene by chemical vapour deposition

报 告 人：Dr. Zhengtang Luo

报告人单位：香港科技大学

报告时间：2018 年 12 月 24 日（星期一）下午 15:00

报告内容：Graphene and other two-dimensional (2D) layered materials have been widely synthesized by chemical vapor deposition (CVD) to obtain high quality films. We have demonstrated multiple strategies to obtain grain-size, layer number and morphology controlled high quality single-crystal graphene domains on large scale. For example, we developed a backside carbon gettering (BCG) approach for CVD growth of graphene, which regulates the nucleation of graphene domains on the top side of the Cu substrate. In addition, we have improvised the configuration of Cu foil and form a bridge-shaped geometry which generates a confined space for the CVD reaction. More recently, we demonstrated a novel way of recrystallization the polycrystalline Cu substrate surface to single-crystal Cu (111) plane through melting and resolidification phase prior to growth step. Cu (111) surface promoted the epitaxial growth of graphene during CVD and highly orientated single layer as well as bilayer graphene domains were obtained over a large area. Consequently, our multiple approaches of engineering the growth substrate paved the way toward achieving high quality single crystal graphene for high performance ultrathin optoelectronic devices.

学术交流活动

➲ 2018 年第 14 届中韩双边高分子材料科学研讨会

2018 年第 14 届中韩双边高分子材料科学研讨会于 11 月 4 日在韩国釜山举行，11 月 8 日胜利闭幕。中韩双边高分子材料科学研讨会是由中国科学院长春应用化学研究所和韩国成均馆大学（Sung Kyun Kwan University）共同发起的，旨在促进我国和韩国在高分子材料方面的发展与交流的会议。

本次研讨会中韩两国共有来自 20 余所高校和研究所的 80 余人参加。韩国科学技术院 Hee-Tae Jung 教授与中国科学院长春应用化学研究所高分子物理与化学国家重点实验室门永锋研究员共同担任大会主席。 Hee-Tae Jung 教授主持了开幕式并发表讲话。

会议共收到学术论文 80 篇，其中邀请报告 32 篇，墙报展讲 48 篇。会上双方代表就高分子材料学的若干前沿研究领域，包括光电功能高分子、生物医用高分子材料、高分子纳米材料、高分子凝胶等，进行了广泛的交流和热烈地讨论。

本次研讨会为两国高分子科学工作者提供了一个高水平的科研论坛，是一次相互学习、增进合作的大会。学者们通过交流，活跃了学术思想，结下了友谊，为未来科研方向和开展国际合作研究提供了全新的思路，打下了坚实的基础。

