# **2019年度广东省科学技术奖公示表**

# **（自然科学奖、技术发明奖、科技进步奖格式）**

|  |  |
| --- | --- |
| **项目名称** | **具有多尺度结构的功能材料化学品的结构优化设计和调控** |
| **主要完成单位** | 华南理工大学 |
| **主要完成人**  **（职称、完成单位、工作单位）** | 1.章莉娟（教授，工作单位：华南理工大学，完成单位：华南理工大学。采用计算机模拟构建了研究聚合物载药微颗粒的介观结构形成和演变的系统方法，建立了跨尺度定性和定量构效关系，提出了设计聚合物载药微颗粒多尺度结构的一般规则，设计和开发出系列新型智能响应型聚合物载体材料。代表性论文1、3、5、7、10的通讯作者，代表性论文4、9的共同作者；专利1-3的发明人。） |
| 2.钱宇（教授、华南理工大学、华南理工大学。采用计算机模拟、基团贡献法，以及定性趋势分析等方法建立聚合物载药微颗粒体系定量的构效关系模型(QSAR )，揭示微/介观结构对宏观性能的影响机制。代表性论文4、9的通讯作者，代表性论文5、6、7、8、10的共同作者；专利1的发明人。） |
| 3.奚红霞（教授、华南理工大学、华南理工大学。主要负责本项目气体吸附分离材料研究方向。构建了研究多级孔/介孔沸石和MOFs材料的介观结构形成和影响机制的计算机模拟方法，提出了材料结构建模及构效关系预测，设计和开发了系列多级孔/介孔沸石和MOFs功能材料。代表性论文6、8的通讯作者；专利4的发明人。） |
| 4.文秀芳（研究员、华南理工大学、华南理工大学。主要负责本项目特殊润湿性界面材料方向的研究。采用DPD介观模拟方法解析了选择性溶剂中聚合物胶束的形成过程，揭示了特殊润湿性界面多尺度介观结构的形成机理和影响机制，设计合成了系列具有超疏水特性的特殊润湿性油水分离材料等高性能功能材料化学品。代表性论文2的通讯作者，代表性论文10的共同作者；专利5的发明人。） |
| 5.郭新东（教授、北京化工大学、华南理工大学。将多尺度模拟应用于功能材料化学品的结构设计与调控，探索了复杂多相的化学品体系中分子间作用力的计算，从分子层面并结合实验技术揭示了结构和性能的关系。代表性论文4、9的第一作者，代表性论文1、3、5、7的共同作者；专利2,3的发明人。） |
| 6.林文静（讲师、广东工业大学、华南理工大学。探究了聚合物载药微颗粒体系多尺度定性构效关系，根据目标靶向位点特性，设计和制备了系列pH刺激响应聚合物载体材料及抗肿瘤药物递送体系，开发了制备结构明确的嵌段聚合物的工艺。代表性论文10的第一作者，代表性论文3、7的共同作者；专利3的发明人。） |
| 7.张灿阳（未取得、新加坡-麻省理工学院科研中心、华南理工大学。基于化学产品工程和药物递送体系的理论，设计合成了满足最终性能要求的一系列多肽聚合物材料，及具有主动靶向功能的纳米载药递送载体，阐明了材料结构和药物释放性能的关系。代表性论文1的第一作者，代表性论文3、7的共同作者；专利2的发明人。） |
| 8.杨友强（工程师、金发科技股份有限公司、华南理工大学。将实验技术、计算机模拟和理论分析相结合，通过系统设计和开发新型pH响应性聚合物及其胶束药物输送系统，深入探讨分子结构-介观结构-宏观性能之间的多尺度关系，揭示了分子结构和胶束结构对最终控制释放性能的影响。代表性论文3、5、7的第一作者，代表性论文1的共同作者；专利1-3的发明人。） |
| 9.陈全（讲师、昆明理工大学、华南理工大学。设计和开发了多种新型智能响应聚合物载体材料，阐明了材料的微介观结构与性能的关系，开发了多臂星型聚合物的制备技术。代表性论文10的共同作者。） |
| 10.吴颖（助理研究员、华南理工大学、华南理工大学、系统地研究了多级孔分子筛/MOFs的构效关系，包括缺陷工程在内的新型改性技术对MOFs吸附分离性能的强化机理和策略。代表性论文6、8的第一作者。） |
| **项目简介** | 本项目属于化学产品工程领域的基础研究。功能材料化学品的多尺度结构特征包括分子/原子、分子/原子聚集体和宏观材料(如颗粒、薄膜等)，而介于分子/原子和宏观材料之间的聚集体物相或表界面结构（即介观结构）是实现材料结构和工艺过程定量设计、优化和调控的一个瓶颈问题。因此，国家自然科学基金委重大研究计划“多相反应中的介尺度机制及调控”将其列为了三个关键科学问题之一，认为是材料结构设计和优化反应工艺的核心问题。这一核心科学问题包括两个方面:介观结构形成的机制是什么，介观结构怎样影响材料性能。要解决这个问题就必须掌握介观结构的形成过程、特征信息等。而介观结构通常属于纳米尺寸范围，且介观相分离的时间非常短暂，现有实验技术和时间、空间尺度较小的分子模拟还难以对其进行研究。本项目在国家自然科学基金重点/面上及重大研究计划项目、广东省自然科学基金团队项目和科技计划项目等的资助下，将计算机介观模拟方法与实验技术、理论分析相结合，以三大类具有多尺度结构特征的功能材料化学品（用于药物递送的具有智能响应性控制释放的聚合物微颗粒功能材料、用于气体吸附分离的多级孔/介孔分子筛和有机金属骨架（MOFs）功能材料、用于含油废水分离的具有特殊润湿性界面的功能材料）为案例，对其介观结构的形成机制、结构-性能关系进行了系统  和深入地研究。主要的研究成果和科学价值体现有以下几个方面：  （1）针对纳米尺度的介观结构难以实验精确观察测量的瓶颈，本项目构建了研究多尺度结构化学品介观结构形成、演变和影响机制的计算机介观模拟技术和方法，为从介观尺度认识和揭示材料结构特点提供了新的手段。  （2）建立了功能材料化学品分子结构、介观结构和宏观性能之间跨尺度的定性或定量构效关系，揭示了微介观结构对宏观性能的影响机制，总结出根据性能需求设计多尺度结构的一般规则，为新型功能材料化学品设计和制备的科学化、系统化提供理论指导。  （3）根据目标性能需求设计和开发了一系列具有自主知识产权的新型智能响应型聚合物微颗粒药物载体材料、多级孔/介孔分子筛和MOFs气体吸附分离材料、特殊润湿性界面油水分离材料等功能材料化学品，并促进了相关领域的应用基础理论和制备技术发展。  本项目在化工顶级期刊AIChE J、CES和Biomaterials、ACS Nano等期刊上发表SCI收录论文80多篇，研究成果得到学术界同行的广泛认同与肯定，SCI他引近2000次，其中，10篇代表性论文被Nature Materials、AIChE J、AFM、JACS等具有广泛影响力的期刊引用，SCI他引518次。获得国家发明专利32件、美国发明专利两件、PCT专利三件。 |
| **代表性论文**  **专著目录** | 论文1：<Self-assembled pH-responsive MPEG-b-(PLA-*co*-PAE) block copolymer micelles for anticancer drug delivery> |
| 论文2：<Inspired by stenocara beetles: from water collection to high-efficiency water-in-oil emulsion separation> |
| 论文3：<pH-sensitive micelles self-assembled from multi-arm star triblock co-polymers poly (ε-caprolactone)-*b*-poly (2-(diethylamino) ethyl methacrylate)-*b*-poly (poly (ethylene glycol) methyl ether methacrylate) for controlled anticancer drug delivery> |
| 论文4：<Dissipative Particle Dynamics Studies on Microstructure of pH-Sensitive Micelles for Sustained Drug Delivery> |
| 论文5：<pH-sensitive micelles self-assembled from amphiphilic copolymer brush for delivery of poorly water soluble drugs> |
| 论文6：<Effective Ligand Functionalization of Zirconium-Based Metal–Organic Frameworks for the Adsorption and Separation of Benzene and Toluene: A Multiscale Computational Study>. |
| 论文7：<Amphiphilic copolymer brush with random pH-sensitive/hydrophobic structure: synthesis and self-assembled micelles for sustained drug delivery.> |
| 论文8：<Adsorption and separation of ethane/ethylene on ZIFs with various topologies: Combining GCMC simulation with the ideal adsorbed solution theory (IAST)> |
| 论文9：<Core/shell pH-sensitive micelles self -assembled from cholesterol conjugated oligopeptides for anticancer drug delivery> |
| 论文10：<Structure-properties relationships of pH-responsive (PCL)2(PDEA-*b*-PPEGMA)2 micelles: Experiments and DPD simulation> |
| **知识产权名称** | 专利1：<一种具有pH响应性的两亲性共聚物刷及其制法和应用>（ZL 2010 1 0215072.X） |
| 专利2：<基于聚-β氨基酯的pH响应无规共聚物及其制法和应用>（ZL 2012 1 0087875.0） |
| 专利3：<一种pH响应/疏水基团无规共聚聚合物及其制法和应用>（ZL 2011 1 0269496.9） |
| 专利4：<一种ZSM-5型中微双孔复合分子筛的制备方法>（ZL 2013 1 0384533.X） |
| 专利5：<交联型含氟（甲基）丙烯酸嵌段共聚物及其制备与应用>（ZL 2012 1 0301027.5） |
| **推广应用情况** |  |