

# 利用多物理场仿真研究水凝胶与超分子作用

安琪<sup>1</sup>, 潘绍丰<sup>1</sup>, 栾兴龙<sup>1</sup>

<sup>1</sup>中国地质大学（北京），材料科学与工程学院

## Abstract

生命现象中存在许多复杂的时空调节机制，以便对一些生物活性因子进行合理分配。其中，最为常见的是动态的时空浓度梯度，即随着时间积累，空间各处浓度将不断地发生变化；这一过程对于生物体来说是十分重要的。

本文受生物体系中，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，报道水凝胶材料中快速可逆超分子结合调控物质浓度梯度的概念。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，产生与自由扩散不同的浓度梯度分配。

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。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；对氨基偶氮苯的两种顺反异构体与beta-环糊精的结合常数具有一定的差异，导致真实的实验结果显示两者的扩散速度差异显著。仿真结果也还原了这一差异。

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。

## Figures used in the abstract

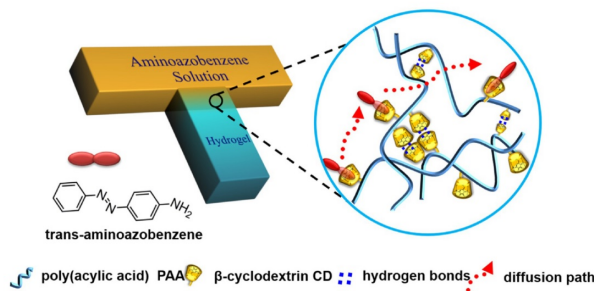


Figure 1: 对氨基偶氮苯在beta-CD接枝PAA水凝胶中的扩散行为