

基于聚合物刷的 Pickering 界面催化体系构建与热力学机制

针对化工领域多相反应的重大生产需求,本项目聚焦影响多相反应效率的反应物相际传递关键科学问题,从熵-焓平衡机制的热力学基础理论出发,优化了基于格子模型的密度泛函理论,能够很好描述固体表面聚合物刷/膜的结构特性,解释了二元聚合物刷的溶剂响应和锁定/开锁机制,从理论上阐明了熵-焓竞争协同的机理;设计并合成了一系列具有环境响应特性的亲水共聚物,发现了不同共聚物的多重响应规律,利用贻贝仿生学建立了一种通用高效的固体表面高分子接枝方法,构建了固体催化剂在油/水界面催化两相反应的多相反应系统,为 Pickering 乳液界面催化 (PIC)技术的工程化提供了新思路。研究成果突出基础理论性创新,应用前景广阔,符合国家对于化工产业绿色低碳与可持续的高质量发展方向。

本项目通过十年的积累,围绕 Pickering 界面催化体系的构建与热力学机制,完成了系统性的基础研究工作,能够为涉及界面催化体系的化工过程开发提供理论指导,研究工作产生的原创性成果,在 ChemCatChem、 Chemical Engineering Science、Langmuir 等期刊发表高水平研究论文 45 篇,与本成果密切相关的 8 篇代表性论文他引总次数达到 317 次(WOS 数据库),核心成果单篇他引最高 107 次,受到国内外同行的广泛关注,出版《密度泛函理论》专著 1 部,获中国发明专利授权 1 件,培养博士生 15 名,硕士生 20 名。该项科研成果获 2022 年度中国化工学会科学技术奖基础研究成果奖二等奖。