

界面水的分类：基于水-聚合物相互作用的亲水聚合物分子动力学模拟研究

来源: arXiv

日期: 2026-03-26

DOI: -

链接: <https://arxiv.org/abs/2603.25198v1>

【中文标题】

界面水的分类：基于水-聚合物相互作用的亲水聚合物分子动力学模拟研究

【研究背景】

本研究旨在探究水化聚合物中界面水的结构和动态特性，特别是水-聚合物相互作用对界面水的影响。

【研究方法】

通过分子动力学模拟，对七种含水量聚合物（PVA、PHEA、PHEMA、PBA、PMEMA、PEG、和PMEA）的水化结构和动态进行。研究包括：水含量依赖性、通过二面角分布表征的聚合物链波动、水与聚合物官能团之间的氢键寿命 τ_{HB} ，以及通过范德瓦耳斯相互作用能 E_{vdW} 表征的水-聚合物相互作用。模拟在干燥和平衡水化条件下进行，并分析了界面水的局部化水化壳、水分子结合和氢键网络。

【主要发现】

羟基含聚合物（PVA、PHEA和PHEMA）在干燥状态下具有相对较高的 T_g 值，且在水分化后显著降低。链波动受限，形成局部化水化壳。相比之下，PMEMA和PBA表现出较低的水含量平衡值和疏水性；尽管它们的干燥状态 T_g 值较低且对水含量依赖性较弱， τ_{HB} 也遵循阿伦尼乌斯行为，疏水聚集促进水分子的局部化。PEG和PMEA显示干燥状态 T_g 值较低，对水含量的依赖性较弱，波动更大，水分子结合较松。在 T_g 以下，水与醚或甲氧基氧原子之间的 τ_{HB} 表现出超阿伦尼乌斯行为。这些发现揭示了亲水（PVA、PHEA和PHEMA）、疏水（PMEMA和PBA）和灵活水化（PEG和PMEA），并为解释受水-聚合物相互作用控制的界面水提供了分子层面的见解。

【临床意义】

本研究为理解水-聚合物相互作用在界面水中的作用提供了分子层面的见解，有助于开发新型水化聚合物材料，并可能对药物递送和生物材料设计产生重要影响。