

12. 15 上午大会报告（三楼如意厅）

Superlattice Engineering in Giant Molecules

Stephen Z. D. Cheng

School of Emergent Soft Matter, Advanced Institute for Soft Mater Science and
Technology, South China University of Technology, Guangzhou

School of Polymer Science and Engineering, The University of Akron, Akron, Ohio
44325-3909

Inverse design and inverse thinking are critical steps in the new materials developments (materials genome approach). When we design materials with specific functional properties, we often start with independent building blocks (“mesoatoms”) which possess well-defined molecular functions and precise chemical structures. Using the “Molecular Lego” approach, we can then, in some cases with multiple steps, assemble such elemental mesoatoms together in preferred secondary structures (or packing schemes) to construct materials possessing topologically mandated hierarchical structures with desired functions. In this talk, correlating mesoatoms with mesoscale superlattices, mimicking metal alloys, a rational engineering strategy becomes critical to generate designed periodicity with emergent properties. For molecule-based superlattices, nevertheless, nonrigid molecular features and multistep self-assembly make the molecule-to-superlattice correlation less straightforward. In addition, single component systems possess intrinsically limited volume asymmetry of self-assembled spherical mesoatoms”, further hampering novel superlattices’ emergence. We demonstrate that properly designed molecular systems could generate a spectrum of unconventional superlattices. We systematically explore the lattice-forming principles in unary and binary systems, unveiling how molecular stoichiometry, topology, and size differences impact the mesoatoms and further toward their superlattices. The presence of novel superlattices helps to correlate with Frank–Kasper phases previously discovered in soft matter as well as newly discovered decagonal quasi-crystals. We envision the present work offers new insights about how complex superlattices could be rationally fabricated by scalable-preparation and easy-to-process materials in their bulk states.

中国散裂中子源与南方先进光源

李晓^{1,2}

1 散裂中子源科学中心；2 中国科学院高能物理研究所

中国散裂中子源（CSNS）是我国首台、世界第四台脉冲型散裂中子源，为基础科学前沿研究和国家重大需求领域提供了先进的中子散射研究平台。南方先进光源（SAPS）是规划中的第四代衍射极限同步辐射光源，毗邻CSNS。通过发挥同步辐射与中子散射技术的协同互补性，CSNS和SAPS将形成“强力组合”，提供更为丰富和完备的研究手段，共同支撑粤港澳大湾区综合国家科学中心和国际科技创新中心建设。报告将介绍CSNS的建设和运行情况，以及CSNS-II和SAPS的最新进展。

当小角散射遇见人工智能：如何形成科研合力？

赵丽娜

中国科学院高能物理研究所

X 射线小角散射解析方法作为同步辐射装置重要的表征手段之一，能够支撑包括生物、物理、化学、材料等基础学科研究。随着第四代同步辐射光源的建设投入使用，海量小角散射实验数据汹涌而来，为了完成科学大数据的精准挖掘，对相应的人工智能技术提出前所未有的迫切需求。那么当小角散射遇见人工智能，能够碰撞出怎样的火花？又如何形成驱动科研的合力呢？

本报告以新型药物与靶蛋白互作机制研究作为示例主线，具体阐述如何运用人工智能相关方法、并融合多尺度模拟，构建包括小角散射实验数据挖掘在内的先进同步辐射实验“智慧终端”解析计算体系。进一步建设科学用户客户端（智慧光源大脑，Intelligence Photon Source Brain -- IPSBrain），用于科学用户直接使用相关人工智能驱动的实验数据解析新方法，进而形成推动科学前沿发现的力量。这样，为科研新范式的进化给出来自小角散射、基于大科学装置的回答。

聚焦纳米尺度结构解析与表征的SAXSFocus

程薇

安徽国科仪器科技有限公司

安徽国科仪器自主研发的 SAXSFocus 小角X射线散射仪。配备高通量X射线光源和精密准直镜,确保短时间内获得高质量的散射谱数据。兼容多种样品架以及原位台,轻松实现不同模式切换,提高测试效率。同时通过典型应用案例,展示 SAXSFocus 在纳米材料、聚合物、生命科学及孔隙率分析等领域的强大研究能力,为相关领域研究提供可靠的技术支撑与创新解决方案。

SEC-SAXS 在新一代实验室小角 X 射线散射线站上的应用

宋良益
Xenocs China

尺寸排阻色谱与生物溶液小角 X 射线散射（SEC-SAXS）相结合是一种有用的技术，它能够对难以处理的样品进行结构分析，例如不稳定的生物样品和复杂的混合物，并且在当今所有最先进的生物 SAXS 同步辐射束线上得到了广泛的应用。

在这次报告中，将介绍基于新一代实验室实验室小角 X 射线散射线站的 SEC-SAXS 的成功搭建。通过直接在 SAXS 样品处进行的紫外吸收测量确保了准确的浓度测定，这对于从散射数据中直接确定分子量至关重要，并展示了即使在中等浓度下使用小体积样品，也能获得其高质量的散射数据，达到了大多数同步辐射束线上的 SEC-SAXS 样品需求水平。使研究者能够在实验室内即可进行 SEC-SAXS 测试表征样品，并且没有辐射损伤进一步方便了样品用于其他实验室内分析技术。

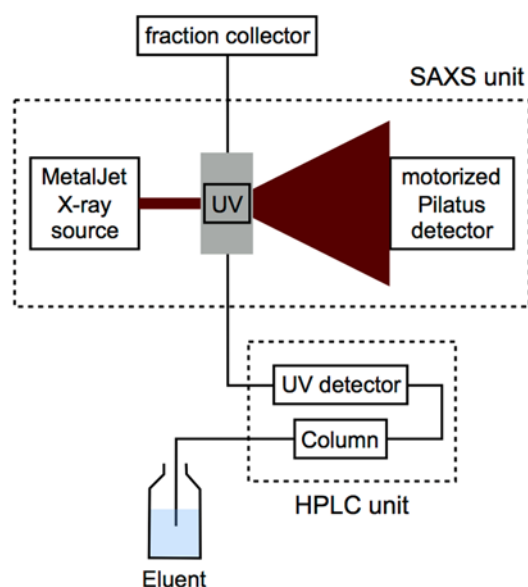


图 1. SEC-SAXS 示意图

12. 15 下午（第一分会场 V5 会议室）

Small Angle X ray Scattering at Shanghai Synchrotron Radiation Facility: From 1D to 3D and From Single-technique to Multi-technique

Fenggang Bian

Shanghai Synchrotron Radiation Facility (SSRF)

Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences (CAS),
Shanghai, China

Small angle X ray scattering (SAXS) is an important technique on some research fields, such as nanomaterials, polymers, colloids, proteins etc. Here the three running SAXS beamlines at Shanghai Synchrotron Radiation Facility (SSRF) are simply introduced at first, which are BL16B1, BL19U2, BL10U1. BL16B1 is from bending magnet for general application. BL19U2 from undulator is mainly served for liquid fields, such as proteins and colloids, which can also provide beam time for other fields. BL10U1 from undulator is Ultra-Small Angle X ray Scattering (USAXS) beamline, which is very longer (about 120m) and has larger and higher experiment hall outside the main building of SSRF and can be used more in industry. The q range of BL10U1 is from 0.0042 - 6.28nm^{-1} detected simultaneously by the three detectors for WAXS, SAXS and USAXS respectively. The micro-beam SAXS (μSAXS) with smaller beam size and higher flux have also developed in USAXS beamline. Secondly, the development of SAXS technique at SSRF is described in detailed. On the base of the these beamlines some SAXS techniques have been developed from a point SAXS called 1D-SAXS, to scanning by μSAXS called 2D-SAXS or SAXS-STXM, to SAXS-CT (3D), and from single 1D-SAXS to in-situ multi-technique of USAXS/SAXS/WAXS/Raman/IR/SALS; besides have simultaneous SAXS/WAXS, ASAXS, GISAXS, GIWAXS, CD-SAXS etc. A special SAXS beamline of Sinopec is being constructed and will be completed at the end of this year. Those experimental techniques above are discussed here. Several examples of polymer sciences are also presented.

高能同步辐射光源粉光小角线站建设进展

默广，李志宏，吴忠华，邢雪青，刘云鹏，陈中军

中国科学院高能物理研究所

高能同步辐射光源^[1]是我国十三五重点建设的重大科技基础设施之一，是由中科院高能所在北京市怀柔区建设的我国第一台第四代同步辐射光源，预计2025年12月底通过国家验收。粉光小角线站作为首批建设线站之一，将免费为我国广大科研工作者提供多维度、实时、原位的全方位小角测试服务。

报告内容主要包含粉光小角线站当前建设进展、测试能力、实验方法和未来升级等内容。小角站采用真空外平面型波荡器IAU25为插入件，基波能量可在8-12KeV范围内调节，能量带宽约1.5%。依托高能光源高能量和低发射度的优势，插入件产生的准单色基波（粉光）可直接提供测试，满足大部分用户的实验需求^[2]。利用粉光的高通量（达 10^{15} cps）优势，可开展动态散射探测或弱散射体系的探测。除粉光模式外，光束线还配置了可移入移出光路的单色器，用于开展高角分辨需求的单色光实验。光束线中还配置了三组自由切换的金刚石复合折射透镜，可对12KeV单色光进行3种模式的聚焦，满足用户开展高空间分辨等测试需求。最后，对小角站配置的三台高性能探测器的探测能力和空间分布、小角相机装置的设计和实验模式切换，多种样品环境的购置和研发等进行介绍，期望用户前来开展系统性、特色性、高水平的研究工作。

粉光小角线站的建设，将在助力我国广大小角用户开展国家科技任务、探索基础前沿科学、提升工业核心能力等方面发挥重要作用。

参考文献：

1. 潘卫民，李京祎，焦毅. 科学通报. 2024, doi: 10.1360/TB-2024-0797.
2. Zhihong Li, Quanjie Jia, Ming Li. *Instrumentation Science & Technology*. 2021, 49(5):560.

致谢：

此工作由高能同步辐射光源国家重大科技基础设施项目(2017-000052-73-01-001294)支持。

上海光源10U1线站实验方法及in-house研究介绍

张昊^{1,2}

1 中国科学院上海高等研究院；2 深圳大学低维材料基因工程研究院

上海光源10U1线站拥有极高的光子通量，能够达到每秒 10^{13} (phs/s)。线站探测包含 q 范围广泛，覆盖从 0.0042 nm^{-1} 到 32 nm^{-1} ，适用于多种结构的精确测量。时间分辨能力高达10毫秒，能够捕捉结构的快速动态变化。微聚焦模式下光斑尺寸为10微米 $\times$ 8微米，使得观察样品的精细结构，及分布成为可能。新增实验方法USAXS/SAXS/WAXS三连用装置首次满足从埃尺度-纳米尺度-微米尺度的全尺度原位在线检测表征；GISAXS/GIWAXS也以在线站成功使用，得益于线站的高通量，已实现2nm厚度多层膜表征。

此次，将结合in-house实际工作，从用户实验的视角，探讨线站用户实际碰到的实验问题及可能的改进措施，优化用户的科学研究体验奠定基础。

How to perform 2D WAXS and GIWAXS on an in-house Single-Crystal XRD

Xiaohe Miao

**Instrumentation and Service Center for Molecular Sciences
Westlake University**

As it is well known that wide-angle X-ray scattering (WAXS) analyzes diffraction signals scattered at wide angles due to sub-nanometer-sized structures in X-ray crystallography. And WAXS is similar to small-angle X-ray scattering (SAXS), but it probes smaller length scales by increasing the angle between the sample and detector.

The WAXS technique, composed of transmission and specular modes, is used to determine the degree of crystallinity and grain orientation in polymer samples, assess the chemical or phase composition of films, evaluate the texture (preferred alignment of crystallites), measure crystallite size, and detect film stress. Generally, fibers and polymers are analyzed using transmission WAXS method to investigate their microstructures.

Grazing-Incidence Wide-Angle X-ray Scattering (GIWAXS), specular mode, is a typical and powerful tool for studying the structural characteristics of films, surfaces, and nanostructured materials. It offers enhanced sensitivity to the near-surface region, allowing for the investigation of crystallinity, grain orientation, and molecular arrangement, thereby providing insights from crystal structures to the microscale.

Typically, 2D GIWAXS analysis is performed at a beamline or using SAXS equipment. However, recent developments in my lab have made 2D GIWAXS feasible with in-house single-crystal XRD systems. This advancement expands the application of single-crystal diffraction (SCD) beyond merely resolving the 3D atomic structures of single crystals. It also enhances the capabilities of various techniques, including Powder XRD, SAXS, Micro-area XRD, 2D XRD and *in-situ* XRDs etc.

Here comes some typical application cases that showcase the powerful hardware of SCD and its advancements in characterizing functional materials.

人工智能/机器学习在同步辐射小角X射线散射数据处理与分析上的应用

赵晨皓^{1,2}, 昱万程^{1,2}, 李良彬^{1,2}

1 中国科学技术大学国家同步辐射实验室; 2 安徽省先进功能高分子薄膜工程实验室

同步辐射小角X射线散射 (SAXS) 是研究高分子薄膜加工与服役过程中多尺度结构演变的有力工具。特别是, 随着同步辐射光源亮度的提升以及先进二维面探测器的技术进步, 通过时间分辨小角X射线散射原位表征可跟踪毫秒量级的快速结构演变过程。然而, 实验产生的海量SAXS数据对数据处理与分析造成了严峻的挑战。此外, SAXS散射花样为样品实空间结构在倒易空间中的映射, 因此测试结果不直观、不易被解释。

近10年来蓬勃发展的人工智能技术为解决上述挑战带来了新的机遇。国内外学者都在积极探索人工智能/机器学习在SAXS数据处理与分析上应用, 并取得了令人可喜的进展。^{1,2,3}这里, 我们以等规聚丙烯硬弹性膜 (iPP) 为例, 探索了人工智能/机器学习在SAXS数据处理与分析上的应用。具体包括: (1) 基于降维可视化分析实现结构演变幅度、结构演变路径等结构演变特征的快速提取; 开发深度学习生成模型, 建立加工参数-SAXS散射花样的映射关系, 预测给定加工参数下的iPP硬弹性膜的SAXS散射花样。⁴ (2) 开发了由物理知识驱动的深度学习生成模型SAXSNN, 可生成任意SAXS散射花样对应的实空间图像, 可帮助研究人员直观、快速地理解SAXS散射花样。⁵值得指出的是, 虽然上述研究均以iPP硬弹性膜为例, 所发展的方法框架具有良好的可通用性, 因此其应用不受具体材料的限制。

参考文献:

1. Lu, S; Jayaraman, A. Progress in Polymer Science 2024, 153, 101828.
2. Anker, A.; Bulter, K.; Selvan, R.; Jensen, K. Chemical Science 2023, 14, 14003.
3. Chen, Z.; Abdrejevic, N.; Drucker, N. et al. Chemical Physics Reviews 2021, 2, 031301.
4. Zhao, C.; Yu, W.; Li, L. Materials & Design 2023, 228, 111828.
5. Zhao, C.; Sun, S.; Zhu, J.; Han, X.; Yu, W.; Li, L. under review.

致谢:

国家自然科学基金项目 (52103288) 及国家重点研发计划项目 (2020YFA0405800) 资助。

基于深度学习的同步辐射衍射/散射降噪与在线数据解析方案研究

董政¹, 周中正¹, 李纯¹, 张一¹, 董宇辉¹

1 中国科学院高能物理研究所

新一代光源装置具备小光斑、高相干、高亮度的优势, 具有更强的空间、时间和能量分辨能力, 这推动了实验模式向高分辨率、多尺度、超快速以及动态加载或工况条件下的原位表征过渡。基于先进光源实现动态、复杂原位实验实时监测与原位环境的反馈调控, 高性能的实验站、高频率实验软件系统的闭环反馈控制、基于数据流的在线数据处理的学科算法与反馈机制缺一不可。如何利用前沿算法更好的发挥先进光源的性能, 成为了新的挑战。

为了应对海量衍射/散射数据处理与在线反馈的挑战, 我们将衍射/散射图像的物理先验知识与深度学习方法相结合, 开发了高效的去噪算法与在线数据解析深度学习模型。新的深度学习网络模型, 充分考虑了同步辐射衍射/散射的图像特点与物理原理, 与传统的自然图像去噪模型相比, 提供了一种定制的解决方案。所提出的模型在处理 SAXS/WAXD 图像时表现出更优越的性能。海量数据在线解析的效率是闭环反馈控制面对的核心问题之一, 为此我们将物理先验信息嵌入同步辐射衍射/散射数据解析中, 可以在数秒内解析近百万帧实验数据, 为相关实验的衍射/散射在线反馈调节提供了算法支撑。

未来, 我们将基于前期工作与数据积累开发面向同步辐射衍射/散射的深度学习基座模型, 以解决深度学习泛化能力与同步辐射用户样品来源与实验方法各异的挑战。结合数据采集软件框架, 以支撑同步辐射衍射/散射相关实验站的在线数据解析与反馈需求。

参考文献:

1. Zhou Z, Li C, Bi X, Zhang C, Huang Y, Zhuang J, Hua W, Dong Z, Zhao L, Zhang Y and Dong Y. A machine learning model for textured X-ray scattering and diffraction image denoising[J]. npj Computational Materials: 2023, 9(1): 58.
2. Zhou Z, Li C, Fan L, Dong Z, Wang W, Liu C, Zhang B, Liu X, Zhang K, Wang L, Zhang Y and Dong Y. Denoising an X-ray image by exploring the power of its physical symmetry[J]. Journal of Applied Crystallography: 2024, 57(3): 741-754.
3. Sun M, Dong Z, Wu L, Yao H, Niu W, Xu D, Chen P, Gupta HS, Zhang Y, Dong Y, Chen C and Zhao L. Fast extraction of three-dimensional nanofiber orientation from WAXD patterns using machine learning[J]. IUCrJ: 2023, 10(3): 297-308.
4. Wang J, Dong Z, Zhang Y, Hua W, Wang Z, Guo H, Yang Y and Bi X. StreamSAXS: a Python-

based workflow platform for processing streaming SAXS/WAXS data[J]. Journal of Synchrotron Radiation: 2024, 31(5): 1249-1256.

致谢:

感谢国家重点研发计划青年科学家项目资助（项目编号：2023YFA1609900）。

同步辐射溶液散射在核酸药物递送系统微观结构表征和质量控制中的应用

宋攀奇¹, 李豪^{1,2}, 李可萌^{1,3}, 李怡雯¹, 田强², 贺晓鹏³, 李娜¹

1 中国科学院上海高等研究院; 2 西南科技大学; 3 华东理工大学

同步辐射溶液散射 (SAXS) 技术在核酸药物递送系统 (如脂质纳米粒子, LNPs) 的微观结构表征中具有独特优势。近年来, 随着 mRNA 疫苗等核酸药物的快速发展, 对递送系统的结构研究需求大幅增加。SAXS 技术能够在溶液状态下高效分析纳米级结构, 提供核酸递送系统的整体形态、内部构造和稳定性信息, 这些信息对于优化载体设计和提高递送效率至关重要。在 LNPs 的表征中, SAXS 不仅可以探测到核酸与脂质分子组装形成的核心-壳层结构, 还能够通过与其他表征技术 (如冷冻电镜、动态光散射) 相结合, 提供从分子到纳米尺度的多层次信息^[1]。通过调节同步辐射源的强度和波长, SAXS 可以实现高分辨率的时间和空间解析, 捕捉 LNPs 在不同环境 (如 pH、温度) 的动态变化, 进而揭示其结构-功能关系。此外, SAXS 对核酸递送系统的质量控制同样具有重要作用。基于 SAXS 数据构建的数据库和模型可以实现自动化的参数拟合和结构预测^[2], 结合机器学习算法^[3], 能够对 LNPs 的形态均一性、壳层厚度、核心密度等关键参数进行高通量评估, 从而实现质量控制的标准化。这种结构信息的在线监测和分析方法为药物开发提供了可靠的质量控制手段, 有助于加快核酸药物的产业化应用进程。总体而言, 同步辐射 SAXS 在核酸药物递送系统的表征和质量控制中展现出强大的应用潜力, 将在未来推动递送系统的优化设计和新型核酸药物的开发。

参考文献:

- 宋攀奇, 张建桥, 李怡雯, 刘广峰, 李娜. 化学学报 2022, 80, p690-702.
- 李娜, 宋攀奇, 田强, 李豪, 李怡雯, 张建桥, 刘广峰. 中国发明专利 2024, 授权专利号: ZL202410885216.4
- K.Wu, X.Yang, Z.Wang, N.Li, J.Zhang, L.Liu. Briefings in Bioinformatics 2024, 25(3), bbae186.

致谢:

国家自然科学基金项目资助 (U2230115)

同步辐射散射实验方法的若干应用与实践

曾建荣^{1,2}

1 中国科学院上海高等研究院；2 中国科学院上海应用物理研究所

本报告将结合作者十多年来从事同步辐射X射线散射实验方法学及其应用方面的研究工作，介绍该方法的特点和若干具体的应用实践。实验方法包括小角X射线散射（SAXS）、广角X射线散射（WAXS）和超小角X射线散射（USAXS）及其相关衍生方法。应用实例在 高分子、金属、无机非金属等几大类材料中均有涉及。报告还将初步探讨同步辐射散射方法应用方面的前沿动态情况。

参考文献：

- 1 Zhaopeng Cao, Jinming Zhu, Jun Peng, Nan Meng, Fenggang Bian, Chaoran Luan, Meng Zhang, Yan Li*, Kui Yu*, Jianrong Zeng*. *Journal of Physical Chemistry Letters* 2022, 13, 3983-3989
- 2 Nan Meng, Jian-Rong Zeng*, Feng-Gang Bian*, Peng Rao, Kun Qian, Xiang-Yue Liu, Guang-Feng Liu, Yi-Wen Li, Feng-Yang Wu, Guo-Qi Ma, and Gan-Ji Zhong*. *Macromolecules* 2024, 57, 9189–9202
- 3 Tao Liu, Guangmin Hu, Yujie Wang, Jianrong Zeng*, Qing Dong*, Fenggang Bian, Zhaopeng Cao, Nan Meng, Jiao Zhang, Bao-de Sun. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*. 2023, 33(5): 1305-1317
- 4 Nan Meng, Jianrong Zeng*, Fenggang Bian*, Ganji Zhong, Zhongming Li, Zhaobo Sun, Jiayao Wang. *Polymer* 2021, 237: 124359
- 5 Xiaoyu Hao, Meng Chen, Linxi Wang, Zhaopeng Cao, Yan Li, Shuo Han, Meng Zhang, Kui Yu*, Jianrong Zeng*. *Chemical Communications* 2020, 56: 2031-2034
- 6 Jie Gao, Hefei Huang*, Jizhao Liu, Jianrong Zeng*, Ruobing Xie, Yan Li*. *Scripta Materialia* 2019, 158: 121-125
- 7 Baowei Zhang[#], Tingting Zhu[#], Mingyang Ou, Nelson Rowell, Hongsong Fan, Jiantao Han, Lei Tan, Martin T. Dove, Yang Ren, Xiaobing Zuo, Shuo Han*, Jianrong Zeng*, Kui Yu*. *Nature Communications* 2018, 9: 2499
- 8 Mingyang Liu, Kun Wang, Linxi Wang, Shuo Han, Hongsong Fan, Nelson Rowell, John, A. Ripmeester, Romain Renoud, Fenggang Bian, Jianrong Zeng*, Kui Yu*. *Nature Communications* 2017, 8: 15467

综合应用小角激光、X光以及中子散射研究聚合物电解质的 相分离

史伟超^{1,2}

1 南开大学化学学院; 2 南开大学物理科学学院

新一代的固态电解质材料,既要求有良好的离子传导性能,又同时需要一定的力学性能。嵌段共聚物具有天然的优势,可以同时满足这些基本要求。我们利用小角激光、X光以及中子散射,研究了锂盐LiTFSI掺杂的PPEGMEA-*b*-PS聚合物电解质在熔体中的微相分离行为。在实验中发现:随着盐浓度的增加,静电作用显著促进微相分离的发生,PPEGMEA-*b*-PS可以从无序相,转变为不同的有序相态。我们将所有实验测试结果整理为一张极不对称的相图,得到如下结论:(1)离子的静电作用显著促进相分离发生,并诱导相图的向低PPEGMEA体积分数偏移;(2)在相图右侧可以形成稳定的复杂球状相(如A15, σ 以及BCC相),以及一些动力学因素导致的亚稳态相(如液态堆积相和十二面体准晶相),但在相图左侧并没有出现这些复杂相。我们进一步结合理论,分析了静电作用和盐浓度的关系,并且分析了嵌段共聚物构象不对称性对相图的影响机制。

参考文献:

1. Shen, L.; Liu, R.; Zhou, Y.; Song, T.; Guan, Y.; Wu, X.; Wei, Z.; Chen, X.; Zhang, W.; Shi, W. *Macromolecules* 2024, 57, 5230.
2. Wu, X.; Zhou, Y.; Song, T.; Chen, X.; Shen, L.; Jiang, H.; Ke, Y.; He, C.; Yang, H.; Shi, W. *Macromolecules* 2023, 56, 2818.
3. Wu, X.; Song, T.; Wei, Z.; Shen, L.; Jiang, H.; Ke, Y.; He, C.; Yang, H.; Shi, W. *Polymer* 2022, 260, 125307.

致谢:

感谢国家自然科学基金委项目资助(T2122008, 22373052)

同步辐射衍散射智能化在线反馈系统研究

张一

中国科学院高能物理研究所

原位工况、多维度、超快衍散射实验已经成为新一代光源的常规实验。同时也带来了海量实验数据信息挖掘,高频在线反馈等一系列问题。为了在真实、复杂、动态的原位环境下,精准识别、表征样品微结构的损伤等物理现象,在快速、精准微结构损伤识别的基础上,精准调控原位环境(工艺参数),实现“检测-诊断-调控”的闭环反馈,我们开发了同步辐射衍散射基座模型。同时,发展智能调光、智能决策、智能调控、科学预警等线站智能技术,结合为新一代光源打造的面向先进光源实验的全生命周期软件系统(Mamba)与大数据流中枢系统(Mamba Data Worker),实现了面向金属增材制造的衍散射实验的在线反馈调控。

未来,我们将基于光源类大科学装置的先进表征方法,结合大数据和人工智能构建面向衍射散射技术的数据解析基座模型,应对不同工况、气氛、温度下材料跨尺度解析需求;研究深度学习基座模型、大型软件框架与大科学装置的融合机制,提升光源的智能化水平。

参考文献:

1. Zhang Z, Li C, Wang W, Dong Z, Liu G, Dong Y and Zhang Y. Towards full-stack deep learning-empowered data processing pipeline for synchrotron tomography experiments[J]. The Innovation: 2024, 5(1): 100539.
2. Dong Y.*, Li C., Zhang Y. et al. Exascale image processing for next-generation beamlines in advanced light sources. Nature Reviews Physics (2022). 4, 427-428
3. Zhou Z, Li C, Bi X, Zhang C, Huang Y, Zhuang J, Hua W, Dong Z, Zhao L, Zhang Y and Dong Y. A machine learning model for textured X-ray scattering and diffraction image denoising[J]. npj Computational Materials: 2023, 9(1): 58.
4. Sun M, Dong Z, Wu L, Yao H, Niu W, Xu D, Chen P, Gupta HS, Zhang Y, Dong Y, Chen C and Zhao L. Fast extraction of three-dimensional nanofiber orientation from WAXD patterns using machine learning[J]. IUCrJ: 2023, 10(3): 297-308.

致谢:

感谢国家重点研发计划青年科学家(项目编号:2023YFA1609900)与国家重大科技基础设施高能同步辐射光源的项目资助。

12.15 下午（第二分会场，V6 会议室）

SAXS在工业聚烯烃材料包装应用研究

唐毓婧

中石化（北京）化工研究院有限公司

聚烯烃是一种广泛应用于国计民生的高分子材料，可用于薄膜、成型制品、管材、电线电缆等。聚烯烃材料的力学性能、光学性能和阻隔性能对于其在食品包装、药品包装中的应用十分重要。包装应用上，膜材料若挺度不够，即薄膜太软，则不利于印刷和制品形状的保持。包装膜雾度越大，透明度和成像度越差，影响人们对包装内容物的观测。高阻隔材料可以延长食品的保质期，提高货架寿命，如何提高材料的阻隔性能，是当前包装材料的研究热点之一。研究工作采用小角X射线散射仪（SAXS）、广角X射线衍射仪（WAXD）、示差扫描量热分析（DSC）、小角激光光散射(SALS)以及白光干涉轮廓仪（WLI）等方法研究了高密度聚乙烯薄膜制品的挺度与薄膜凝聚态结构之间关系，数据表明结晶度和取向度共同影响膜制品的挺度性能；研究了丙乙无规共聚聚丙烯从流延片到正压成型杯的凝聚态结构演变以及表面结构变化，同时测量了试样的表面雾度和内部雾度，并对正压成型杯成型前后的表面雾度、内部雾度与结构之间的关系进行了探讨；研究了两种不同的聚乙烯树脂流延膜，对比加入成核剂 HPN-20E 后制备的流延膜的阻隔性能变化的机理。进而提出半定量的取向结构参数表征晶体取向与阻隔性能之间的关系。

参考文献：

- 1.唐毓婧*, 任敏巧, 任毅等. 石油化工, 2018, 47 (5) ,464.
- 2.侯瑞祥, 姚雪容, 唐毓婧*等. 合成树脂及塑料, 2020, 37 (3) ,75.
- 3.苏萃, 任敏巧, 唐毓婧*等. 高分子学报, 2021, 52 (7) ,775.

同步辐射X射线散射原位研究聚乙烯醇成膜机理

程宏¹, 张前磊², 陈威^{1,*}

1 中国科学技术大学, 核科学技术学院/国家同步辐射实验室, 安徽合肥, 230029;

2 安徽皖维先进功能膜材料研究院有限公司, 安徽合肥, 230029

半结晶聚合物成膜过程涉及复杂非平衡相变。其中, 干燥结晶动力学对材料性能具有关键影响。本研究采用同步辐射小角和广角X射线散射技术 (SAXS/WAXS) 结合原位流延装置, 对聚乙烯醇 (PVA) 薄膜在不同温度 (50-95 °C) 下的成膜过程进行了原位实时跟踪。通过分析微观结构参数 (如结晶度、片晶长周期和水分含量), 揭示了以下四个阶段: 1) 水蒸发阶段。水分以恒定速率挥发而未发生结晶; 2) 快速结晶阶段。PVA开始结晶, 长周期迅速缩短, 结晶度显著增加; 3) 扩散受限阶段。水分扩散逐渐减慢, 链运动性受到抑制; 4) 退火阶段。新形成的片晶插入现有片晶簇, 结晶度进一步提高。研究发现, 干燥过程中的相变是由过冷度和链运动性的复合效应决定的, 这两种效应都受干燥温度和溶剂水含量的影响。降低温度或水含量将增加过冷度, 从而有利于成核。但是, 这也会导致链的运动性降低, 阻碍结晶过程。基于结晶动力学, 发现了结晶起始PVA重量分数 (ω_{PVA}) 与温度呈非单调依赖关系。最小的结晶起始浓度出现在80 °C, 该温度接近纯PVA的玻璃转变温度。基于此提出了PVA亚浓溶液干燥结晶过程的温度与溶剂协同驱动机理。

参考文献:

1. Cheng, H.; Zhao, Y.; Wei, X.; Zhang, Q.; Yang, E.; Xiong, Y.; Zhu, J.; Wu, Z.; Chen, J.; **Chen, W.*** Supercooling and Solvent Depletion-Driven Poly(Vinyl Alcohol) Film Formation Mechanism as Elucidated by *In Situ* Synchrotron Radiation X-Ray Scattering. *Macromolecules* 2024, 57 (4), 1569–1580.
2. Wu, Z.; Xiong, Y.; Li, C.; Cheng, H.; Li, Y.; **Chen, W.*** Exploring the Interphase Structure of Poly(Vinyl Alcohol) during Sol–Gel Transition Using Selective Probes with Varied Molecular Sizes. *Macromolecules* 2023, 56 (17), 7113–7124.

致谢:

国家自然科学基金项目资助 (U20A20256, 52422302) .

Phase transitions and Morphology of isotactic polybutene-1 and its ethylene random copolymer. SAXS and solid-state ¹H NMR studies.

Yanan Qin^{1,2,3}, Victor Litvinov¹, Yongfeng Men^{1,2}

1 State Key Laboratory of Polymer Physics and Chemistry, Changchun Institute of Applied Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130022, P. R. China;

2. School of Applied Chemistry and Engineering, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, P. R. China

3. Institute of Materials, Henan Academy of Sciences, Zhengzhou 450046, P. R. China;

Phase composition, molecular mobility and morphology of isotactic polybutene-1 (iPB-1) and its ethylene copolymer (iPB-1/C2) are studied using time-domain ¹H NMR methods, SAXS, WAXS and flash DSC experiments. Two crystallization routes are used for preparing iPB-1/C2 with hexagonal crystal lattice: (1) crystallization from melt leading to form I' crystals, and (2) polymorphic phase transition from form II to form I crystals. Spin-diffusion NMR experiments allow to establish difference in semi-crystalline morphology of these samples. The crystallization route 1 leads to typical lamellar morphology, whereas the route 2 causes fragmentation of crystal lamellae into small blocks which are separated by low mobile inner interface within lamellae. It is suggested that lamellar fragmentation upon the polymorphic phase transition is largely determined by random chain-folding structure on the lamellar surface of form II crystals which leads to a distribution in the size of the inner interface and crystal blocks. The role of phase composition and morphology of iPB-1 with form I crystals on mechanical properties is proposed.

Reference:

1. Y. N. Qin, V. Litvinov, W. Chasse, B. Zhang, Y. F. Men, Polymer 215 (2020) 123355.

同步辐射超小角 X 射线散射原位研究聚乙烯醇缩丁醛胶片形变机理

崔昆朋
中国科学技术大学

聚乙烯醇缩丁醛 (PVB) 中间膜作为夹胶玻璃的核心部件之一, 以其优异的抗冲击以及粘接性能被广泛应用于汽车、建筑、光伏等领域。PVB 中间膜作为一类高技术壁垒产品, 长期被国外所垄断, 国内产品性能 (如低温抗冲击性) 与国外差距明显。材料的结构决定性能, 目前 PVB 的分子结构已经为大家所熟知, 但对于其介观的亚微米尺度结构, 特别是服役条件下的结构及结构演化仍不明确。针对这一问题, 本论文利用上海光源国内首条超小角 X 射线散射 (USAXS) 光束线 — BL10U, 在亚微米尺度下系统研究了 (增塑) PVB 中的拉伸诱导形变机理。[1-2]

参考文献:

1. Changzhu Lv, Hang Guo, Shengyao Feng, Qi Yan, Chunlei Xu, Wancheng Yu, Liangbin Li, Kunpeng Cui*. Deformation Mechanism of Amorphous Plasticized Poly(vinyl butyral). *Macromolecules*, 2023 56 (7), 2663-2674
2. Erjie Yang, Rongyao Ji, Jibin Miao, Qi Yan, Liangbin Li, Hang Guo*, Kunpeng Cui*. Deformation and Fracture Behaviors of Tough Plasticized Poly(vinyl butyral) across Broad Temperature and Strain Rate Ranges. *Macromolecules* 2024, 57, 16, 8123–8133

P4VP-*b*-PS-*b*-PEO-*b*-PS-*b*-P4VP五嵌段共聚物的本体相分离行为

郭蕾，杜滨阳

生物基运输燃料技术全国重点实验室，高分子科学与工程学系，浙江大学，杭州，310027

相比于AB两嵌段和ABC三嵌段共聚物，具有复杂嵌段组成和次序的多嵌段共聚物为其相分离行为提供了丰富的可能性，成为嵌段共聚物相分离行为研究的重要课题之一。本文使用ABCBA对称型五嵌段共聚物作为模型分子研究其在本体中的相分离行为，选用的三种嵌段分别为聚-4-乙烯基吡啶(P4VP)、聚苯乙烯(PS)和聚乙二醇(PEO)。从PEO出发通过两步可逆加成-断裂转移自由基聚合(RAFT)成功合成了一系列具有不同体积分数、结构明确、窄分布的P4VP-*b*-PS-*b*-PEO-*b*-PS-*b*-P4VP五嵌段共聚物。其中，PS与P4VP嵌段之间的Flory-Huggins相互作用参数 $\chi_{PS/P4VP} = 0.3$ ，^[1] 有着较强的相分离倾向，PS和PEO嵌段之间相容性较好，其 $\chi_{PS/PEO} = 0.064$ ，^[2] PEO与P4VP在60 °C下采用无规相近似法(RPA)计算得到的 $\chi_{PEO/P4VP} = 0.158$ ，并且随着温度的升高 χ 值会有所增加。通过小角X射线散射(SAXS)和透射电子显微镜(TEM)研究P4VP-*b*-PS-*b*-PEO-*b*-PS-*b*-P4VP的本体相分离行为，结果表明：随P4VP嵌段体积分数(f_{P4VP})的增加，四组样品 $V_yS_6O_{90}S_6V_y$ 、 $V_yS_{32}O_{90}S_{32}V_y$ 、 $V_yS_{38}O_{90}S_{38}V_y$ 、 $V_yS_{60}O_{90}S_{60}V_y$ 呈现出由无序态向柱状相(Cylinder)，再向层状相，后向P4VP为分散相的柱状相转变的趋势。其中， $S_xO_{90}S_x$ 和 $V_yO_{90}V_y$ 三嵌段共聚物均表现为无序态(Disorder)，添加PS嵌段后， $V_yS_xO_{90}S_xV_y$ 中的 $S_xO_{90}S_x$ 未观察到明显的相分离，因此可将 $S_xO_{90}S_x$ 视为“一相”。嵌段PS的引入能够显著改变 $S_xO_{90}S_x$ 和P4VP嵌段之间的相分离能力，这一相分离能力随 x 的增加而提高。当 $x = 6$ 时，在 $V_{26}S_6O_{90}S_6V_{26}$ 中就能观察到层状相(Lamella)结构。变温SAXS结果进一步表明 $V_yS_xO_{90}S_xV_y$ 的相分离结构均具有较好的热稳定性，在测试的温度范围内不随温度发生变化。

参考文献：

1. Kennemur J G. Macromolecules 2019, 52, 1354.
2. Gao J, Lv C et al. Macromolecules 2020, 53, 9641.

同步辐射SAXS研究载带铀酰PS-*b*-PAA胶束的结构和输运

田强，吴思远，石鑫鹏，Mark Julian Henderson

西南科技大学 环境友好能源材料国家重点实验室

天然有机质在地质介质中广泛存在，含有丰富的羧基、酚基等活性官能团，且能以稳定的环境胶体形式存在，其势必会影响、改变放射性核素的归宿和运移行为。因此有必要深入探究放射性核素与有机质胶体的相互作用。本工作以准单分散的聚苯乙烯-聚丙烯酸（PS-*b*-PAA）胶束作为有机环境胶体的模型粒子，主要使用同步辐射X射线小角散射（SAXS）技术研究了PS-*b*-PAA胶束与铀酰和碳酸铀酰的相互作用。小角散射球壳模型和胶束模型分析表明：（1）在弱酸性溶液中，铀酰导致PAA壳层厚度降低、衬度增加；随铀酰浓度的增加，胶束产生团聚和沉淀；（2）在弱碱性溶液中，负电性的碳酸铀酰与PAA依然具有良好的亲和性，随着碳酸铀酰浓度增加，PAA壳层的散射衬度显著增加，平均1个胶束可吸附1000个碳酸铀酰物种；（3）在地下水环境中，PS-*b*-PAA胶束对碳酸铀酰具有选择吸附性，二者能形成稳定的复合胶体，且透析实验表明碳酸铀酰没有发生明显的解吸附。本工作的研究方法和认识对于深入理解和预测放射性核素在地质处置环境中的运移行为具有重要意义。

参考文献：

1. Q. Tian, D. Zhang, N. Li, et al. Langmuir 2020, 36, 4820.
2. X. Shi, Q. Tian, M.J. Henderson, et al. Environ. Sci.: Nano 2022, 9, 2587.

致谢：

国家自然科学基金项目(U2230130)

热塑性聚氨酯弹性体的硬相区结构与性能构筑

张若愚

中科院宁波材料所，先进诊疗材料与技术实验室，浙江省宁波市，315201

聚氨酯是最为常见的热塑性弹性体之一，也是典型的无规嵌段高分子之一。典型的聚氨酯主链包括互相间隔的硬段和软段。由于缩聚反应的特点，主链上硬段的长度并不均一而是存在一定分布。此外软硬段之间也存在较为强烈的热力学不相容，导致本体中普遍存在微相分离结构以及所谓的物理交联网络。在这种微观结构中，硬段组成的硬相区是比较关键的物理交联点，也是维持弹性体网络的关键点。但是对于硬段如何排列成硬相区，且不同长度硬段组成的硬相区结构有什么特点，这些问题到目前依然没有清晰的答案。

课题组通过综合散射和热分析等方法，研究了微相分离过程中硬相区的成核与生长动力学，提出并初步验证了成核微相分离的机制。在 FlashDSC 的实验中，通过快速降温 and 升温使聚氨酯样品从真正的均相状态开始发生微相分离。可以发现，硬相区结构的产生需要一个温度以来的诱导期。在绝对强度 SAXS 的实验中，可以发现相区的出现和增大是符合热力学原理而违背直觉的。即在升温过程中，相区的数量会减少，但是幸存相区的尺寸会不断增大。因为只有更大的相区才具有更高的稳定性。此外，在等温实验中，等温时间越长熔融越低。这种反常现象暗示硬相区具有非均一的结构。其核心结构较为规则，而外围结构则变得越来越疏松。

通过硬段的调控，课题组也开发了多种高性能和多功能的高分子材料，并用于柔性传感和医用等领域。

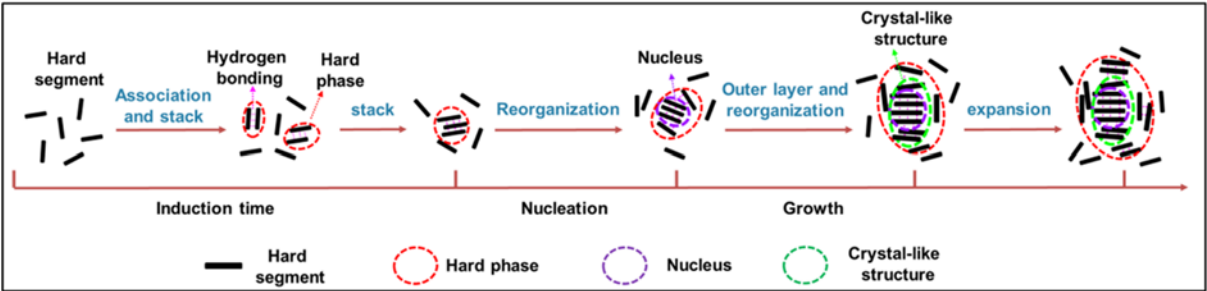


Fig. 1 The formation of hard domain with different length hard segment

参考文献:

1. Zhou, C.; Wang, Y.; Muthukumar, M.; Zhang, R.; Zhao, J.; Jia, D., *Macromolecules* **2022**, **55** (18): 8133-8142.
2. Chen, C.; Ying, W. B.; Li, J.; Kong, Z.; Li, F.; Hu, H.; Tian, Y.; Kim, D. H.; Zhang, R.; Zhu, J., *Adv. Funct. Mater.* **2022**, **32** (4): 2106341.
3. Ying, W. B.; Wang, G.; Kong, Z.; Yao, C. K.; Wang, Y.; Hu, H.; Li, F.; Chen, C.; Tian, Y.; Zhang, J.; Zhang, R.; Zhu, J., *Adv. Funct. Mater.* **2021**, **31** (10): 2009869.
4. Ying, W. B.; Liu, H.; Gao, P.; Kong, Z.; Hu, H.; Wang, K.; Shen, A.; Jin, Z.; Zheng, L.; Guo, H.; Zhang, R.; Zhu, J., *Chem. Eng.* **2021**, **420**: 127691.
5. Ying, W. B.; Yu, Z.; Kim, D. H.; Lee, K. J.; Hu, H.; Liu, Y.; Kong, Z.; Wang, K.; Shang, J.; Zhang, R.; Zhu, J.; Li, R.-W., *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2020**, **12** (9): 11072-11083.
6. Kong, Z.; Ying, W. B.; Hu, H.; Wang, K.; Chen, C.; Tian, Y.; Li, F.; Zhang, R., *Polymer* **2020**, **210**: 123012.
7. Kong, Z.; Tian, Q.; Zhang, R.; Yin, J.; Shi, L.; Ying, W. B.; Hu, H.; Yao, C.; Wang, K.; Zhu, J., *Polymer* **2019**, **185**: 121943.
8. Guo, Y.; Zhang, R.; Xiao, Q.; Guo, H.; Wang, Z.; Li, X.; Chen, J.; Zhu, J., *Polymer* **2018**, **138**: 242-254.

致谢:

国自然面上项目资助 (51773218)

X射线散射技术在软物质复杂结构和动力学研究中的应用

焦学琛，郭桥雨

国家同步辐射实验室，中国科学技术大学

结构是人类认识自然的基础，传统材料体系的结构较为简单，容易研究。相比之下，软物质的结构十分复杂，难以表征和理解，阻碍其性能的进一步优化。X射线散射技术突破这一窘境，可以直接定量地获得复杂结构的统计信息，提供诸如相分离、结晶度、分子排列等关键信息。截止到目前，我国已具备较为完善的X射线散射研究体系，包括同步辐射级别和实验室级别的软X射线及硬X射线的装置。除硬件外，在数据采集技术和分析方法方面也取得了巨大进步，对粉体、薄膜、超薄膜、胶体和溶液等多种物态进行实验和分析。本报告将介绍本课题组利用此类技术在软物质的复杂结构和动力学研究中的应用。

参考文献：

1. Liang Q , Hu Z , Yao J ,et al.Blending Donors with Different Molecular Weights: An Efficient Strategy to Resolve the Conflict between Coherence Length and Intermixed Phase in Polymer/Nonfullerene Solar Cells[J].Small,2024.
2. Jiao X , Wang C , McNeill C R .Detecting the Onset of Molecular Reorganization in Conjugated Polymer Thin Films Using an Easily Accessible Optical Method[J].Macromolecules, 2019, 52(12).
3. Sun R , Guo J , Sun C ,et al.A universal layer-by-layer solution-processing approach for efficient non-fullerene organic solar cells[J].Energy & Environmental Science, 2019, 12(1):384-395.DOI:10.1039/c8ee02560f.

致谢：

受安徽省地方自然科学基金23年项目资助（项目编号：BJ2310000055）。

催化材料合成及重构过程研究

张建玲

中国科学院化学研究所

催化材料在化学化工过程中有着极其广泛而重要的应用，其可控合成与性能调控是具有重大意义的研究课题。如何从原子和分子水平上揭示催化材料合成过程中结构和性质动态演变的规律是核心问题，也是当前面临的科学难题。我们采用同步辐射原位小角X-射线散射技术、原位X-射线吸收光谱等技术，实时跟踪催化材料在合成过程中的变化及在催化反应中的结构重构情况，并与其他技术相结合，从原子、分子、纳米尺度结构等不同层次认识催化材料合成及重构过程中颗粒生长、晶体转变等的演变规律，以实现催化材料结构和性质的精准控制，获得高效催化性能，并在催化材料的构效关系方面取得深入认识。

参考文献：

1. Sang, X.X.; Zhang, J.L.; Xiang, J.F.; Cui, J.; Zheng, L.R.; Zhang, J.; Wu, Z.H.; Li, Z.H.; Mo, G.; Xu, Y.; Song, J.L.; Liu, C.C.; Tan, X.N.; Luo, T.; Zhang, B.X.; Han, B.X. *Nat. Commun.*, 2017, 8: 175.
2. Zhang, B.X.; Zhang, J.L.; Zhang, F.Y.; Zheng, L.R.; Mo, G.; Han, B.X.; Yang, G.Y. *Adv. Funct. Mater.*, 2020, 30:1906194.
3. Sha, Y.F.; Zhang, J.L.; Cheng, X.Y.; Xu, M.Z.; Su, Z.Z.; Wang, Y.Y.; Hu, J.Y.; Han, B.X.; Zheng, L.R. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2022, 61, e202200039.
4. Hu, J.Y.; Zhang, J.L.; Tan, X.N.; Cheng, X.Y.; Su, Z.Z.; Qian, L.R.; Xu, M.Z.; Sha, Y.F.; Wang, Y.Y.; Yang, Y.S.; Liu, Y.P.; Mo, G.; Xing, X.Q.; Wu, Z.H. *Nano Res.*, 2023, 16: 3703.
5. Tan, Z.H.; Zhang, J.L.; Yang, Y.S.; Zhong, J.J.; Zhao, Y.Z.; Hu, J.Y.; Han, B.X.; Chen, Z.J. *J. Am. Chem. Soc.*, 2023, 145, 21983.
6. Yang, Y.S.; Zhang, J.L.; Tan, Z.H.; Yang, J.; Wang, S.; Li, M.L.; Su, Z.Z. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2024, 63, e202408873.
7. Zhang, R.J.; Zhang, J.L.; Wang, S.; Tan, Z.H.; Yang, Y.S.; Song, Y.; Li, M.L.; Zhao, Y.Z.; Wang, H.; Han, B.X.; Duan, R. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2024, 63, e202405733.

SAXS技术在铋基催化剂研究中的两个应用实例

吴忠华，刘云鹏，邢雪青，陈中军，默广

中国科学院高能物理研究所

同步辐射小角X射线散射（SAXS）技术在纳米尺寸结构的表征中发挥着极其重要的作用。我们用溶剂热法合成了 $(\text{BiO})_2\text{CO}_3$ 纳米颗粒^[1]用作光催化剂，合成了PVP@Bi纳米颗粒^[2]用作 CO_2 还原为甲酸的电催化剂，用同步辐射SAXS/XRD/XAFS等联用技术表征了这两种Bi基催化剂合成过程中的微观结构变化。本报告将以这两种Bi基催化剂合成的前驱体溶液为例，偏重介绍SAXS技术在提取前驱体溶液中纳米尺度结构信息的方法。所获得的纳米粒度分布信息对于理解催化剂的合成机制以及催化特性具有帮助作用。

参考文献：

1. Yunpeng Liu, Shunzheng Zhao, Jiajun Zhong, Jianglong Liu, Baotong Chen, You Liao, Lei Yao, Zhongjun Chen, Buxing Han, Zhonghua Wu, In-situ tracking CO_2 -assisted isothermal-isobaric synthesis of self-assembled Bi-based photocatalyst using novel SAXS/XRD/XAFS combined technique, Science China Materials. 2024, 67(11), 3609-3621.
2. Yunpeng Liu, Lei Gong, Jianglong Liu, Peng Xiao, Baotong Chen, Fei Xie, Caoyu Yang, Zhonghua Wu, Fabrication of Interface with capping-bonding synergy to boosts CO_2 Electroreduction to Formate, Applied Catalysis B: Environment and Energy. 2025, 362, 124760.

致谢：

这一研究工作得到国家自然科学基金项目(No.12305372)、科技部重点研发项目(No.2022YFA1603802)的资助。相关实验测试是在北京同步辐射装置(BSRF)4B9A、1W2A、1W2B束线，上海同步辐射装置(SSRF)BL17B束线，以及合肥国家同步辐射实验室(NSRL)XMCD-b束线上完成的。

小角X射线散射方法研究单分散金纳米颗粒的成核生长动力学

陈雪莲¹, 韦萌¹, 王金鸽¹, Stephan Förster²

1 西安石油大学; 2 Forschungszentrum Julich

功能纳米材料的形核、生长是材料和化学科学研究两个基本过程,该过程的系统研究和调控能够为设计具有新颖和重要性能的材料提供理论指导。本文以金(Au)为研究对象,通过小角X射线散射技术(SAXS)与紫外-可见分光光度计联用探究了强配体十二硫醇(DDT)与还原剂TBAB的添加顺序对Au颗粒的形成动力学过程的影响规律及尺寸单分散性的调控机制。研究发现,在尺寸分散性低的Au颗粒体系引入DDT后,通过配体交换在颗粒表面原子发生了选择性刻蚀,进而出现了大颗粒溶解而小尺寸颗粒生长的现象,实现了Au纳米材料生长过程及尺寸/尺寸分布的精准调控,并提出单分散性Au纳米颗粒的制得主要源于消化熟化(Digestive ripening)生长控制的“尺寸分布聚焦”机理。进一步通过调节Au³⁺前驱体的老化和配体油胺(OAm)与甲苯的体积比的策略将Au纳米颗粒形成过程中Au³⁺前驱体的初始还原速率 r_0 与单体浓度、生长途径和最终产物的尺寸/尺寸分布建立定量关系。当 r_0 值介于 1.45×10^{-5} – 2.26×10^{-5} M/s之间时,Au单体消耗缓慢,主要通过晶核聚并成更大的颗粒、颗粒内部的内生长、原子沉积和尺寸分布的聚焦这三种生长途径形成单分散5-7 nm的Au颗粒;当 r_0 值等于或大于 3.47×10^{-5} M/s时,由于单体浓度的显著降低导致原子沉积过程的消失,Au纳米颗粒的生长途径逐渐改变;当 r_0 值达到 5.55×10^{-5} M/s时,Au颗粒生长只经历了晶核合并生长、合并后颗粒内生长/尺寸分布聚焦生长,最终获得了尺寸小、尺寸分散性下降的Au颗粒。

参考文献:

1. Xuelian Chen,* Meng Wei, Shaohua Jiang, and Stephan Forster. Langmuir 2019, 35 (37), 12130.
2. Xuelian Chen,* Jing Wang, Yujie Zhong, Yan Li, Xiqiang Pan,* and Stephan Förster. The Journal of Physical Chemistry C 2022, 126, 6619.

致谢:

国家自然科学基金、陕西省中组部“青年百人”、陕西省科技厅自然科学基金项目资助(62104191、2019JQ-184)。

12.15 下午（第三分会场 V7 会议室）

CSNS小角中子散射仪及科学应用

柯于斌^{1,2}, 杨华^{1,2}, 蒋寒秋^{1,2}, 谢振华^{1,2}

1 中国科学院高能物理研究所; 2 散裂中子源科学中心

微观和介观尺度结构对材料宏观性能和功能特性起决定性的作用, 历来是材料学家研究的焦点。小角中子散射 (SANS) 技术是揭示物质内部微介观结构的重要研究手段。利用中子的高穿透性、无损、有磁矩和对轻元素敏感的特性, SANS可定量表征块体、粉体、溶液或薄膜材料内部纳米尺度 (典型1~100nm) 上化学成分、密度和磁不均匀结构的形貌、尺寸和体积分数信息以及动态演化规律。

中国散裂中子源的小角中子散射仪 (CSNS-SANS) 是国内首台基于脉冲中子源的小角谱仪, 单次测量具有宽Q值范围 ($0.004\text{--}0.80\text{\AA}^{-1}$) [1]。谱仪配备了一系列样品环境实验装置, 能够通过复杂外场加载条件来模拟实际材料加工/服役条件, 开展原位中子散射实验。此外, 依托谱仪发展了掠入射小角中子散射 (GI-SANS) 技术[2]、SANS-DSC、SANS-电阻率[3]和 SANS-流变 (Rheo-SANS) 同步表征技术[4]以及核磁散射分离[5]等新型实验方法学并获得重要应用, 为相关学科发展提供了新的研究方法。

自2018年运行以来, CSNS-SANS广泛应用于多学科领域的微介观结构研究。在新型高分子聚合物和生物大分子的链段结构及聚集态、化学与能源领域的纳米孔隙结构、凝聚态物理中的纳米磁畴以及合金相分离过程的研究中取得了多项突破和用户成果产出。报告将结合谱仪在上述领域中的应用实例介绍CSNS-SANS的具体科学应用。

参考文献:

1. Yubin Ke*; Chunyong He; Haibiao Zheng, et al., Neutron News 2018, 29(2), 14.
2. Guilong Cai, Yuhao Li, Yang Fu, et al. Nature Communications 2024,15, 2784
3. 柯于斌 等, 专利 202310283751.8
4. Jun Wang, Haofeng Sun, Zhijing Han, et al., Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects (under review)
5. 柯于斌, 李彬, 段辉平. 金属学报 2024, 60(8), 1109.

致谢:

国家重点研发计划专项 (2024YFE0110005) 和国家自然科学基金面上项目 (12275154) 资助。

小角中子散射在合金研究中的应用

张中武

哈尔滨工程大学材料科学与化学工程学院

细小纳米团簇相（2-5nm）在强化合金中具有非凡的特性，要理解纳米团簇相的强化机制需要对纳米团簇相的性质及其形成机制具有较好的认识。然而尺度只有几个纳米的纳米相，尤其是当纳米相分布于带有磁性的铁基合金中时，给纳米相的表征带来了极大的困难，因为即使是高分辨透射电子显微镜也难以清晰地观察到铁基合金中如此细小的含有缺陷的纳米相。本文提出利用小角中子散射技术和三维原子探针层析技术表征带有缺陷的纳米相。联合利用小角中子散射技术和三维原子探针层析技术成功地证实在新型氧化物弥散强化合金中的Y-Ti-O纳米相中存在大量空位。根据这一有力证据，成功地解释了Y-Ti-O纳米相的形成机制。利用小角中子散射和三维原子探针技术研究了钢中富铜纳米相演变动力学，纳米相强化和位错强化的关系。

致谢：

国家自然科学基金-叶企孙联合基金重点项目资助（U2141207）。

小角中子散射在若干金属材料研究中的应用

李天富, 闫士博, 陈忠, 王子军, 滕杰, 刘荣灯, 陈东风

中国原子能科学研究院

由于中子不带电、具有穿透力强等特性, 实验中可测量块体试样, 具有宏观统计性, 小角中子散射成为研究材料内部纳米结构重要实验手段, 它通过测量分析样品在小角度对中子的散射, 获得材料内部的纳米/微米尺度成分或密度的不均匀性, 并适于加载样品环境, 开展模拟材料服役条件下的原位测量。小角散射的样品制备简单, 对元素周期表的一些近邻元素, 例如铁、铬、锰、镍等的散射对比度很大, 适合研究金属合金材料, 在观测时可与透射电镜、三维原子探针等技术形成互补。

本文着重介绍利用小角中子散射开展的若干金属材料相关的研究工作, 包括纯镍晶界的小角中子散射研究, 核电压力容器钢模型合金老化脆化机制研究、17-4PH沉淀强化不锈钢阀杆热老化的磁小角中子散射研究、15-15Ti奥氏体不锈钢蠕变微观机制的小角中子散射研究, 镍基单晶高温合金纳米析出相原位演化的小角中子散射研究等。

参考文献:

1. 叶春堂, 刘蕴韬. 中子散射技术及其应用. 物理, 2006, 35(11): 961-968
2. 孙凯, 李天富, 陈东风. 中子散射及相关技术的发展与应用. 原子能科学技术, 2020(S1)
3. 陈东风, 陈忠, 武梅梅, 李眉娟, 刘晓龙, 李天富, 贺林峰, 李玉庆, 孙凯. 先进中子检测技术在核工业材料研究中的应用. 原子能科学技术, 2024, 58(S2): 424-437

致谢:

国家自然科学基金项目资助 (12375305); 感谢中国散裂中子源VSANS小角中子谱仪提供束流; 感谢德国亥姆霍兹柏林研究堆V4小角中子谱仪提供束流。

上海交通大学中子散射材料表征平台介绍

钟圣怡

上海交通大学

材料的多尺度结构与性能之间存在着紧密关联，因此对于多尺度结构的无损量化表征为揭示材料在制备及服役过程中的构效关系与反应机理提供直接证据，是材料精确设计的前提。中子具有高穿透力、可辨识核素、具有磁矩、兼顾静态结构和动力学研究的优势，利用中子作为探测物质微观结构的大科学装置，成为探索科学前沿的有力工具。上海交通大学依托绵阳研究堆，建设中子散射先进材料表征平台，包括我国首台冷中子高分辨织构应力一体化谱仪“河图”、超长多模式中子小角散射谱仪“洛书”以及相关测试方法与解谱技术的研发。其中“河图”谱仪已于2022年正式验收，目前运行状态良好，能对工程部件的残余应力、织构等信息进行无损定量表征；“洛书”谱仪一期建设已于2024年10月通过验收，该谱仪配备可切换速度选择器、超长准直与高分辨探测器系统、可实现超长量程高精度测试，推动国内中子谱仪技术及中子应用科学的发展，解决我国能源、生命科学、化工、医学等前沿科学领域中材料成分结构的无损量化表征问题。

微小角中子散射谱仪及其在物质大尺度结构表征中的应用

左太森^{1,2}, 马长利^{1,2}, 陈青^{1,2}, 朱宏^{1,3}, 程贺^{1,2}

1 散裂中子源科学中心; 2 中国科学院高能物理研究所; 3 东莞理工学院

中国散裂中子源 (CSNS) 微小角中子散射 (VSANS) 谱仪可同时测量样品内部0.4-1000 纳米的微观和介观结构, 由广东省科技厅资助, 是世界上第一台基于散裂中子源的微小角中子散射谱仪。谱仪设计多种实验模式: 常规SANS模式下, 谱仪准直长度从2.49米到12.75米灵活可变, 三组探测器可同时采集从0.12度到35度的散射中子; VSANS模式下, 多狭缝聚焦将最大研究尺度从100纳米左右扩展到几百纳米到1微米; 极化模式可观测材料中大尺度自旋磁结构; 掠入射模式可研究薄膜或表面面内结构。谱仪采用小孔法获得绝对散射强度, 多狭缝几何的分辨率函数也有别于常规针孔几何小角谱仪。谱仪已于2024年3月正式对外开放运行, 将为我国基础科研和产业升级做出关键贡献。一方面将应用于基础前沿研究, 如高分子结晶和相分离、生物大分子相互作用、自组装超分子、斯格明子等; 另一方面将服务于国家重大需求和产业升级, 如生物医药、高性能碳纤维、超高分子量聚合物、先进合金材料、可燃冰等的研究。

参考文献:

1. Zuo, T.; Han, Z.; Ma, C.; Xiao, S.; Lin, X.; Li, Y.; Wang, F.; He, Y.; He, Z.; Zhang, J.; Wang, G.; Cheng, H., The multi-slit very small angle neutron scattering instrument at the china spallation neutron source. J. Appl. Crystallogr. 2024, 57 (2), 380-391.
2. Zuo, T.; Ma, C.; Han, Z.; Li, Y.; Li, M.; Cheng, H., The basic principle of small angle neutron scattering and its application in macromolecules. Acta Polymerica Sinica 2021, 52 (9), 1192-1205.
3. Zuo, T. S.; Cheng, H.; Chen, Y. B.; Wang, F. W., Development and prospect of very small angle neutron scattering (vsans) techniques. Chinese Phys. C 2016, 40 (7), 076204.

致谢:

感谢广东省科学技术厅专项“微小角度中子散射谱仪建设”专项资助。

小角中子散射链标记技术研究等规聚丁烯-1不同分子链动力学晶体的力学服役机理

赵鑫桐^{1,2}, 马长利³, 程贺³, 卢影^{1*}, 门永锋^{1,2*}

1 中国科学院长春应用化学研究所: 2 中国科学技术大学:

3 中国科学院高能物理研究所东莞研究部 散裂中子源科学中心

链标记技术作为一种极为有效的科学技术手段广泛应用于包括药物、材料以及食品等诸多研究领域¹。其中在分子科学领域中,我们将少量的氘代链作为标记链均匀共混引入常规链中;基于两相间不存在相分离的前提下,结合小角中子散射技术(SANS),观测结晶或力学场下标记链的构象变化,揭示结晶、形变机理²。

根据半晶高分子材料晶内分子链活动能力,可将其分为“crystal-mobile”和“crystal-fixed”两类;前者包含聚乙烯、等规聚丙烯和聚环氧乙烷等,后者包含间规聚丙烯、聚己内酯等聚合物³。iPB-1作为一种优异的模型体系,其熔体结晶直接形成的亚稳晶型II是典型的“crystal-mobile”晶体;随即发生自发、不可逆的固-固相转变,伴随着宏观尺寸的收缩⁴,晶内分子链活动能力大幅度下降,形成的稳态晶型I成为典型的“crystal-fixed”晶体。二者除分子链活动能力外,在片晶层次结构上基本一致。

我们将1%全氘代iPB-1作为标记链,利用溶液共混的方法引入分子量相近的常规iPB-1体系中,氘代链在任意结构条件均表现出高斯链的构象,这意味着二者间不存在明显的相分离。随后利用自搭建的小角中子散射(SANS)-广角X射线衍射/小角X射线散射(WAXD/SAXS)-原位拉伸联用设备,研究了宏观形变过程中晶型II和晶型I中单根标记氘链的构象变化;实验结果表明晶型II中的标记链在形变初期表现出仿射形变行为,而晶型I中的标记链始终偏离“仿射形变”且整体形变量小于晶型II,在分子链水平上观测并证明了二者的晶内分子链活动性差异。

参考文献:

1. Atzrodt, J.; Derdau, V.; Kerr, W. J.; Reid, M. *Angew. Chem. Int. Edit.* 2018, 57(7), 1758.
2. Wignall, G. D.; Melnichenko, Y. B. *Rep. Prog. Phys.* 2005, 68(8), 1761.
3. Schulz, M.; Seidlitz, A.; Kurz, R.; Bärenwald, R.; Petzold, A.; Saalwächter, K.; Thurn-Albrecht, T. *Macromolecules* 2018, 51(21), 8377.
4. Tashiro, K.; Hu, J.; Wang, H.; Hanesaka, M.; Saiani, A. *Macromolecules* 2016, 49(4), 1392.
5. Sadler, D. M.; Barham, P. J. *Polymer* 1990, 31(1), 46.

致谢：

国家自然科学基金国际（地区）合作与交流项目资助（22161132007），东莞松山湖大科学装置（散裂中子源）重点课题资助（KFKT2022A02）。

小角中子散射研究ABC三嵌段共聚物的溶胶-凝胶转变

姜乃生

北京科技大学

可注射温敏性嵌段共聚物水凝胶在药物递送、组织工程等领域具有广阔的应用前景，其温度响应特性主要源于特定嵌段的低临界溶液温度（LCST）行为，使得聚合物胶束溶液能够在接近人体生理温度时从溶胶态（独立胶束）转变为凝胶态（稳定的胶束网络）。近期，我们采用小角中子散射结合衬度匹配技术研究了ABC型类肽三嵌段共聚物（简称AMD）在水中随温度变化的溶胶-凝胶转变行为。研究表明，AMD共聚物在室温下形成由亲水A、M嵌段和疏水D嵌段组成核壳型球形胶束。当温度升高至临界凝胶温度以上时，具有LCST行为的A嵌段发生脱水现象，导致胶束间发生新的物理交联，从而形成双微域水凝胶网络结构。此外，我们还进一步探索了不同嵌段长度对胶束形态以及溶胶-凝胶转变行为的影响。该研究有助于人们深入理解ABC型温敏三嵌段共聚物的溶胶-凝胶转变行为，为可注射温敏性水凝胶的分子设计和优化提供指导。

参考文献：

1. Naisheng Jiang, Tianyi Yu, Meng Zhang, Bailee N. Barrett, Haofeng Sun, Jun Wang, Ying Luo, Garrett L. Sternhagen, Sunting Xuan, Guangcui Yuan, Elizabeth G. Kelley, Shuo Qian, Peter V. Bonnesen, Kunlun Hong, Dongcui Li, Donghui Zhang. *Macromolecules* 2024, 57(14), 6449-6464.

致谢：

国家自然科学基金委面上项目资助（52073025）。

基于物理键转化学键策略构筑高度均匀化学交联凝胶

郑成志^{1,2}, 汤健¹, 陈全^{1,2}

1 中国科学院长春应用化学研究所; 2 中国科学技术大学

传统化学交联聚合物凝胶通常通过无规共聚方法获得, 导致凝胶内部存在交联点分布不均和链尺度缺陷等问题。这种不均匀性阻碍了凝胶结构参数与其物理性质之间关系的精确构建, 限制了基于目标性能的聚合物凝胶材料的开发。相比之下, 物理交联凝胶体系由于其交联作用能量接近单位热能, 具有可逆性, 通常呈现高度均匀性。在凝胶化过程中, 体系倾向于达到热力学稳定的最低能量状态, 物理交联点通过破坏和重组实现均匀分布, 从而降低整体自由能。我们设想如果能够将物理键快速转化为化学键, 即可实现具有高度均匀性的化学交联聚合物凝胶的构筑。基于上述设想, 我们近期基于组氨酸修饰的四臂聚乙二醇前驱体(tetra-PEG-His)成功开发出一种氧化还原响应型聚合物凝胶。该凝胶通过简单的氧化反应将二价钴交联剂转化为三价钴, 从而实现交联点从物理键向化学键的转变, 使凝胶从可自愈的黏弹性液体转变为稳定的弹性固体。我们通过小角中子散射实验验证了该凝胶体系的均匀性, 结果显示物理交联凝胶与化学交联凝胶的散射谱图基本一致, 证明了将物理键转化为化学键以构筑高度均匀化学交联聚合物凝胶策略的可行性。

参考文献:

1. Z. Zhang, Q. Chen, R. H. Colby. *Soft Matter* 2018, 14, 2961.
2. T. Sakai, T. Matsunaga, Y. Yamamoto, C. Ito, R. Yoshida, S. Suzuki, N. Sasaki, M. Shibayama, U. I. Chung. *Macromolecules* 2008, 41(14), 5379.
3. S. V. Wegner, F. C. Schenk, S. Witzel, F. Bialas, J. P. Spatz. *Macromolecules* 2016, 49(11), 4229.

致谢:

国家自然科学基金项目资助 (No. 22173095) .

基于小角散射研究软物质的非线性动力学和流变学

王哲

清华大学 工程物理系

软物质，包括高分子、胶体、凝胶，以及生物大分子等，是一类常见的凝聚态物质。它们的组成结构单元的尺寸往往介于微观原子尺度 ($\text{\AA}$) 和宏观尺度 ($>\mu\text{m}$) 之间，因此，也被归类为介观物质。因为这一独特的空间特征，软物质体现出极为丰富的形变和流动性质。而这种独特的“柔软性”，也是软物质的诸多应用的基础。可见，研究软物质何以如此之“软”，不但具备科学意义，也具备实用价值。

小角散射是探索介观世界的利器。利用小角散射为实验工具，结合理论分析、计算机模拟，研究了两类极具代表性的软物质：过冷态胶体溶液和缠结高分子溶体。过冷液体在较大的剪切率下会展现出显著的剪切变稀。这一非线性行为的微观机理在于粒子的集体行为构成了局域弹性区[1]。这些局域弹性区一般包含数百个粒子。它们在流动中不断的产生和湮灭，从而构成了体系黏度的来源。局域弹性区的尺寸、屈服形变与宏观流变行为展现出简单的动态标度律，可由流变—小角中子散射检验。对于缠结高分子体系，其动态和流变行为的标准模型为管道模型。但管道模型在非线性的流变区的预测结果与实验存在不符之处。通过球谐函数展开方法[2]，可方便地考察形变高分子链的构象。进一步地，提出“有效缠结”概念[3]，并证明有效缠结是描述大尺度形变高分子链的重要工具。基于这一概念，利用小角中子散射，在实验上验证了缠结约束释放现象的“Rouse斜坡”特征。有效缠结的提出，为突破管道模型的固有思维打开了一种可能性。

参考文献：

1. Phys. Rev. X (2022) 12, 041006.
2. Phys. Rev. X (2017) 7, 031003.
3. Macromolecules (2024) 57, 3202.

致谢：

国家自然科学基金面上项目资助（项目编号11975136）。

小角中子散射技术在铝基复合材料研究中的应用

朱士泽¹, 刘振宇¹, 柯于斌², 肖伯律¹, 马宗义¹

1 中国科学院金属研究所; 2 散列中子源科学中心

非连续增强铝基复合材料 (DRA) 因优异的比强度和比刚度在空天等领域取得广泛应用。深入理解纳米析出相和纳米增强相的强化行为, 是开发新一代更高强韧性DRA的必要保障。基于中子源和同步辐射光源的小角散射技术可原位表征DRA中纳米相的演变, 不仅侦测面积大, 还可获得相尺寸、含量等参量的量化数据, 从而弥补常规表征手段存在的不足。本研究以纳米碳管增强铝 (CNT/Al)、微米碳化硅颗粒增强铝 (SiC/Al) 复合材料为研究对象, 探讨了CNT取向的小角中子散射探测方法, 为CNT/Al构件的考核评价提供了新的思路; 研究了SiC-Al界面不相容性影响下的析出相演变特性, 由此指导建立了成分体系与时效工艺的调控方法, 实现了复合材料强塑性的提升与时效工艺的简化。

致谢:

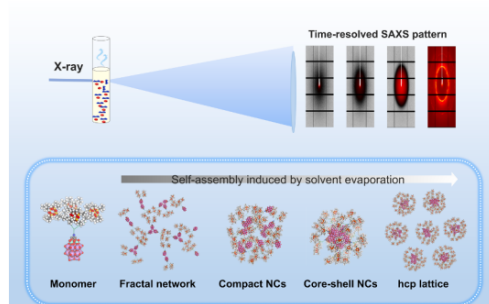
国家重点研发计划 (2021YFA1600700, 2022YFB3707400)、国家自然科学基金 (51931009)、中国科学院高性能工程材料建制化平台 (JZHKYPT-2021-01)。

基于SAXS技术的Janus分子动态自组装研究

张建桥¹，王维²，田强³，李娜^{1*}

1 中国科学院上海高等研究院；2 南开大学；3 西南科技大学

纳米团簇自组装是制备功能化纳米材料的有效方法。对于电子衬度较大的金属基纳米团簇，可通过TEM或XRD监测其自组装过程，并且已提出了成熟的成核生长理论。但对于结构与形态与金属纳米颗粒显著不同的、人工合成Janus异质团簇，其在溶液过程中的自组装机理仍不十分清楚。这一类人工合成的Janus异质团簇，由于其自组装过程受到自身表面官能团与溶剂环境的相互作用影响，在不同的溶剂体系下，其自组装机理与中间过程也存在差异。本工作利用时间分辨同步小角X射线散射（SAXS），研究了两亲分子4POSS-DL-POM（由四个多面体低聚硅氧烷POSS、一个linker和一个多金属氧酸盐POM组成）在丙酮/正癸烷混合溶液中蒸发的自组装过程。散射数据评估包括Kratky分析、对距离分布函数和模型拟合，跟踪了4POSS-DL-POM的动态自组装过程：从分形网络到紧密粒子，再到具有核壳结构的纳米团簇，最后组装为有序的超晶格结构。根据core-shell model拟合得到的参数，计算了核-壳纳米粒子的平均聚集数。



参考文献：

1. J. Zhang, Q. Tian, N. Li et.al. Journal of Colloid And Interface Science 2024, 674,437-444.

致谢：

国家自然科学基金项目资助（U2230115, U2230130,92061120, 12005285）。

12.16 上午（第一分会场，V5 会议室）

后AlphaFold时代的整合结构生物学：

Where AI, MD and experiments meet

王勇

浙江大学生命科学学院

在AlphaFold的革命性突破之后，结构生物学进入了一个全新的发展阶段。尽管深度学习模型在蛋白质结构预测方面取得了卓越成就，全面解析生物学功能仍需结合动态信息与实验验证。人工智能（AI）与分子动力学（MD）的结合，为采样复杂生物分子体系的缓慢构象转换提供了强有力的工具。本报告将聚焦于AI辅助MD的增强采样技术，重点阐述如何利用自适应采样和机器学习优化反应坐标，以显著提升分子模拟的效率和精度。同时，我们将探讨AI、MD与结构生物学实验技术在后AlphaFold时代的整合与应用。基于我们的研究成果，例如通过AI驱动自适应采样实现蛋白质缓慢构象转换的精准采样，以及利用流匹配方法构建生物分子系统的最优反应坐标，我们将展示AI技术在加速和扩展生物分子动力学研究中的潜力。此外，报告还将通过多个具体案例，探讨多源实验数据（如Cryo-EM、NMR和XL-MS）与增强采样技术和MD的结合，如何更全面地捕捉生物大分子的结构系综和动态行为，为理解蛋白质的动态特性和生物学功能提供新的研究视角。

参考文献：

1. Mingyuan Zhang, Hao Wu*, Yong Wang*, J Chem. Theory Comput., 20 (19), 8569–8582 (2024).
2. Yong Wang, Ruhong Zhou, A Practical Guide to Recent Advances in Multiscale Modeling and Simulation of Biomolecules. AIP Publishing, (2023).
3. Mingyuan Zhang, Zhicheng Zhang, Hao Wu*, Yong Wang*, J Chem. Theory Comput., in revision, (2024).

致谢:

国家自然科学基金面上项目(32371300),“十四五”国家重点研发计划“生物与信息融合(BT与IT融合)”专项项目(2021YFF1200404),浙江省自然科学基金重点项目(LZ24C050003)资助。

探讨半结晶高分子小角X-射线散射机制

李向阳

中国科学院合肥物质科学研究院，固体物理研究所

众所周知，半结晶高分子在静态结晶时会形成片晶簇。非晶层和片晶层相互交织，赋予高分子优异的力学性能。传统理论认为它和其它无规材料一样，在透射X射线散射中是由入射X射线直接诱导的，导致其复杂性的主要原因在于片晶厚度和长周期的分散性[1]。近年来[2-5]，我们仔细研究了半结晶高分子的散射。发现，对于仅含几个片晶，侧向尺寸仅有几百纳米的非理想片晶簇，可能存在其他的散射机制，即衰减波诱导的散射。

在本研究中，我们改进了拟合方法，探讨了高密度聚乙烯，等规聚丙烯，聚1-丁烯，聚氧化乙烯的小角散射机制。发现，高密度聚乙烯和等规聚丙烯采用衰减波诱导的散射作为其散射机制，而聚1-丁烯，聚氧化乙烯采用入射X射线直接诱导的散射作为散射机制。影响机制选择的主要因素有长周期，片晶簇内片晶数目，线性结晶度。长周期小，片晶数目少，线性结晶度在50%附近的半结晶高分子易选择衰减波诱导的散射作为其散射机制。

参考文献：

1. W. Ruland and B. Smarsly Journal of Applied Crystallography 2004 Vol. 37 Pages 575-584
2. X. Y. Li, J. J. Ding, Y. P. Liu and X. Y. Tian IUCrJ 2019 Vol. 6 Issue Pt 5 Pages 968-983
3. X. Li, J. Ding, P. Chen, K. Zheng, X. Zhang and X. Tian IUCrJ 2021 Vol. 8 Issue 4 Pages 595-607
4. X. Li, P. Chen, M. Xu, J. Ding, L. Chen, X. Zhang, et al. Macromolecules 2021 Vol. 54 Issue 18 Pages 8751-8769
5. X. Li, J. Ding, Y. Lin, L. Chen and X. Tian Materials Today Communications 2024 Vol. 38 Pages 107751

致谢：

国家自然科学基金面上项目资助（项目编号：22175183）。

共振X射线散射解析复杂手性结构

曹瑜^{1,2}, 刘峰¹

1 西安交通大学材料科学与工程学院; 2 西安交通大学物理学院

近年来, 超分子手性的自发产生与放大机制吸引了众多关注。小角X射线散射(Small angle X-ray scattering, SAXS)作为一种衬度源于电子密度波动的实验方法, 是了解软材料自组装行为的重要手段。但是SAXS在时间与空间上的平均化却导致该方法无法进一步解析超分子手性的来源及分子排布方式。共振X射线散射(Resonant X-ray scattering, RXS)是在轻元素吸收边附近进行测试的实验方法, 作为X射线吸收与散射相结合的过程, 可以获得一系列共振增强/消光信号, 并借以分析自组装结构中分子的方向周期性¹。通过将SAXS/RSoXS相结合, 我们成功解析了Helical Nanofilament (HNF)²以及Double Gyroid (DG)³中分子的排布模型, 并且从分子排布的角度揭示了超分子手性的自发产生机理⁴。基于实验所得的共振信号, 通过构建简化模型并进行理论模拟, 我们发现并表征了DG结构中的分子螺旋, 这些分子螺旋在相反的网络上实现了自分类, 从而形成非手性的DG结构; 随着温度的降低, DG结构拉长变形为四方结构, 其中一条网络上的分子螺旋解旋, 从而导致超分子手性的产生。通过将SAXS/RSoXS相结合, 并借助基于分子排布模型的共振信号模拟, 我们实现了对分子方向周期性的解析, 这对于深入研究手性结构的组装行为以及超分子手性的自发产生与放大机理都有着非常重要的意义。

参考文献:

1. Cao, Y.; Feng, J.; Nallapaneni, A.; Arakawa, Y.; Zhao, K. Q.; Zhang, H. J.; Mehl, G.*; Zhu, C. H.*; Liu, F.* J. Mater. Chem. C 2021, 9, 10020-10028.
2. Cao, Y.; Tan, T. Y.; Walba, D. M.; Clark, N. A.; Ungar, G.; Zhu, C. H.; Zhang, L.*; Liu, F.* Nano Lett. 2022, 22, 4569-4575.
3. Cao, Y.; Alaasar, M.; Nallapaneni, A.; Salamończyk, M.; Marinko, P.; Gorecka, E.; Tschierske, C.; Liu, F.*; Vaupotic, N.*; Zhu, C. H.* Phys. Rev. Lett. 2020, 125, 027801.
4. Cao, Y.; Alaasar, M.; Zhang, L.; Zhu, C. H.; Tschierske, C.*; Liu, F.* J. Am. Chem. Soc. 2022, 144, 6936.

致谢:

国家自然科学基金项目资助(12204369)。

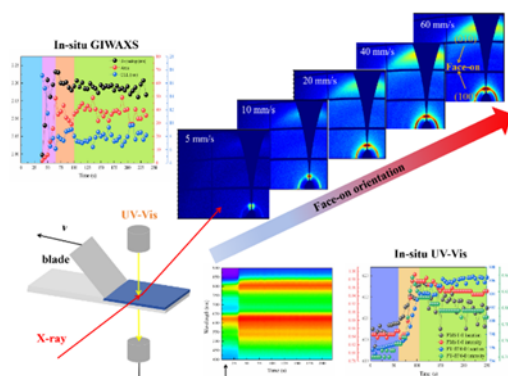
原位掠入射X射线散射在有机太阳能电池领域的应用

杨春明，冯杨，郝嘉亮，马千一，洪春霞，李秀宏，边风刚

中国科学院上海高等研究院/上海光源

基于上海光源小角散射线站建立了有机太阳能电池液相成膜原位掠入射小角X射线散射（GISAXS），原位掠入射广角X射线散射(GIWAXS)以及和原位紫外可见光光谱（UV-Vis）相结合的实时测量技术。同时，开发了用于原位测量数据处理所需的软件SGTools [1]，与国际上常用的SAXS数据处理软件（Fit2d, GIXSGUI）相比，该SGTools软件具有适合处理弱散射体系（如高分子薄膜，超薄纳米薄膜等）掠入射散射数据批处理的特点，兼具透射SAXS数据批处理功能。

应用自研原位技术和开发的相关软件，原位研究了刮涂三元非富勒烯小分子受体有机太阳能电池的溶液剪切成膜机制，详细分析了活性层成核、结晶以及相分离的特征演变和构效关系[3]。同时，我们也研究了全聚合物OSCs的成膜动力学机制，发现溶液剪切强烈影响分子的结晶取向，继而影响OSCs的光电转换效率，而且还会影响OSCs的可拉伸性。另外，基于原位掠入射X射线散射研究了溶剂蒸汽退火对全聚合物OSCs的形貌演变，发现适当的退火时间以及预热退火可以避免晶体的再次再次肿胀，有利于性能的提升。



有机太阳能电池刮涂过程中的原位掠入射X射线散射研究

参考文献：

1. Zhao, N.; Yang, C.; Bian, F.; Guo, D.; Ouyang, X., SGTools: a suite of tools for processing and analyzing large data sets from in situ X-ray scattering experiments, J. Appl. Cryst. , 2022, 55: 195.
2. Peng Z.; Zhang Y.; Sun X.; Yang, C.; et al. Real-Time Probing and Unraveling the Morphology Formation of Blade-Coated Ternary Nonfullerene Organic Photovoltaics with In Situ X-Ray Scattering, Adv. Funct. Mater., 2023, 33(14): 2213248.

致谢:

感谢国家自然科学基金（12175295,U1932118）的资助.

小角 X 射线散射中样品至探测器距离标定的一种方法

李志宏¹, 吉校兰^{1,2}

1 中国科学院高能物理研究所; 2 太原科技大学

小角 X 射线散射 (SAXS) 是研究纳米材料结构的重要手段, SAXS 实验的关键参数之一是样品到探测器的距离, 它直接影响散射数据的角度范围和空间分辨率。由于探测器的实际感光面和样品中心通常难以确定, 因此需要对样品到探测器距离进行标定。

传统标定方法依赖于标准样品的衍射峰, 往往稳定性差, 而且需要进行曲线拟合, 因此准确性和可重复性有限。为了解决这些问题, 本研究使用了由美国国家标准与技术研究院 (NIST) 开发的标准样品玻璃碳 SRM3600, 该标准样品具有各向同性结构, 可提供稳定且清晰的绝对散射强度, 常用于 SAXS 绝对强度标定。本研究通过将玻璃碳 SRM 3600 整条实验散射曲线与其理论曲线进行比较, 循环迭代得到样品到探测器的距离。该方法提高了标定过程的统计准确性和可重复性。

参考文献:

1. Allen AJ, Zhang F, Kline RJ, Guthrie WF, Ilavsky J. NIST Standard Reference Material 3600: Absolute Intensity Calibration Standard for Small-Angle X-ray Scattering. J Appl Crystallogr 2017;50:462–74.
2. Blanton TN, Barnes CL, Lelental M. Preparation of silver behenate coatings to provide low- to mid-angle diffraction calibration. J Appl Crystallogr 2000;33:172–3.

致谢:

1. 高能同步辐射光源 HEPS.
2. 深部复杂应力条件下煤储层多尺度岩石力学性质及其控制因素研究 (U1910206).

Microfluidics for Time-Resolved Small-Angle X-Ray

Scattering

Panqi Song¹, Jianqiao Zhang¹, Guangfeng Liu¹, Yiwen Liu¹, Na Li^{1*}

¹ National Facility for Protein Science in Shanghai, Zhangjiang Laboratory,
Shanghai Advanced Research Institute, Shanghai, 201210, China

Small-angle X-ray scattering (SAXS) is a well established technique to probe the nanoscale structure and interactions in soft matter. It allows one to study the structure of native particles in near physiological environments and to analyze structural changes in response to variations in external conditions. The combination of microfluidics and SAXS provides a powerful tool to investigate dynamic processes on a molecular level with millisecond time resolution. Reaction kinetics in the millisecond time range has been achieved using continuous-flow mixers manufactured using micromachining techniques. The time resolution of these devices has previously been limited, in part, by the chip material and flow channel type. These limitations can be overcome using polymethylmethacrylate (PMMA) as the material providing that beam divergence and photon flux suitable for performing SAXS experiments can be maintained. Such microfluidic devices in combination with SAXS would be an attractive probe for time-resolved studies. Here, the development of time resolution SAXS capability, built around the microfluidic chip at the BioSAXS BL19U2, is reported. A detailed description of the chip, as well as the data acquisition and control are provided. Results are presented where this apparatus was used to study the folding of bovine serum albumin (BSA) for this technique are discussed.

致谢:

这项工作得到了中国国家自然科学基金(U2230115)以及上海自然科学基金(21ZR1471600)的支持.

生物医用嵌段共聚物功能纤维构效关系研究中的小角X射线 及中子散射应用

王林格，廖国行，张蕴婕，梅芷晴，贾毅凡，陈磊，于倩倩

华南理工大学，前沿软物质学院，华南软物质科学与技术高等研究院，广东省功能与智能杂化材料与器件重点实验室，广州市 510640

静电纺丝技术是目前唯一能够直接、连续制备高分子纳米纤维的方法。同时，所得高分子纤维膜材料具有比表面积高、孔径可调控和通透性好的特点，使得静电纺纳米纤维成为纤维科学的前沿和研究热点。嵌段共聚物由于各嵌段具有不同的化学结构和功能，可通过自组装或特定加工手段形成高级聚集结构并在宏观上实现特定功能。将静电纺丝技术和嵌段共聚物自组装相结合，用嵌段共聚物纳米纤维为结构基础或模板，通过进一步的退火、交联、煅烧等加工手段，可以把嵌段共聚物的分子设计和结构功能拓展放大到宏观纤维膜材料的结构设计及性能调控上，因此具有一些独特的结构与性能[1]。如嵌段共聚物在退火后形成的微相分离结构可在纤维表面的自组装形成的亲、疏水性结构等[2]，并可在生物医用材料（组织工程支架、肿瘤治疗）等领域的产生特殊的应用[3]。本工作将嵌段共聚物自组装相结合，通过选择性溶剂蒸汽退火后处理，有效调控嵌段共聚物纤维结构及性能，制备出具有梯度拓扑结构的嵌段共聚物纤维支架。同时，通过原位、时间分辨小角X射线及中子散射等技术表征用于研究嵌段共聚物纤维的自组装纳米结构和微观形貌衍变过程及构效关系研究[4]，为相关材料在生物医药应用提供支持。

参考文献：

1. Chen, L., *et al.*, *Soft Matter*, 2019, 15, 2490.
2. Wang, L., *et al.*, *Macromol. Rapid Comm.*, 2015, 36, 1437; Wu, J., *et al.*, *Appl. Surf. Sci.*, 2017, 422, 769.
3. Li, W., *et al.*, *Acta Biomater.*, 2019, 92, 60; Chen, L., *et al.*, *Adv. Fiber. Mater.*, 2022, 4, 1669; Yang, C., *et al.*, *Giant*, 2024, 18, 100259; Yang, C., *et al.*, *ACS Appl. Mater. Inter.*, 2024, 16, 40787.
4. Liao, G., *et al.*, *Polymer*, 2023, 283, 126205; Jia, Y., *et al.*, *Sol. Energ. Mat. Sol. C.*, 2023, 256, 112322.

致谢：

国家自然科学基金项目资助（No. U22A20316）。

小角散射与多方法整合研究生物大分子动态结构

龚洲, 朱月玲, 杨帅

中国科学院精密测量科学与技术创新研究院

蛋白质、RNA等生物大分子在生命活动中发挥着至关重要的作用。解析这些生物大分子的结构,并揭示它们在各种生理和病理过程中的动态变化,对于深入解码生命的奥秘具有重要意义。然而,由于生物大分子的动态结构涉及多个时间和空间尺度,仅依靠单一研究方法通常难以全面解析这些复杂的动态变化。

小角散射(SAXS/SANS)能够在溶液状态下提供生物大分子的整体形状和构象变化信息,为研究动态结构提供了重要工具。将小角散射与其他高分辨率研究方法相结合,例如溶液核磁共振(NMR)、化学交联质谱(XL-MS)、单分子荧光成像、全原子分子动力学模拟等,可以显著提升动态结构表征的深度与广度。通过这种整合策略,我们系统研究了多结构域蛋白的结构动态变化、天然无序蛋白的动态行为与液液相分离的调控、拥挤环境对蛋白质相互作用的影响,以及非编码RNA的结构与动态变化。

这些多方法整合的研究思路,不仅提高了结构解析的分辨率和准确性,还显著缩短了动态结构分析的时间。此外,这些成果为理解生物大分子的动态行为提供了全新视角,并为进一步的功能研究和相关药物研发提供了有力支持。

参考文献:

- Yueling Zhu, Shiyan Lin, Lingshen Meng, Min Sun, Maili Liu, Jingyuan Li, Chun Tang*, Zhou Gong*. J Mol Cell Biol, 2024, doi:10.1093/jmcb/mjae038
- Zhou Gong, Ju Yang, Lingyun Qin, Chun Tang, Hanqiu Jiang, Yubin Ke, Xu Dong*, J Phys Chem B, 2022, 126, 4840
- Zhou Gong, Shuai Yang, Xu Dong, Qingfen Yang, Yueling Zhu, Yi Xiao, Chun Tang*, J Mol Biol, 2020, 432, 4523

致谢:

国家重点研发计划项目资助(2018YFA0507700)。
基金委面上项目资助(22374154)。

12.16 上午（第二分会场，V6 会议室）

聚酰胺基多嵌段共聚物的微相分离结构与性能调控

袁丽慧^{1,2}, 任宇婷^{1,2}, 卢唯践^{1,2}, 董侠^{1,2,*}, 王笃金^{1,2}

1 中国科学院化学研究所; 2 中国科学院大学

长碳链聚酰胺有脂肪族、脂环族、半芳香族、芳香族等多种类型。本报告围绕线性脂肪族和脂环族两类展开讨论。PA1012是一种偶偶长碳链聚酰胺，分子链上两个相邻的酰胺基团之间有较长的亚甲基链段，因此材料兼具聚烯烃和聚酰胺的优良性能，该链结构特点，使得材料具有一定排列规则的氢键结构，具有同质多晶的特点和典型的Brill转变行为。脂环族的PACM作为长碳链聚酰胺的二元胺单体，与线性二酸聚合后得到的长碳链聚酰胺弹性体的结晶受到抑制，赋予材料高的光学透明度、良好的热稳定性和耐磨性、耐候性等。由于软硬段的不相容特性，脂肪族和脂环族两类聚酰胺的微观相分离对材料的结构和性能都具有重要的影响作用。本报告围绕PA1012脂肪族和PACM脂环族长碳链聚酰胺多嵌段共聚物的微相分离结构及其在外场下的结构演化展开，讨论了结晶及微相分离结构对材料的透明性、气体渗透性和选择性的影响，建立了微观结构与性能的关联。

参考文献:

1. Lihui Yuan, Ping Zhu, Yu Wang, Xuan Li, Yihan Yang, Hui Du, Xia Dong*, Dujin Wang. Gas transport properties of poly(ether-b-amide) segmented copolymers: The role of the degree of microphase separation in amorphous regions, *Journal of Membrane Science*, 2024, 693: 122339.
2. Weijian Lu, Ping Zhu, Ying Zhao*, Dujin Wang, and Xia Dong*, A Disulfide Based Poly(ether b amide) Copolymer with Rapid Self-healing Ability under Moderate Conditions, *Chin. J. Chem.*, 2024, 42: 943-950.
3. Yuting Ren, Xia Dong*, Dynamic polymeric materials via hydrogen-bond cross-linking: Effect of multiple network topologies, *Progress in Polymer Science*, 2024, 158: 101890

致谢:

国家重点研发计划融合重点专项，项目资助（2022-1400600）

流动诱导聚偏氟乙烯极性相结晶的原位研究

马哲

天津大学

结晶性高分子占高分子材料总量的三分之二以上。高分子在材料加工和服役过程中受到外场作用而加速结晶动力学、诱导取向甚至改变结晶晶型。结晶性聚偏氟乙烯（PVDF）具有优异的机械性能、热稳定性、压电和铁电性，在电子电器、柔性传感等领域有广阔的应用前景^[1]。PVDF是典型的多晶型聚合物，其压电和铁电性主要源于含连续反式构象的正交 β 和 γ 晶，但PVDF静态结晶通常形成动力学优势的单斜 α 晶，而制备 β 和 γ 晶则需要高温高压、快速冷却等苛刻条件。我们利用原位X射线方法，结合离线傅里叶变换红外光谱，研究了流动场作用下PVDF的结晶行为，发现流场可诱导PVDF从熔体直接形成取向的极性 β 和 γ 晶^[2]。增加应变速率和降低温度有利于提高流动诱导 β 晶的结晶度，但是不影响降温结晶中 α 晶结晶动力学^[3]。此外，通过两种与PVDF存在不同强度离子-偶极相互作用的离子十六烷基三甲基溴化铵和四丁基硫酸氢铵引入离子-偶极相互作用，利用0.5 wt%离子不仅可以显著提高流动过程中形成的 β 晶含量，并促进流动停止后的 β 晶结晶以及诱导 γ 晶形成^[4]，有效实现PVDF的极性晶体结构调控。

参考文献：

1. Ameduri, B. Chemical Review 2009, 109, 6632.
2. Chu, Z.; Liu, L.; Lou, Y.; Zhao, R.; Ma, Z.; Li, Y. Industrial & Engineering Chemistry Research 2020, 59, 4459.
3. Chu Z.; Liu L.; Liao Y.; Li W.; Zhao R.; Ma Z.; Li Y. Polymer 2020, 203, 122773.
4. Chu Z.; Zhao R.; Wang B.; Liu L.; Ma Z.; Li Y. Macromolecules 2021, 54, 3800.

小角散射技术在动态交联聚合物复合体系结构解析中的应用

犹阳, 李云琦

贵州大学材料与冶金学院, 高分子材料与工程系, 贵阳 550025

由异种聚合物或聚合物与填料复合而得的多组分聚合物复合体系往往表现出单一组分聚合物材料所不具备的优秀综合性能, 是聚合物材料实际应用的重要形式。随着动态共价化学的不断发展, 与之相关的聚合物材料及其复合材料功能化研究在近年来受到广泛关注。然而, 由动态共价化学开发的新型多组分聚合物复合体系制备方法却较少报道。动态共价键可赋予交联聚合物拓扑结构重排的能力, 我们基于这一特殊性能设计了一种可将不相容异种聚合物均匀混合的多组分聚合物材料制备策略, 即聚合物可逆互锁网络 (RILNs)¹⁻³, 并利用小角散射技术研究RILNs微观结构及其形变过程。结果表明RILNs中两种子网络可实现均匀混合且形变过程中两种子网络可同步形变并通过异种网络的相对滑移实现应力平均化与能量耗散, 从而使RILNs表现出优于子网络的力学性能。此外, 我们将动态特性与传统聚氨酯发泡工艺结合, 开发了一种在低温无溶剂环境下复合聚合物与无机填料的策略, 可充分发挥聚合物与无机填料间的弱相互作用, 从而在无需界面处理或额外添加剂的前提下制备性能优秀的聚氨酯/h-BN复合材料, 利用小角散射技术研究了填料对聚氨酯微相分离结构的影响。本工作将为动态交联聚合物复合体系的设计制备及其构效关系研究提供参考。

参考文献:

1. You Y., Peng W.L., Xie P., Rong M.Z., Zhang M.Q., Liu, D. Mater. Today 2020, 33, 45.
2. You Y., Rong M.Z., Zhang M.Q. Macromolecules 2021, 54, 4802.
3. Dai, W.T., Xie, Z.H., Ke, Y.B., You, Y., Rong, M.Z., Zhang, M.Q., He, C.Y., Jiang, H.Q., Yang, H. Mater. Today Phys. 2022, 27, 100768

致谢:

本工作得到国家自然科学基金委员会的资助(项目号: 52303121, 22173094), 特此致谢。

受限高分子晶体取向的表征

刘国明，王明

中国科学院化学研究所

在受限空间中，高分子的结晶行为与本体不同。在一维纳米孔中，高分子晶体通常以分子链垂直于孔轴方向的方式排列。对此，Steinhart等^[1]基于聚偏氟乙烯（PVDF）在阳极氧化铝模板中（AAO）中的晶体取向研究，提出了“动力学选择（kinetic selection）”机理来解释这一现象。该模型认为，AAO中的PVDF发生均相成核，形成随机取向的晶核。在随后的晶体生长过程中，AAO的一维纳米孔道会对晶体的生长方向进行“筛选”。我们通过X射线极图法表征了各种聚合物填充在AAO模板中的聚合物，系统研究了受限尺寸和结晶条件对取向结构的影响。从动力学的角度，提出了“多种单轴取向竞争生长”的机理^[2]。从热力学角度，界面成核将形成另一种取向模式：分子链平行于孔轴方向的取向。我们用反射法和透射法结合采集了受限聚合物的完整极图，在一些聚合物体系中发现分子链平行于孔轴方向的取向模式，该模式是动力学禁阻的，建立了界面相互作用与取向/界面成核的关系^[3]。

参考文献：

1. Steinhart, M.; Goring, P.; Dernaika, H.; Prabhakaran, M.; Gosele, U.; Hempel, E.; Thurn-Albrecht, T., Coherent kinetic control over crystal orientation in macroscopic ensembles of polymer nanorods and nanotubes. *Physical Review Letters* 2006, 97 (2), 027801.
2. Su, C.; Shi, G.; Li, X.; Zhang, X.; Müller, A. J.; Wang, D.; Liu, G., Uniaxial and Mixed Orientations of Poly(ethylene oxide) in Nanoporous Alumina Studied by X-ray Pole Figure Analysis. *Macromolecules* 2018, 51 (23), 9484-9493.
3. Wang, M.; Li, C.; Napolitano, S.; Wang, D.; Liu, G., Quantifying and Modeling the Crystallinity of Polymers Confined in Nanopores. *ACS Macro Letters* 2024, 13, 908-914.

致谢：

国家自然科学基金项目资助（项目编号：21873109, 21922308）。

高交联度聚乙烯的结晶和熔融

蒋世春

天津大学

Alternating metastable crystalline layers and confined amorphous layers construct polymer crystals containing tails, loops, ties and entanglements of linear polymer chains. In this study, cross-linked polyethylene (xPE) was prepared in molten state by γ -ray irradiation to avoid possibly heterotopical cross-linking in solid state. The averaged molecular weight between the cross-linking points (M_c) of the PE gel was determined via swelling equilibrium method. It was found that high cross-link densities have been achieved, i.e., the length of strands between cross-link points is even shorter than the length of strands between physical entanglements. Crystallization behavior, crystalline structures and melting of the xPE were investigated by differential scanning calorimetry (DSC), small-angle and wide-angle X-ray scattering (SAXS and WAXS). The analysis of the peak position in WAXS profiles showed that polyethylene cross-linked in the molten state showed more significant shifts than all other systems, which most likely, due to the statistical (random) distribution of the cross-link points obtained by irradiation of the melt, and because of the rejection of cross-links from the crystals into the amorphous phase, the crystalline structures are under tension. The number of non-crystallizable CH_2 units was analyzed according to two basic assumptions and proposed the slow and fast crystallization behaviors of the PE with high and low molecular weight between the cross-links in xPE. It was attributed this transition from crystallization of strands longer than the length of strands between flexible physical entanglements to crystallization of short strands between the fixed (chemical) cross-link points, allowing only crystallization of the (very few) suitable segments already in close proximity.

参考文献:

1. de Gennes, P. G., Scaling Concepts in Polymer Physics. Cornell university press: 1979.
2. Doi, M.; Edwards, S. F., The Theory of Polymer Dynamics. Oxford University Press: 1986; Vol. 73.

3. De Gennes, P. G., Reptation of a polymer chain in the presence of fixed obstacles. The journal of chemical physics 1971, 55 (2), 572-579.
4. Flory, P.; Vrij, A., Melting points of linear-chain homologs. The normal paraffin hydrocarbons. JACS 1963, 85 (22), 3548-3553.
5. Mandelkern, L.; Prasad, A.; Alamo, R. G.; Stack, G. M., Melting Temperature of the n-Alkanes and the Linear Polyethylenes. Macromolecules 1990, 23, 3696-3700.

聚合物接枝金纳米粒子超晶格结构及其演化过程

熊必金

华中科技大学化学与化工学院

接枝于金纳米粒子 (AuNPs) 表面的聚合物配体不仅可以稳定粒子, 还可以诱导其有序堆砌形成超晶格结构, 且通过改变聚合物配体分子量及结构可有效调控粒子间距和空间结构^[1,2]。然而, 目前关于聚合物链长、接枝密度、金纳米粒子尺寸等对超晶格的结构演化过程及结构的影响规律尚不明确。针对该问题, 本论文采用巯基封端聚苯乙烯 (PS) 接枝的金纳米粒子 (AuNPs@PS) 作为组装基元, 通过 AuNPs@PS 甲苯分散液在毛细管及气液界面缓慢蒸发制备 AuNPs@PS 超晶格, 并研究了聚合物链长和金纳米粒子尺寸对超晶格结构的影响规律。采用原位 SAXS 技术监测了毛细管中 AuNPs@PS 组装体的结构演变过程, 结果表明在毛细管中以 $0.133 \mu\text{L}\cdot\text{h}^{-1}$ 的速率缓慢挥发溶剂过程中, 分子量为 22 kg/mol 的 PS 接枝的金纳米粒子可以组装成单轴取向的面心立方 (fcc) 结构和体心四方 (bct) 结构, 其他较短链 (分子量分别为 2 kg/mol、5 kg/mol 和 12 kg/mol) PS 接枝的金纳米粒子可以组装成 fcc 结构。在溶剂挥发过程中也可观测到 fcc 向 bct 超晶格转变的过程, 原位 SAXS 结果表明该转变是由于溶剂挥发过程中长链聚合物的溶剂溶胀和不均匀压缩所致, 且配体长度和接枝密度对该转变过程具有显著影响。此外, 采用原位 SAXS 技术监测了气液界面组装 AuNPs@PS 超晶格的结构演变过程, 结果表明, 在溶剂氛围下可观测到长链聚合物接枝的纳米粒子从无规堆积向 fcc 再到二维六角堆积转变的过程, 且该转变过程与配体长度密切相关。

参考文献:

1. C. Yi, Y. Yang, B. Liu, J. He, Z. Nie, Chem. Soc. Rev. 2020, 49, 465.
2. Q. Cheng, L. Song, H. Lin, Y. Yang, Y. Huang, F. Su, T. Chen, Langmuir 2020, 36, 250.

复杂表界面弱相互作用的小角散射研究

罗智

南方科技大学

蛋白质等生物大分子有着高度复杂的表界面结构。例如，具有不同亲疏水性质的氨基酸所组成的图案化表面决定了蛋白质的分子识别、自组装等功能。经典的连续介质理论往往难以解释这类分子尺度固液界面的性质；对这类分子尺度复杂结构的研究需要表征技术具有高时空分辨率、多尺度的能力。本报告将探讨基于小角X射线及中子散射的生物材料表征方法，利用分子动力学模拟、蒙特卡洛三维重构技术等，为研究分子尺度自组装结构、生物大分子药物及其递送体系提供新的平台技术，也为研究生物材料纳米尺度表界面物理化学理论提供新的工具。

参考文献：

1. Angew. Chem., Int. Ed., 61, no. 43 (2022): e202209751.
2. PNAS, 116, no. 51 (2019): 25516-25523.
3. Nat. Comm., 9, no. 1 (2018): 1343.
4. Sci. Transl. Med., 15, (2023): eabq1887.

致谢：

国家自然科学基金面上项目（22272071）

12.16 上午（第三分会场，V7 会议室）

新型脂环族聚酯晶体结构解析和结晶行为研究

胡文贤^{1,2}, 马天怡^{1,2}, 周勇¹, 刘国明^{1,2}, 王笃金^{1,2}

1 中国科学院化学研究所; 2 中国科学院大学

本工作研究了新型聚酯聚(丁烯-反式-1,4-环己烷二甲酸酯)(PBCE)的结晶和晶型转变,发现熔体缓慢冷却形成 α 晶,而快速冷却形成 β 晶。通过纤维衍射图分析,解析了 α 晶的结构:其属三斜晶胞,空间群为含对称中心的P-1群: $a=5.46\text{ \AA}$, $b=6.89\text{ \AA}$, $c=13.51\text{ \AA}$, $\alpha=138.37^\circ$, $\beta=109.42^\circ$, $\gamma=63.30^\circ$ 。利用原位WAXS阐明了 α 晶和 β 晶在升温 and 拉伸过程中的结构演变,发现升温过程二者直接转化为熔体,而拉伸过程中发生 $\beta\rightarrow\alpha$ 转变。另外,研究还发现,随着温度升高,两种晶型的晶胞都发生显著的畸变,这可能与主链中环己烷环的非平面振动有关。拉伸诱导晶型转变过程表现出各向异性特征,表明了晶体的初始取向对微观力学响应的影响。

参考文献:

1. Wenxian Hu#, Tianyi Ma#, Yong Zhou, Michelina Soccio, Nadia Lotti, Dario Cavallo, Dujin Wang, Guoming Liu,* Crystal Structure and Polymorphism of Poly (butylene-trans-1,4-cyclohexane dicarboxylate), *Macromolecules*, 2024, 57 (9), 4374.

致谢:

国家自然科学基金项目资助(22273113)。

断裂统计行为揭示聚乙烯的结构缺陷

廖涛¹, 姜志勇¹, 赵昕彤, 门永锋^{1,2}, Phil Coates³, Ben Whiteside³,

1 中国科学院长春应用化学研究所; 2 中国科学技术大学;

3 University of Bradford

断裂行为在材料的力学性能中很重要, 拉伸则是一种常用的研究断裂的方法。然而断裂参数通常呈现离散行为, 使得其研究较为困难。进行大量实验, 从统计角度可较为有效解决此问题。一般来说, 脆性断裂呈现Weibull分布, 而韧性断裂为Gaussian分布, 表明断裂核的产生是不相干的且均匀分布。若是偏离Weibull或Gaussian分布, 则表明体系里存在着结构缺陷。

微注塑样品的熔接痕是一种结构缺陷, 我们对熔接痕样品进行了断裂统计研究, 作为对比, 没有熔接痕的样品也准备了。对样品进行结构分析, 发现样品的取向度沿着流动方向降低, 在熔接痕处或流动末端最小, 拉伸结果表明, 样品基本在熔接痕处或流动末端断裂, 说明这些位置是结构缺陷, 在较低模温, 断裂参数呈Gaussian分布, 此时是缺陷主导断裂, 而在较高模温, 结构分布更为均匀, 结构缺陷被某种程度上弱化, 部分样品能被拉伸很长, 最终导致断裂参数的非Gaussian分布。

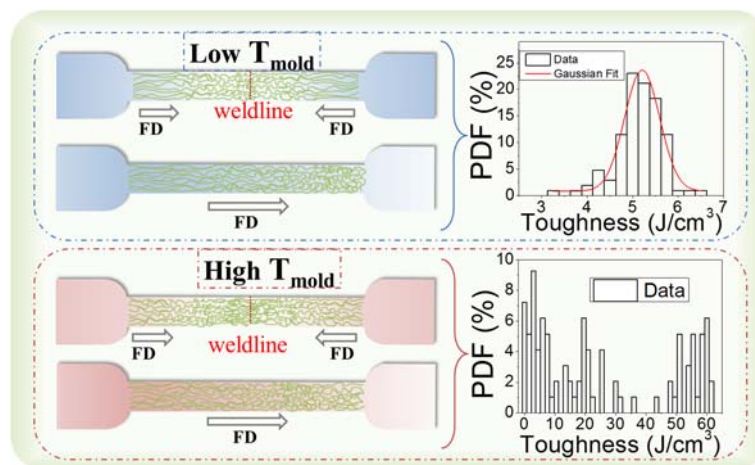


图1 拉伸断裂参数分布的模温依赖特性。

参考文献:

1. Ben Jar, P. Y.; Xu, J. *Polym. Eng. Sci.* **2011**, *51* (3), 573-584.
2. Liao, T. et al. *Macromolecules* **2021**, *54*, 8860-8874.
3. Liao, T. et al. *Macromolecules* **2023**, *56*, 1983-1994.

致谢:

Newton Advanced Fellowship of Royal Society (NA150222).

模拉iPP/UHMWPE的微观结构演变的形变温度依赖性

秦璇^{1,2}, 卢影^{1,2}, 吕冬^{1,2,*}, Fin Caton-Rose³, Phil Coates³, 门永锋^{1,2,*}

1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
和高分子科学与技术重点实验室, 长春市人民大街5625号, 130022;

2中国科学技术大学应用化学与工程学院, 安徽省合肥市金寨路96号,
230026;

3布拉德福德大学聚合物跨学科研究中心 (IRC), 英国布拉德福德
BD7 1DP

超高分子量聚乙烯 (UHMWPE) 是最有发展前景的聚烯烃之一, 但较高的熔体粘度限制其加工和应用。改善加工性能的有效方法是引入另一种聚合物成分。然而, 如果各组分之间不相容, 则很大程度上影响共混物的性能。在这项工作中, 我们将超高分子量聚乙烯与等规聚丙烯 (iPP) 混合, 并在低于、接近和高于UHMWPE熔融温度的条件下, 通过模拉成功加工出 iPP/UHMWPE 样品。研究发现, 在 130 °C、140 °C和150 °C模拉的 iPP/UHMWPE 样品出现了多个熔融峰。为了理解复杂的熔融行为, 我们主要进行了 WAXD、SAXS 和 SEM 测试其微观结构。结果表明, 160 °C以上的熔点是由 iPP 片晶的熔化造成的。在130和140 °C模拉的样品中, UHMWPE的两个熔融峰分别与冷却诱导的UHMWPE晶体、形变诱导的UHMWPE微纤晶有关。而D-150样品在模拉过程中, 固态的 iPP与UHMWPE熔体间显著的力学性能差异导致微孔在样品通过模具时形成。另外, UHMWPE熔体被塑形后的iPP骨架固定, 随着样品拉出模具, 温度降低, UHMWPE逐渐结晶导致体积回缩而进一步产生空洞, 导致明显的发白现象。基于上述发现, 我们提出了模拉 iPP/UHMWPE 样品的微观结构演变的形变温度依赖性。

参考文献:

1. P. D. Coates; P. Caton-Rose; I. M. Ward; G. Thompson. Sci. China Chem. 2013, 56(8), 1017.
2. Lyu, D; Sun, YY; Lu, Y; Liu, LZ. Macromolecules 2020, 53 (12), 4863.

致谢:

中国科学院国际伙伴计划资助 (121522KYSB20210042)

国家自然科学基金资助 (52103046)

中国先进研究堆小角中子散射谱仪研发应用进展

王子军, 李天富, 闫士博, 陈忠, 滕杰, 刘荣灯, 陈东风

中国原子能科学研究院

小角中子散射技术在研究材料内部纳米结构方面具有特色, 离位观测时可与透射电镜、三维原子探针等技术形成互补, 而原位近工况条件下的实时动态观测是小角中子散射技术特有的优势, 适于加载高低温、高压、载荷等样品环境, 开展模拟材料服役条件下的原位测量。

中国先进研究堆中子小角谱仪主要研究领域为生物、聚合物和金属合金材料。过去几年, 我们对该谱仪的真空系统, 准直系统和数据采集系统进行了改造升级。针对小角技术的发展和用户应用需求, 先后研发了水浴控温自动换样、放射性样品、磁场加载、热力耦合加载等原位小角实验装置。基于这些原位样品环境装置以及相应的原位小角实验方法, 成功开展了压力容器钢、核电马氏体不锈钢、镍基高温合金等的原位小角中子散射实验研究, 进一步拓展了谱仪的研究领域, 以更好满足用户需求。

参考文献:

- 1.陈忠; 李天富*; 王子军; 闫士博; 刘荣灯; 李眉娟; 胡文耀; 邹之全; 杨宇辰; 刘蕴韬; 孙凯; 陈东风.小角中子散射原位热力耦合加载装置.原子能科学技术, 2024, 58(1): 211-217.
- 2.Shibo Yan; Zijun Wang; Tianfu Li ;Zhong Chen; Xiaoming Du; Yuntao Liu; Dongfeng Chen*; Kai Sun; Rongdeng Liu; Bing Bai; Xinfu He; Kaitai Liu; Shuanzhu Wang. In Situ Characterization of 17-4PH Stainless Steel by Small-Angle Neutron Scattering Materials, 2023,16(16):5583
- 3.Investigation of Cu-enriched precipitates in thermally aged Fe-Cu and Fe-Cu-Ni model alloys, Wang Zijun,Du Xiaoming,Li Tianfu,Sun Kai,Tong Xuezhu,Li Meijuan,Liu Rongdeng,Liu Yuntao,Chen Dongfeng. Journal of Nuclear Materials, 2022, 562:153601

致谢:

中国原子能科学研究院院长基金项目资助 (YZ232505000901); 中国核工业集团基础研究项目资助(FK010261123429)

基于小角散射技术的RNA结构与构象动态研究

方显杨

中国科学院生物物理研究所

RNA 是生命活动不可或缺的功能分子并与多种疾病的发生密切相关，基于 RNA 和靶向 RNA 的疗法方兴未艾。深入研究 RNA 的结构、构象动态与功能的关系对于揭示 RNA 的生理机制与发展 RNA 疗法至为关键。当前人们对 RNA，特别是长链 RNA 的结构和构象动态信息了解还很少。由于 RNA 固有的柔性，应用传统的高分辨率结构研究方法，如 X 射线晶体学、核磁共振和冷冻电镜对其开展高级结构研究仍十分具有挑战性。得益于全球更多更亮同步辐射光源的兴建和数据处理方法的进展，小角 X 射线散射 (SAXS) 日益成为一种重要的结构生物学研究新方法。相比于蛋白质，RNA 的磷酸糖主链电子密度更高，RNA 对 SAXS 更敏感。近年来，SAXS 在 RNA 的结构和构象动态研究中展现出独特的优势。在报告中，我们将汇报在 SAXS 方法学以及基于 SAXS 的 RNA 结构与构象动态研究中的进展。

参考文献

1. Yufan Zhang[#], Zhonghe Xu[#], Yu Xiao[#], Haodong Jiang[#], Xiaobing Zuo, Xing Li^{*}, **Xianyang Fang^{*}**. Structural mechanisms for binding and activation of a contact-quenched fluorophore by RhoBAST. *Nature Communications* **2024**, 15(1):4206
2. Xiaolin Niu, Zhonghe Xu, Yufan Zhang, Xiaobing Zuo, Chunlai Chen^{*}, **Xianyang Fang^{*}**. Structural and dynamic mechanisms for coupled folding and tRNA recognition of a translational T-box riboswitch. *Nature Communications* **2023**, 14(1):7394.
3. Xiang Chen[#], Yan Wang[#], Zhonghe Xu[#], Meng-Li Cheng, Qing-Qing Ma, Rui-Ting Li, Zheng-Jian Wang, Hui Zhao, Xiaobing Zuo, Xiao-Feng Li, **Xianyang Fang^{*}**, Cheng-Feng Qin^{*}. Zika virus RNA structure controls its unique neurotropism by bipartite binding to Musashi-1. *Nature Communications* **2023**, 14(1): 1134
4. Lilei Xu[#], Yu Xiao[#], Jie Zhang, **Xianyang Fang^{*}**. Structural insights into translation regulation by THF-II riboswitch. *Nucleic Acids Research* **2023**, 51(2):952-965.
5. Xiaolin Niu[#], Ruirui Sun[#], Zhifeng Chen, Yirong Yao, Xiaobing Zuo, Chunlai Chen^{*}, **Xianyang Fang^{*}**. Pseudoknot length modulates the folding, conformational dynamics and robustness of Xrn1 resistance of flaviviral xrRNAs. *Nature Communications* **2021**, 12(1): 6417
6. Yan Wang, Yaoyi Chen, Yanping Hu, **Xianyang Fang^{*}**. Site-specific covalent labeling of large RNAs with nanoparticles empowered by expanded genetic alphabet transcription. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **2020**, 117(37): 22823-22832.

合肥先进光源-多尺度时空分辨共振相干散射线站

徐以会^{1,2}, 黄宁东¹, 昱万程¹, 谢飞¹, 陈凯¹, 廖昭亮¹

1 中国科学技术大学; 2 上海科技大学

合肥先进光源 (HALF) 是中国科学技术大学国家同步辐射实验室负责建设的低能区第四代同步辐射光源, 其电子束能量为2.2 GeV, 周长为480 m, 束流自然发射度为86.3 pm·rad, 共有20个长直线节和20个短直线节。HALF装置预计2028年建设完成, 将与国内已有的上海光源以及建设中的北京高能光源进行互补, 利用高亮度高相干性的中低能X射线开展复杂体系的电子态、化学态、轻元素结构的精确测量。

多尺度时空分辨共振相干散射线站 (BL07) 是HALF首批线站之一, 主要开展软韧X射线共振散射和相干散射研究。BL07光子能量覆盖250-4000 eV, 400 eV下设计能量分辨率优于12000, 光通量大于 10^{12} /s, 光子相干度优于25%。BL07共有三个实验站, 包括软X射线散射共振相干散射实验站、韧X射线散射共振相干散射实验站、以及量子材料散射实验站。这三个实验站互补, 可以提供宽广的q空间以及丰富的样品环境, 从而利用共振X射线散射 (RXS)、相干X射线散射 (XPCS)、以及共振弹性X射线散射 (REXS) 等散射技术, 开展聚合物、有机半导体、小分子自组装体、生物材料、量子材料等体系的高时空分辨结构和动力学表征。

基于半导体氧化物的表面增强拉曼散射衬底的动态自组装——晶体散射研究

陈青¹, Benedikt Socher², Andrei Chumakov², Roth Stephan^{2,3}

1 中国散裂中子源; 2 Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY; 3 KTH Royal Institute of Technology

二氧化钛 (TiO₂) 是一种优秀的基于半导体氧化物的表面增强拉曼散射 (SERS) 衬底候选材料。生物高分子模板化是能够有效的将模板形貌转移到TiO₂层的有效途径。然而, TiO₂结晶性的调控是一个关键问题, 尤其是考虑到生物高分子的热力学稳定性通常较低。为了解决这个问题, 我们用纳米纤维素 (CNF) 指导TiO₂的自组装, 通过将原子层沉积于热退火技术结合起来, 得到具有特定表面形貌和结晶性的TiO₂/CNF复合薄膜。经检测, 我们发现沉积在ITO基底上的、具有10 nm厚度的二氧化钛薄膜经过退火后, 增强因子高达 1.79×10^6 , 这对基于半导体氧化物的SERS衬底来说非常优秀。浓度低至10 nM 的小分子待测物可在我们的TiO₂/CNF基底上被灵敏检测。我们以小角散射技术为切入点, 对分别对TiO₂在热退火过程中纳米尺度结构、晶体生长与相变有了清晰的认知, 为了解基于该薄膜的SERS衬底的机理提供了理论基础。

参考文献:

1. Q. Chen, M. Betker, C. Harder, C. Brett, M. Schwartzkopf, N. Ulrich, M. E. Toimil-Molares, C. Trautmann, L. D. Söderberg, C. Weindl, V. Körstgens, P. Müller-Buschbaum, M. Ma, S. V. Roth. *Advanced Functional Materials*, 2022, 32, 2108556

致谢:

Helmholtz-OCPC postdoc program (20191004)

12.16 下午（第一分会场，V5 会议室）

新型海洋粘附蛋白组装机制研究

王露露，杨娟，刘伟治

山东省青岛市 中国海洋大学海洋生命学院

为适应复杂多变的环境，海洋中有多种生物通过分泌粘附蛋白营附着生活。海洋粘附蛋白组装机制的研究不仅为解码海洋湿粘附奥秘奠定分子基础，同时也为新型海洋生物医用生物材料开发提供重要的资源宝库。

研究团队多年来聚焦典型海洋粘附生物，成功构建了 5 种粘附生物（扇贝、海葵、藤壶、帽贝、海鞘）转录组和蛋白质组库，获得了近百条在粘附组织高表达、序列特异性强的新型粘附蛋白序列库。深入研究发现其可组装成具有优异性能的蛋白基生物材料，包括具有高延展性的纤维/膜材料、环境响应的智能水凝胶和高性能的涂层等^[1-5]。

聚焦高性能蛋白基涂层材料，深入研究发现重组扇贝足丝粘附蛋白在 Ca^{2+} 的诱导下于 30 min 内快速组装成类细胞外基质涂层 Sbp9^A。Sbp9^A 涂层可原位吸附，制备工艺简单，反应条件温和，代表了一类异于 Dopa 依赖型蛋白组装和类淀粉样蛋白组装的新模式。

对 Sbp9^A 涂层的降解性、细胞相容性以及体内抗氧化活性进行评价，发现涂层可降解，显著促进细胞生长、粘附和伸展。同时重组扇贝足丝蛋白涂层通过调节创面微环境，包括缩减炎症时间、促进巨噬细胞极化、降低 ROS 水平、促进血管再生等，在多种动物模型上均促进糖尿病伤口修复，并在创面渗出液的干扰下仍保持促愈合活性，表明该蛋白涂层是一种应用于湿态场景的具有良好生物相容性的抗氧化材料。

综上，该研究丰富了蛋白基生物活性涂层材料的类型，其所具有的强湿吸附性将弥补现有材料在湿环境应用时功效发挥不稳定等难题。

参考文献

1. Wang L, Xue B, Zhang X, et al., *ACS Nano*, Extracellular matrix-mimetic intrinsic versatile coating derived from marine adhesive protein promotes diabetic wound healing through regulating the microenvironment. 2024, 18(22):14726.
2. Zhang X, Cui M, Wang S, et al., *Nat Commun*, Extensible and self-recoverable proteinaceous

- materials derived from scallop byssal thread. 2022, 13:2731.
3. Wang L, Zhang X, Xu P, et al., **Bioact Mater**, Exploration of sea anemone-inspired high-performance biomaterials with enhanced antioxidant activity. 2021, 10:504.
 4. Xia Y, Zhou R, Wang S, et al., **Int J Biol Macromo**, The design of an RGD in situ sustained delivery system utilizing scallop byssal protein through genetic engineering. 2024, 267: 131636.
 5. Xu P, Wang L, Zhang X, et al., **ACS Appl Mater Interfaces**, High-performance smart hydrogels with redox-responsive properties inspired by scallop byssus. 2022, 14(1):214.

致谢:

本研究由国家自然科学基金 (32071371) 资助完成.

整合结构生物学解析蛋白质的动态学

刘主

华中农业大学

蛋白质是生命活动的执行者，它通过结构的动态变化执行具体的生物学功能，解析蛋白质的动态结构与转换过程是理解并干预生命活动的基础。蛋白质动态学定量解析蛋白质的动态结构，揭示蛋白质不同构象之间的相互转换，阐明蛋白质通过结构动态变化执行功能的分子机制。然而，溶液环境中，动态的蛋白质存在多种构象状态，且快速转换，时空变化跨度大，因而不易捕获和表征，单一的技术手段难以准确、全面解析其动态结构和转换过程，需要开发和综合运用多种交叉互补的研究技术与方法。此次会议报告，我将围绕蛋白质动态学解析技术的开发与整合应用，介绍我实验室的一些最新进展与应用实例，展示小角x光散射技术与整合结构生物学方法在解析蛋白质动态学方面的独特优势与应用潜力。

致谢：

国家自然科学基金优秀青年基金项目资助（32422041）。

拥挤与限域环境中水的氢键特性：分子动力学模拟与多尺度 光谱研究

尤晓

西湖大学工学院，合成生物学与生物智造省重点实验室

氢键网络的结构与动力学是水在生物界面及拥挤环境中发挥核心作用的关键。红外光谱与飞秒二维红外光谱技术结合分子动力学（MD）模拟，为解析水分子间氢键行为提供了从分子尺度到动态变化的视角。与此同时，小角散射（SAXS）通过探测物质在纳米到微米尺度的密度波动，揭示了生物系统（如生物凝聚体、液液相分离体系、磷脂双层和药物递送系统）中宏观结构和分子分布的信息。这些技术的联用可以在跨尺度解析中发挥重要优势，填补单一技术在时间、空间分辨率上的局限性。

在类细胞质溶液等拥挤环境中，生物分子占据了约40%的体积，平均相邻分子间距仅约1纳米，相当于少于10个水分子间隔的空间。这种拥挤效应显著改变了水的氢键网络特性，包括氢键的寿命、强度及协同性，从而对生物分子的结构、动力学与稳定性产生深远影响。在生物膜界面、细胞液液相分离区域和药物载体纳米体系等典型受限环境中，氢键网络的特性不仅塑造了水分子的行为，也在关键生化过程中发挥调控作用。本研究利用分子动力学模拟与二维红外光谱的结合，系统探讨了拥挤环境、磷脂界面及生物凝聚体中的氢键结构和水分子行为。结果表明，生物拥挤环境对水分子动力学的影响在不同体系中表现出高度特异性。结合小角散射等多尺度研究方法，可进一步揭示微观相互作用的本质及其与宏观现象的联系，为我们后续更深入地探讨复杂生物环境中蛋白质相变和生物凝聚体内部的水分子行为提供了重要理论基础与实验工具。

参考文献：

1. **You, X.**; Baiz, C. R. “Importance of Hydrogen Bonding in Crowded Environments: A Physical Chemistry Perspective”. *J. Phys. Chem. A*, **2022**, 126 (35), 5881-5889.
2. **You, X.**, et. al.; Baiz, CR. “Short- and Long-range Crowding Effects on Water’s Hydrogen Bond Networks”. *Cell Rep. Physical Science.*, **2021**, 2(5):100419.
3. **You, X.**, et. al.; Baiz, C. R. “A comparative study of interfacial environments in lipid nanodiscs and vesicles” *Biophys. Rep.*, **2022**, 2(3), 100066.
4. **You, X.**, et. al.; Baiz, CR. “Molecular Mechanism of Cell Membrane Protection by Sugars: A Study of Interfacial H-bond Networks”, *J. Phys. Chem. Lett.*, **2021**, 12, 39, 9602–9607

致谢：

美国国家自然科学基金项目（NSF 1847199）。

小角散射解析病毒的仿生策略和炎症激活机制

张越¹, 王宏宇¹, 付涵¹, Richard Gallo², Gerard C.L.Wong³

1 西湖大学; 2 加州大学圣地亚哥分校; 3 加州大学洛杉矶分校

炎症反应的失控常常是病毒感染从轻症转向重症的标志性事件，在新冠病毒感染的人群中，尽管绝大多数的患者症状轻微，但约有5% 的患者最终发展成多器官衰竭，甚至死亡，而部分康复后的患者也饱受新冠后遗症的折磨。那么新冠病毒为何会引起强烈且异质性高的炎症反应？在近期的研究中，我们发现，患者的免疫系统对病毒蛋白的降解并无法消除其致病性，而且不恰当的降解过程反而会释放出有毒性的多肽碎片，从而增强其致病性。结合机器学习、x射线小角散射（SAXS）我们发现，这些降解碎片（xenoAMPs）高度模拟抗菌肽的理化特征，具备与核酸形成晶体复合物的能力，其复合物中核酸分子的周期性排列结构刚好可以诱发Toll样受体在晶体附近的聚集，从而放大下游炎症信号，该现象与抗菌肽在诱导自身免疫性疾病中的机制类似。且该晶体复合物可激活健康细胞大量表达促炎性细胞因子白细胞介素6（IL-6）和IL-8，产生与新冠相似的转录组。

参考文献：

1. Zhang, Y., et al., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.,2024, 121(6), e2300644120.
2. Wang, H., et al., J. Mater. Chem. B.,2024.

致谢：

上海同步辐射光源BL19U2生物小角散射线站的支持.

12.16 下午（第二分会场，V6 会议室）

基于小角X射线散射的超细炸药纳米级结构演化研究

张浩斌，李诗纯

中国工程物理研究院化工材料研究所

炸药是武器装备的能量载体，是决定武器装备安全可靠的重要功能部件。超细炸药因其特殊的微观结构而具有感度选择性改善、临界尺寸小、释能效率高等优异性能，在冲击片雷管、微机电系统和固体推进剂中发挥了重要作用。然而，超细炸药的高活性表界面结构不稳定，易发生颗粒团聚和长大，导致性能劣化，从而给武器系统的可靠性与有效性带来隐患，亟待深入认识超细炸药微纳结构在不同环境条件下的结构演化与颗粒熟化机制。小角X射线散射（SAXS）是表征超细炸药微纳结构的有效手段。课题组基于原位SAXS技术，研究了HNS-IV、LLM-105等超细炸药微纳结构的演化规律与机制，掌握了热时效处理对超细炸药固相熟化的影响机制、粘结剂对超细HNS固相熟化的影响规律、颗粒特性及残余溶剂对超细HNS固相熟化的影响机制、超细炸药致密化过程及PBX在热处理下纳米级孔隙的演化机制及对冲击起爆性能的影响，为超细炸药的应用性能调控提供了良好的基础。

参考文献：

1. Shanshan He, Haobin Zhang, Gang Li, et al. *Energetic Materials Frontiers*, 2022,3(4):240.
2. Zhang, Haobin, Xu, Jinjiang, Li, Shichun, et al. *Molecules* 2022, 27, 3871.
3. Jiangtao Xing, Haobin Zhang, Liangfei Bai, et al. *Langmuir* 2023, 39(9): 3391.
4. Jincan Zhu, Xinfeng Wang, Haobin Zhang*, et al. *Denfence Technology*, under review.

致谢：

国家自然科学基金项目资助（22375191）。

小角散射技术在平衡与非平衡态分子行为表征中的应用研究

邸安颀¹, 陆安慧¹, Karen Edler², Lennart Bergström³, Marianne Liebi⁴

1 大连理工大学化工学院; 2 英国巴斯大学; 3 瑞典斯德哥尔摩大学;

4 瑞典查尔姆斯理工大学

纳米粒子组装的宏观材料可以集成单个纳米粒子的力学、光学和催化等性质，构建功能特异性的新材料。实现对组装结构体的精准表征能够指导调控内部组成、微观结构以及界面性质，是满足不同应用的性能需求的关键手段。

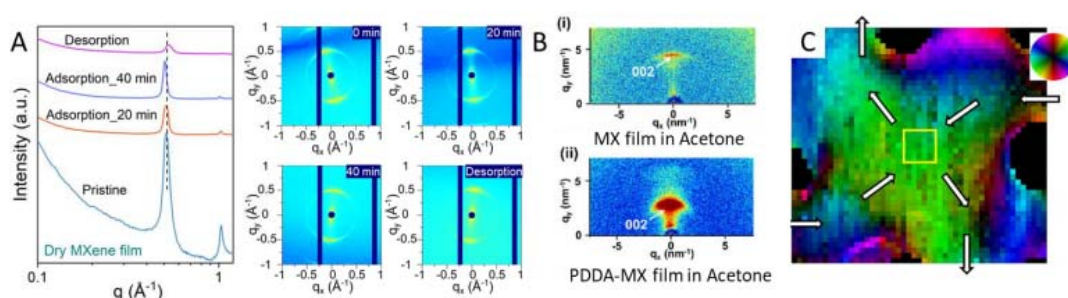


Fig. A. 在 1000 mg L^{-1} NaCl 溶液中吸附和解吸过程中 MXene 薄膜的原位 WAXS 图谱。B.MXene (MX)和 PDPA 修饰的 MXene (PDPA-MX)薄膜在丙酮溶剂中的结构变化 C. 纳米纤维素在微流控装置中的扫描小角散射图谱。

小角散射是表征纳米粒子组装的重要手段，不仅能够表征纳米结构，而且可以实现对分子凝聚态、非平衡分子态以及层间分子或离子态的表征，从而深入解析材料的宏观性能。本工作主要围绕结合小角中子散射和同位素标记对凝聚态结构中的分子间相互作用进行表征^[1]；搭建原位装置实现对非平衡态的分子有序结构的表征^[2-3]；以及对二维 MXene 材料中的分子溶胀状态和离子嵌入态表征^[4-5]。

参考文献：

1. A. Di, J. Schmitt, K. Ma, M.A. Da Silva, K. J. Edler, *Journal of Colloid and Interface Science*, 2020, 578, 608-618
2. A. Di, J. Xu, T. Zinn, M. Sztucki, W. Deng, A. Ashok, C. Lian, L. Bergström, *Nano Letters*, 2023, 23 (5), 1645-1651
3. A. Di, B. Berke, P. T. Corona, L. Björn, R. Kádár, K.M.O. Håkansson, M. Guizar-Sicairos, M. E. Helgeson, M. Liebi, unpublished data.
4. A. Di, C.L. Wang, Y.L. Wang, H.Y. He, W.T. Deng, P. Stiernet, L. Bergström, J.Y. Yuan and M. Zhang, *Chemical Science*, minor revision.

5.H. Zhang, B. Pang, A. Di, J. Chang, F. Héraly, A. Sikdar, K. Pang, X. Guo, J.S. Li, J.Y. Yuan, M. Zhang, Small, 2024, 2403518

致谢:

国家自然科学基金委, 青年科学基金项目 (22405029)

Blue-light-induced conformational change and intermolecular interactions of Cryptochrome

李培^{1,†}, 程化强^{1,†}, Vikash Kumar², Cecylia Severin Lupala², 李选选²,
Yingchen Shi², Keehyoung Joo³, Jooyoung Lee⁴, 刘海广^{2,5,*}, 谭砚文^{1,*}

1 表面物理国家重点实验室, 复旦大学物理系, 2 北京计算科学中心;
3 Center for Advanced Computation, KIAS, Korea; 4 School of
Computational Sciences, KIAS, Korea; 5 北京师范大学物理系

Cryptochromes (CRYs) are blue light receptors that mediate circadian rhythm and magnetic sensing in various organisms. A typical CRY consists of a conserved photolyase homology region (PHR) domain and a varying carboxyl-terminal extension (CTE) across species. The structure of the flexible CTE and how CTE participates in CRY's signaling function remain mostly unknown. In this study, we uncovered the missing link between CTE conformational changes and downstream signaling functions. Specifically, we discovered that the opening of CTE exposes an active surface of CraCRY (*C. reinhardtii* animal-like CRY), which interacts with Rhythm Of Chloroplast 15 (ROC15), a circadian-clock-related protein. Our finding was made possible by two technical advances. First, we directly observe, for the first time, the opening of CTE upon blue light excitation using single-molecule Förster resonance energy transfer technique. Second, we obtain the dark and lit structures of full-length CraCRY, including CTE, through computation and small-angle X-ray scattering (SAXS). Our results provide insights into how CRY performs diverse functions upon light activation.

参考文献:

1. P. Li et al., Commun Biol 2022, 5, 1103.

解缠结半晶聚合物的结构形成与应用

王泽凡

深圳大学化学与环境工程学院

作为区分于小分子最主要的结构特征，大分子链缠结极大地影响着半晶聚合物的加工、结晶形貌及最终的力学性能。特别是在超高分子量材料的加工过程中，通常需要引入塑化剂、溶剂等改善其缠结结构，改善可加工性并提升产品最终宏观力学性能，其中最典型的案例便是超高分子量聚乙烯纤维的凝胶纺丝过程。在我们前期工作中，通过在长链聚己内酯（PCL）中引入化学结构完全相同的短链齐聚物，制备了一系列结构均一、缠结浓度不同的聚合物熔体。结合小角X射线散射及流变学手段，建立了晶体形貌尺寸与熔体缠结浓度之间的定量关系，证明了半晶聚合物的无定形区尺寸随体系中缠结浓度的降低而下降。同时利用相同的高分子粘弹性和结晶学理论，制备了一种具有超高相变焓，结构稳定的相变材料。

参考文献：

1. Zefan Wang*, Biying Li, Fotis Christakopoulos, Kefeng Xie, Caizhen Zhu*, Jian Xu; Alejandro J. Müller. *Macromolecules* 2024, 57, 21, 10240–10252
2. Zefan Wang*, Shuxian Liu, Caizhen Zhu*, Jian Xu. *Advanced Materials* 2024, 36 (20), 2403889.
3. Zefan Wang*, Leire Sangroniz, Jian Xu, Caizhen Zhu*, Alejandro J. Mueller*. *Macromolecular Rapid Communications* 2024, 45 (15), 2400124.
4. Zefan Wang*, Mareen Schaller, Albrecht Petzold, Kay Saalwaechter, Thomas Thurn-Albrecht. *Macromolecules* 2024, 57, 4, 1632-1641.
5. Zefan Wang, Mareen Schaller, Albrecht Petzold, Kay Saalwaechter, Thomas Thurn-Albrecht*. *Proc. Nat. Acad. Sci.* 2023, Vol. 120 No. 27 e2217363120 (Direct Submission)

致谢：

国家自然科学基金资助（22303052）。

12.16 下午（第三分会场，V7 会议室）

外场诱导PVA水凝胶结构演化的小角X射线和中子散射研究

张名科，宋坤，张焱，黄蕊，刘栋

中国工程物理研究院 核物理与化学研究所绵阳 621999，中国

原位小角散射是研究高分子基材料体系结构演化和结构性能关系的重要手段。中子的同位素分辨能力和同步辐射X射线的高时间分辨率使得二者成为天然的互补探针。团队前期基于原位小角X射线散射（SAXS）[1]和小角中子散射（SANS）[2-3]开展了硅橡胶等复合材料的本构关系研究。

近期，宋坤等人针对不同退火温度下PVA物理水凝胶的外场诱导结构演化和机理开展了原位SAXS和SANS表征 [4]。结合单轴拉伸作用下的力学行为和网络结构演变，揭示了软网络和硬网络对PVA水凝胶力学性能的竞争效应，如图1所示。进一步，我们改变PVA水凝胶的制备方法，利用原位SAXS和SANS研究不同制备方法对PVA水凝胶力学性能和网络结构的影响。此外，我们利用原位SAXS研究无规共聚高分子氟橡胶在不同温度下单轴拉伸过程中的力学行为和网络结构演变，旨在揭示氟橡胶的力学性能的网络结构演变机理。

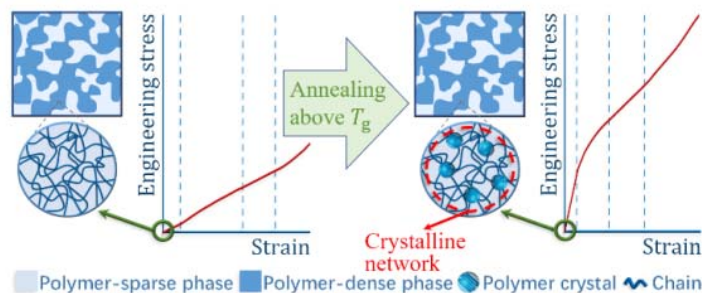


图1. $T > T_g$ 时硬网络形成示意图⁴

参考文献：

1. Huang, L.-Z., et al. Polymer, Volume 274,2023,125926.
2. Han, J.-J., et al. Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, Volume 172,2023,107586.
3. Yang, T.-T. et al. Composites Part B: Engineering, Volume 242,2022,110100.
4. K Song, MK Zhang et al. Revised.

小角X射线/中子散射解析光电高分子材料的溶液态聚集结构

叶龙

天津大学

光电高分子材料因其可溶液加工性、轻质柔性和大面积印刷制备等显著优势，近年来引起了广泛关注。然而，这类材料在器件中的性能受多种因素影响，其中光电高分子在溶液中的聚集结构及其在薄膜中的排列方式是影响性能的关键因素。尽管许多研究已深入探讨了单组分光电高分子在溶液中的聚集行为，但共混体系的聚集结构较为复杂，且现有表征技术的局限性使得领域内对光电高分子共混体系的溶液聚集结构及其温度依赖性认识尚不充分。因此，准确表征共混体系的溶液聚集结构，并开发一套有效的数据解析方法，以建立共混体系多尺度溶液聚集结构与器件性能的直接关联，是优化有机光电器件性能的关键。

针对光电高分子材料在不同温度下的多样化聚集特性，我们结合溶液小角X射线散射和小角中子散射的互补优势，深入解析了三类高效率有机光伏共混体系的溶液聚集结构及其温度依赖性^[1,2]。系统地研究了各共混体系在不同温度下的溶液聚集行为及其对器件性能的影响。通过引入一个新的物理参数 Φ ，用于量化聚合物聚集体内受体小分子分布的百分比，揭示了该参数与器件性能之间的直接关系，为理解有机光电器件的加工敏感性提供了新的视角。

参考文献：

1. Mengyuan Gao, Chunlong Sun, Yiwen Li, Na Li, Hanqiu Jiang, Chunyong He, Yu Chen, Wenchao Zhao, Jianhui Hou, Long Ye*, *Advanced Materials*, 2024, 36(39), 2406653.
2. Mengyuan Gao, Junjiang Wu, Xiyue Yuan, Chunyong He, Hanqiu Jiang, Wenchao Zhao, Chunhui Duan*, Yu Chen, Yubin Ke, Huifeng Yao, Long Ye*, *Energy & Environmental Science*, 2023, 16(12), 5822.

致谢：

感谢国家自然科学基金（项目编号：22375143）和天津市杰出青年科学基金（项目编号：23JCJJC00240）项目资助。

基于BL19U2线站的高压溶液小角X射线散射方法开发

刘广峰，李怡雯，张建桥，宋攀奇，李娜

中国科学院上海高等研究院国家蛋白质科学研究（上海）设施

压力作为一种重要的热力学变量，高压可用于引发软物质系统中的各种结构变化，结合小角X射线散射（SAXS）的空间分辨能力，可用于蛋白质折叠动力学、核酸的结构稳定机制研究，在生命科学领域具有广泛的应用前景。目前，国内尚缺少用于高压溶液散射的专用装置。为此，在上海光源BL19U2生物小角线站设计开发了一种专用于溶液X射线散射的高压原位样品装置和手动加压系统，实现了在 0.1–250 MPa范围内静水压测量。该装置采用0.3 mm金刚石片作为窗口，有助于准确扣除背景散射，实现高信噪比的测量。溶菌酶和铁蛋白的实验证明了生物大分子高压溶液散射方法的可行性。该装置可以很好地满足同步辐射实验的时间有限性和高压实验的复杂性要求，只需要一到两个人就可以完成高压溶液散射实验。该套装置丰富了BL19U2线站的研究技术，扩展了线站开展高压下溶液自组装、高压生物反应等软物质科学研究的能力。

参考文献：

1. SCHROER M A, PAULUS M, JEWORREK C, et al. High-pressure SAXS study of folded and unfolded ensembles of proteins [J]. Biophys J, 2010, 99(10): 3430-7.
2. BROOKS N J, GAUTHE B L, TERRILL N J, et al. Automated high pressure cell for pressure jump x-ray diffraction [J]. Rev Sci Instrum, 2010, 81(6): 064103.

致谢：

国家自然科学基金青年基金（12105350）；中国科学院青年创新促进会（2020289）资助。

同步辐射小角 X 射线散射 (SAXS) 数据预测蛋白质轮廓参数的深度 学习模型算法开发与部署

李庆梦

中国科学院高能物理研究所

在生物学领域，研究蛋白质结构对于理解其功能、设计药物和开发专用材料至关重要。传统的 X 射线晶体学方法在蛋白质结晶和在生理条件下准确表示蛋白质结构方面存在挑战。然而，通过同步辐射小角 X 射线散射 (SAXS) 技术测量溶液状态下蛋白质的散射数据，可以解析出蛋白质结构信息。传统的软件分析方法耗时且需要专业知识，但深度学习具有高效的学习能力，可以提高蛋白质结构分析的效率和准确性。因此，我们开发了 U-net 神经网络来提升蛋白质 SAXS 图像的信噪比，并进一步开发了残差神经网络 (ResNet) 来训练一个用于预测 SAXS 强度数据和关键蛋白质轮廓参数（包括分子量 (MW)、最大分子内直径 (Dmax) 和回转半径 (Rg)）的模型。预测结果显示，U-net 神经网络将图像信噪比提升了 42.29%，而 ResNet 模型的预测准确度达到了 87.86%。ResNet 预测模型利用 SAXS 数据快速预测蛋白质轮廓参数，实现了对高通量数据的秒级响应，将效率提高了数百甚至数千倍。我们将 ResNet 模型部署在上海同步辐射光源生物 X 射线小角散射实验站 (BL19U2)，实现了对数据的批量处理和高效分析。这一技术进步将有助于对蛋白质结构与功能之间关系的研究，推动生物学领域的科学研究和应用。

12. 16 下午大会报告及闭幕式（V5 会议室）

Incoherent and coherent SAXS experiments at synchrotron

beamlines

A. Gibaud

Le MANS Université, UMR 6283 CNRS, Le Mans France

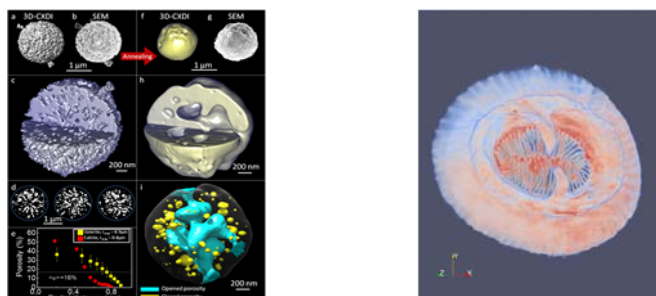
SWUST, Mianyang China

In this presentation, I will outline the key differences between SAXS (Small-Angle X-ray Scattering) experiments conducted at the ESRF synchrotron beamlines ID02 and ID10.

ID02 is a state-of-the-art incoherent SAXS beamline, designed to analyze samples spanning a size range from nanometers to micrometers. This beamline is highly versatile and suitable for studying the structural properties of a wide range of materials. In contrast, ID10 is a beamline dedicated to Coherent X-ray Diffraction Imaging (CXDI), a technique that enables high-resolution imaging of materials using the phase information of X-rays. To begin, I will provide a brief introduction to the concept of coherence in X-ray scattering, which is crucial for understanding the difference between the two techniques. After this, I will present several experimental examples to demonstrate the distinct capabilities of these two beamlines.

For instance, at ID02, we can use SAXS to track the kinetics of precipitation in a system such as calcium carbonate (CaCO_3) particles, utilizing a flow cell setup [1]. This allows real-time monitoring of particle formation and growth, providing insights into dynamic processes that would otherwise be challenging to observe. Next, I will introduce our work at ID10, where we employ Coherent X-ray Diffraction Imaging (CXDI) to unravel the 3D architectures of materials at unprecedented resolutions. For example, we have investigated mineral architectures like precipitated calcium carbonate (PCC) and microalgae, such as coccolithophorids [2,3]. With CXDI, we can explore the three-dimensional morphology of such materials with a voxel size close to 20 nm, offering detailed information that is difficult or impossible to obtain with traditional techniques such as scanning electron microscopy (SEM) or optical microscopy. This high-resolution 3D

imaging opens up new avenues for understanding the intricate internal structures of complex materials.



3D reconstructions of PCC and coccolith measured at ID10

References :

- 1-A. Gibaud et al., Insights into the precipitation kinetics of CaCO_3 particles in the presence of polystyrene sulfonate using *in situ* small-angle X-ray scattering, J. Applied Cryst. 2023, 56, 1114-1124
- 2- O Cherkas, T Beuvier, DW Breiby, Y Chushkin, F Zontone, and A.Gibaud, Direct Observation of Microparticle Porosity Changes in Solid-State Vaterite to Calcite Transformation by Coherent X-ray Diffraction Imagin, Cryst. Growth Des. 2017, 17, 8, 4183–4188
- 3-T. Beuvier, I Probert, L Beaufort, B.Suchéras-Marx, Y Chushkin, F Zontone, A. Gibaud, [X-ray nanotomography of coccolithophores reveals that coccolith mass and segment number correlate with grid size](#), Nature Comm. 2019, 10

SAXS and SANS in studies of soft 1D lattices and superlattices

Goran Ungar,

Xi'an Jiaotong University and University of Sheffield

Many systems form layered structures, usually of two alternating sublayers such as crystalline-amorphous in semicrystalline polymers, or aliphatic-aromatic in smectic liquid crystals (LC), lipid-water in lyotropics or two polymer blocks in block copolymers or blends. But sometimes 1D lattices are not simple, developing into superlattices, either to resolve packing frustration or as a consequence of a specific kinetically favoured formation pathway. Small-angle X-ray and neutron scattering are methods of choice for their study. Their application will be illustrated on a selection of polymer and LC examples.

墙报列表 (12.15 19:00-20:00)

中国晶体学会小角散射会议

崔腾飞^{1,2}, 田龙^{1,2}, 左太森^{1,2}, 郑玉杰^{1,2}, 高寒^{1,2}, 肖松文^{1,2}, 林雄^{1,2}, 张俊佩^{1,2}, 王天昊^{1,2}, 程贺^{1,2}, 童欣^{1,2}

1 中国科学院高能物理研究所; 2 散裂中子源科学中心

在这项工作中, 我们展示了在中国散裂中子源微小角中子散射 (Very Small-angle Neutron Scattering, VSANS) 谱仪上应用极化中子技术所取得的进展。在VSANS谱仪上装配极化中子分析设备, 并对各部分器件工作效率进行标定, 其中包括极化超镜 (极化器)、射频场中子自旋翻转器 (极化翻转器)、以及氦-3中子自旋过滤器 (极化分析器)。根据VSANS谱仪的束流特点, 制定了针对连续波长入射极化中子小角散射实验的完整数据归约方案, 包括极化器件工作效率修正、绝对散射强度归约等。此外, 我们成功应用二十二烷酸银粉末样品、蛋白质以及聚合物等软物质样品验证了谱仪的中子极化分析实验性能。这项工作成果证明了中国散裂中子源已具备自主研发极化中子仪器与技术的能力, 也标志着VSANS谱仪实现了极化中子小角散射实验的功能, 未来将承接相应用户实验应用需求。

参考文献:

1. Krycka K, Chen W, Borchers J, Maranville B, & Watson S. Journal of Applied Crystallography (2012), 45(3), 546-553.
2. Kira, Hiroshi, et al. Proceedings of the 2nd International Symposium on Science at J-PARC—Unlocking the Mysteries of Life, Matter and the Universe (2015).
3. Chen, WangChun, et al. Journal of Physics: Conference Series (2017). Vol. 862, No. 1, p. 012004

致谢:

本工作得到了中国国家重点研发计划 (批准号: 2020YFA0406000 和 2020YFA0406004) 的支持。磁场模拟工作是通过中国国家自然科学基金 (批准号: 12075265 和 U2032219) 以及广东省杰出青年科学基金资助开展的。实验中所采用的 ^3He 自旋过滤器是在广东省极端条件重点实验室 (项目编号: 2023B1212010002) 以及东莞市引进创新创业领军人才计划 (批准号: 20191122) 的支持下研发的。感谢广东省科技厅对微小角中子散射谱仪项目的大力支持。

聚环氧丙烷-聚邻苯二甲酸环己烯嵌段共聚物

热塑性弹性体力学行为及聚集态结构演化研究

刘辰申, 王维, 任伟民, 王海*

大连理工大学化工学院, 大连市甘井子区凌工路 2 号, 116023

热塑性弹性体得益于其高弹性和可加工性被广泛应用于众多领域。本文针对一种由聚环氧丙烷嵌段 (polypropylene oxide, PPO) 和聚邻苯二甲酸环己烯嵌段 (poly(cyclohexene phthalate), PCHPE) 构成的可降解热塑性弹性体 (PPO-PCHPE TPE), 对其力学行为和应变过程中聚集态结构的演化进行研究。该 TPE 由 50wt% 的 PPO 软段和 50wt% 的 PCHPE 硬段构成, 两嵌段均为无定型结构, 玻璃化温度分别为 -60°C 和 120°C , 热分析及小角 X 射线散射 (SAXS) 分析中均表现出明显的相分离行为。通过改变熔融加工过程中的退火条件制备了退火温度分别为 20°C 、 60°C 和 100°C 的三种 TPE 样品, 并进行力学行为和聚集态结构分析。当在不同温度、不同拉伸速率下进行真应力应变曲线测试发现, 在应变范围内证实随着退火温度的升高, 屈服点出现的位置略有向低应变方向偏移, 但对该 TPE 的力学性能影响较小。广角 X 射线衍射 (WAXD) 测试结果表明, 拉伸过程中 TPE 的无定型区发生明显取向。原位拉伸过程的 SAXS 结果表明, TPE 的两相结构在垂直于拉伸方向上被逐渐破坏, 高分子基体内形成了垂直于拉伸方向排列的孔结构。同时, PPO 与 PCHPE 形成的分相结构沿着拉伸方向发生了取向, 形成长周期更大的两相结构, 但较大的拉伸应变使得两相结构呈现沿着拉伸方向倾斜排列的趋势, 这一结构上的变化使得 TPE 出现了应力硬化。

参考文献:

1. Zhu, Y.; Radlauer, R. M.; Schneiderman, D. K. et al. *Macromolecules* 2018, 51(7): 2466.
2. Huy, T. A.; Adhikari, R.; Michler, G. H. *Polymer* 2003, 44(4) 1247.

高分子粘结剂对超细炸药固相熟化的影响机制研究

段凤仪^{1,2}, 张浩斌¹, 李诗纯^{1*}, 刘渝^{1*}

1 中国工程物理研究院化工材料研究所; 2 中国科学技术大学

超细六硝基芪 (HNS) 具有安全性好、冲击起爆阈值低等特点, 在起爆传爆序列方面具有广阔应用前景。固相熟化是超细 HNS 炸药贮存使役过程中的主要老化行为, 会导致粒径长大、性能劣化。影响超细 HNS 固相熟化动力学的因素包括外部因素和内部因素, 已有研究表明温度、湿度是影响固相熟化的重要外部因素, 但是内部影响因素研究十分欠缺。其中为了定型、增塑等要求而加入的粘结剂是重要的内部影响因素, 但影响机制尚不清晰。为此, 研究采用了原位小角 X 射线散射 (SAXS) 表征了不同粘结剂种类包覆下的超细 HNS 颗粒结构演化行为, 通过计算分析比表面积 (SSA) 的变化趋势, 探求其固相熟化机制, 开发抑制策略策略。研究表明 F23 系列粘结剂有着优于 F26 系列的抗熟化效果, 而 F2313 则拥有最优的抗熟化效果。

参考文献:

1.段凤仪, 贺山山, 张浩斌, 等. 含能材料, 2023, 31(10):994-1003.

2.Sulei Hu, Wei-Xue Li .Science374,1360-1365(2021).

致谢:

氟聚物粘结剂对超细 HNS 固相熟化动力学的影响机制及熟化抑制研究项目资助 (2237051185) .

闭环回收聚硫代乙交酯的结晶与熔化行为研究

牟绍栋^{1,2}, 卢影¹, 门永锋^{1,2}

1 中国科学院长春应用化学研究所; 2 中国科学技术大学

近年来, 塑料闭环回收的概念成为高分子科学界关注的焦点, 该方法通过设计特定的单体合成高分子材料, 再将其直接转化为原单体, 从而实现资源循环和同级使用^[1]。陶友华等人提出, 硫交酯单体可以作为一类新型的单体用于合成闭环回收塑料^{[2][3]}。目前对于聚硫代乙交酯该新型材料的基本物理参数及凝聚态结构研究十分有限, 然而, 高分子材料的热力学参数是其成型加工的参考基准, 聚集态结构又决定了材料的使用性能。因此, 探究聚硫酯热力学参数和聚集态结构是十分必要的。首先, 我们通过差示扫描量热仪 (DSC) 制备了聚硫代乙交酯在不同温度下的等温结晶样品, 结合小角X射线散射 (SAXS) 获得不同等温样品的长周期, 以等温温度对相应长周期的倒数作图, 获得了不同分子量样品的结晶线^[4], 利用外推法求得平衡结晶温度230 °C; 同时我们探究了结晶线的斜率与样品分子量之间的关联。其次, 我们通过快速差示扫描量热仪 (FSC) 分析了等温结晶样品在不同加热速率下的熔点, 并通过熔点对加热速率校正获得获得了零加热速率下的熔点^[5]; 在假设长周期不变的情况下, 以校正后的熔点对相应长周期的倒数作图获得了熔化线, 外推求得聚硫代乙交酯的平衡结晶温度为220 °C。

参考文献:

1. Y. Wang, M. Li, S. Wang, Y. Tao and X. Wang. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60, 10798-10805.
2. Y. Wang, M. Li, J. Chen, Y. Tao and X. Wang. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60(41), 22547-22553.
3. Y. Wang, Y. Zhu, W. Lv, X. Wang and Y. Tao. *J. Am. Chem. Soc. Int. Ed.* 2023, 145, 1877-1885.
4. G. Strobl, in: *The Physics of Polymers*, second ed., Springer, Berlin, Germany, 1997.
5. M. Konishi and A. Toda. *Thermochimica Acta Int. Ed.* 2015, 603, 197-204.

致谢:

国家自然科学基金项目资助 (22161132007)

间规聚丙烯在超临界二氧化碳下的微观结演化规律

蔡磊^{1, 2}, 卢影¹, 门永锋^{1, 2}

1 中国科学院长春应用化学研究所; 2 中国科学技术大学

超临界二氧化碳 (ScCO_2) 作为一种绿色、可再生的溶剂, 在聚合物加工领域具有广泛的应用前景^[1]。间规聚丙烯 (sPP) 作为一种多晶型聚合物, 其不同晶型会表现出不同的力学特性, 调控间规聚丙烯的晶型及含量是优化其力学性能的主要途径。本研究旨在通过研究 sPP 在 ScCO_2 环境下的微观结构演化规律, 为深入了解 ScCO_2 氛围下 sPP 晶型选择机制奠定基础。

本工作通过原位同步辐射 WAXD 与高温高压装置联用表征设备系统地研究了 sPP 在不同等温结晶温度和压力下的微观结构变化。发现 sPP 在 ScCO_2 氛围下能生成在常压下不易出现的 $(110)_\text{II}$ 晶面, 这一结果与 Ma^[2] 等人的研究相一致, 并且进一步发现晶型 II 从等温结晶之初便开始生长。其次又在较高的等温结晶温度下 ($T_c = 100\text{ }^\circ\text{C}$) 观察到了衡量晶体结晶完善度的 $(211)_\text{I}$ 晶面, 该晶面也是从结晶之初便开始生长。

同时, 基于离线 WAXD 测试技术全面研究了等温结晶温度和压力对 sPP 晶型及其含量的影响, 发现完善与不完善晶型 I、晶型 II 三者之间的生长存在竞争: 1) 在一定 CO_2 压力下, 晶型 II 首先随着结晶温度的升高而变多, 之后再次变少; 2) $(110)_\text{II}$ 与 $(211)_\text{I}$ 都有着各自最优的结晶温度和压力生长窗口。又基于离线 SAXS 测试技术研究了压力对 sPP 长周期的影响, 长周期会随着压力的增高而变大。

参考文献:

1. Hou. J, Zhao. G, Wang. G, Zhang. L, Dong .G, Li. B. J. Supercrit. Fluid. 2019, 145, 140-150.
2. Weingming. M, Jian. Y, Jiasong. He, Dujin. W. Polymer. 2007, 48, 1741-1748.

致谢:

国家自然科学基金项目资助 (22161132007)。

常规小角和多狭缝微小角中子散射谱仪分辨率函数及模拟验证

朱宏^{1,3}, 左太森^{1,2}, 韩泽华^{1,2}, 马长利^{1,2}, 陈青^{1,2}, 程贺^{1,2}, 刘宇佳³

1 散裂源科学中心; 2 中国科学院高能物理研究所; 3 东莞理工学院

小角中子散射 (SANS) 仪器的分辨率函数通常由一系列高斯函数近似表示, 包含谱仪几何和波长分辨率的贡献。其中几何因素包括源孔径、样品孔径、准直长度、探测器像素大小和到样品距离。对于飞行时间小角中子散射 (TOF-SANS) 谱仪, TOF数据映射到Q空间的策略也会影响Q分辨率。对于多狭缝微小角中子散射 (MS-VSANS) 谱仪, 多束中子汇聚到探测器表面, 并且仅在水平方向上具有高分辨率, Q分辨率应该被分解到X方向和Y方向, 此时分辨率函数不能近似为高斯分布, 而是一系列梯形分布的叠加。为了全面理解TOF-SANS和MS-VSANS谱仪的分辨率, 基于中国散裂中子源 (CSNS) 的MS-VSANS谱仪和虚拟中子平台McStas, 对直径为200纳米和500纳米的聚苯乙烯球进行了虚拟中子实验。模拟结果与实验数据吻合良好。进一步的模拟也已进行, 以验证分辨率算法的准确性。

参考文献:

1. Zuo, T.; Ma, C.; Han, Z.; Li, Y.; Li, M.; Cheng, H., The basic principle of small angle neutron scattering and its application in macromolecules. *Acta Polymerica Sinica* 2021, 52 (9), 1192-1205.
2. Zuo, T.; Han, Z.; Ma, C.; Xiao, S.; Lin, X.; Li, Y.; Wang, F.; He, Y.; He, Z.; Zhang, J.; Wang, G.; Cheng, H., The multi-slit very small angle neutron scattering instrument at the china spallation neutron source. *J. Appl. Crystallogr.* 2024, 57 (2), 380-391.
3. Bergenholtz, J.; Ulama, J.; Zackrisson Oskolkova, M., Analysis of small-angle x-ray scattering data in the presence of significant instrumental smearing. *J. Appl. Crystallogr.* 2016, 49 (Pt 1), 47-54.
4. Hammouda, B., Probing nanoscale structures-the sans toolbox. National Institute of Standard and Technology, https://www.ncnr.nist.gov/staff/hammouda/the_SANS_toolbox.pdf.
5. Hjelm, R., Jr, The resolution of tof low-q diffractometers: Instrumental, data acquisition and reduction factors. *J. Appl. Crystallogr.* 1988, 21 (6), 618-628.
6. Hjelm, R., Jr, Resolution of time-of-flight small-angle neutron diffractometers. *J. Appl. Crystallogr.* 1987, 20 (4), 273-279.
7. Zuo, T. S.; Cheng, H.; Chen, Y. B.; Wang, F. W., Development and prospect of very small angle neutron scattering (vsans) techniques. *Chinese Phys. C* 2016, 40 (7), 076204.
8. Vad, T.; Sager, W. F. C., Comparison of iterative desmearing procedures for one-dimensional small-angle scattering data. *J. Appl. Crystallogr.* 2011, 44 (1), 32-42.
9. Pedersen, J. S.; Posselt, D.; Mortensen, K., Analytical treatment of the resolution function

for small-angle scattering. J. Appl. Crystallogr. 1990, 23 (4), 321-333.

10. Zhou, J.; Zhou, X.; Zhou, J.; Jiang, X.; Yang, J.; Zhu, L.; Yang, W.; Yang, T.; Xu, H.; Xia, Y.; Yang, G.-a.; Xie, Y.; Huang, C.; Hu, B.; Sun, Z.; Chen, Y., A novel ceramic gem used for neutron detection. Nuclear Engineering and Technology 2020, 52 (6), 1277–1281.

11. Willendrup P K, Lefmann K. McStas (i): Introduction, use, and basic principles for ray-tracing simulations[J]. Journal of Neutron Research, 2020, 22(1): 1-16.

12. Willendrup P K, Lefmann K. McStas (ii): An overview of components, their use, and advice for user contributions[J]. Journal of Neutron Research, 2021, 23(1): 7-27.

致谢:

本研究由广东省科学技术厅专项“微小角度中子散射谱仪建设”项目资助。

同步辐射小角 X 射线散射在脂质纳米粒介观结构表征中的应用： 一种球形核-三壳层模型

李豪¹，宋攀奇²，李怡雯²，段佳琳²，屠书泐²，Mehwish Mehmood¹，李娜^{2*}，田强^{1*}

1 西南科技大学，材料与化学学院，环境友好能源材料国家重点实验室

2 中国科学院上海高等研究院，上海国家蛋白质科学设施

脂质纳米粒（LNP）由可电离阳离子脂质、胆固醇、中性磷脂和聚乙二醇化脂质组成，其结构表征对于了解它们作为核酸药物治疗载体的疗效至关重要。在这项工作中，我们提出了一种使用同步辐射小角 X 射线散射(SAXS)技术表征LNP介观结构的散射数据分析方法。提出了一个球形核-三壳层模型，以描述脂质和负载核酸在LNP粒子内部的分布情况。该模型能够确定多种脂质组分在LNP内、中、外层的壳层厚度和散射长度密度，进而基于该模型计算LNP在溶液中的尺寸分布。本研究首先对模型中的参数开展了计算模拟工作，以理解关键结构参数对散射曲线形貌的影响。其次，根据上市新冠疫苗Comirnaty(Pfizer & Moderna公司)配方比例，分别制备了空载和负载核酸的LNP，验证了模型的可行性。最后，同样利用上述配方改变氮磷比率（N/P）制备了不同N/P的LNPs验证了模型的适用性。拟合结果表明，较高的N/P比有利于形成粒径更均匀的mRNA-LNPs，并且在特定的N/P比为5时膜层的均匀性达到最佳。所提出的模型可以有效地理解LNP中脂质分布与负载核酸的构效关系，进而可应用于LNP稳定性评价和新型核酸药物的配方筛选和优化产业应用中。

致谢：

这项工作得到了中国国家自然科学基金（U2230115和U2230130）以及上海自然科学基金（21ZR1471600）的支持。

Effects of residual solvent on the solid phase ripening of ultrafine explosives

Jincan Zhu ^{a, b}, Bo Jin ^b, Yu Liu ^{a, b}, Shichun Li ^a, Haobin Zhang ^a

^a Institute of Chemical Materials, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999,
China;

^b School of Materials and Chemistry, Southwest University of Science and Technology, Mianyang
621010, China

Nowadays, ultrafine explosives are widely used in military fields. Ultrafine 2,2',4,4',6,6'-hexanitrostilbene (HNS) has emerged as an optimal primer for explosion foil initiators due to its excellent thermal stability and high-voltage short-pulse initiation performance. However, the solid phase ripening of ultrafine HNS leads to a degradation in its impact detonation performance. Previous studies have indicated that residual dimethyl formamide (DMF), which is present in ultrafine HNS prepared using the recrystallization method, affects ultrafine HNS ripening. The mechanism of residual solvent effects on solid phase ripening of ultrafine HNS is unclear. In this work, the specific surface area (SSA) derived from small angle X-ray scattering (SAXS) was utilized for kinetic fitting analysis to explore the mechanism by which residual solvents enhance the solid phase ripening of ultrafine HNS. In-situ SAXS at temperatures of 150 °C, 100 °C and 60 °C revealed an initial rapid decrease in SSA with time, followed by a slow decline. Furthermore, the higher amounts of residual DMF accelerated the reduction in SSA with time. Kinetic fitting analysis demonstrated that reducing residual DMF would lower both the activation energy and the pre-exponential factor, consequently decreasing the rate constant of solid phase ripening. The mechanism was speculated that it primarily facilitated the Ostwald ripening (OR). Additionally, contrast variation small angle X-ray scattering (CV-SAXS) confirmed that coating of ultrafine HNS particles is an effective method for inhibiting ripening, significantly reducing both the rate and extent of ripening of ultrafine HNS. This study predicts how residual solvents impact the solid phase ripening process of ultrafine HNS and proposes strategies for enhancing the long-term stability of ultrafine explosives. Key words: Ultrafine HNS; Residual solvent; Solid phase ripening; Small angle X-ray scattering

中子散射技术研究反光素蛋白(reflectin)的分级组装行为

郭苓¹ 韩晶晶^{2,3} 王智鑫^{2,4} 罗翔^{2,3} 储祥蔷^{1,2}

(1. 香港城市大学, 香港, 999077;

2. 中国工程物理研究院研究生院, 北京, 100193

3. 中国工程物理研究院 核物理化学研究所, 绵阳, 621999

4. 中国散裂中子源, 东莞, 523803

当章鱼、墨鱼、鱿鱼等头足纲动物需要躲避危险或传递信号时, 能在极短时间内变化皮肤颜色和形态。变色机理包括两类: 色素体细胞中的色素改变和彩虹体细胞及白色体细胞的结构变化。其中, 结构色彩的变化主要靠反光素蛋白(reflectin)的自组装过程形成片状结构改变光的传播。另外, reflectin蛋白可被咪唑等小分子诱导发生高级组装。然而, 目前reflectin蛋白的组装机制却尚未被研究清楚。这项工作利用中子散射技术从原子层面对reflectin蛋白的组装动力学和结构进行研究。我们对比了reflectin蛋白组装受不同温度、浓度、小分子影响下的行为。其中准弹性中子散射的结果表明, reflectin蛋白的动力学行为随温度的升高而加强, 且小分子诱导的高级自组装表现出更强的动力学特征。小角中子散射的结果表明, 高级自组装形成的结构更紧凑稳定。这项作为reflectin蛋白自组装改变布拉格反射层距离从而改变皮肤颜色的理论提供了有力证据, 在此基础上可对头足纲动物皮肤变色进行进一步研究。

参考文献:

1. Guan, Z., et al. (2017). "Origin of the reflectin gene and hierarchical assembly of its protein." *Current biology* **27**(18): 2833-2842. e2836.
2. Squires, G. L. (1996). Introduction to the theory of thermal neutron scattering, Courier Corporation.
3. 韩晶晶 and 储祥蔷 (2019). "利用中子散射探索生命世界中的物理奥秘." *物理* **48**(12): 780-789.
4. Wang, Z., et al. (2024). "Experimental Evidence for the Role of Dynamics in pH-Dependent Enzymatic Activity." *The Journal of Physical Chemistry B*

致谢:

香港城市大学 (Projects No. 9610568 and 7006132)

国家自然科学基金委员会—中国工程物理研究院联合基金(批准号:U2230207)项目资助

不良溶剂诱导聚合物接枝金纳米粒子超晶格结构及其演化过程

任瑞，熊必金

华中科技大学

超晶格是一种由纳米粒子周期性排列而成的结构，具有独特光学、电学和磁学性质，其性能不仅受粒子本身性质影响，还与粒子的排列和空间结构有关。聚合物接枝金纳米粒子可以稳定粒子，并通过调节聚合物分子量，诱导粒子有序排列、控制粒子间距，从而有效调控超晶格的结构。本研究制备了四种不同分子量聚苯乙烯接枝的金纳米粒子（ $\text{AuNPs}_{5\text{nm}}@PS_{2k}$ 、 $\text{AuNPs}_{5\text{nm}}@PS_{5k}$ 、 $\text{AuNPs}_{5\text{nm}}@PS_{12k}$ 、 $\text{AuNPs}_{5\text{nm}}@PS_{22k}$ ）。通过向纳米粒子的甲苯分散液中引入正癸烷（PS 的不良溶剂）调控纳米粒子的自组装过程，观察并分析其超晶格结构的转变。

引入不良溶剂正癸烷后， $\text{AuNPs}_{5\text{nm}}@PS_{5k}$ 纳米复合材料的超晶格结构发生了由 bct 向 fcc 的转变，表明不良溶剂的引入显著改变了纳米粒子之间的相互作用力。进一步分析发现，溶剂的引入导致超晶格的晶格发生溶胀，晶格常数增加，从而促进了超晶格结构从 bct 向 fcc 的转变。这一现象表明溶剂不仅影响了纳米粒子的分散状态，还通过改变分子间相互作用力，诱导了不同类型超晶格结构的形成。在升温实验中，我们观察到不同粒径的金纳米粒子表现出不同的结构变化。对于 $\text{AuNPs}_{5\text{nm}}@PS_{22k}$ ，超晶格结构在升温过程中始终保持 bcc 结构，然而，当温度超过 160°C 时，结构发生了转变，形成了 rcp 结构。 $\text{AuNPs}_{5\text{nm}}@PS_{5k}$ 在升温过程中则经历了从 bct 向 bcc 的转变，当温度升高到 70°C 时，纳米粒子变为单分散状态，而降温后再次形成 fcc 超晶格结构。这些温度引发的结构转变可能与纳米粒子的表面能、溶剂的挥发速率以及粒子之间的相互作用力的变化密切相关。这些发现为我们深入理解溶剂和温度在纳米粒子组装过程中的作用提供了新的思路。本研究揭示了溶剂对聚合物接枝金纳米粒子组装行为的影响，为相关领域的研究提供了重要的理论基础与应用前景。

关键词：金纳米粒子；自组装；溶剂诱导；超晶格结构

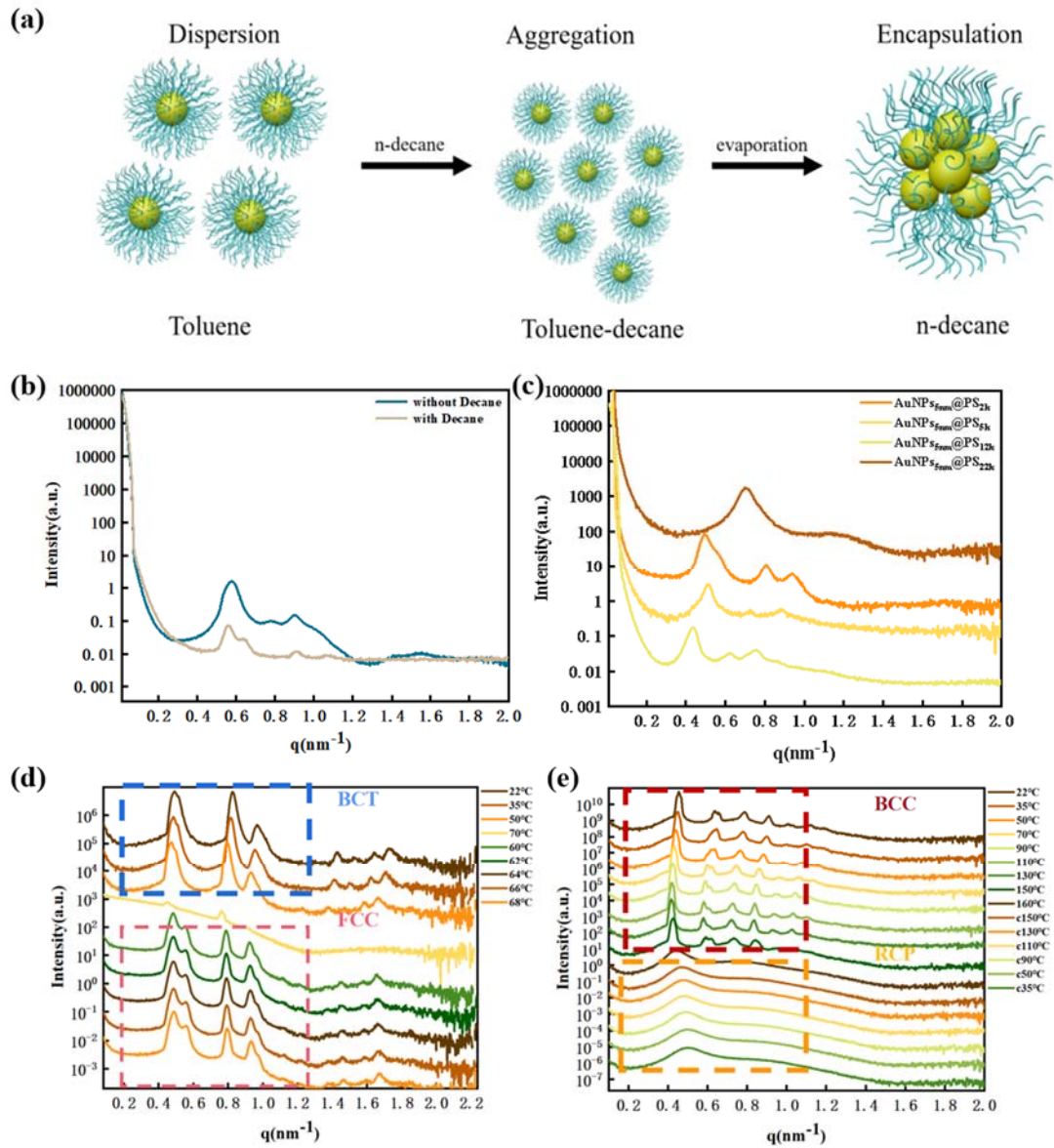


图 (a) 溶剂诱导纳米粒子自组装示意图; (b) AuNPs_{5nm}@PS_{5k} 在不良溶剂存在下的结构转变; (c) AuNPs_{5nm}@PS_{2k}、AuNPs_{5nm}@PS_{5k}、AuNPs_{5nm}@PS_{12k}、AuNPs_{5nm}@PS_{22k} 在不良溶剂存在下的 1D SAXs 曲线; (d) AuNPs_{5nm}@PS_{5k}、(e) AuNPs_{5nm}@PS_{22k} 在不同温度下的 1D SAXs 曲线

参考文献:

1. Qian, Y., da Silva, A., Yu, E. *et al. Nat Commun.* 2021, **12**, 2767.
2. Zhang, H., Wang, W. J., *et al. Nanoscale* 2017, **9**, 8710-8715.

综合X射线散射系统的设计与实现

郭桥雨，焦学琛

国家同步辐射实验室，中国科学技术大学

X射线散射是研究物质微观结构的有力工具，不仅推动了当代材料科学的发展，也是物理、化学和生物等基础和应用研究领域的关键实验技术。目前，我国的上海光源和北京光源能够开展高能及中高能X射线散射与衍射实验，合肥光源可开展软X射线散射实验。大科学装置的实验站中部件复杂，种类丰富，如何简单化、人性化和智能化地开展实验，是线站科学家的关注点之一。其中各设备联用方法学是开发的难点之一，需要开发者了解系统中每一个电控设备的使用方式和功能用处，系统地开发实验功能，降低用户使用实验站的学习成本和减少操作时间，这能够有效地提升大科学装置的影响力。本课题组围绕了多能量段、多原位环境、多实验方案开展了系统的设计与开发。开发多样化的联用功能，如透射多样品采集、掠入射多样品采集、原位环境多样品采集等各项实验功能。

参考文献：

1. Castro R, Makushok Y, Abadie L, Bauvir B, Neto A, Vega J. Storing EPICS process variables in HDF5 files for ITER. Fusion Eng Des. 2023;194:113697.
2. An L, Jiang H, de Camargo Branco D, Liu X, Xu J, Cheng GJ. Self-packaged high-resolution liquid metal nano-patterns. Matter-U.S. 2022;5(3):1016-30.
3. He S, Huang L, Chen X, Zhang X, Wang Z, Lan T, et al. Control system of high-voltage pulse power supply for compact torus injector based on EPICS. Fusion Eng Des. 2023;192:113498.
4. Carvalho P, Duarte A, Pereira T, Carvalho B, Sousa J, Fernandes H, et al. EPICS IOC module development and implementation for the ISTTOK machine subsystem operation and control,2011.
5. Kim M, Yu IK, Kim K, Kyum MC, Kwon M. EPICS implementation for the KSTAR vacuum control system. Fusion Eng Des. 2006;81(15-17 SPEC. ISS.):1823-7.

致谢：

受安徽省地方自然科学基金23年项目资助（项目编号：BJ2310000055）。

间规聚甲氧基苯乙烯溶剂诱导结晶和相转变

王海¹, 门永锋², 崔冬梅², 田代孝二³

1 中石油(上海)新材料研究院有限公司; 2 中国科学院长春应用化学研究所; 3 丰田工业大学(日本)

间规聚苯乙烯(SPS)从熔体结晶可形成 α 和 β 晶体, 在溶剂诱导下可形成 γ 、 δ 、 δ_c 等晶体, 且存在不同晶型之间复杂的转变关系。随着稀土催化的发展, 在苯环上含极性基团的高立构规整度的SPS被合成出来并逐渐成为功能性聚烯烃领域的研究热点之一。因此, 本研究聚焦一系列SPS中苯环邻(O)、间(M)、对(P)位被甲氧基(OMe)取代的SPS, 间规聚甲氧基苯乙烯(OMe-SPS)。基于精确的晶体结构解析, 研究了OMe-SPS在溶剂和温度场下的结晶和相转变行为, 并与SPS形成对比。O-Me-SPS分子链为2/1螺旋构象, 而M-OMe-SPS和P-OMe-SPS则为平面锯齿构象。M-OMe-SPS在溶剂诱导下可以发生与SPS类似的相转变行为, 而O-Me-SPS、P-OMe-SPS没有出现类似现象。

与SPS类似, M-Me-SPS/四氢呋喃(THF)和M-Me-SPS/甲苯(TOL)络合晶体的单斜晶胞均含有2两条反向平行的2/1螺旋链。在溶剂处理和后续加热过程中, SPS及其与溶剂络合的晶体可以发生amorphous- δ_c / δ - γ - α / β 的转变过程, 其中2/1螺旋构象会转变成为平面锯齿构象的分子链。然而, M-Me-SPS可以在晶体状态下发生溶剂诱导相转变, 即发生crystal(β)- δ - γ 转变, 与SPS有显著区别。可以说, 苯环上的极性基团改变了SPS的晶体结构和相转变过程, 是化学结构-晶体结构-物理性质关联的典型代表。

参考文献:

1. Gowd E. B.; Tashiro K.; Ramesh C.; *Progress in Polymer Science* **2009**, 34, 280-315.
2. Wang H.; Men Y.; Tashiro K.; *Frontiers in Soft Matter* **2022**, 2, 1041872.

致谢:

国家自然科学基金项目资助 (#22073015, #21704101)。

同步辐射SWAXS探究iPP纯介晶相在拉伸过程中的相转变行为

臧儒鑫^{1,2}, 门永锋^{1,2}

1 中国科学院长春应用化学研究所; 2 中国科学技术大学

等规聚丙烯(iPP)是现代生活中应用最广泛的塑料之一。iPP的介晶相通常是熔融样品在冰水中快速淬火得到的有序结构。而以介晶相出发进行的系统力学试验室仍然缺乏研究的。所以本工作从纯介晶相出发, 在30 °C、40 °C、50 °C三个温度, 通过上海同步辐射光源进行在线的连续曝光获得了SAXS-WAXD联用数据。SAXS表明样品在30度的拉伸前后样品的晶相并没有发生转变, 一直都是完全的介晶相, SAXS信号没有峰, 说明了介晶相与非晶相的电子密度差异不大, 而在温度升高以后, 40 °C和50 °C实验在样品产生屈服之后都产生了介晶相向 α 相的转变, SAXS曲线出现峰, 说明出现了与非晶区电子密度差异明显的 α 相, 之后在大变形区域, 又出现了峰变小的趋势, 这显示了此时 α 相再次向介晶相的转变, 同时在WAXD之中可也佐证这一点, 在WAXD当中我们通过特征峰位置的变化以及Peakfit软件的分峰拟合得到了不同晶相之后的含量的变化。最后给出了原理解释。

参考文献:

- 1.Corradini, P., et al. Macromolecules, 1986, 19(11):2699-2703.
- 2.Hong, K., et al. Macromolecules, 2004, 37 (26), 10174-10179.
- 3.Haward, R. N., et al. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences 1968, 302 (1471), 453-472.

致谢:

本工作获得了国家自然科学基金项目(22161132007)的支持.

可结晶性聚酰亚胺的结晶行为研究

龚世友^{1,2}, 廖涛¹, 门永锋^{1,2}

1 中国科学院长春应用化学研究所; 2 中国科学技术大学

芳香族聚酰亚胺是一种高性能聚合物材料, 具有优异的热稳定性、耐化学性和优异的机械性, 因此这类聚合物能够用于要求更为严格的领域。而半结晶聚酰亚胺还具有更高的耐溶剂性和在玻璃化转变温度以上保持较好机械性能等优势。

针对一种结晶型的聚酰亚胺树脂 PMDA/BAPB^[1] (结构单元如图 1 所示)。首先通过差示扫描量热仪 (DSC) 和热重分析仪 (TGA), 得到该样品 $T_g = 250^\circ\text{C}$, $T_m = 388^\circ\text{C}$, $T_{d,N2} = 555^\circ\text{C}$ 。再使用 DSC 研究其等温结晶动力学, 结果表明其结晶速度较慢, 半结晶时间随等温结晶温度的升高先降低后升高, 呈现 U 型, 最快结晶速度在 320°C (此时半结晶时间约为 280 s), 说明其低温有利于晶体成核, 高温有利于晶体生长。通过 Hoffman-Weeks 方程^[2]外推得到其平衡熔点为 $T_m^0 \approx 407^\circ\text{C}$ (如图 2 所示)。同时, 该样品在较低温度 (低于 340°C) 进行等温结晶时, 会发生熔融重结晶现象。使用快速扫描量热仪 (FSC) 可以以 500 K/s 的升温速度抑制其熔融重结晶过程。我们还发现, 随着熔融温度的升高以及熔融时间的增加, 样品颜色逐渐变深, 直至黑色, 同时其结晶能力也会减弱。通过 TGA 在

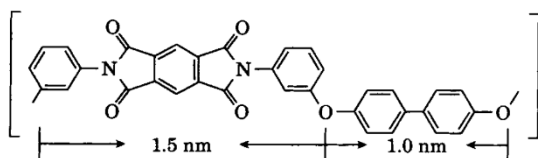


图 1 : 结构单元

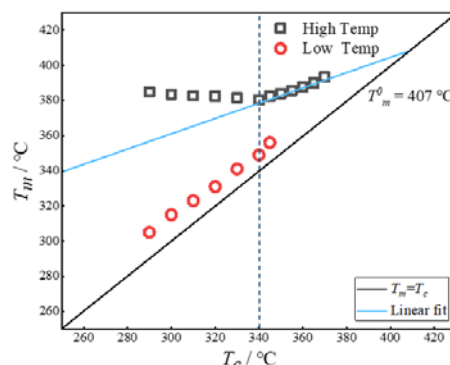


图 2 : 外推得到平衡熔点为 $T_m^0 \approx 407^\circ\text{C}$

450°C 长时间恒温可以初步确定其在熔融过
于实际加工应用具有非常重要的价值。

参考文献：

[1] Hsiao, et al. *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics* **1994**, 32(4), 737-747.

[2] Hoffman J. D, et. al. *Treatiseon Solid State Chemistry* 1976, 3, 497-614.

致谢：国家重点研发计划项目资助（2022YFB3707304）

同步辐射 SAXS 在煤尘爆炸研究中的应用前景

吉校兰^{1,2}, 李志宏¹, 王远洋²

1 中国科学院高能物理研究所; 2 太原科技大学

煤炭作为一种多孔碳材料,是重要的能源和化工原料。然而,煤尘爆炸是煤炭工业中的严重安全隐患,会造成严重的经济损失和人员伤亡。深入研究其微观机制显得尤为重要,其中煤的孔隙结构变化在一定程度上反映出煤尘爆炸机理。一方面,煤的孔隙为挥发分的释放和外界物质的进入提供了路径,影响传热传质速率和表面反应,从而影响爆炸行为。另一方面,爆炸产生的高温高压、热解产物等,会导致煤尘的孔隙结构发生显著变化。

目前,传统研究方法难以提供爆炸过程中孔隙结构的实时动态信息。同步辐射时间分辨小角X射线散射(SAXS)方法通过检测散射光的角度和强度变化,可以提供样品内部微观结构的实时变化,尤其适用于研究纳米尺度的孔隙结构变化,具有高时间分辨率、高灵敏度和非破坏性等优点。因此,本研究利用同步辐射时间分辨SAXS方法,实现对爆炸过程中孔隙结构的实时监测,从而获得孔隙变化的动态规律,为揭示煤尘爆炸机理提供实验数据。

参考文献:

1. Cashdollar, K. L. Coal dust explosibility. *J. Loss Prev. Process Ind.* 9, 65–76 (1996).
2. Grigoriew, H., Luboradzki, R. & Cunis, S. In Situ Studies of Monosaccharide Gelation Using the Small-Angle X-ray Scattering Time-Resolved Method. *Langmuir* 20, 7374–7377 (2004).

PAN基碳纤维原丝纺丝过程的结构演化

王季平，张巍松

常州工学院 化工与材料学院 碳纤维新材料产业学院

碳纤维质量比金属铝轻，但强度却高于钢铁，具有耐腐蚀、高强度、高模量的特性，是国防军工和民用领域的关键材料。聚丙烯腈（PAN）纤维是应用最广泛的碳纤维前驱体，其结构特点从根本上决定了碳纤维结构和性能^{1,2}。此外，由于PAN链间的强氢键作用，导致PAN纺丝以溶液纺丝为主。因此，揭示纺丝过程PAN多层次结构演化机理，对制备高性能碳纤维有重要的理论指导价值。本研究应用WAXS和SAXS表征手段，通过对比湿法和干喷湿纺工艺过程中晶体结构、片晶取向、孔洞等多尺度结构形成过程的差异，揭示纺丝过程的结构演化机理。结果表明，在凝固阶段，对与干法工艺来说，晶体和孔的取向结构已基本成型；而湿法工艺在凝固阶段主要发生相分离，且形成的相分离结构更接近球形，取向度较低；此外，尽管干燥之前，湿法和干湿法纤维表现出截然不同的结构特点，然而经过蒸汽牵伸之后得到的PAN原丝，定性来看表现出类似的聚集态结构，这可能说明牵伸在很大程度上可以消除早期工艺过程形成的结构记忆³。

参考文献：

1. Jian He, Qiufei Chen, Hongqiang Zhu, Yuhang Wang, Hamza Malik, Bomou Ma, Xueli Wang, Hui Zhang, Yong Liu,* and Jianyong Yu. 2024, *ACS Appl. Polym. Mater.* 6, 1781–1789
2. Jiaojiao Li, Yuxiu Yu, Haojie Li, Yaodong Liu; 2021 *J Appl Polym Sci.* ;138:e50988
3. Luo, W.; Yu, Y.-H.; Wang, J.-P.; Hu, W.-B.* . 2022 *J. Chem. Phys.* 156, 144904

致谢：

国自然青年基金项目资助（22403010）。

溶剂蒸汽加速聚丁烯-1晶型转变的机理探究

姜继超^{1,2}, 宋新月¹, 张吉东^{1,2}

1 中国科学院长春应用化学研究所; 2 中国科学技术大学

聚丁烯-1 (iPB-1)从熔体中结晶优先生成动力学优势的晶型II, 而后经过长达数周的晶型生成稳定的晶型I, 这严重限制了其应用¹。在过去的几十年中, 大量研究表明拉伸应力²、高压³、分步退火⁴等均能加速II-I的转变过程, 其中溶剂蒸汽退火可以显著促进晶型转变速度⁵, 但其机理尚不清楚。我们通过WAXD和SAXS技术, 对溶剂蒸汽退火对iPB-1从晶型 II 向晶型 I 转变的加速机制进行了探究。在正己烷蒸气退火过程中, WAXD中晶型 II 的 (200) 和 (213) 衍射峰首先向低角度移动, 随后向高角度偏移。这一现象表明晶格常数发生了变化, 其中 c 轴最初主要受到压缩, 而 a、b 轴则呈现膨胀, 揭示了内部应力的存在, 而这种应力是加速晶型转变的关键因素。进一步通过弹性模型对内应力进行了定量表征, 发现应力随时间先上升至 0.6 MPa, 随后下降并稳定在 0.2 MPa的平台值。原位SAXS表明, 溶剂渗透到无定形区域时会引发膨胀从而产生内应力。结果表明这种由膨胀引起的内应力可显著促进晶型I成核, 是晶型转变加速的重要驱动力。

参考文献:

1. Miller, R. L.; Holland, V. F. *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Letters* 1964, 2 (5), 519.
2. De Rosa, C.; Auriemma, F.; Malafronte, A. *Macromolecules* 2014, 47 (3), 1053.
3. Nakafuku, C.; Miyaki, T. *Polymer* 1983, 24 (2), 141.
4. Qiao, Y.; Wang, Q.; Men, Y. *Macromolecules* 2016, 49 (14), 5126.
5. Kaszonyiova, M.; Rybnikar, F.; Geil, P. H. *Journal of Macromolecular Science, Part B* 2004, 43 (5), 1095.

致谢:

国家自然科学基金面上项目资助 (52373027) .