

新解机器学习启发的“电荷转移络合物”

机器学习自由基交替共聚，并经过降维处理后的模拟结果示意图

高分子科学系陈茂课题组(PolyMao)将蒙特卡洛动力学模拟与机器学习贝叶斯优化相结合,绘制了传统自由基共聚反应的分子量分布谱图,近日意外发现交替共聚反应具有产生低分散共聚物的显著趋势(MWD<1.5)。该工作揭示了传统自由基交替共聚中影响分子量分布的新规律,为调控MWD提供了新途径。

陈茂课题组在研究中建立的机器学习-蒙特卡洛模拟框架有望为不同聚合反应研究提供新思路,该工作以“Low-Dispersion Polymers via Free Radical Alternating Copolymerization: Effects of Charge-Transfer-Complexes”为题发表在《德国应用化学》(Angew. Chem. Int. Ed. 2024, doi.org/10.1002/anie.202409744)。

聚合物分子量分布或分散度(MWD)对材料加工性能、机械性能、凝聚态结构等方面有显著影响。为了调节分子量分布,可通过聚合物共混或优化聚合工艺实现。自由基聚合是制备高分子的最重要方法之一,在全球聚合物年产量中贡献了约45%,但该类传统合成方法从聚合机理上难以实现窄分子量分布(MWD<1.5),导致以此为基础的工艺技术只能利用宽分布聚合物进行后续操作。近年来,美国Cornell大学、瑞士ETH、澳大利亚UNSW等单位的科研人

员利用“可控/活性”自由基聚合对分子量分布的定制调控展开了系列报道,但对于工业应用更广的传统自由基聚合而言,仍有很大挑战。

该发现与传统聚合的实验结果出现了矛盾,如苯乙烯与马来酸酐交替共聚物的MWD>2.0。长期以来,传统自由基交替共聚的机理分为两类,围绕是否由“电荷转移络合物(CTC)”作为加成单元、参与链增长展开了多年争论,绝大多数学者认为CTC占据了主导机制。陈茂团队的机器学习方案主动避免了CTC干预,发现了不同寻常的MWD趋势,揭示了在传统交替共聚中有望通过影响CTC调控MWD,首次提出了“低CTC”获得窄MWD、“高CTC”获得宽MWD的假设。以此为基础,研究团队合成了超过30种不同化学结构的交替共聚物(MWD<1.4),实现了二元、三元、四元交替共聚反应,制备了十克级的共聚产物。

高分子科学系谷宇博士为文章第一作者,高分子科学系陈茂教授为通讯作者。该项研究受到国家自然科学基金、上海市科委、复旦大学高分子科学系、聚合物分子工程国家重点实验室的大力支持。

全文链接: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.202409744>

来源:高分子科学系

微电子学院多项成果亮相JSSC

微电子学院ICD实验室的徐佳伟、洪志良教授与国内知名企事业单位开展产学研合作,分别开发了应用于TMR磁传感器、心率血氧采集、生物阻抗测量的高精度模拟前端芯片,以及用于电池供电设备中的低纹波电源管理芯片。

智能传感芯片在工业控制、医疗诊断、数据采集等应用中起着至关重要的作用。在这些应用中,具有低纹波特性的电源芯

片提供精确、稳定的电力,确保系统的可靠运行,在保持信号完整性和减少干扰方面发挥着关键作用。

四项合作成果近期发表于国际固态电路权威期刊 IEEE Journal of Solid-State Circuits(JSSC),论文第一作者分别为瞿天翔(博士后)、姚畅(硕士)、潘钦竞(博士)、曹鹏(博士后)。

来源:微电子学院

为深入挖掘古代中国艺术遗存的价值,全面分享和讨论艺术史及相关研究的最新成果,文史研究院于2024年11月30日至12月1日组织“山海之间——古代中国跨区域艺术史青年论坛”学术研讨会。

古代中国文化艺术汲取百家之长,既能立足自身传统与特色,亦积极吸收多元文明精华,在铸就自身辉煌文化丰碑的同时,借助陆上丝绸之路与海上丝绸之路等交通干线影响了亚欧大陆在内的广袤地区。此种跨区域交流通过思想宗教、物质经贸等领域的频繁往来,从而推进了各民族在文化交融与艺术创作上的互动,并呈现出各方和谐融汇的恢弘图景。

会议第一版块的主题为“异

域之眼——墓葬艺术与文化交流”,推出《西风东渐:汉代及其以前的水滴纹金饰》《四川汉代面具中的异域元素》《东亚海域中的高句丽石室壁画墓》三场报告;第二版块主题为“丹青隐没——古代墓葬与区域传播”,推出《北魏迁都与帝陵新变》《试论河朔地区宋代墓葬的营造过程》两场报告;第三版块主题为“窟中万方——石窟寺与跨文化互动”,推出《从印度到敦煌——佛教与六师舍卫城斗法故事图文的演进与发展》《一步降凡——山海之间的佛足迹》《从西夏官阙故地到北宋护国万菩萨堂——陕西子长钟山石窟营建背景与洞窟思想臆测》《西藏阿里帕尔嘎尔布石窟赞神壁画探析——兼论于阗艺术在赞神图像演

变中的关键地位》四场报告;第四版块主题为“梵像乾坤——丝路沿线多民族佛教艺术”,运用跨学科的方法,离开传统艺术史研究对“物”本身的注目,而关注“物”背后的观念。第五版块主题为“他山之石——东西方文明互通互鉴”,研讨从考古学、图像研究、技术史研究的成果可以很好地启迪、弥补、超越传统历史学研究。

本次论坛聚集了来自不同学科、学术背景各异的研究人员,与会者带来的报告在个案讨论与专题精析的基础上,均呈现出广阔的视野与清晰的脉络。论坛令许多观点与思维得以碰撞、交流,有效地激发了研究者对古代中国跨区域艺术史更深层次的思考。

来源:文史研究院

七

复旦大学环境科学智能研究中心于2024年12月17日成立,这是学校深入推进学科交叉创新的重要举措。中心将立足国家重大战略需求,推动环境科学研究范式变革,为生态文明建设和碳中和目标实现提供有力支撑,为全球环境治理贡献“复旦智慧”和“复旦方案”。

环境科学与工程系主任、环境科学智能研究中心主任王琳教授介绍了研究中心的整体情况,

在已有研究项目和教学设计的基础上,未来中心将重点围绕大气环境智能模拟与预测、智能化污染物识别治理与健康风险评价、城市韧性和极端气候事件应对、生态系统智能检测与评估四个重点方向开展工作,在科研创新、人才培养和平台建设上做重点布局,以期打造国际一流的环境科学与人工智能交叉创新平台。

中心的成立,标志着复旦环境学科在智能化转型方面迈出

\$" \$&

学校12月17日上午举行2024年度科技伦理线上培训会。理工医各院系师生、部分附属医院研究人员、校内二级伦理委员会委员和秘书等300余人参加培训。

马克思主义学院朱伟副教授作题为“从‘受试者’到‘研究参与者’理念的演进——《赫尔辛基宣言》2024版解读”的报告,详细介绍了2024版《赫尔辛基宣言》与以往版本的不同之处,讲解保护患者/研究参与者

理念的历史演进,强调了“自由和知情的同意”等概念。生命科学院杨亚军教授作题为“高校科研活动中常见伦理问题解析与思考”的报告,介绍新出台的伦理法律法规,强调科研用人类生物样本的存储管理需要合法合规,详细说明需要进行伦理审查的情形,及伦理审查的大致流程、审批周期、需要提交的伦理材料及其如何填写等内容。实验动物中心强苏静作题为“实验动物伦理和伦

理审核要点及常见问题”的报告,阐述实验动物福利和伦理的相关概念,如动物福利的五项自由,实验动物伦理的3R原则等,详细介绍实验动物伦理审核要点及常见问题。

本次培训内容将理论与实践相结合,从理论知识的深入讲解,到伦理审查实务均有涵盖,提高了师生对国家最新法规政策和伦理规范的认识。

来源:科学技术研究院

“上海市职业病危害(粉尘、噪声、电离辐射)工程防护技术指导中心”授牌仪式2024年12月24日举行,复旦大学放射医学研究所被列入“上海市职业病危害(电离辐射)工程防护技术指导中心”共建单位。

工程防护技术指导中心由上海市疾病预防控制中心和复旦大学、上海交通大学、同济大

学、上海市计量测试技术研究院联合成立。其中,电离辐射工程防护持术中心由上海市疾病预防控制中心、复旦大学放射医学研究所和上海市计量测试技术研究院等三家单位联合组成,主要承担本市放射性职业病危害防护工程设计、工程控制技术和装备、工程治理、个人防护等相关法规政策标准研究、技术研

发、技术评估、技术指导及技术筛选、推广、应用等工作。复旦放射医学研究所将依托原有的合作共建平台基础,主动服务国家核电建设和核医疗产业发展,积极推进放射损伤医学防护和辐射监测技术方面的优势互补与协作,更好助力上海市核技术应用产业发展。

来源:放射医学研究所