

# Research of the Properties of Hydrogels with Various Water Contents

Lin Wei, Jie Wu, Rongrong Yu\*, Xiaojian Hui

School of Science, Xijing University, Xi'an Shaanxi  
Email: yrr2009@126.com

Received: Oct. 26<sup>th</sup>, 2018; accepted: Nov. 9<sup>th</sup>, 2018; published: Nov. 16<sup>th</sup>, 2018

---

## Abstract

In this paper, CBMA hydrogel is used as the research object and then the change of hydrogel index under different water contents is mainly discussed. First of all, molecular dynamics model of hydrogel is provided. It is simulated that lifetime autocorrelation functions are expressed with variation trends as the time scale increases. Furthermore, it is shown that a large decrease in characteristic lifetime of side-chain pairs occurs between 62% water content and 71% water content. Finally, the number of side-chain pairs in hydrogels decreases quickly over 62% water content according to the simulation results. This point is the same as the results of the available experimental results.

## Keywords

Hydrogel, Water Content, Lifetime

---

# 不同含水量下水凝胶的性能研究

魏林, 武婕, 于蓉蓉\*, 惠小健

西京学院理学院, 陕西 西安  
Email: yrr2009@126.com

收稿日期: 2018年10月26日; 录用日期: 2018年11月9日; 发布日期: 2018年11月16日

---

## 摘要

本文以CBMA水凝胶为研究对象, 进而讨论不同含水量下的水凝胶的指标变化情况。首先, 我们给出水凝胶的分子动力学模型, 并且模拟随着时间的增加, 侧链的寿命自相关函数表现出不同的变化趋势。其

\*通讯作者。

次, 在含水量为62%至71%之间, 侧链对的特征寿命表现出大幅下降的趋势。最后, 研究发现CBMA水凝胶中侧链对的数目在含水量大于62%时数目逐渐减少。模拟结果与已有的实验结果保持一致。

## 关键词

水凝胶, 含水量, 寿命

Copyright © 2018 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

近年来, 随着航空航天、生命、环境等领域科学技术的不断发展和日益创新, 人们需要研发特定的材料或制造更加专门的器件来实现一些特殊的功用。软性器件的诸多优点促进了软性器件的蓬勃发展, 其良好的发展态势又进一步促进了软物质的大量研究, 对软物质力学的研究已成为力学学科的一个新的热点研究方向。水凝胶作为一种软性固体物质, 它的形成机理是当交联聚合物网络与溶剂接触, 小分子迁移进入聚合物网络, 从而形成所谓的溶胀态聚合物凝胶。聚合物凝胶是具有可逆大变形的弹性材料。研究聚合物凝胶在多场耦合激励下的凝胶变形机理及力学行为将是非常重要的, 它是一个多学科交叉课题, 将涉及力学, 物理, 化学, 材料, 生命科学等, 是当今最具有挑战的高技术前沿研究领域之一。

水凝胶是水膨胀的亲水聚合物网络, 含有大量的水。有关水凝胶的研究[1] [2], 特别是对由羧甜菜碱甲基丙烯酸甲酯(CBMA)和亚硫代苯基甲基丙烯酸酯(SBMA)这些分子材料组成的水凝胶的研究在过去的几年里已经有了显著的增长趋势。刺激响应性水凝胶能够感知外界环境的微小变化(例如温度、PH 值离子强度、光、电场和磁场等), 并通过自身体积的膨胀和收缩来响应外界的刺激。敏感型水凝胶的上述特点, 使其在药物控制释放、物质分离提纯和生物材料培养等方面有广泛的应用前景, 如人工组织工程[3] [4] [5], 药物输送[4] [6] [7] [8], 流量控制[9]和传感器[10]等。由于凝胶的高含水性以及良好的生物相容性, 凝胶是很好的生物组织替代材料, 也是用于农用薄膜的好材料。由于凝胶的溶胀特性, 环境敏感性凝胶可用于药物的输送与控制。例如, 温敏性凝胶已被广泛用作药物输送系统, 通过响应温度的变化从而控制药物的释放[7]。凝胶在工程中也有广泛的应用, 例如水处理和石油勘探及生产等方面, 它可用于油井密封和水油分离[11]。国外已有研究学者提出了多种凝胶溶胀行为的研究模型。Seung [12], He [13]和Seung [14]等人采用分子动力学研究了不同含水量情况下水凝胶的扩散和力学性能。

本文中我们研究在不同含水量下 CBMA 水凝胶中侧链的寿命自相关函数、侧链对的特征寿命、侧链对的数目的变化情况。通过已有的研究, 不同含水量下水凝胶的特性。然而, 我们所做的一系列研究是为我们探讨水凝胶对农用薄膜的研究打下基础, 进而从科学、环保、实用等角度来研究水凝胶的选取。

## 2. 水凝胶的分子动力学模型[13]

这个模型主要克服水凝胶动态交叉连接及其与膨胀态度的关系, 分子动力学模拟技术是很好的适合提供详细的结构和动态信息, 通过下面的模型来了解水凝胶的聚合物网络和结构。作为一个自然的交叉连接, 左旋侧链对之间的连接应该是足够稳定的, 以至于水凝胶的结构是稳定的。为了描述一个自然的交叉连接的稳定性, 我们通过下面的表达式来评估了左旋侧链对寿命的自相关函数。

$$C_{pair}(t) = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} \frac{\langle P(0)P(t) \rangle}{\langle P(0) \rangle^2}$$

其中如果左旋侧链对在时间  $t$  存在时,  $P(t)$  是一个等于 1 的二元函数, 否则,  $P(t)$  等于 0; 当时间等于 0 时,  $N_p$  是水凝胶中左旋侧链对的个数; 断括号 ( $\langle \rangle$ ) 表示总体平均值。寿命相关函数的慢衰变表示左旋侧链对之间的关系更稳定。为了更清晰的了解自相关函数的变化规律, 我们画出相应的图形。羧甜菜碱甲基丙烯酸甲酯(CBMA)水凝胶作为含水量的函数, 如图 1 绘制出 CBMA 水凝胶中侧链的寿命自相关函数。

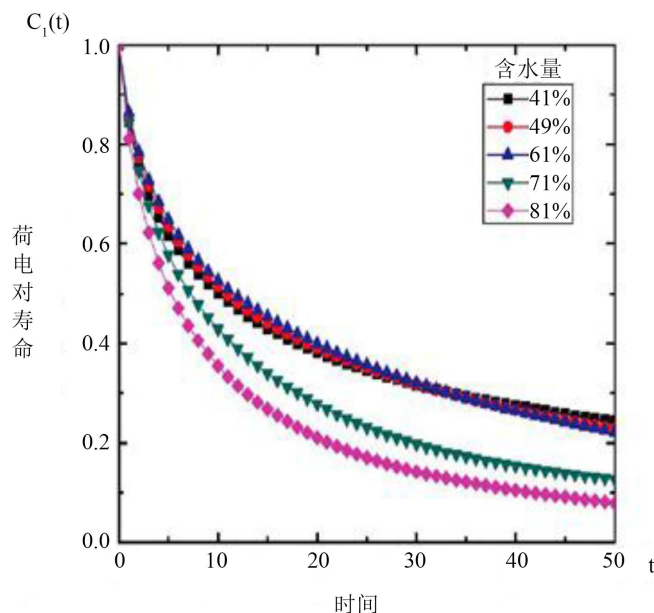


Figure 1. Lifetime autocorrelation functions in the CBMA hydrogels  
图 1. CBMA 水凝胶中侧链对的寿命自相关函数

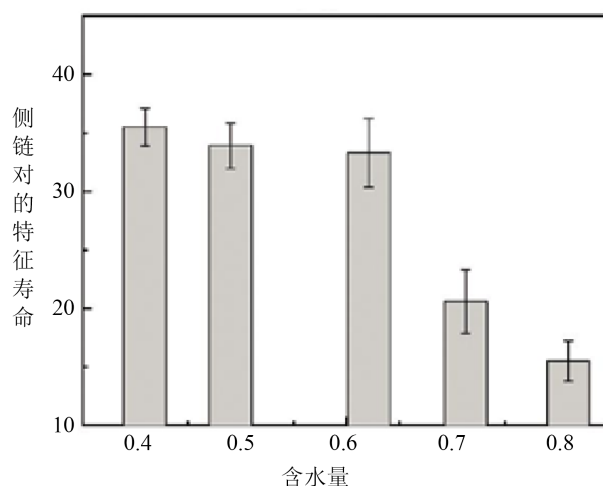
从图 1 中把时间  $t$  作为横坐标, 作为水含量函数的荷电对寿命  $C_1(t)$  作为纵坐标, 我们观察到随着时间的逐渐增加, 结果表明, 当含水量超过 62% 时, 两性离子对的寿命迅速下降。另一方面, 当水含量低于 62% 时, 两性离子对的寿命曲线基本相同, 衰减较慢, 表明存在稳定的缔合关系, 即物理交联。

为了定量地测量这一差异, 通过将指数衰减函数拟合到  $C_{pair}(t)$  曲线上, 得到了平均寿命如下:

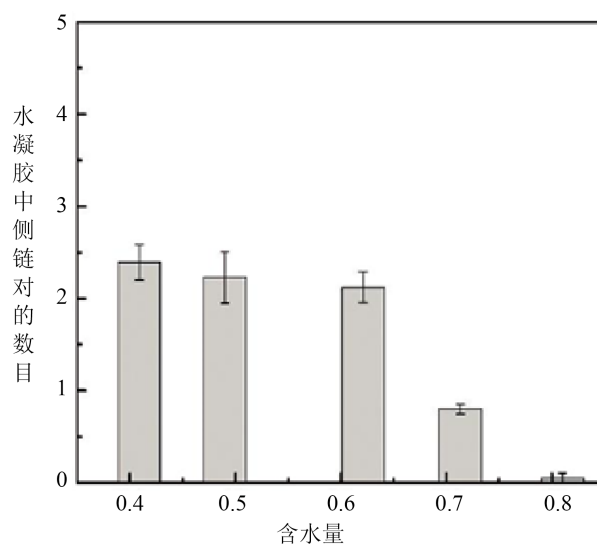
$$C_{pair}(t) = A_p \exp\left(-\frac{t}{\tau_p}\right)$$

其中  $A_p$  是振幅,  $\tau_p$  是平均寿命。以含水量为横坐标, 侧链对的特征寿命作为纵坐标, 画出特征寿命的变化趋势, 如下图 2。

图 2 中含水量作为横坐标, 侧链对的特征寿命作为纵坐标, 画出水凝胶中侧链对的特征寿命。我们观察到图 2 中计算的平均寿命表明, 在含水量为 62% 至 71% 之间, 寿命大幅度下降。另一面, 含水量小于 62% 的平均寿命变化不是很大。这是由于水凝胶中存在过量的水而导致水凝胶内部物理交联的断裂, 表明 62% 的水含量是两性离子 CBMA 水凝胶达到平衡溶胀状态的含水量。通过不同含水量下水凝胶的两性离子侧链对的平均数目, 两性离子物理交联的破坏也得到证实。以水含量为横坐标, 水凝胶中侧链对的数量作为纵坐标, 画出如图 3 中在不同含水量下 CBMA 水凝胶中侧链对的数目。



**Figure 2.** Characteristic lifetimes in the CBMA hydrogels  
**图 2.** CBMA 水凝胶中侧链对的特征寿命



**Figure 3.** Number of side-chain pairs in the CBMA hydrogels  
**图 3.** CBMA 水凝胶中不同含水量下侧链对的数目

图 3 中横坐标是含水量，纵坐标是水凝胶中侧链对的数目。从图 3 中显示，含水量大于 62% 的情况下，CBMA 水凝胶中侧链对数目迅速减少。本研究中的水凝胶模型代表了一个完美的化学交联聚合物网络。有趣的是，在本研究中发现的平衡含水量接近于已有实验[15]确定的高交联物含量(100%)的一个相似 CBMA 水凝胶的平衡含水量。较高的交联剂含量通常表明聚合物网络更接近于完美交联。实验中 Carr 等人报告说，它们的水凝胶的平衡含水量大约 60%，这与本工作的模拟结果非常接近。因此，侧链对的寿命可以作为确定两性离子水凝胶平衡溶胀状态的另一种方法。

### 3. 结论

我们给出了 CBMA 水凝胶分子模型在不同含水量下的侧链的寿命自相关函数、侧链对的特征寿命和侧链对数目的研究情况。从图 1 中根据我们的模拟结果，随着时间的逐渐增加，当水含量不足 62% 时，两性离子对的寿命曲线基本相同，衰减相对；当水含量大于 62% 时，两性离子对的寿命迅速下降；从图

2 中, 我们可以看出在含水量为 62%至 71%之间, 寿命大幅度下降。表明 62%的水含量是两性离子 CBMA 水凝胶达到平衡溶胀状态的含水量; 图 3 可以发现, 模型表现出了含水量超过 62%是, 水凝胶中侧链对数目逐渐减少。在此的讨论, 让我们更好地了解不同含水量对水凝胶的影响, 也为进一步的研究水凝胶在农用薄膜上的研究打下基础。

## 参考文献

- [1] Kloxin, A.M. and Anseth, K.S. (2008) Protein Gels on the Move. *Nature*, **454**, 705-706. <https://doi.org/10.1038/454705a>
- [2] Susanto, H. and Ulbricht, M. (2007) Photografted Thin Polymer Hydrogel Layers on PES Ultrafiltration Membranes: Characterization, Stability, and Influence on Separation Performance. *Langmuir*, **23**, 7818-7830. <https://doi.org/10.1021/la700579x>
- [3] Drury, J.L. and Mooney, D.J. (2003) Hydrogels for Tissue Engineering: Scaffold Design Variables and Applications. *Biomaterials*, **24**, 4337-4351. [https://doi.org/10.1016/S0142-9612\(03\)00340-5](https://doi.org/10.1016/S0142-9612(03)00340-5)
- [4] Longer, P. (2006) Biomaterials for Drug Delivery and Tissue Engineering. *MRS Bulletin*, **31**, 477-485. <https://doi.org/10.1557/mrs2006.122>
- [5] Kaneko, D., Gong, J.P. and Osaka, Y. (2002) Polymer Gels as Soft and Wet Chemomechanical Systems—An Approach to Artificial Muscles. *Journal of Materials Chemistry*, **12**, 2169-2177. <https://doi.org/10.1039/B109981G>
- [6] Quick, Y. and Park, K. (2012) Environment-Sensitive Hydrogel for Drug Delivery. *Advanced Drug Delivery Reviews*, **64**, 49-60. <https://doi.org/10.1016/j.addr.2012.09.024>
- [7] Ramanan, R.M.K., Chellamuthu, *et al.* (2006) Development of a Temperate-Sensitive Composite Hydrogel for Drug Delivery Applications. *Biotechnology Progress*, **22**, 8. <https://doi.org/10.1021/bp0501367>
- [8] Quick, Y. and Park, K. (2001) Environment-Sensitive Hydrogel for Drug Delivery. *Advanced Drug Delivery Reviews*, **53**, 321-339. [https://doi.org/10.1016/S0169-409X\(01\)00203-4](https://doi.org/10.1016/S0169-409X(01)00203-4)
- [9] Dong, L., Agartala, A.K., Bebe, D.J., *et al.* (2006) Adaptive Liquid Microlenses Activated by Stimuli-Responsive Hydrogels. *Nature*, **442**, 551-554. <https://doi.org/10.1038/nature05024>
- [10] Li, H., Yuan, Z., Lam, K.Y., *et al.* (2004) Model Development and Numerical Simulation of Electric-Stimulus-Responsive Hydrogels Subject to an Externally Applied Electric Field. *Biosensors and Bioelectronics*, **19**, 1097-1107. <https://doi.org/10.1016/j.bios.2003.10.004>
- [11] Kleverlaan, M., Vannoort, R.H. and Jones, L. (2005) Deployment of Swelling Elastomer Packers in Shell E&P. Presented at the SPE/IADC Conference, Amsterdam.
- [12] Seung, S.J., William, A.G. and Kanlani, M.Y.S. (2007) Mechanical and Transport Properties of the Poly(ethylene oxide)-Poly(acrylic acid)double Network Hydrigel from Molecular Dynamic Simulations. *Journal of Physical Chemistry B*, **111**, 1729-1737. <https://doi.org/10.1021/jp0656330>
- [13] He, Y., Shao, Q., Tsao, H.K., *et al.* (2011) Understanding Three Hydration-Dependent Transitions of Zwitterionic Carboxybetaine Hydrogel by Molecular Dynamics Simulations. *Journal of Physical Chemistry B*, **115**, 11575-11580. <https://doi.org/10.1021/jp204682x>
- [14] Seung, G.L., Giuseppe, F.B., Seung, S.J., *et al.* (2009) Molecular Dynamics Simulation Study of P(VP-co-HEMA) Hydrogels: Effect of Water Content on Equilibrium Structures and Mechanical Properties. *Biomaterials*, **30**, 6130-6141. <https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2009.07.035>
- [15] Carr, L.R., Xue, H. and Jiang, S.Y. (2011) Functionalizable and Nonfouling Zwitterionic Carboxybetaine Hydrogels with a Carboxybetaine Dimethacrylate Crosslinker. *Biomaterials*, **32**, 961-968. <https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2010.09.067>

**知网检索的两种方式：**

1. 打开知网页面 <http://kns.cnki.net/kns/brief/result.aspx?dbPrefix=WWJD>  
下拉列表框选择：[ISSN]，输入期刊 ISSN：2330-1724，即可查询
2. 打开知网首页 <http://cnki.net/>  
左侧“国际文献总库”进入，输入文章标题，即可查询

投稿请点击：<http://www.hanspub.org/Submission.aspx>

期刊邮箱：[ojs@hanspub.org](mailto:ojs@hanspub.org)