

研究目标

本项目的重点是解决含有固有饱和键或由反应引发产生饱和键的聚合物材料（IRUP，如聚氯乙烯（PVC）、橡胶（NR、SBR）、ABS 树脂等）的升级回收难题。通过创新性地引入规整催化阵列的概念，系统研究高分子链在阵列位点上的构象和吸附动力学，以了解它们如何影响分解路径；通过结合热力学（吸附环境）和动力学（空间限域）的协同效应，进一步发展由规整催化阵列诱导的 IRUP 材料分解反应调控方法论；最终揭示催化阵列与分解反应的构效关系，为 IRUP 材料的循环提供技术方案。

研究背景

目前，约 30%的合成塑料可归属于 IRUP 材料（如聚氯乙烯、橡胶、ABS 树脂等）。现有的催化策略主要集中在化学键层面的反应，而忽视了对整个聚合物链的均匀调控。由于这些材料易于自聚合的特性，其焦化副反应无法得到有效抑制。为了解决这个问题，我提出使用催化阵列对聚合物链进行整体均匀的催化。初步实验和部分文献已经显示出这种方法在链分解反应中的潜在优势和更高的精准度。本研究将深入挖掘前期实验结果，建立规整催化阵列诱导的 IRUP 材料分解反应调控方法和理论，推动 IRUP 材料的高选择性升级回收。

研究内容

- 1. 建立催化阵列材料的制备和合成方法：**本研究将建立催化阵列材料的合成方法，包括碳基、硅基、有机金属框架基、共价有机框架基材料等。
- 2. 分析 IRUP 的分解路径：**结合催化阵列材料，将揭示催化阵列对 IRUP 热解路径的调控规律，明确催化阵列在选择性分解反应路径中的热力学和动力学贡献，建立分解机理。
- 3. 研究热力学/动力学协同的反应调控：**利用环境诱导的热力学和动力学聚合物链吸附，进行链的吸附态原位表征，建立催化剂位点、密度与孔结构和裂解产物之间的构效关系。

预期成果

- 1. 解析催化阵列调控机制：**建立聚合物链在规整催化阵列上的吸附动力学与构象演化模型，明确链吸附状态如何影响 IRUP 的选择性裂解路径。
- 2. 创制热力学/动力学协同调控方法：**提出吸附热力学与动力学协同的策略，建立催化剂和裂解产物的定量构效关系，形成催化阵列体系的设计方法。
- 3. 形成 IRUP 材料的升级回收解决方案：**申请 5 项专利、发表 2-5 篇 SCI 论文，推动 ABS、PVC 等 IRUP 材料的闭环循环，建立以催化剂工程、反应器工程和聚合物分解化学为核心的绿色化学研究团队。