



水下黏附凝胶的设计: 从仿生经验到数据驱动

范海龙^{1*}, 杨虎^{2*}

1. 深圳大学化学与环境工程学院, 深圳 518071

2. 中央财经大学信息学院, 北京 100081

* 联系人, E-mail: fanhl@szu.edu.cn; hu.yang@cufe.edu.cn

Design of underwater adhesive hydrogels: from biomimetic experience to data-driven approaches

Hailong Fan^{1*} & Hu Yang^{2*}

¹ College of Chemistry and Environmental Engineering, Shenzhen University, Shenzhen 518071, China

² School of Information, Central University of Finance and Economics, Beijing 100081, China

* Corresponding authors, E-mail: fanhl@szu.edu.cn; hu.yang@cufe.edu.cn

doi: 10.1360/CSB-2025-5454

水下黏附材料是一类能够在潮湿或水环境中表现出优异黏附性能的功能材料, 适用于复杂水环境下的装置修复、组织黏合及智能机器人等前沿领域, 是支撑海洋工程装备和高端生物医用器械的关键基础材料, 具有广阔的应用前景和重大战略价值^[1]。然而, 其研发仍面临核心科学挑战: 其一, 水分子在界面间形成稳定水合层, 阻碍材料与基底的有效接触, 显著降低黏附效率; 其二, 水分子的持续渗透会引发材料溶胀或水解, 使黏附性能随时间衰减, 难以实现长期稳定。如何高效破除界面水合层并赋予材料在水下环境中的持久稳定性, 是当前制备高性能水下黏附材料亟需突破的核心科学问题^[2]。

仿生是当前制备水下黏附材料的核心策略。自然界中, 贻贝、藤壶等生物依赖黏附蛋白在水下实现稳定附着, 其序列中富含多酚类、带电基团等特殊官能团, 在维持黏附力方面发挥关键作用, 为人工设计提供了直接的分子模板^[3]。基于此, 研究人员通过模仿这些官能团并结合经验性优化配比, 已经开发出一系列具备水下黏附性能的聚合物材料。然而, 这种策略仍有明显局限: 一方面, 设计过程依赖经验, 聚合物合成中单体序列排列高度随机, 使官能团间的协同效应难以稳定重现, 难以积累高质量的数据集; 另一方面, 缺乏对复杂分子作用关系的系统化认知, 难以通过传统实验方法直接锁定影响性能的关键结构参数, 制约了材料性能的进一步优化

与新材料的高效设计。

人工智能在无机固体、合金等原子结构明确的体系中已展现出巨大潜力, 其成功依赖于大量高质量数据的支撑, 使得模型能够捕捉结构与性能之间的映射规律。然而, 这一范式难以直接迁移到高分子功能材料, 特别是水下黏附凝胶的研究中^[4]。原因在于, 黏附性能不仅由化学组成决定, 还受到分子间弱相互作用、热扰动效应、聚合网络构型及介观尺度结构等多重因素耦合作用, 导致其构效关系高度复杂且难以通过传统模拟与实验高效解析; 与此同时, 聚合物合成过程中的序列不可控性, 使得难以系统获取覆盖充分的数据集。这种“结构复杂性与数据稀缺性并存”的特征, 正是制约人工智能在水下黏附材料领域广泛应用的根本障碍。

基于此, 我们团队充分结合高分子材料研究的积累与人工智能技术的优势, 尝试从序列层面寻找水下黏附材料设计与性能优化的新路径。在理论方法上, 我们取得了关键进展, 为后续数据驱动开发水下黏附材料奠定了基础。早在2019年, 我们发现黏附蛋白中存在一种关键的邻位序列规律: 带正电的氨基酸与芳香族氨基酸倾向于相邻排列, 这一结构可以通过苯基破坏水合层并促进阳离子与基底形成强静电力作用, 从而显著增强水下黏附性能。我们首次将这一序列规律引入人工聚合物设计, 并取得了突破性成果^[5,6]。

为实现该序列特征在聚合物中的有效转译, 我们提出了

引用格式: 范海龙, 杨虎. 水下黏附凝胶的设计: 从仿生经验到数据驱动. 科学通报, 2026, 71: 1078–1080

Fan H, Yang H. Design of underwater adhesive hydrogels: from biomimetic experience to data-driven approaches (in Chinese). Chin Sci Bull, 2026, 71: 1078–1080, doi: 10.1360/CSB-2025-5454

基于理想恒比共聚的合成策略,通过精确调控单体的竞聚率,有效克服了带电单体和芳香单体在反应过程中的自聚倾向,成功合成出具有高比例邻位排列的聚合物序列。所得水凝胶在高盐水环境中表现出优异的黏附性能,能够在10 s内实现对玻璃的快速黏附,并承受高达60 kPa的负载。该成果首次证明,模仿黏附蛋白的序列特征而非单纯的官能团,能够赋予人工材料稳定而高效的水下黏附功能。

尽管基于单一黏附蛋白的关键邻位规律,我们已成功制备出性能优异的水下黏附材料,但这一经验能否在更多蛋白中被复制?是否存在能够跨越物种、具有普适性的统计规律?这些问题仍有待深入探究。自然界中数量庞大的黏附蛋白库由无数物种在进化中塑造而成,虽然它们在具体序列上差异显著,但在功能实现上可能隐含共通的模式。基于这一认识,我们在后续研究中不再局限于个别蛋白,而是将整个

黏附蛋白数据库纳入分析,尝试从大数据维度提炼自然序列的共性规律,并将其转化为可指导人工聚合物设计的通用策略。该研究工作发表于*Nature*^[7],标志着我们在水下黏附材料研究领域实现了从单一序列启发到数据库驱动设计的重大突破。

我们从3822种生物中收集了超过两万条黏附蛋白序列,涵盖细菌、海洋动物、真菌、病毒等多个类群。通过多序列比对,提取了不同物种黏附蛋白的共有特征序列。随后,依据氨基酸的功能属性将20种氨基酸残基划分为六大功能单元,并以此对共有序列进行重新编码,计算不同功能单元在序列中的相邻组合频率。由此构建出一套可直接映射为聚合物单体比例的“仿生组分配方库”(图1(a))。这一“统计仿生”策略,使我们能够将自然界数百万年进化所积累的序列规律,转译为人工合成可操作的配方规则,实现了从演化智慧到设计公

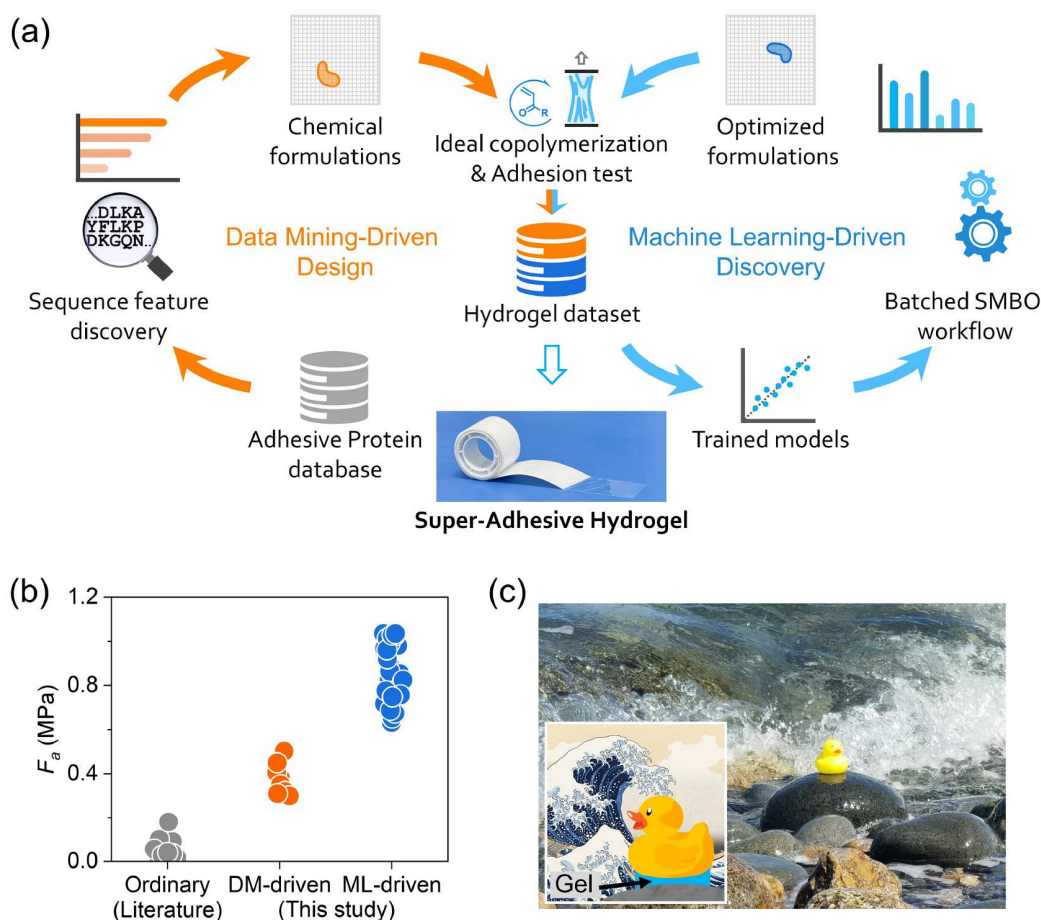


图1 (网络版彩色)数据驱动的水下黏附水凝胶设计^[7]。(a) 集成数据挖掘、实验验证与机器学习优化的高性能水下黏附水凝胶设计流程示意图; (b) 所开发水凝胶在水下的黏附强度比较; (c) R1-max黏附水凝胶将小黄鸭牢固黏附于海边岩石表面的照片。Copyright © 2025 Springer Nature

Figure 1 (Color online) Data-driven de novo design of underwater adhesive hydrogels^[7]. (a) Conceptual scheme of the proposed approach integrating data mining, experimentation and machine learning to design high-performance adhesive hydrogels. (b) Comparison of underwater adhesive strength between previously reported hydrogels and newly developed hydrogels by data mining-driven and machine learning-driven. (c) Photographic images of R1-max adhering a rubber duck to a seaside rock, withstanding ocean tides. Copyright © 2025 Springer Nature

式的转化。

在实验阶段,我们筛选出六种竞聚率接近1的代表性单体,分别模拟六类氨基酸功能基团,并采用理想恒比共聚策略,成功合成出序列分布可控的水凝胶。这一方法在保证蛋白质特征序列保真度的同时兼顾了合成可行性,从而建立了一个小而精、高质量的水凝胶数据集。实验结果显示,基于数据库挖掘所得配方制备的水下黏附凝胶,其性能已普遍优于既往文献中报道的多数水凝胶。为进一步提升研发效率、降低试错成本,我们引入人工智能技术,采用顺序模型优化算法(Sequential Model-Based Optimization, SMBO)在庞大的单体组合空间中高效筛选最优配方。具体流程包括:利用已有实验数据训练机器学习代理模型,对材料配方与水下黏附性能之间的关系进行拟合,并在预测潜在优异配方的同时评估其探索价值与不确定性。随后,通过实验验证模型推荐的候选配方,并将真实测量结果持续反馈,用于更新数据集和迭代强化模型预测精度。该“模型预测-实验验证-数据反馈”闭环加速了材料发现过程,使优化过程在有限实验次数下逐步逼近全局最优区域,显著降低了实验成本。经过多轮循环,我们最终筛选出多种黏附强度超过 1 MPa的水凝胶,其性能相比既有文献水平提升了一个数量级(图1(b))。

进一步的应用测试表明,基于数据驱动策略开发的水下黏附材料在稳定性与环境适应性方面表现卓越。在真实海水环境的测试中,材料能够在海浪的反复冲击下保持牢固附着(图1(c));在模拟工程场景的水管封堵实验中,材料可快速封

堵三米高水管底部的泄漏孔洞,实现即时止漏,并在持续水压下保持稳固,展现出优异的黏性和抗压性能;在小鼠皮下植入实验中,材料保持良好的生物相容性和结构稳定性,无显著免疫排斥反应。这些结果表明,该策略制备的水下黏附材料能够在复杂环境中稳定工作,并具备进入工程与医学应用的潜在可行性。

回顾本研究全过程,我们实现了从理论驱动到数据驱动的材料设计范式转变,提出了一种融合知识与数据的功能性软物质材料研发方法论,推动了软材料设计思路的跨越式发展。研究表明,在模仿自然的过程中,关键不仅在于复制某些分子结构或个别生物特征,更在于深入挖掘自然界演化过程中沉淀的共性统计规律,并将其转化为可操作的设计规则,从而实现材料性能上的重大突破。同时,高分子材料体系普遍具有多官能团协同作用与多尺度结构演化特征,导致其结构-性能映射关系复杂、表征困难。深度学习为解析这种复杂构效关系提供了新路径,可直接基于结构信息进行学习,并与性能预测和材料优化实现端到端集成,从而挖掘影响材料性能的关键多尺度结构特征,促进新材料的发现与设计。因此,借助深度学习模型乃至大语言模型,实现高分子材料的多尺度结构表征,并构建融合自然启发机制与数据驱动策略的设计范式,将成为提升功能高分子材料可设计性的重要方向。该研究范式的实现与推广,将加速包括水下黏附材料在内的高分子材料研发进程,为材料性能的优化与提升提供智能化支撑与创新工具。

推荐阅读文献

- 1 Fan H, Gong J P. Bioinspired underwater adhesives. *Adv Mater*, 2021, 33: 2102983
- 2 Narayanan A, Dhinojwala A, Joy A. Design principles for creating synthetic underwater adhesives. *Chem Soc Rev*, 2021, 50: 13321–13345
- 3 Huang P, Zhang H, Zeng H. Mussel-inspired molecular strategies for fabricating functional materials with underwater adhesion and self-healing properties. *Adv Mater*, 2025: 2501542
- 4 Tran H, Gurnani R, Kim C, et al. Design of functional and sustainable polymers assisted by artificial intelligence. *Nat Rev Mater*, 2024, 9: 866–886
- 5 Fan H, Wang J, Tao Z, et al. Adjacent cationic–aromatic sequences yield strong electrostatic adhesion of hydrogels in seawater. *Nat Commun*, 2019, 10: 5127
- 6 Jin Z, Fan H, Osanai T, et al. Gluing blood into gel by electrostatic interaction using a water-soluble polymer as an embolic agent. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2022, 119: e2206685119
- 7 Liao H, Hu S, Yang H, et al. Data-driven *de novo* design of super-adhesive hydrogels. *Nature*, 2025, 644: 89–95