

中国材料大会 2025

暨新材料科研仪器与设备展

7 月 5-8 日, 2025

福建 厦门

D41-抗菌材料
D41-Antibacterial Materials

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



D41. 抗菌材料

分会主席：徐大可、杨春光、段顺、邱家军、王琳

D41-01

智能响应抗菌材料

吴水林

北京大学材料科学与工程学院

致病菌感染特别是深层组织细菌感染严重威胁病人的健康。尽管抗生素治疗仍然是目前的细菌感染疾病治疗的主要治疗模式，但是由于抗生素过度使用导致耐药菌的出现，这些多耐药菌特别是超级耐药菌使得抗生素治疗面临严重的挑战。本研究团队发展了一系列新型激发智能响应抗菌生物材料，这些材料在外场例如光、超声、微波以及电场激发下，快速原位产生抗菌因子，实现对感染病灶部位的细菌进行快速高效杀灭，且不产生耐药性。

D41-02

钽铌基抗菌植入材料及表面涂层

任富增

南方科技大学

金属钽和铌具有良好的生物相容性和生物活性，但作为骨科植入体缺乏抗感染能力。铜具有抗菌和促成骨作用，而且与钽和铌不互溶。因此，本研究提出利用机械合金化和放电等离子体烧结技术，制备出双相超细晶铌铜（钽铜）合金。体外实验结果表明，该超细晶体双相合金表现出良好的生物相容性和更高的耐腐蚀性，具有较强的抗菌性能，能显著上调成骨相关基因的表达。新西兰兔股骨植入模型进一步证明了铌铜合金骨螺钉可显著提高促成骨和骨整合能力。另外，我们采用光刻结合电感耦合等离子体刻蚀技术，在钛表面构筑高分辨率的微纳结构，并进一步利用电子束蒸镀沉积技术在其上沉积了纳米钽-钽铜双层薄膜。基于微纳拓扑结构和钽-钽铜纳米双层薄膜的协同作用，可以有效调控细胞的生长状态，显著提高细胞的附着、增殖和分化能力，抑制细菌的附着和增殖，实现抗感染和促进骨的协同。

D41-03

骨科植入材料表界面抗菌促成骨双重功能调控

王怀雨

中国科学院深圳先进技术研究院

传统的骨科植入材料在在临床应用中面临的高感染风险与骨再生困难两大难题。骨科材料植入的成功与否，关键在于其与外周复杂生理环境的交互作用。由于植入材料与外周环境的交互作用发生在其表层极小的厚度范围内，调控表/界面性质能够快捷有效地实现骨科材料与毗邻组织的功能适配，同时不会影响基底材料的其他性能。基于上述优势，表/界面功能设计与构建已迅速发展成为骨科植入材料的热点研究方向。汇报人长期从事生物材料，尤其是骨科植入材料表/界面调控相关研究，运用自己多学科交叉的研究背景，采用物理与化学的表/界面改性手段，针对骨科材料在应用过程中所面临的骨整合效果不佳、感染风险等关键问题提出了相应的表/界面改性策略，实现从微纳到宏观尺度表/界面功能的有效调节，并深入研究材料表/界面与外周生理环境的交互作用关系，设计与构建兼具抗菌与促成骨功能的新型骨科植入材料。

D41-04

医用材料表面抗菌功能化及其应用研究

段顺

北京化工大学

细菌感染严重危害人类的健康。传统的抗菌药物治疗正面临着细菌耐药、毒副作用等问题。针对这些问题,开发新型抗菌材料,有望成为一种有效的应对手段。为此,本研究根据感染部位微环境、医疗器械使用条件、材料制备等方面的具体需求,发展了“纳米到米”多尺度的抗菌材料设计策略与构建方法。为适应肺部感染治疗的需要,开发了感染响应性多糖载药纳米粒子;在骨科植入材料表面,构建了厚度为微米级别的天然高分子基响应性抗菌涂层,用于感染性开放骨折的治疗;通过交联渗透法,制备了具有皮肤样结构的多糖抗菌凝胶,可以快速、有效地治疗大面积皮肤创面感染;以共混加工为基本策略,创制了一种耐高温灭菌的长效聚氨酯抗菌导管,并在企业实现了中试级别的生产,导管直径为毫米级别、长度可达米级,对于预防导管相关感染具有重要意义。通过上述抗菌材料的设计与构建,为新型抗菌材料的发展提供了新的思路。

D41-05

纳米催化抗微生物感染及免疫调节

林翰

中国科学院上海硅酸盐研究所

临床医用植入物表面形成的微生物膜使得入侵体内的病原体对灭菌制剂、抗生素和宿主免疫防御系统具有高度抗性,从而导致持续的微生物感染,这对个人术后恢复和公共卫生安全都产生了极大的挑战。感染微环境中生物膜所引起的乏氧、营养供给不足和弱酸性微环境,使宿主免疫细胞向抗炎表型极化。近年来,基于无机生物材料的理化性能设计、针对宿主免疫防御的定向调节,正在成为后抗生素时代抗感染策略的前沿研究方向。基于“纳米催化医学”理论,将纳米催化材料/化合物递送至感染局部病灶微环境,响应感染微环境差异性表达的化学底物,发生特异性催化反应生成自由基物种,有效杀伤致病微生物,并调控感染免疫微环境,进一步抑制感染进展。

D41-06

眼科抗菌材料

王佰亮

温州医科大学附属眼视光医院

D41-07

ϵ -聚赖氨酸基抗菌生物活性材料:从感染治疗到组织再生

雷波

西安交通大学

微生物来源的 ϵ -聚赖氨酸(EPL)是一类重要的天然生物大分子,具有广谱的抗菌生物活性,生物相容性及生物降解性,在感染性疾病治疗和组织再生医学中具有重要的应用前景。本报告汇报了课题组近年来在多功能EPL基生物活性材料方面的研究进展。在材料方面设计制备了基于EPL的多功能聚合物、多功能组织工程支架、多功能水凝胶、多功能可降解医用植入体等,研究发现EPL基生物活性材料可以有效处理耐药菌感染并促进组织再生,可以作为一种高效的降解基因载体实现肿瘤基因治疗和促进骨-软组织再生,与其他生物活性材料协同可以实现抗感染-抗肿瘤-促再生的多功能新应用。本报告同时也指出了EPL基材料在感染性疾病治疗和组织再生医学中应用中可能面临的挑战和不足。

参考文献

- [1] Advanced Functional Materials, 2019, 29(22), 1806883.
- [2] Advanced Functional Materials, 2021, 31(30), 2100924
- [3] Bioactive Materials, 2021, 6(3), 721-728
- [4] Materials Today, 2022, 53, 27-40.
- [5] ACS Nano, 2023, 17 (20), 19526-19549

D41-08**镓掺杂高熵合金的抗生物膜与成骨协同机制研究**

杨盛兵

上海交通大学医学院附属第九人民医院

人工关节与骨折内固定等金属植入物广泛应用于临床骨科治疗，但植入后感染及骨整合失败仍是导致翻修术与功能丧失的主要难题，亟需开发兼具抗菌活性与促骨整合能力的下一代功能化金属材料。本研究构建了一种以 Ti - Zr - Nb - Ta 为基体、系统掺杂不同浓度镓 (Ga) 的多组分高熵合金 (HEA)，并从材料结构、生物活性与机制维度开展系统评价。

研究发现，该合金在保持高强度与低弹性模量等优异力学性能基础上，展现出显著的广谱抗菌与抗生物膜性能。Ga 掺杂可有效抑制金黄色葡萄球菌 (MRSA) 与铜绿假单胞菌 (P.a) 在材料表面的黏附与生物膜形成。机制研究表明，该作用与细菌 Fe^{3+} 摄取受阻、Fur/IscR 等铁稳态相关调控失衡，以及 ROS 应激水平上调密切相关。Ga 元素的“类铁欺骗”特性使其在不诱导耐药的前提下，对多种耐药菌均表现出良好抑菌效果。

在成骨方面，体外实验结果显示，镓掺杂 HEA 显著增强骨髓间充质干细胞 (BMSCs) 的成骨分化与矿化能力。转录组测序分析揭示，Ga 可通过抑制骨形成抑制因子如 Gremlin 的表达，激活 Wnt/ β -catenin 等骨生成信号通路。此外，在山羊胫骨感染性骨缺损模型中，Ga-HEA 材料不仅有效控制感染，还显著提升了新骨形成体积与植入物界面骨结合质量。

本研究提出了一种通过“Ga 元素调控微环境”的多功能高熵合金材料设计策略，兼顾结构稳定性、抗菌效能与骨整合能力，为智能化骨科植入材料的开发提供了全新理论基础与实践路径。

D41-09**g-C₃N₄/TiO₂ 异质结电子能带结构调控与光响应抗菌性能优化**

饶席

西南大学

由细菌威胁引发的公共卫生危机已成为全球亟待解决的重大挑战，对经济发展、生态平衡和公众健康造成巨大影响。在过去的数十年里，抗生素被广泛使用以对抗细菌威胁，虽然成效显著，却加剧了抗生素耐药性 (AMR) 的扩散，催生出了更多的新型耐药细菌。目前，研究人员正致力于开发绿色安全且不易诱发耐药菌的新型抗菌策略。光催化技术依靠清洁的太阳能，通过激发环境中的水和氧气生成有强氧化性的活性氧物质 (ROS)，可高效灭活多种细菌微生物，在抗菌领域展现出广阔的应用前景。TiO₂、g-C₃N₄ 光催化剂具备绿色安全、成本低廉、光催化活性高等优点，但存在可见光响应范围窄、光生载流子复合率高等不足，需要在结构设计上进行优化改进。因此，本研究将 TiO₂/g-C₃N₄ 和其他材料耦合构建异质结，调控能带结构，拓宽其光响应范围，加速光生载流子的分离和转移，促进 ROS 的生成，提升其光响应抗菌功效。

D41-10**基于镁氢材料的选择性抗菌剂及其机制探究**

裴佳

上海交通大学

D41-11**手性高分子抗菌材料**

王兴

北京化工大学

微生物耐药是全球性重大挑战。应对微生物耐药既要克服耐药微生物的耐药屏障，又要防止正常微生物产生耐药性，亟需发展新的抗菌策略。针对微生物耐药难题，报告人提出了手性识别抗菌策略，建立了

手性高分子抗菌材料体系，研究成果推动了抗菌产业发展。手性识别抗菌策略是利用微生物对材料的特殊手性偏好发展的攻/防策略，从而克服耐药菌或避免菌耐药，两方面共同形成了一个有机整体。创新研究工作包括：设计右旋聚氨基酸纳米粒，突破细菌多重耐药屏障，原位靶向胞内耐药菌，治疗耐药菌感染；建立左旋萜基手性高分子抗菌材料新体系，广谱抑制微生物粘附，特别是抑制真菌粘附，避免微生物产生耐药性；创建手性高分子抗菌产品，创制环境微生物监控设备，推广裸眼可视化抗菌评价方法，推进基础研究转化应用，服务国家生物安全战略。

D41-12

功能化多肽抗菌生物材料的分子设计

马曦

中国农业大学

抗生素滥用导致的多重耐药菌感染已成为全球公共健康的重大威胁，传统抗菌药物的疗效显著下降。预计到 2050 年，全球每年因多重耐药菌感染死亡人数将达 1000 万。在此背景下开发新型抗菌治疗策略尤为迫切。多肽生物材料因其优异的抗菌性能和多功能特性受到广泛关注。与传统抗生素通过特异性干扰细菌代谢途径不同，多肽主要通过物理破膜机制来诱导细菌死亡，从而大大降低了耐药性产生的风险。然而针对复杂的细菌感染环境，传统多肽在体内应用表现出诸多应用局限性。例如，一些细菌能够穿透侵入宿主细胞内，并且进化出逃逸策略来保护其免受宿主免疫应答和多肽的攻击。同时细菌还能形成由多糖和蛋白质构成的生物膜，进一步增强其保护机制。此外，体内生理环境中的蛋白酶以及血清蛋白等因素限制了多肽的稳定性和有效性。针对上述问题，本课题组通过结合自组装等分子设计策略以及引入多种功能化修饰，以实现多肽抗菌活性、稳定性及生物相容性的改善。同时赋予多肽抗生物膜、刺激响应、靶向和细胞穿透等新的功能特性，以实现其在复杂感染环境下的多场景应用需求。

D41-13

微生物导致织物黄变的机制研究与防治

张雷

天津大学

织物黄变严重影响纺织品的美观性和耐用性，其主要诱因之一是微生物在织物表面繁殖代谢形成菌斑。我们通过微生物培养和高通量测序技术，分离鉴定出两种主要产色菌株。并在菌株代谢物和织物着色物质中鉴定出多种共有的发色团分子，表明这些分子可能在黄变过程中起到关键作用。为了解决微生物导致的织物黄变问题，设计合成了一种可见光响应的光催化复合抗菌材料 Ag@Ga₂O₃。在织物表面修饰后，织物的杀菌和除色能力显著提高，能有效防止织物黄变现象。

D41-14

纳米催化材料在杀菌治疗方面的应用

于欣

济南大学

细菌感染每年困扰着数百万人，已成为一个全球严峻的公共卫生问题。与普通抗生素相比，光催化材料抗菌剂具有以下两个优点：1) 对革兰氏阳性菌和革兰氏阴性菌普遍具有杀灭作用；2) 具有极高的稳定性从而对细菌的预防具有持久的作用效果。但是在体内抗菌治疗时，光催化需要持续敞开光照；而伤口必须包扎与光照的矛盾难调和。目前虽然可以利用可见光增加其穿透深度进行光催化杀菌，但其效果一直不是很理想。而且，光催化过程中产生的 ROS 寿命极短，扩散半径有限，使其无法作用到细菌表面就会消失，也降低了杀菌效果。针对光催化材料在杀菌治疗中可见光效果差，材料对细菌的捕获能力不足及需要持续光照的问题，我们专注于将光催化材料应用到杀菌治疗中。首先，通过光催化机理研究，实现了近红外光响应的具有增强载流子分离能力的光催化性能；接着，通过纳米-生物表界面的调控，实现了材料对细菌的捕获，使产生的 ROS 能够迅速的作用到捕获细菌的表面，增强了杀菌能力；进一步，将光催化与酶催化结合起来，解决了杀菌需要持续光照的问题，实现了“白”加“黑”的治疗，为实际应用的推进提供

了理论依据和技术支持。

D41-15

抗菌气体药物递送高分子

王腾蛟

西北工业大学

研究发现，一氧化氮（NO）、一氧化碳（CO）、硫化氢（H₂S）等气体分子，在生命体内广泛分布，并通过参与代谢过程中的信使传递对生命生理过程发挥重要调控作用，并因此被命名为气体信使（Gaseous signaling molecules, GSM）。基于其生理调控作用，这些气体药物已被研究应用于针对各种疾病的治疗中，在心血管疾病、炎症性疾病、组织缺损、肿瘤、感染、代谢紊乱、神经退行性疾病等的治疗中展现出积极效果。然而，基于 GSM 的治疗方法在实现临床广泛应用前，仍有若干问题需要解决。一方面，GSM 在生理环境中半衰期较短，通常只有数秒或数分钟。另一方面，GSM 介导的生理作用具有显著的浓度依赖性：生理相关浓度的 GSM 通常展现出有益的治疗效果，通过影响其内源性合成降低其在生理环境中的浓度将会影响细胞的正常生理活动，长时间高浓度的外源性 GSM 也会诱导细胞毒性导致细胞死亡和组织损伤。不仅如此，针对不同的组织或细胞，发挥治疗性生理作用的浓度也不相同。因此，针对病理部位的特定状况精确调控 GSM 作用浓度及作用时间是基于 GSM 的疗法的核心问题之一。

近年来，高分子药物载体技术的迅速发展为实现 GSM 的广泛应用创造了条件。本报告中，我将汇报课题组近期关于抗菌功能 GSM 递送高分子对抗细菌感染领域的工作，即通过构建多种 GSM 递送高分子实现 GSM 在细菌感染区域的有效递送与可控释放，从而实现针对感染类疾病的精准治疗。

D41-16

智能抗菌表面构建及性能调控

谭继

中国科学院上海硅酸盐研究所

针对医用钛及聚醚醚酮等骨植入体术后可能发生感染的临床问题，构建了一系列智能抗菌功能涂层。具体包括：1）设计了可干扰质子和电子转移的植入体表面，实现选择性饥饿抗菌，避免了采用传统无机抗菌组分对细胞活性的不利影响；2）设计了跨立型异质结构与声学超结构等光/声外场响应抗菌涂层，实现了基于光热/光催化/声热/声催化高效抗菌，无创治疗感染。上述智能抗菌表面改性策略可为新型抗菌型植入体的设计提供科学参考。

D41-17

新一代海洋防污涂层的功能设计

李祥宇

东北大学

海洋生物污损是海洋工程材料服役中面临的世纪性难题，开发无毒高效的防污涂层事关能源、环境、国防等国家重大需求，但是现阶段的防污涂层由于较差的机械性能和短效被动杀菌机制不可避免地发生二次生物污损以及更严重的微生物腐蚀。受珍珠母不定形/结晶异质结构的启发，本工作开发一种由生物基聚合物水凝胶和致密有机金属框架材料（MOFs）协同组装的稳定坚韧的海洋防污防腐涂层。多尺度高密度交联网络有效提高涂层强度和韧性等力学性能，而且可不受基底的材质和形貌的限制而稳定涂覆在金属、玻璃、橡胶，塑料等各种材料表面。更重要的是，由于 MOF 材料本征多孔特性，这种仿生涂层可作为杀菌剂、缓蚀剂等的多功能负载平台，呈现出基于智能金属离子或药物释放的主动防御行为，实现对于包括蛋白质、细菌、藻类在内海洋污损生物的广谱防污，并有效抑制金属材料的微生物腐蚀过程。该研究成功开发了一种新型高强 MOF 基涂层的制备策略，并为海洋防污与海洋防腐的协同设计提供了独特见解。

D41-18

外源响应抗菌生物材料

毛丛杨
湖北大学

引言：耐药菌的快速出现与传播无疑对全球公共卫生构成严峻挑战。开发新型抗生素虽被证实是可行的策略，然而新抗生素研发进程始终滞后于新型耐药菌的出现。因此，本研究构建了外源性刺激（光、超声、微波）响应型生物材料，以治疗耐药菌感染。

材料与方法：我们在钛植入体表面构建了光响应氧化物钙钛矿型钛酸钙/纤维状红磷异质结纳米薄膜，用于治疗植入体相关的耐甲氧西林金黄色葡萄球菌生物膜感染；我们也设计开发了基于富含 Ti^{3+} 物种滑移位缺陷的 Ti_3C_2 [$\text{Ti}_3\text{C}_2\text{-SD}(\text{Ti}^{3+})$] 纳米片的超声介导声动力疗法（SDT），用于骨组织感染治疗，用于骨组织感染治疗；我们还构建了微波（MW）响应型聚乳酸-羟基乙酸共聚物微粒（PLGA MPs），用于治疗深层组织耐药菌感染。

结果与讨论：研究表明，异质界面处形成的 P-N 结及内建电场在 808 nm 近红外光照射下显著促进了电子转移和杀菌活性氧的生成。高效的电荷转移同时赋予该纳米薄膜优异的近红外光热响应特性。体内实验证实，经近红外光照射 20 分钟后，该纳米薄膜可清除 $99.42\% \pm 0.22\%$ 的成熟 MRSA 生物膜，同时展现出优越的骨传导能力，有效促进植入物-骨整合；超声响应纳米材料凭借超声触发的活性氧高效释放及精准细菌捕获能力，在耐甲氧西林金黄色葡萄球菌诱导的骨组织感染治疗中表现出强效抗菌效能。此外，该材料能显著增强骨髓间充质干细胞的成骨分化能力并加速骨重塑过程；相应的微波热疗（MWH）不仅能破坏 BAM 复合体关键表面暴露蛋白 BamA，还可增强外膜通透性。该疗法还能削弱细菌酶催化残基与抗生素分子官能团间的氢键相互作用，最终恢复传统抗生素对多重耐药大肠杆菌所致尿路感染及腹膜炎的杀菌能力。

D41-19

卟啉基微纳结构构建及外场响应抗菌性能研究

张翔宇

太原理工大学人工智能学院

细菌感染严重威胁人类健康。临床上通常采用抗生素治疗，但抗生素的长期使用和滥用导致细菌耐药性不断增强。鉴于此，本文以卟啉为基材，通过离子掺杂、异质结构构建，优化了卟啉电子结构，改变电子传输速率，提高了卟啉对可见光及微波的利用率，实现了外场辅助高效抗菌，并将其用于皮肤伤口和骨髓炎感染治疗。

D41-20

关于耐微生物腐蚀和防污材料设计的一点思考

徐大可

东北大学

海洋经济已提升为国家战略，成为我国国民经济发展新的增长点。然而，海洋生物污损不仅会增加船舶表面粗糙度，导致航行阻力激增，而且将加速海洋装备腐蚀，尤其以微生物腐蚀问题为主，严重制约海洋工程技术的可靠性和寿命。海洋生物污损和海洋微生物腐蚀，同时发生、相互关联却又不等同，具有隐蔽、快速、难以检测的特点，每年造成的全球海洋经济损失达数千亿美元。因此，海洋防污是建设强大海军，开发海洋资源，实现我国“蓝色梦想”需要解决的重要材料问题。报告人提出利用合成生物学技术、基因组学、电化学和显微学等多学科交叉的技术进行海洋生物群落解析-微生物腐蚀污损机理探索-靶向多尺度防污防腐涂层设计，建立“阻碍黏附-细菌杀灭-生物被膜驱散”协同防污新模式。

D41-21

钛合金海洋生物污损防护技术发展前沿问题探讨

陈柏屹

集美大学 轮机工程学院

海洋生物污损严重威胁海洋装备的长期服役性能，尤其是钛合金结构因其优异的耐蚀性和生物相容性

面临严峻的污损挑战。针对这一问题，本研究从微观机制和宏观技术两个层面展开探索。在微观层面，通过搭建死活菌相互作用表征平台（结合 DHM 和探针调制型 AFM），揭示了死菌细胞通过改变活菌（如铜绿假单胞菌 PAO1）表面粘附力、运动行以影响生物被膜在钛合金表面的形成。研究发现，紫外灭活后的死菌（如鼠李糖乳杆菌 LGG）释放胞内物质可抑制 PAO1 的粘附，并促使其远离钛合金表面运动，这为钛合金微生物防污表面设计提供了新思路。在宏观技术层面，综述了钛合金防污的物理（超声清洗、振动）、化学（电解海水、自抛光涂层）及仿生方法（超疏水、液体注入表面），指出单一技术存在局限性，需发展协同策略。未来应结合微观行为机理开发智能防污涂层，并融合物理清除与功能表面技术，以实现钛合金在苛刻海洋环境中的长效防污，为海洋装备防护提供了理论和实践依据。

D41-22

外源响应抗菌生物材料

周文昊¹，郑玉峰*²

1. 西北有色金属研究院

2. 北京大学

植入性医疗器械术后感染是威胁患者生命安全的重大临床难题，开发具有主动抗菌能力的金属功能表面成为当前材料医学领域的研究前沿。本文聚焦医用金属材料的光动力抗菌表面构建，系统探讨了通过结构调控与功能组分协同，实现对细菌黏附、生物膜形成及感染扩散的精准干预策略。通过电化学去合金化技术，在钛钽合金表面构建形成微纳多孔钽结构，显著增强其光吸收能力与表面反应活性，在近红外激发下可协同产生 ROS 与光热效应，实现高效无药物抗菌，同时显著促进成骨细胞黏附、增殖与骨再生。针对可降解锌合金存在的生物安全与感染风险问题，我们设计并原位构建了富钼异质结结构，有效调控其表面电子结构和载流子分布，实现了对革兰氏阳性与阴性菌的持久抑制。上述研究为新一代兼具骨修复能力与光响应抗菌性能的个性化金属植入材料提供了理论依据和材料基础，展现出良好的临床转化前景。

D41-23

镁合金表面锰氧化物涂层构建及其抑菌抗肿瘤性能研究

陈岚*、于迦南、关绍康

郑州大学

骨肿瘤在手术切除后往往需要植入假体进行固定和填充。假体置换术后易感染且肿瘤易复发已成为临床棘手的问题。镁合金由于其具备良好的生物相容性、可完全降解且降解产物对人体有益、与人骨相近的弹性模量等优势，在生物医用材料领域备受关注。

本工作在 ZE21C 骨植入镁合金表面制备了不同锰氧化态的锰氧化物 (PEO/MnOx) 涂层，并对其表面形貌、催化性能、耐腐蚀性能和生物学性能等方面进行了探究。在 808 nm，功率 1 W/cm² 近红外光照射下，锰氧化物涂层均能够在 10 min 内可升温超过 50 °C，均具有良好的光热效果以及光热稳定性。体外和体内实验表明，随着锰氧化物价态升高，样品展现出优异的催化和耐腐蚀性，能够有效促进肿瘤细胞膜发生脂质过氧化并破坏细菌膜电位完整性，抑制肿瘤细胞和细菌粘附，从而实现抗肿瘤和抗菌双重作用。另外，样品均具有良好的细胞相容性和生物安全性。锰氧化物改性镁合金有望作为骨肿瘤术后植入材料的解决方案之一，联合化学动力学治疗 (CDT) 和光热治疗 (PTT) 重构术后肿瘤微环境，抑制术后感染和肿瘤复发。

D41-24

仿生抗菌钛合金制备与性能研究

卢衍锦、龚伟*

福建师范大学

医用钛铜合金被认为是降低或解决钛合金内植物细菌感染问题的潜在候选植入材料。然而，仅靠单一调整成分和微结构尺度的方法，不可避免地会遇到强度和塑性的倒置关系。因此，寻求新的设计与制备方法以满足结构/功能一体化的临床需求具有重要的探索意义。本文研发了具有三周期极小曲面 (TPMS) 仿生三维穿插结构的 Ti6Al4V-Ti5Cu 复合材料，以解决传统均质钛铜合金结构/功能失配的难题。本文对

Ti6Al4V-Ti5Cu 复合材料的微观组织、力学性能、耐腐蚀性能和耐磨性能进行了系统性研究,并探讨了 SPS 烧结温度和 TPMS 仿生结构对合金组织与性能的影响。

D41-25

外源响应抗菌生物材料

周建宏*、张世平

宝鸡文理学院

聚醚醚酮(PEEK)以其良好的力学性能、抗化学腐蚀性等优异特性,被视为理想的新一代骨科材料。然而,PEEK 属于生物惰性材料,生物活性低,植入体内后骨整合能力不足,易引发界面松动和脱落,成为制约临床应用的瓶颈问题。另外,PEEK 无抗菌性能,植入体内易被细菌感染,这被认为是 PEEK 基种植体植入失败的另一主要因素。针对 PEEK 基植入体骨整合能力弱以及无抗菌性能的问题,基于仿生理念,本论文在 PEEK 基表面构建掺杂金纳米颗粒的三维柱状羟基磷灰石(Au/HA)涂层,以赋予其骨整合和抗菌双重功能。

本文采用水热法,首先采用冷压烧结法制备出 $\text{Ca}(\text{OH})_2/\text{PEEK}$ 复合前驱体,进一步借助水热法以及高温氧化还原法制备出 Au/HA 涂层。在水热处理过程中通过探究水热处理的温度、时间和掺金浓度对羟基磷灰石晶体形态的影响,得到制备出掺金三维柱状羟基磷灰石的最佳工艺参量。

体外细胞实验表明,相对于 PEEK 表面,本论文制备的 Au/HA 复合涂层能显著促进成骨细胞的黏附与增殖;细菌平板涂布检测结果表明,相对于 PEEK 表面,本研究获得的 Au/HA 复合涂层对大肠杆菌以及金黄色葡萄球菌表现出良好的抗菌性能,并且抗菌性能随着掺金浓度的提高而增强。

D41-26

具有高抗菌活性的核壳结构纳米铜构建及性能研究

杨春光*、张新蕊

中国科学院金属研究所

纳米氧化亚铜因高活性、制备成本低且无耐药产生,在纳米治疗方面备受关注,但极易发生氧化,导致活性位点不足,制约其应用。本研究基于限域效应开发核-壳结构 $\text{Cu}@\text{C}$ 纳米颗粒,利用石墨对纳米氧化亚铜的包覆实现 Cu_2O 的稳定化递送。并且成功构建 $\text{Cu}/\text{Cu}_2\text{O}/\text{CuO}$ 三相复合且比例可调的核心结构,形成三相 Cu 对肿瘤/感染/炎症微环境的智能响应,激活多相铜之间的电荷传递反应,进而实现高活性位点 Cu_2O 的循环和再生,展现出优异的抗肿瘤性能及抗感染特性。

D41-27

一种纳米敏化剂介导的超声动力疗法治疗幽门螺旋杆菌感染而不扰乱宿主肠道菌群

阳丽华

中国科学技术大学

Infection by *Helicobacter pylori*, a prevalent global pathogen, currently requires antibiotic-based treatments, which often lead to antimicrobial resistance and gut microbiota dysbiosis. Here, we develop a non-antibiotic approach using sonodynamic therapy mediated by a lecithin bilayer-coated poly(lactic-co-glycolic) nanoparticle preloaded with verteporfin, Ver-PLGA@-Lecithin, in conjunction with localized ultrasound exposure of a dosage permissible for ultrasound medical devices. This study reveals dual functionality of Ver-PLGA@Lecithin. It effectively neutralizes vacuolating cytotoxin A, a key virulence factor secreted by *H. pylori*, even in the absence of ultrasound. When coupled with ultrasound exposure, it inactivates *H. pylori* by generating reactive oxygen species, offering a potential solution to overcome antimicrobial resistance. In female mouse models bearing *H. pylori* infection, this sonodynamic therapy performs comparably to the standard triple therapy in reducing gastric infection. Significantly, unlike the antibiotic treatments, the sonodynamic therapy does not negatively disrupt gut microbiota, with the only major impact being upregulation of *Lactobacillus*, which is a bacterium widely used in yogurt products and probiotics. This study presents a promising alternative to the current antibiotic-based

therapies for *H. pylori* infection, offering a reduced risk of antimicrobial resistance and minimal disturbance to the gut microbiota.

D41-28

电话活性抗菌生物材料设计与应用

邱家军

中国科学院上海硅酸盐研究所

细菌膜表面存在“质子耦合电子转移链”，它是细菌合成能量 ATP 的主要途径。基于此，我们设计了能够夺取电子，破坏细菌膜表面“质子耦合电子转移链”的电话活性材料，即在医用钛表面构建聚酰亚胺涂层，通过聚酰亚胺羰基活性位点的酮-烯醇式转变和锂离子的嵌入与脱嵌实现可逆充放电。聚酰亚胺涂层放电过程中伴随着锂离子的脱嵌和电子转移，它能够夺取细胞膜表面电子，破坏细菌膜表面“质子耦合电子转移链”，切断细菌能量供给，诱导细菌死亡。

D41-29

数据驱动加速发现下一代抗菌纳米酶

朱之灵

青岛科技大学

近年来，细菌耐药性问题日益加剧，对公共健康构成严峻挑战。纳米酶作为人工设计的类酶催化剂，凭借其稳定性、可控性及高度靶向性等优势，在抗菌治疗中表现出巨大潜力。其中，氧化还原型纳米酶通过催化活性氧（ROS）的生成，实现对细菌细胞膜和关键蛋白质的氧化破坏，已成为新一代广谱抗菌剂的研究重点。此外，水解型纳米酶因其对细菌细胞壁、生物膜中关键化学键（如肽键、糖苷键）的切割能力，亦展现出协同杀菌和突破生物膜屏障的潜能。

如何加速高效抗菌纳米酶的开发与筛选？本报告将围绕“数据驱动的理性设计”策略展开探讨，重点聚焦以下三个方向：（1）构建材料数据库：通过对现有超过 10,000 篇相关文献的系统挖掘，提取纳米酶的结构、性质与性能数据，建立大规模抗菌纳米酶数据库；（2）机器学习辅助结构-性能关联建模：借助人工智能算法，从复杂数据中提取催化机制与活性预测模型，推动从“经验筛选”向“理论预测”转变；（3）针对性抗菌机制优化设计：结合微环境响应机制，设计具备靶向识别、生物膜穿透及动态调控能力的“智能抗菌”纳米酶，减少对宿主细胞的毒性风险。

该数据驱动策略不仅显著提高了纳米酶发现效率，也为应对多重耐药菌感染提供了全新的研究范式。未来，随着人工智能与材料科学的进一步融合，基于理性设计的纳米酶药物有望在精准感染治疗中发挥更大作用。

D41-30

生物适配型阳离子抗菌界面及其应用研究

张维

中国科学院理化技术研究所

D41-31

钛表面骨整合及抗菌双功能化涂层构建及其性能

李博*、憨勇

西安交通大学

临床研究证实，在体内存在细菌感染的情况下，即使植入体具有强的组织整合潜力，依然无法实现组织整合。已经知道，细菌在纳米棒阵列表面的粘附力可驱动纳米棒刺破细菌胞壁和胞膜，从而杀灭细菌，但该物理刺破效应与纳米棒阵列几何构形参量（如纳米棒顶端尖锐度、长度等）密切相关。然而，纳米棒顶端尖锐度及长度与其对金黄色葡萄球菌（简称金葡菌）物理刺破效应间的关系仍未厘清。另外，最近的

国内外研究进展提示,除涂层自身表面化学刺激和构形激发的物理刺激外,外加电/磁/热场等物理刺激同样能够调控成骨相关细胞及细菌行为,因此亟待构建具有外场响应功能的涂层以实现对抗菌及骨整合行为的调控。

本研究基于微弧氧化与水热复合、镁热还原以及原子层沉积等工艺方法,构建了一系列物理构形可控、可负载多种抗菌及生物活性组元,且具备良好超声响应能力的纳米棒阵列涂层体系。通过系统评估其在细菌感染微环境下的骨整合能力,揭示了纳米棒阵列的几何构形(包括顶端尖锐度与长度)及其所负载功能组元的协同效应对涂层长效抗菌性和骨整合能力的调控机制。研究进一步发现,涂层结构中的氧空位等缺陷特征与其在超声刺激下活性氧自由基生成效率密切相关。同时,通过分析活性组元的可控释放行为及其对微环境的调控,进一步阐明了其如何介导免疫调节,最终在骨质疏松等特殊病理状态下促进骨整合的作用机制。上述研究为抗菌及骨整合双功能化新型生物活性涂层的结构组态设计提供了理论基础。

D41-32

3D 打印含铜钛合金的生物功能化和力学性能研究

王强*、汤红艳、刘佳林、毛建婷

中国医科大学附属口腔医院

钛和钛合金具有良好的机械性能、耐腐蚀性能及生物相容性,它作为医用金属材料在口腔、骨科、手术器械等方面有着广泛的应用。激光增材制造技术(Additive manufacturing, AM)特别适合于成形高熔点的钛合金,它可以直接将计算机中复杂的三维数字结构变成实体,因此,在个性化医用植入体方面有巨大潜力。目前,关于增材制造成形钛合金方面的焦点主要集中在工艺参数和材料成分对微观组织结构、力学性能以及生物相容性的影响上,而对材料在人体中服役所面临的腐蚀问题关注较少,特别是长期被忽视的微生物腐蚀(Microbiologically influenced corrosion, MIC)。钛和钛合金等金属医用材料已广泛用于牙科,口腔环境温暖潮湿且营养丰富,特别适合多种微生物的生存。因此,在口腔环境中服役的这些金属材料往往面临着微生物腐蚀的风险。变形链球菌(*S. mutans*)在口腔天然菌群中占有较大比例,是牙菌斑的主要成分之一,也是龋齿的主要病原体。当 *S. mutans* 附着在牙齿表面后,可形成多糖包裹的生物被膜,并能够通过代谢糖类产生有机酸,从而导致局部的 pH 值下降。生物被膜一般被认为是导致 MIC 的关键因素,所以,控制 MIC 的有效方法是抑制金属表面生物被膜的形成和生长。Cu 是一种具有抗菌功能的金属元素,可用于开发抗菌功能合金,通过形成富铜相以及 Cu 离子释都能产生良好的抗菌效果。

为了提高材料的耐微生物腐蚀性能,通过激光选区熔化(Selective laser melting, SLM)工艺制备了 Ti 和 Ti-5Cu 合金以及 TC4/TC4-5Cu 含铜梯度功能材料,并研究了在 *S. mutans* 存在条件下的 MIC。通过 90 天长周期和 14 天短周期的浸泡实验来分别研究口腔变形链球菌单菌对 SLM Ti 和 Ti-5Cu 的微生物腐蚀行为和微生物腐蚀疲劳,从而定量地确定 MIC 对金属植入提材料的结构破坏和机械性能的降低。结果表明 Ti-5Cu 样品中 Cu 离子的释放、Ti₂Cu 相的析出以及腐蚀产物 Cu₂O 和 CuO 均表现出抗菌作用,从而提高了材料的耐微生物腐蚀性能,铜的加入可以通过减少疲劳裂纹萌生来提高材料的腐蚀疲劳性能。体外细胞毒性和细胞骨架染色结果说明尽管钛铜合金中有少量铜离子释放,但 MC3T3-E1 细胞生长良好。SLM 工艺制备的 TC4/TC4-5Cu 含铜梯度功能材料在不影响基体机械性能的同时又赋予金属抗菌功能。变形链球菌对 TC4 和 TC4/TC4-5Cu 的微生物腐蚀结果表明含铜梯度材料能对样品表面粘附的生物被膜起到一定的抑制作用,有菌条件下含铜钛合金的腐蚀电流密度 i_{corr} 以及最大点蚀坑深度均小于 TC4。

铜合金化的策略不仅能提高材料的耐微生物腐蚀性能,也可以降低点蚀结构缺陷,改善金属的微生物腐蚀疲劳性能。在不改变材料基体微观组织结构的基础上,通过 SLM 工艺设计铜合金化的梯度材料是提高材料耐微生物腐蚀能力的一种有效途径。

D41-33

抗菌-防污纺织整理改性及关键问题

符丽梅,廖晓颖,曹怡红,袁鑫,张卓成,陈仕国*

深圳大学材料学院

纺织品是细菌滋生的温床,致病性细菌在织物表面黏附和增殖严重影响人们的健康。传统纺织品抗菌

整理技术是将抗菌剂加载到织物表面和/或其微纤维上。由于抗菌剂的溶出,易诱导细菌耐药和破坏皮肤表面的微生态平衡。有别于传统的抗菌整理技术,本研究将抗菌化合物以共价键链接到 CF 上,构建了一种抗菌和防污结界,赋予织物优异抗菌防污功能,而不影响其舒适性、安全性和其他物理化学性质。通过抗菌防污结界的构建,抗菌处理后织物的细菌易通过常规水洗涤去除,让抗菌功能充分暴露,以确保长效抗菌和抗污表面。

D41-34

Ag Nanoclusters Anchored on Oxygen Vacancy-Rich Alumina Catalyst for Efficient Bacterial Inactivation

Ting Wang*

School of Materials Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University

The rapid rise of antibiotic-resistant bacteria has become a critical concern for human and animal health, highlighting the pressing need for alternative antibacterial approaches. Nonetheless, the poor antimicrobial performance and single-use nature of conventional antibacterial materials severely restrict their commercialization and large-scale utilization. In this study, we successfully developed a silver nanocluster-anchored oxygen vacancy-rich alumina (Ag NCs/Ov-Al₂O₃) antimicrobial agent, which synergistically enhances silver atom utilization efficiency while maximizing active site density compared to conventional γ -Al₂O₃ and Ag nanoparticle (Ag NP)-based systems. Experimental and theoretical analyses demonstrated that Ag incorporation induces a substantial increase in oxygen vacancy (Ov) concentration within Al₂O₃ and optimizes its electronic configuration, thereby facilitating efficient oxygen molecule adsorption and activation. Remarkably, this structural modulation enables sustained reactive oxygen species (ROS) generation even under dark conditions—a breakthrough addressing the limitations of light-dependent antimicrobial agents. Density functional theory (DFT) calculations further elucidated that Ag NCs, coupled with enriched Ov sites, synergistically amplify interfacial interactions with bacterial membranes, leading to membrane disruption and intracellular damage. This antibacterial strategy based on Ag NCs/Ov-Al₂O₃ offers a highly efficient and environmentally friendly solution for indoor air filtration and sterilization, effectively overcoming the limitations associated with low-light environments.

D41-35

摩擦纳米发电机自驱动杀菌系统设计及性能研究

孙霄、董丽婷、陈守刚*

中国海洋大学材料科学与工程学院引言

海洋生物污损对人类健康安全和海水环境质量造成了严重威胁。当前,海洋电化学防污技术面临能量供给与界面电荷调控的双重挑战:传统电化学方法受限于电网依存度高和能耗阈值限制,而基于摩擦纳米发电机(TENG)的自驱动电化学防污系统在海洋高湿/高盐/生物污损耦合环境中易因界面电荷耗散加剧导致输出稳定性骤降。本研究提出等离子体诱导界面化学重构与介电掺杂协同增强策略,开发了聚乙烯醇(PVA)基、聚偏二氟乙烯(PVDF)基摩擦电聚合物材料体系。构建自供电杀菌防污系统,利用TENG产生的高压脉冲电信号驱动 $\cdot\text{OH}$ 、 $\cdot\text{O}_2^-$ 等自由基生成,突破传统电化学防污的能耗限制,同步实现海洋细菌灭活率>99.99%、典型污染物降解率>95%,揭示了多尺度材料改性-接触起电性能提升-电催化反应增强的三级增效机制,为海洋环境自适应能量收集-长效使用一体化系统提供了新材料范式。

D41-36

含铜不锈钢以群体感应为靶标调控细菌运动行为研究

张新蕊、杨春光*

中国科学院金属研究所

生物膜是引发细菌污染的根源。细菌通过运动完成在材料表面的探索和定植,决定生物膜早期粘附,

在生物膜形成中起到关键作用。不锈钢作为医疗、食品等各个领域使用极为广泛的材料，容易在服役过程中成为细菌生物膜的定植载体及传播媒介。通过合金化方式制备的含铜不锈钢已经被证实具有优异的广谱抗菌性，除此之外，本研究发现含铜不锈钢能够通过干预细菌的运动行为，从根源抑制生物膜的形成。本研究采用单细胞标记技术，原位观察了细菌在普通不锈钢和含铜不锈钢表面的运动轨迹，创新性揭示了含铜不锈钢可以增大细菌在其表面的运动速度、位移并减小细菌运动偏转角度，导致细菌在含铜不锈钢表面的运动轨迹呈现长且直的状态，进而限制了细菌在表面的定植。考虑到细菌群体感应机制在细菌运动及发育成生物膜中的关键作用，本项目进一步构建了群体感应系统缺失突变菌株，通过系统研究突变株的运动及生物膜发育表型，证明了含铜不锈钢淬灭细菌群体感应信号，是改变细菌的初始运动状态最终显著滞后生物膜发育的关键，并揭示了相关的运动通路调控机制。项目研究结果为具有抑制生物膜功能的抗菌金属优化设计提供新思路。

D41-37

梯度纳米结构抗菌钛合金及性能研究

陈绵*

华东交通大学

引言：生物活性低和缺乏抗菌性是钛合金作为骨修复材料临床应用中面临的主要问题[1][2]。基于铜元素的抗菌和生物活性，提出构建表层梯度纳米结构以解决钛植入物临床面临感染和生物活性不足的问题。

材料与方法：采用液氮表面超声滚压技术的方法，在 Ti-Cu 合金表面构建梯度纳米结构，并研究其抗菌机理。

结果与讨论：通过调控工艺参数，在钛铜合金表面构建出梯度纳米结构以协同调控细菌和细胞响应。梯度纳米结构钛铜合金（GNS Ti-Cu）表面形成了厚度约为 200 μm 的等轴晶粒细化层，晶粒尺寸随深度的增加而增大。

促成骨活性：GNS Ti-Cu 对小鼠前成骨细胞表现出良好的细胞相容性，并促进了其早期粘附和铺展。

抗菌性能：GNS Ti-Cu 对金黄色葡萄球菌和大肠杆菌均表现出良好的抗菌性能。

结论：在 Ti-Cu 合金表面构建梯度纳米结构可以有效促进其抗菌和促成骨活性，这为开发新型医用金属材料提供实验依据和理论借鉴。

参考文献：

1. Liu X, Chu PK, Ding C.. Mater Sci Eng, R 2004; 47: 49-121.
2. Yoshinari M, Oda Y, Kato T, Okuda K.. Biomaterials 2001;22:2043-8.

D41-38

钯薄膜质子转移介导的时序性抗菌和抗炎研究

张冬冬*

中国科学院深圳先进技术研究院

引言：近年来，针对细菌和细胞的“选择性”和“时序性”调控已成为研究前沿和热点。然而，目前广泛采用的是以药物、抗菌金属离子、活性氧（ROS）和外场刺激产热等为主的杀菌策略，很难选择性区分细菌和正常哺乳动物细胞[1]。本研究从细菌、免疫细胞和骨相关细胞在结构和代谢上的差异出发，期望设计一个生物安全的表面，选择性和时序性地通过不同机制来调节细菌和细胞的命运。

材料与方法：通过离子溅射技术制备钯薄膜；通过 TEM、XPS、酶催化等相关实验表征薄膜的物理化学性能；通过转录组测序和分子生物学来研究薄膜对细菌、巨噬细胞和骨相关细胞的作用规律及机理；构建多种炎症和感染动物模型，评价体内治疗效果。

结果与讨论：许多研究已经发现，钯原子可以很容易地与氢原子结合，使钯纳米晶体在室温下储存质子并通过其晶格释放氢气。为了维持质子浓度梯度，细菌需要将细胞内质子转移到细胞外空间。球差电镜和飞行时间二次离子质谱仪实验证实钯原子的外层电子可以用来共轭质子，将它们吸引到其晶格中。这个过程会破坏细菌的呼吸，最终导致细菌死亡。同时，多种酶催化实验证实构造的氢化钯具有类似于天然酶的多种抗氧化酶活性。此外，氢化钯释放的氢气作为内源性气体和抗氧化剂发挥重要的生理和病理调节功

能。因此, 钯独特的酶活性和载氢特性使其可以有效地清除活性氧, 并促进巨噬细胞向抗炎 M2 型的转化。细菌转录组测序分析显示, 细菌内部氧化应激增加, 而 ATP 合成和营养运输活性受到抑制, 这表明氧化损伤、能量产生功能障碍和营养缺乏是钯薄膜的主要抗菌机制。巨噬细胞的转录组测序分析表明, NOD 样受体信号通路的下调在激活免疫细胞进行 M2 表型极化从而促进骨组织修复中起着至关重要的作用。

结论: 本研究在骨植入材料表面构建钯薄膜, 并调控其物理化学性质, 以夺取细菌胞外微环境中的质子, 干扰正常的细菌生理代谢活性(包括 ATP 的合成和营养物质的共转运等), 从而实现细菌的饥饿杀伤; 随后, 通过化学催化来快速清除炎症早期阶段的活性氧物种和后期释放的氢气, 以调控细胞内部的氧化还原平衡, 重塑成骨免疫微环境, 提高了骨整合和骨缺损修复水平[2]。

参考文献

[1] Li W., Thian E., Wang M., et al. Surface design for antibacterials materials: from fundamentals to advanced strategies, *Advanced Science*, 2021, 2100368.

[1] Zhang D., Li M., Chen S., et al. Novel palladium hydride surface enabling simultaneous bacterial killing and osteogenic formation through proton capturing and activation of antioxidant system in immune microenvironments. *Advanced Materials*, 2024, 2404485.

D41-39

钛铜合金表面纳米结构化 TiO₂/CuO/Cu₂O 复合涂层的制备及其抗菌性、生物相容性研究

张远

山东第一医科大学

由于具有良好的力学性能、抗腐蚀性能及生物相容性, 钛及钛合金被广泛应用于骨替代材料。然而目前临床应用的商业纯钛及 Ti-6Al-4V 不具有抗菌性能并且骨整合能力不足, 因此在一定程度上会造成术后感染及无菌性松动, 从而导致植入失败。因此同时赋予医用钛及钛合金良好的抗菌性及生物活性具有重要意义。研究表明, Cu 作为人体的一种微量元素具有良好的抗菌性, 并且本课题组及其他研究团队发现 Ti-Cu 合金具有优异的抗菌性能, 但其仍为生物惰性材料, 骨整合能力仍有待提高。碱热处理可以在钛及钛合金表面制备一层具有纳米结构的涂层, 从而提高其生物活性。因此, 通过碱热处理对 Ti-Cu 合金进行表面改性, 研究其是否同时具有良好的抗菌性及生物活性。实验发现碱热处理后 Ti-5Cu (Ti-5Cu-AH) 表面生成了具有纳米结构的 TiO₂/CuO/Cu₂O 复合涂层, 涂层具有良好的亲水性和 Cu²⁺释放能力。抗菌实验发现, Ti-5Cu-AH 释放的大量的 Cu²⁺和表面的 CuO 使其具有优于 Ti-5Cu 的抗菌性。体外细胞实验发现, Ti-5Cu-AH 表面的纳米结构和释放的 Cu²⁺促进了小鼠胚胎成骨细胞前体细胞 (MC3T3-E1) 的初期粘附, 碱性磷酸酶 (ALP) 的合成, 细胞外基质的矿化及成骨相关基因的表达, 并且不具有细胞毒性。实验结果表明碱热处理 Ti-5Cu 同时具有良好的抗菌性和生物活性, 为解决目前临床应用的钛及钛合金存在的问题提供了一种潜在的策略。

D41-40

超小型硒化钴纳米酶靶向降解胞外聚合物基质和降低致病性抗耐药细菌感染

朱旭峰

广东医科大学

耐甲氧西林金黄色葡萄球菌 (MRSA) 对全球公共健康造成重大威胁, 尤其是其生物被膜相关的难治性感染 1, 2。胞外聚合物基质 (EPS) 致密的三维结构是生物被膜相关感染难以根除的关键因素 3。因此, 本研究合成了超小型硒化钴纳米颗粒 (CoSe NPs), 并使用葡聚糖 (Dex) 对其进行改性, 成功得到葡聚糖功能化硒化钴纳米颗粒 (Dex@CoSe NPs)。体外结果显示, Dex@CoSe NPs 不仅能够通过降解淀粉样纤维、多糖等胞外聚合物基质分散生物被膜, 还可以介导活性氧 (ROS) 促使细菌细胞膜破裂杀死细菌。此外, Dex@CoSe NPs 通过下调 MRSA 群体感应系统以及 ABC 转运体等途径相关基因降低其致病性。更重要的是, Dex@CoSe NPs 能够有效地缓解 MRSA 引起的慢性伤口感染和全身感染。总之, 该项研究为实现超小型纳米颗粒靶向抗生物被膜相关感染提供新思路。

D41-41

具有微环境响应性的微针的制备及协同抗菌性能研究

胡艳玲¹、江金改²、杨栋梁^{*2}

1. 南京科技职业学院

2. 南京工业大学

传统光动力疗法在生物膜的去除方面,受到生物膜屏障、缺氧环境以及细菌抗氧化防御机制等多种因素的限制。鉴于此,本工作通过在海胆状硫化铋(Bi_2S_3)表面修饰一层 Ga^{3+} -儿茶酚涂层,成功制备了海胆状 BSPG 纳米颗粒。随后,将 BSPG 负载到透明质酸(HA)可溶性微针当中,得到 BSPG 微针贴片(BSPG MN)。将 BSPG 负载到 HA 可溶性微针中,得到 BSPG 微针贴片(BSPG MN)。该贴片可穿透皮肤/细菌生物膜屏障,将 BSPG 纳米颗粒递送至感染部位。作为光/pH 响应型纳米协同剂,海胆状 BSPG 能够穿透细菌并在酸性生物膜环境中释放 Ga^{3+} 。 Ga^{3+} 能够抑制超氧化物歧化酶(CAT)和过氧化氢酶(SOD)的活性,破坏细菌抗氧化系统;在激光照射下,BSPG 通过 I 型光动力行为产生超氧阴离子和过氧化氢,与 Ga^{3+} 协同发挥作用,显著增强抗菌/抗生物膜活性。RNA 转录组分析结果显示,BSPG 联合激光处理能够干扰细菌代谢过程,减少 ATP 的生成量,并增加细菌细胞膜的通透性。此外,BSPG 联合激光处理还会使细菌的质过氧化物急剧积累,加剧细菌氧化损伤。体外抗菌研究表明,BSPG NPs 对 MRSA 的杀伤率可达 99.8%,体内实验显示,BSPG MN 贴片能够突破生物屏障,高效递送 BSPG,从而去除细菌生物膜、减轻炎症并加速伤口愈合。

D41-42

干扰呼吸链碳量子点饥饿疗法抗菌同时调控线粒体代谢促进感染微环境下的骨再生

白信信、罗卓荆、黄景辉*

空军军医大学附属西京医院

目的:植入物相关感染(IAIs)已然成为骨科术后极具挑战性的临床难题之一。研究显示,即便在植入物周围存在极低载量的病原微生物,它们也能通过在表面定植形成生物膜而引发持续性感染,最终可能导致假体松动、溶骨性病损甚至全身性脓毒症等严重后果。当前,抗生素虽仍是植入物改性的常用手段,但生物膜的形成极大增强了细菌对抗生素和宿主免疫系统的抵抗力。同时,骨髓腔封闭的微环境也显著限制了抗生素作用,不仅增加了细菌耐药风险,还可能对正常宿主细胞造成损伤。因此,本研究旨在设计一种新型抗菌改性药物,利用细菌和真核细胞的结构差异,实现高效杀菌的同时最大程度保护宿主细胞,这对于有效预防和控制 IAIs 意义重大。

材料与方法:以无水柠檬酸(CA)为碳源,引入二烯丙基二甲基氯化铵(DDA)、聚六亚甲基胍(PHMG)为异原子掺杂来源,设计合成了能够特异性干预细菌呼吸链的碳量子点,命名为 NGCDs。并通过透射电镜、原子力学显微镜、傅里叶红外光谱等实验对 NGCDs 进行全面表征。利用连续抗菌实验、抗生物膜实验、细菌活死染色、外排泵实验以及细菌转录组学验证 NGCDs 对临床骨感染主要病原体——金黄色葡萄球菌、表皮葡萄球菌、耐甲氧西林金黄色葡萄球菌、铜绿假单胞菌、大肠杆菌以及阴沟肠杆菌的抗菌效果。同时,借助细胞毒性试验、线粒体呼吸实验、膜电位检测实验、q-PCR 实验验证 NGCDs 对成骨细胞的影响,并通过细胞转录代谢组学揭示其作用机制。最后为验证 NGCDs 改性骨植入物的可行性,将其成功负载于钛(Ti)、镍(Ni)、镁(Mg)、钽(Ta)及聚醚醚酮(PEEK)等五种常见的植入材料表面,探究 NGCDs 改性植入物的抗菌、促成骨效能,并构建骨植入物相关感染的大鼠、比格犬动物模型进行体内验证,考察改性植入物在体内感染环境下的促骨整合性能。

结果与讨论:基于原核细菌与真核细胞显著的亚细胞定位差异——原核生物缺乏线粒体等膜结合细胞器,主要通过细胞膜锚定的呼吸链完成跨膜质子梯度建立与 ATP 合成,而真核细胞则通过线粒体进行三羧酸循环和氧化磷酸化等关键代谢过程,本研究设计合成了新型抗菌药物 NGCDs。不仅可通过“饥饿疗法”抑制细菌氧化呼吸链、干扰细菌能量代谢而发挥稳定的抗菌效能,还能通过抑制谷胱甘肽代谢(诱发 ROS)、破坏菌膜等途径,对常见临床骨感染病原菌展现出稳定的杀灭能力。甚至即便针对耐药菌 MRSA,NGCDs 也可通过抑制其耐药基因的表达而保持抗菌活性。相反,进入成骨细胞后 NGCDs 则保持着良好的生物安全性。具体而言,NGCDs 进入真核细胞后受电荷牵引富集于线粒体,但由于无法通过线粒体内膜而集于

内膜外侧，促使线粒体膜电位提升，代谢增强。而转录代谢联合分析表明，NGCDs 进入细胞后可发挥与在细菌中截然不同的作用，通过促进谷胱甘肽代谢（清除 ROS）而保障细胞在炎症环境下的生存。此外，细胞转录组学分析发现，细菌感染可诱导宿主细胞发生铁死亡，而 NGCDs 的加入能显著抑制这一过程，从而有效促进感染微环境中的骨再生。

结论：鉴于真核细胞和原核细菌的结构差异，本研究成功开发了新型正电性抗菌药物——NGCDs，其作用机制主要包括：一是通过静电相互作用高效靶向革兰氏阳性菌（肽聚糖）和革兰氏阴性菌（脂多糖）表面的负电荷组分，迅速破坏细菌膜完整性，阻断呼吸链功能；二是选择性干扰细菌 ATP 合成及氨基酸代谢等能量相关通路，最终使细菌因“能量饥饿”而死亡。此外，NGCDs 对真核细胞线粒体具有独特的时空选择性：由于线粒体外膜存在孔径 2 - 3 nm 的孔蛋白通道，NGCDs 可自由穿透外膜却无法跨越低通透性的内膜，从而局部富集于内膜外侧空间，这种特异性分布不仅避免了药物对线粒体核心代谢功能的干扰，反而可能通过增强内膜电位差（ $\Delta \psi_m$ ）而促进了宿主细胞的能量代谢。因此，NGCDs 可发挥“一石二鸟”的抗菌促成骨协同效应。此外，将其成功负载于植入物表面后不仅保障了植入材料的固有生物安全性，还赋予植入物其强大的抗菌、促骨整合效能，这些发现充分表明 NGCDs 在预防和治疗植入物相关感染领域具有广阔的应用前景，具有重要的研究价值和临床意义。

D41-43

镁表面多策略抗菌生物功能涂层的制备与性能研究

钱堃*

南京工程学院

镁植入材料的应用受到抗菌性能不足的影响。在镁金属表面制备具有抗菌功能的等离子体电解氧化（PEO）涂层是一种有效的应对策略。我们通过等离子电解氧化、化学沉积及自组装技术，在医用镁表面开发出一系列具有多策略抗菌性能的复合涂层。通过控制涂层中不同元素的分布改变涂层在服役环境中的离子释放速率，调控涂层的微观形貌及相组成赋予涂层光响应性能。所研发的涂层可以通过抗菌离子释放及光电/光热响应起到协同高效抗菌的作用。该研究为骨植入材料的开发提供了新的策略。

D41-44

一种太阳能增强杀菌的磷参杂聚合物包裹碳点基薄膜

彭先锋、林星宇*

浙江大学

光动力灭活（Photodynamic inactivation, PDI）作为一种新兴的抗菌策略，已展现出广阔的应用前景。然而，活性氧（Reactive Oxygen Species, ROS）的灭菌效能常受限于细菌细胞膜的屏障作用，从而降低整体抗菌效率。受纳米材料光敏化改性的启发，我们构建了一种基于磷参杂的超碳化聚合物点（Phosphorus-doped Super-Carbonized Dots, PSCD）的光热/光动力协同灭菌复合膜，用于太阳光驱动的高效灭菌。该复合膜以天然聚合物为基质，嵌入 PSCD 纳米颗粒，并通过氢键作用增强其结构稳定性和光响应性能。在太阳光照射下，PSCD 可在可见光区域产生 ROS，并在近红外区域实现局部光热转换，诱导细胞膜通透性增强，促进 ROS 更高效地穿透细菌细胞膜。这种光热与光动力协同机制显著提升了抗菌效果，使细菌在 30 分钟内实现高达 $7 \log_{10}$ CFU/mL 的灭活效率。该复合膜表现出优异的广谱抗菌性能，能有效抑制微生物生长，显著延长草莓货架期。本研究提出了一种兼具生物安全性、生态友好性与高抗菌性能的太阳能驱动抗菌包装新策略，展现出在食品安全和智能包装领域的应用潜力。

D41-45

新型 Ti-Cu 合金表面 TiN_xO_y -Cu₂O-CuO 涂层的抗菌及促内皮化性能研究

赵晓彤*

温州医科大学口腔医学院·附属口腔医院

新型 Ti-5Cu 合金作为心血管植入物的候选材料，其表面性能的优化是加速临床转化的核心。本研究采用等离子体表面改性技术对 Ti-5Cu 合金进行氧氮化处理，制备了 TiN_xO_y -Cu₂O-CuO 涂层。研究发现，涂

层中的 Cu_2O 和 CuO 相较于基体中的 Ti_2Cu 相, 实现了 Cu^{2+} 的快速可控释放。涂层中 TiO_2 晶格氧原子被氮原子取代的结构, 赋予涂层优异的长期超亲水性。抗菌性能测试证实, 基于 $\text{Cu}_2\text{O}/\text{CuO}$ 直接接触杀菌机制, 改性后合金对金黄色葡萄球菌的抗菌率高达 99.9%。生物相容性评价结果表明, 与纯钛相比, 涂层表面超亲水性、纳米结构特性及适宜 Cu^{2+} 释放速率的协同作用下, 内皮细胞在涂层表面的早期粘附、增殖、迁移速率分别提高至 1.4 倍、1.2 倍和 2.5 倍, 血管内皮生长因子 (VEGF) 分泌量增加约 2.6 倍。综上所述, $\text{TiN}_x\text{O}_y\text{-Cu}_2\text{O-CuO}$ 涂层显著提升了 Ti-5Cu 合金的抗菌与促内皮化性能, 是一种极具前景的心血管应用生物活性表面改性方案。

D41-46

骨髓炎模型中粗糙表面 Ti-Cu 植入物生物功能研究

刘徽¹、许道荣²、任玲*¹、杨柯¹

1. 中国科学院金属研究所

2. 南方医科大学南方医院创伤骨科

引言: 骨髓炎是伴随骨科植入物应用的最严重的并发症之一。由于细菌的多重耐药性以及骨内细菌生物膜定植的隐匿性, 彻底治愈骨髓炎仍然十分困难, 复发率高达 30%。金黄色葡萄球菌 (*S. aureus*) 是骨髓炎最常见病原体, 它能够入侵到成骨细胞内, 逃脱人体免疫系统的攻击, 并破坏骨重建过程的动态平衡, 导致骨质溶解。因此, 发展具有抗感染和促成骨协同作用的植入物具有重要意义。

材料与方法: 以课题组自主开发的 Ti-Cu 合金和医用纯钛作为实验材料, 加工成固定针 ($\Phi 0.5 \times 6 \text{ mm}$), 随后表面进行喷砂+酸蚀处理, 获得具有不同多级结构尺寸和数目的粗糙表面, 分别命名为 TiCu-I/II/III、Ti-I/II/III。机械抛光表面(TiCu-P、Ti-P)作为对照。建立 *S. aureus* 诱导的骨髓炎模型, 采用生物发光成像、micro-CT、骨组织染色、免疫组化等方法, 系统研究粗糙表面 Ti-Cu 合金在骨髓炎模型中的抗菌与促成骨协同作用。

结果与讨论: (1) 所有 Ti 植入物周围的骨组织均发生严重的骨髓炎。与 Ti-P 组相比, 粗糙表面 Ti 植入物的多级结构有利于细菌定植。随着粗糙度增加, 粗糙表面 Ti 植入物越有利于诱导宿主免疫系统的杀菌作用, 与其它 Ti 组相比, 故 Ti-III 组的细菌负荷最低。(2) 不同粗糙表面 Ti-Cu 植入物均有效抑制骨髓炎的发生, 并促进新生骨组织的形成, 具有优异的骨整合作用。一方面, 与 Ti 组相比, 粗糙表面 Ti-Cu 植入物通过释放 Cu 离子促进成骨细胞负责的新骨形成过程。另一方面, 与 TiCu-P 相比, 粗糙表面 Ti-Cu 植入物对破骨细胞的抑制作用是决定其出色的骨整合作用的主要原因。

结论: 在骨髓炎模型中, 粗糙表面 Ti-Cu 植入物能够调控骨形成过程与骨吸收过程的平衡状态, 以加速骨重建过程。

D41-47

昆虫源抗菌蛋白/肽的筛选与促感染性伤口修复研究

龚秋雨*

西安交通大学第一附属医院

昆虫是地球上含量最丰富的物种, 体内含有丰富的功能蛋白或多肽¹, 以往的研究多集中于这些蛋白/多肽的结构或机械性能等²⁻⁴。另一方面, 昆虫往往具有强大的免疫系统, 能够高效地抵御外界微生物的侵袭⁵, 这或许与其体内蛋白/多肽的抗微生物或免疫活性有关⁶。鉴于此, 基于此类蛋白/多肽具有生物相容性好、可持续利用、绿色经济等优点, 我们与大连理工大学刘田教授合作, 筛选了若干代表性的昆虫源蛋白质/多肽⁷, 并系统探究了它们对感染性伤口的修复作用与机制^{8,9}。这些结果可能为后续发展用于组织修复的新型活性大分子材料或潜在药物提供了一定的借鉴。

参考文献

1 Castro, R. J. S.; Ohara, A.; Aguilar, J. G. S. et al. Trends. Food Sci. Technol. 2018, 76: 82-89.

2 Muthukrishnan, S.; Mun, S.; Noh, M. Y. et al. Curr. Pharm. Des. 2020, 26(29): 3530-3545.

3 Arakane, Y.; Lomakin, J.; Gehrke, S. H. et al. PLoS Genet. 2012, 8(4): e1002682.

4 Noh, M. Y.; Kramer, K. J.; Muthukrishnan, S. et al. Insect Biochem. Mol. Biol. 2014, 53: 22-29.

- 5 Zhang, Q. Y.; Yan, Z. B.; Meng, Y. M. et al. *Mil. Med. Res.* 2021, 8: 48.
6 Kim, B. Y.; Kim, Y. H.; Choi, Y. S. et al. *Insects.* 2022, 13(10): 958.
7 Gong, Q. Y.; Chen, L.; Wang, J. N. et al. *Biomacromolecules.* 2022, 23(6): 2562-2571.
8 Gong, Q. Y.; Liu, B. H.; Yuan, F. H. et al. *ACS Nano.* 2023, 17(23): 23679-23691.
9 Chen, S. Z.; Qi, H. T.; Zhu, X. Z. et al. *Microbiome.* 2024, 12(1): 272.

D41-48**含银钢铁材料的组织性能与应用研究**

彭伟

上海大学

D41-49**多链段调控的聚脲类液相表面防污性能研究**

朱子昂、陈蓉蓉*、刘培礼、朱佳慧、宋大雷、张宏森、王君

哈尔滨工程大学

海洋生物污损会加剧海上设施和船舶等设备表面腐蚀并造成严重的经济损失。仿生类液相表面(SLLS)防污涂层通过在表面接枝的亲/疏水链段的扰动来阻碍污损生物的黏附,为解决海洋生物污损提供了优选。但是目前针对多链段扰动行为对污损生物的感知、黏附及脱附研究还不够清晰。

本研究以六亚甲基二异氰酸酯三聚体(HDIT)、聚乙二醇和聚天冬氨酸酯作为聚脲基底,选取单羟基封端聚二甲基硅氧烷、甲基丙烯酸十二氟庚酯和聚乙二醇甲醚甲基丙烯酸酯接枝在聚脲基底上分别制备了柔性类液表面(PxNP)、两亲类液表面(PxEyNP)和柔性/刚性双链段类液表面防污涂层(PxFyNP)。通过调控链段接枝含量、链段力学性能和表面润湿性来探究链段扰动对污损生物黏附的影响。

研究发现,链段扰动行为可有效抑制污损黏附,随着链段接枝含量增加三种涂层对细菌、硅藻和贻贝抑制率均有提升。但受链段力学性能影响,同接枝含量的P5NP、P2F3NP和P2E3NP双眉藻(Ha.)抑制率为 $79.2 \pm 3.1\%$ 、 $71.1 \pm 3.5\%$ 和 $81.5 \pm 2.5\%$ 。受界面表面能影响,同接枝含量的P5NP、P2F3NP和P2E3NP的双眉藻脱附率为 $82.9 \pm 4.6\%$ 、 $41.9 \pm 3.3\%$ 和 $37.8 \pm 4.2\%$ 。在实海实验中,涂层表现出至少6个月的防污性能。此外,链段扰动行为可减小涂层界面与液体的粘附力,对涂层进行阻力性能测试,与未接枝链段的聚脲涂层(PONP)相比,三种涂层阻力均减小,其中P5NP阻力最小为6.53N,阻力下降26.4%。多链段类液表面防污涂层的设计防污涂料的设计提供了新的见解。

D41-50**生物医用 Ti6Al4V-5Cu 合金表面细菌黏附行为的尺度研究**石李祯^{1,2}, 刘徽¹, 任玲^{1,*}, 杨柯^{1,*}

1 中国科学院金属研究所师昌绪先进材料创新中心、沈阳市文化路72号、110016

2 中国科学技术大学材料科学与工程学院、沈阳市文化路72号、110016

晶粒细化提高传统生物医用钛合金力学性能、耐蚀性与生物相容性的同时,却增加了细菌黏附的风险。结合Cu元素的优异杀菌性,制备得到晶粒尺寸分别为 $7.48 \pm 1.05 \mu\text{m}$ (CG)、 $5.06 \pm 1.87 \mu\text{m}$ (MG)与 $0.50 \pm 0.07 \mu\text{m}$ (UG)的Ti6Al4V-5Cu合金,探究晶粒细化对其表面细菌黏附行为的影响。所有合金中,晶粒尺寸最小的UG合金表面拥有最小的水接触角、纳米级粗糙度及Zeta电位。与Ti6Al4V合金相比,不同晶粒尺寸的Ti6Al4V-5Cu合金对金黄色葡萄球菌的抗菌率均高达99%以上。Cu元素的合金化可增加Ti6Al4V合金表面与细菌之间的相互作用能垒,抑制细菌黏附。随着Ti6Al4V-5Cu合金晶粒尺寸的减小,相互作用能垒逐渐增加,使得UG合金表面细菌黏附数量最少。与Ti6Al4V合金相比,UG合金表面细菌黏附力降低41.57%。本文研究内容为抗菌超细晶含Cu钛合金的发展提供科学依据。

墙报

D41-P01

用于海洋防污的超亲水抗生物粘附水凝胶微粒涂层

朱玉龙²、朱忆¹、陈耀阳¹、彭佳³、林敏娟³、林凌*¹

1. 自然资源部第三海洋研究所
2. 上海海洋大学
3. 福州大学

随着世界各国对海洋资源开发利用的不断深入,海洋装备表面防污需求激增,开发高效、环保的防污涂层技术已成为当下研究热点。水凝胶防污涂层材料具有超亲水及低弹性模量等特性,可有效防止污损生物的附着,在海洋防污领域极具应用潜力[1]。本研究采用干态涂覆策略制备海洋抗生物粘附水凝胶微粒涂层[2]。首先,通过热聚合制备 PNIPAM/纳米粘土复合水凝胶,经球磨制成微米尺度的水凝胶微粒。然后以清漆为连接层,在连接层上喷涂水凝胶微粒,固化后成功构建水凝胶微粒涂层。该涂层浸泡海水中可快速吸水形成超亲水层,表现出优异的水下超疏油特性(油滴接触角为 141°),以及优异的抗生物粘附性能(抗细菌粘附率大于 50%)。此外,近海挂板也呈现出优异的抗生物粘附性能(生物粘附面积小于 25%)。本研究制备的水凝胶微粒防污涂层安全环保,不含氧化亚铜等有害防污剂,且具有优异的海洋静态防污效果,为海洋防污涂层材料的制备提供了新思路。

D41-P02

化学催化/超声催化协同治疗细菌感染性骨缺损

王超峰¹、吴水林²、梁春永¹、刘想梅*¹

1. 河北工业大学生命科学与健康工程学院
2. 北京大学材料科学与工程学院

声催化和化学动力在抗菌治疗中引起了广泛关注。电子传输效率在声催化和化学动力中起着重要作用,如何调节电子传输并实现声催化和化学动力的相互增强以实现高效的抗菌治疗是一个难题。在此,我们开发了一种缺陷型 S-TiO₂-x/CeO₂ 声敏剂,通过声电子调节 CeIII/CeIV 的价态转换来增强化学动力治疗,并通过创建异质结加速界面电子的传输来增强声催化治疗,从而实现声催化和化学动力的相互增强。在超声波照射下,通过相互增强的化学动力/声催化抗菌治疗,能够杀死 99.3% 的金黄色葡萄球菌。由于 CeO₂ 中存在混合价态的 CeIII/CeIV, S-TiO₂-x/CeO₂ 可以作为氧基底物。Ce⁴⁺能够耗尽谷胱甘肽,并与细菌中的过氧化氢反应产生活性氧。这些活性加上声催化产生的活性氧,导致细菌死亡。同时, S-TiO₂-x/CeO₂ 在超声刺激下产生的电信号和铈离子能够激活 Wnt/ β -连环蛋白信号通路,诱导人骨髓间充质干细胞分化为成骨细胞。S-TiO₂-x/CeO₂ 在超声照射下成功治疗了细菌性骨髓炎,有效清除了感染,抑制了炎症,并促进了骨再生,为深层感染患者提供了有效的治疗方法。

D41-P03

基于分子对接与构效分析的贻贝及藤壶蛋白靶向防污化合物筛选研究

熊九臣¹、陈蓉蓉*^{1,2}、于静¹、刘琦¹、刘婧媛¹、王君^{1,2}

1. 哈尔滨工程大学材料科学与化学工程学院
2. 哈尔滨工程大学长三角高等研究院

环境友好型防污剂的开发对海洋生物污损的防除至关重要,而传统的防污活化合物筛选试验周期长。本研究运用计算机辅助药物设计(CADD)技术,靶向紫贻贝和藤壶的几丁质合成酶,旨在加速绿色防污剂筛选并阐明结合规律。

从 DrugBank 数据库获取 10,023 个小分子,经 Open Babel 结构优化与质子化状态校正预处理后,采用

AutoDock Vina 进行分子对接，筛选出 2,184 个高结合力候选分子（结合能 ≤ -10 kcal/mol）。利用 RDKit 计算分子理化性质与基团信息，并开展系统性构效关系（SAR）分析：(1) 理化性质分析：基于随机森林回归与广义加性模型（GAM）的分析表明，脂水分配系数（LogP）与极性表面积（TPSA）与对接评分呈显著负相关，分子量（MolWt）最优区间为 250-650 Da；氢键受体（HBA）与氢键供体（HBD）数量增加均导致对接评分下降。(2) 基团特征分析：通过随机森林回归与相关性分析发现，芳香环、酰胺及仲胺基团在高活性分子中出现频率显著高于低活性分子，且存在显著关联性，表明其可能构成关键药效团。本研究整合分子对接与多维构效分析，筛选出高亲和力候选化合物，分析了理化性质与结构基团对靶点结合能力的影响规律，为开发基于贻贝及藤壶蛋白抑制的环保防污材料提供了坚实的理论依据与分子基础。