



新闻动态

所内新闻

科研动态

综合新闻

通知公告

媒体扫描

物理所公开课

当前位置: 首页 &gt; 新闻动态 &gt; 科研动态

中国科学院物理研究所  
北京凝聚态物理国家研究中心

SF10组供稿

第79期

2019年12月02日

## 质子透明性—发现无障碍的质子跨膜运输机制

分子筛对于质子交换膜、水纯化淡化和气体分离都有着重要的意义。二维材料凭借其超薄的厚度和良好的力学性能,已经在分子筛应用中展现出了优越的分子运输和筛选潜能。比如石墨烯、氧化石墨烯等二维材料的质子运输性能已经在实验上得到了证实。这些二维材料的质子运输性能依赖于材料上自然形成或者人为制造的纳米级的运输通道。但通常的氧化处理和离子束轰击等方式很难得到高密度并且尺寸均一的纳米通道,因此难以保证二维薄膜材料的质子选择性。纳米格子材料本征的纳米孔结构恰好为分子运输提供了极大的通道密度和良好的尺寸均一性。

最近,中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心表面物理国家重点实验室SF10组博士生徐纪玉等在孟胜研究员的指导下,与北京大学物理学院的王恩哥教授、李新征教授合作,证明了二维纳米格子材料石墨二炔具有极好的质子导通性和选择性(图1)。相关成果近日发表在《自然通讯》(Nature Communications)上。

石墨二炔材料上合适的通道尺寸使膜两侧的水分子形成了跨膜的氢键结构,可以使得质子按照Grotthuss机理以结构扩散的形式实现跨膜质子运输(图2)。质子跨膜转移的自由能势垒为~2.4 kJ/mol,几乎等于质子在体相水中转移的势垒(2.1 kJ/mol),因此石墨二炔薄膜对于质子运输几乎是透明的(图3)。同时,在外电场下的非平衡模拟计算得到了石墨二炔的质子导通率为0.6 S/cm,这是石墨烯质子导通率的10000倍,是商用质子交换膜Nafion的10倍。路径积分分子动力学计算表明质子的核量子效应可以进一步降低质子在石墨二炔界面处转移的势垒,从而加快质子转移的效率。

相对于原子致密排列的石墨烯、h-BN等二维材料,石墨二炔上的纳米孔为质子转移提供了极小的转移势垒。进一步的细致分析表明石墨二炔的纳米孔对于甲醇和乙醇分子具有较大的转移势垒(>100 kJ/mol),这证明石墨二炔材料具有优异的质子选择性。石墨二炔作为一种已经在实验上合成的二维材料,具有成为下一代的质子交换膜材料的巨大潜力。这为近年来兴起的用质子调控氧化物和二维材料物理化学性质提供了新的思路。

该工作得到科技部重点研发计划(2016YFA0300902, 2015CB921001)和国家自然科学基金委(11774396, 91850120, 11934004)的支持。

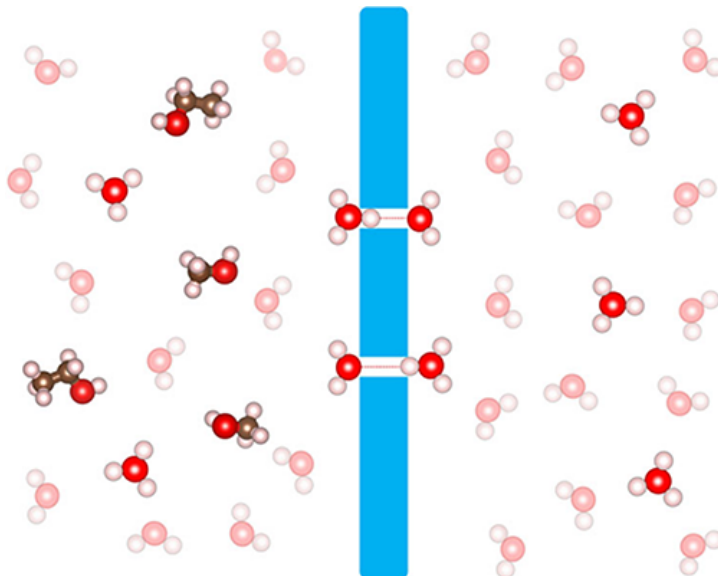


图1. 石墨二炔具有优异的质子导通性和分子选择性。

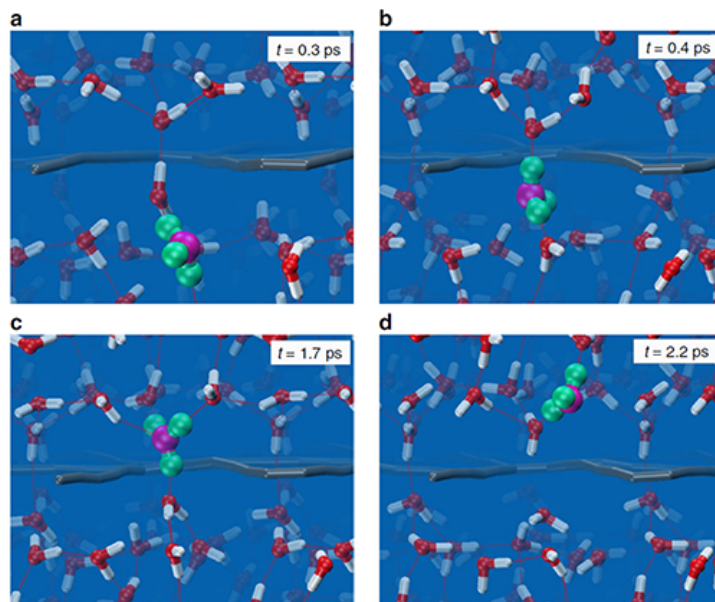


图2. 质子跨膜传输的动态过程。质子按照Grotthuss机理以结构扩散的形式实现跨膜运输。

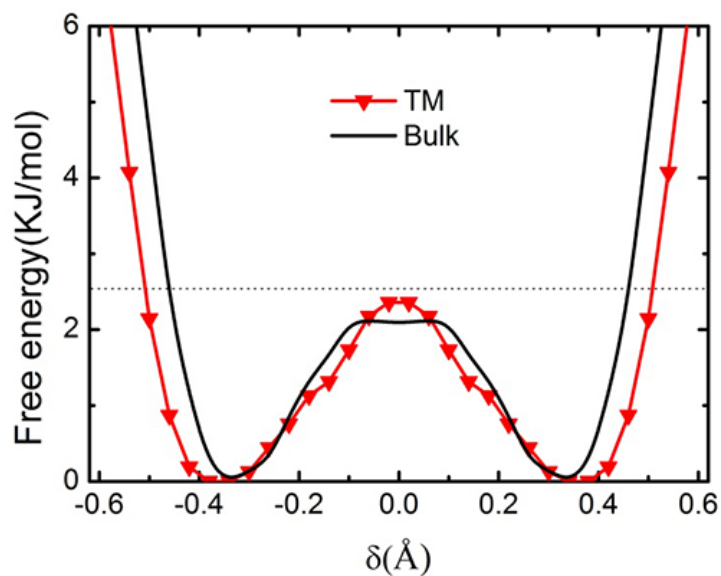


图3. 质子跨膜转移 (TM) 的自由能势垒和质子在体相 (bulk) 水中转移的自由能势垒。虚线代表300K时的 $k_B T$ 。

>> 附件列表:

[下载附件>> NComm10.3971\(2019\).pdf](#)

[电子所刊](#)

[公开课](#)

[微信](#)

[联系我们](#)

[友情链接](#)

[所长信箱](#)

[违纪违法举报](#)

