

科学家首次利用双极膜重水解离实现氘代酸碱低成本制造

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/34295.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

科学家首次利用双极膜重水解离实现氘代酸碱低成本制造

。近日，中国科学技术大学精准智能化学全国重点实验室教授徐铜文、特任教授汪耀明和教授李震宇团队，在氘代化学品制备领域取得突破性进展。该团队创新性地利用双极膜实现重水（ D_2O ）高效解离，首次揭示了核量子效应导致膜层内氘离子（ D^+ ）迁移速率反超氢离子（ H^+ ）的现象，颠覆了“重水解离速率慢”的传统认知，并开发出低成本、高效率制备氘代酸和氘代碱新技术。

氘代酸和氘代碱是合成氘代药物、进行氢/氘（ H/D ）交换反应的关键原料，在OLED等发光材料中具有重要应用前景。当前，氘代酸碱的生产普遍存在工艺复杂多样、反应条件苛刻、产物纯化困难、浓缩能耗高等问题。

该研究以廉价的重水和无机盐为原料，在室温条件下利用双极膜电渗析技术直接高效解离重水，一步生成高浓度的氘代酸和氘代碱，大幅降低了生产成本，有望为下游众多氘代化学品提供经济、优质的氘代酸碱原料。

该研究阐明了双极膜高效解离重水的核心机理。在反向偏压作用下，双极膜中间层离子定向迁出，解离产生的氘离子和氘氧根离子成为氘代酸碱的来源。研究发现，重水体系中更高的氘氧键键能和更低的离子扩散系数共同导致双极膜电渗析膜堆电压显著升高。同时，更高的双极膜极限电流密度和溶液电阻使得重水解离达到稳态所需时间远长于普通水解离。分析表明，重水体系下双极膜中间层解离电阻、膜层传质电阻及扩散边界层电阻均显著高于水体系。在消耗相同电荷量的情况下，氘离子/氘氧根离子的生成速率反而是氢离子/氢氧根离子的1.25倍，这颠覆了关于重水产酸碱速率的固有认知。分子动力学模拟发现，重水更高的粘度和更强的氢键网络增加了阳离子如钾离子的迁移阻力，使其溶剂化壳层更稳定有序；氘离子和质子在膜相内迁移能力存在差异。第一性原理计算证实，膜相内氘离子团簇具有比质子团簇更低的脱水能垒，导致其迁移速率差异近7倍。这表明，离子在膜相内的快速有序扩散强化了双极膜中间层的解离效率。

基于上述原理，研究人员将新技术拓展至多个体系，实现了氘代硫酸、氘代盐酸、氟化氘、氘代硝酸、氘氧化钾、氘氧化钠等一系列氘代酸和氘代碱的高效制备。以双极膜重水解离技术为核心的氘代酸碱制备平台，平均生产成本仅为传统工艺的20%左右。整个生产过程无需使用强腐蚀性试剂或重金属催化剂，排放趋近于零，环境友好特性突出。目前，这一技术已完成工程放大，具备年产3吨氘代酸碱的能力，为其工业化大规模生产奠定了基础。

7月9日，相关研究成果以Synthesis of deuterated acids and bases using bipolar membranes为题，在线发表在《自然》（Nature）上。研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金、中国科学院基础与交叉前沿科研先导专项的支持。

双极膜在重水与水体系中解离对比

双极膜重水解离制备多种气代酸碱及其全流程评价

研究团队单位：中国科学技术大学

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发