
物理所等发现无障碍质子跨膜运输机制

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/7509.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！

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输运和筛选潜能。比如石墨烯、氧化石墨烯等二维材料的质子输运性能已经在实验上得到了证实。这些二维材料的质子输运性能依赖于材料上自然形成或者人为制造的纳米级的输运通道。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输运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研究员孟胜的指导下，与北京大学物理学院教授王恩哥、李新征合作，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输运（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输运几乎是透明的（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。

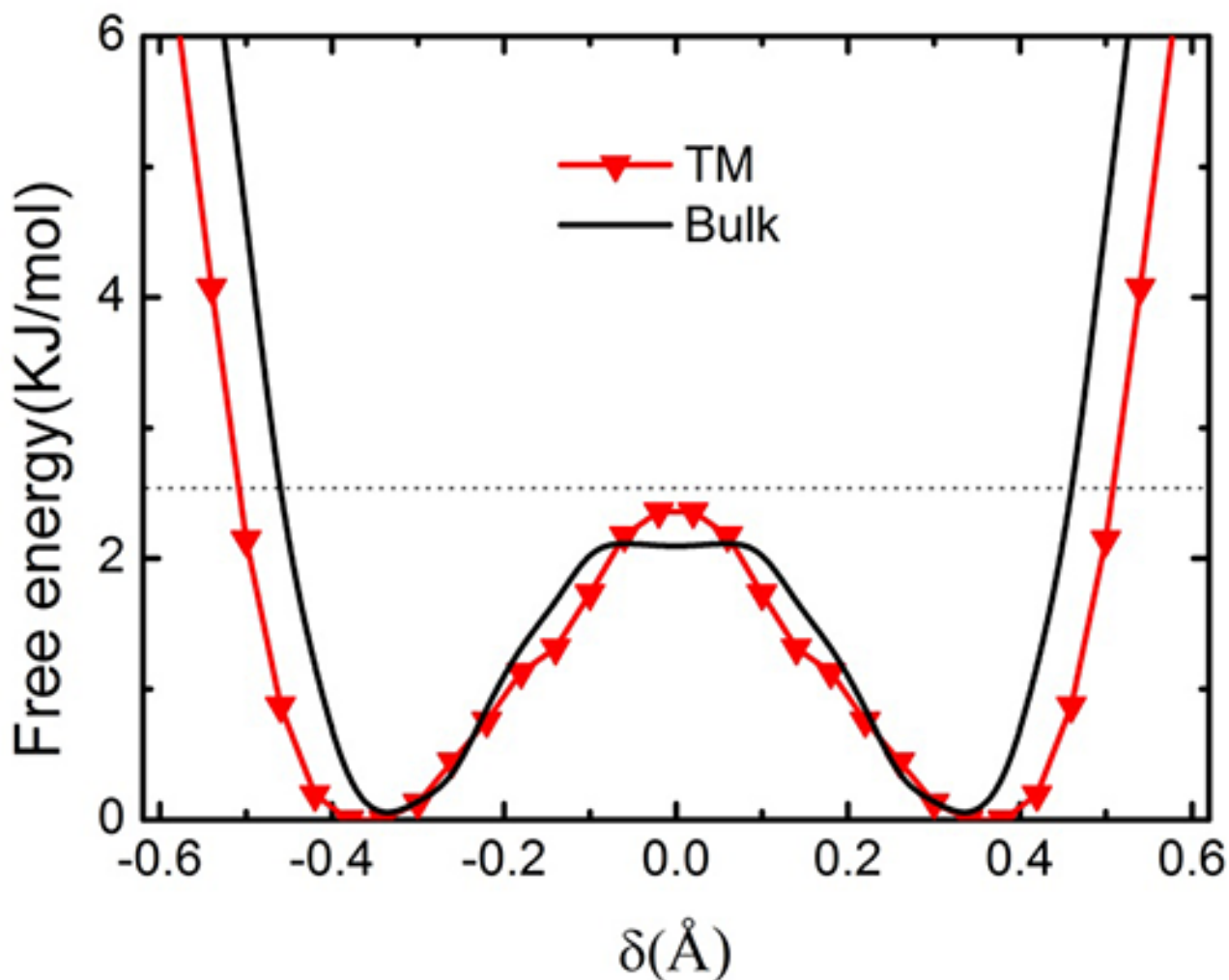


图3. 质子跨膜转移 (TM) 的自由能势垒和质子在体相 (bulk) 水中转移的自由能势垒。虚线代表300K时的 $k_B T$ 。

研究团队单位：物理研究所

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