

同轴包覆纳米管对断裂纳米管内水传输的影响*

孟现文†

(中国矿业大学材料与物理学院, 徐州 221116)

(2025 年 7 月 19 日收到; 2025 年 8 月 5 日收到修改稿)

在大裂隙的断裂纳米管的连接处存在断裂的水桥, 这使得水分子难以通过断裂纳米管. 即使在断裂纳米管内施加较强的压强差, 水分子依然难以通过某些断裂纳米管. 修复断裂纳米管连接处的水桥是实现断裂纳米管内水传输的关键. 目前模拟证实施加匀强电场或太赫兹电场能够修复大裂隙断裂纳米管连接处的水桥. 但这些方法是被动式修复断裂纳米管连接处的水桥, 一旦关闭电场, 裂隙位置会复现断裂的水桥. 本文提出了在大裂隙纳米管外同轴包覆一条完整的纳米管的方法, 实现一种主动修复断裂纳米管连接处的水桥. 包覆纳米管的直径影响断裂纳米管内水分子的占据数、单位时间流量、运动速度及结构. 本文为修复断裂纳米管连接处的水桥提供了一种新的角度.

关键词: 水分子, 断裂纳米管, 修复**PACS:** 31.15.at, 47.56.+r**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250959**DOI:** 10.7498/aps.74.20250959

1 引言

相对于体相水分子, 受限在纳米管特别是非常小的纳米管内的水分子展现出诸多奇异特征^[1-7]. 当纳米管的尺寸与水分子的尺寸可比拟, 达到几个原子尺度时, 纳米管内的毛细现象将变得非常显著. 在受限空间内, 水分子的取向及空间排布受到限制, 这会导致水分子展现一些独特的相变特征^[8]. 与半径较大的纳米管相比, 在较小纳米管内的水分子与纳米管之间的相互作用占主导地位. 在半径较小的纳米管内的水分子与纳米管之间存在较强相互作用, 这极大影响了水分子在纳米管内的传输及结构特点^[9]. 受限空间不仅改变了纳米管内水分子的空间结构, 而且使得纳米管内水分子间的氢键网络在不同受限空间内重新排布^[10,11]. 除此之外, 纳米管内的水分子由于运动受限, 在半径较小的纳米管内的水分子的黏度相对于体相水分子要小, 因此

水分子在半径较小的纳米管内的传输速度得到极大增强^[12,13]. 由于纳米管内的水分子存在奇异特征, 所以研究纳米管内的水对纳米传感器、水过滤膜、药物传递以及能量存储有潜在应用价值^[14-17].

纳米管的结构在影响纳米管内水分子的传输上起着显著作用. 目前, 已经证实包括纳米管的半径、旋度、长度在内的一些结构特点能够影响水在纳米管内的流动、扩散以及传输效率等在内的传输特性^[18-20]. 然而, 在模拟中纳米管的模型主要是包含简单结构的完整纳米管, 为了发现受限在纳米管内新的水分子特征, 相对于单一简单完整纳米管, 纳米管应该包含更多复杂的结构. 例如, 用弯折纳米管替代平直纳米管时, 水分子在 35°弯折角的弯折纳米管内的单位时间流量是其在平直纳米管内单位时间流量的 3.50 倍^[21]. 在半径较大的纳米管内内置另外一个较小纳米管, 不但能够显著影响纳米管内水分子的结构, 而且能意外增强水分子在纳米管内的单位时间流量^[22], 与此同时, 脱盐效率也

* 国家自然科学基金 (批准号: 11605285) 和中国矿业大学学科前沿项目 (批准号: 2022WLXK17) 资助的课题.

† E-mail: xwmeng@cumt.edu.cn

发生较大变化. 实验表明, 氯化钠溶液通过在半径较大的纳米管内内置另外一个较小纳米管的复合结构时, 通过纳米管的水分子单位时间流量及纳米管的脱盐效率均得到增强^[23]. 最近在模拟研究中构造了一类新型复杂纳米管, 这类复杂纳米管被称为断裂纳米管, 它由非连接的纳米管组成, 断裂纳米管连接处通过水桥连接^[5]. 为了让水分子通过断裂纳米管, 必须考虑断裂纳米管两侧施加的压强及裂隙的长度这两个因素. 当水分子受限在一维断裂纳米管内时, 断裂纳米管连接处的水桥的稳定性与裂隙的长度息息相关. 随着断裂纳米管的裂隙长度增加, 断裂纳米管内水分子的占据数及水分子通过断裂纳米管的单位时间流量均降低, 尤其是在断裂纳米管两侧不加压强的情况下, 水分子通过断裂纳米管的单位时间流量下降更快^[24]. 一维断裂纳米管连接处水桥的结构和稳定性等性质受断裂纳米管两侧施加的压强及断裂纳米管裂隙长度的影响. 一般而言, 水分子通过完整纳米管的单位时间流量与纳米管两侧所施加的压强成正相关关系, 然而, 当一维断裂纳米管的裂隙达到 0.80 和 1.30 nm 时, 水分子通过这两类断裂纳米管的单位时间流量一开始随着压强增加而增加, 但是继续增加断裂纳米管两侧的压强会导致水分子通过这两类断裂纳米管的单位时间流量降低; 当一维断裂纳米管的裂隙长度达到 1.80 nm 时, 即使断裂纳米管两侧施加高达 4200 个大气压的压强, 水分子依然不能通过裂隙长度为 1.80 nm 的一维断裂纳米管^[25].

所以断裂纳米管连接处水桥的稳定性对水分子通过断裂纳米管的能力产生重要的影响. 到目前为止, 研究中提出了数种增强断裂纳米管内水分子流动的方法. 由于水分子为极性分子, 在电场环境中, 水分子的空间结构根据电场方向重新排布^[26,27]. 研究已经证实, 电场能够修复断裂纳米管连接处的水桥. 当在断裂纳米管轴向施加电场时, 在断裂纳米管连接处能够形成稳定的水桥^[28]. 在断裂纳米管轴向方向同时施加压强及轴向匀强电场, 水分子能够有效通过裂隙长度较大的断裂纳米管^[29]. 除此之外, 体系的温度也对水分子通过断裂纳米管产生不可忽视的影响. 在室温下, 随着断裂纳米管的裂隙长度增加, 水分子通过断裂纳米管的单位时间流量迅速变成零. 与此相对应的是, 提高体系的温度能够增强水分子越过断裂纳米管裂隙的能力, 这使得水分子通过特定断裂纳米管的单位时间流量

随着体系温度增加而增加^[30]. 最新研究表明, 太赫兹电场能够极大增强单链水分子通过断裂纳米管的能力, 这是由于在太赫兹电场影响下, 断裂纳米管内的水分子展现出部分氢键连接或者没有氢键连接, 这极大增强了断裂纳米管内水分子的自由度^[31]. 尽管在修复断裂纳米管连接处的水桥上提出了几种方法, 但是这些方法是被动式且能耗地修复断裂纳米管连接处的水桥. 一旦电场或者温度去除, 水分子依然不能通过裂隙长度较大的断裂纳米管. 本文提出基于在断裂纳米管外同轴包覆另外一个纳米管的方法, 设计一种主动式修复断裂纳米管断裂水桥的方法. 本研究为修复断裂纳米管连接处的水桥提供了理论依据.

2 模拟细节

图 1(a) 展示了整个模拟框架图, 该框架包含相互平行的石墨烯片, 一个断裂纳米管及其同轴包覆的完整纳米管, 以及石墨烯片层外的水层. 石墨烯片与断裂纳米管垂直相连, 两片石墨烯间的间距为 2.38 nm. 图 1(b) 展示的是同轴包覆断裂纳米管的完整纳米管, 该包覆纳米管的直径 (D) 为变量, 在模拟中 D 的取值范围为 0—1.70 nm. 如果 $D = 0$ nm, 说明断裂纳米管上并未包覆完整纳米管. 图 1(c) 展示的是断裂纳米管示意图, 断裂纳米管由 2 个单独纳米管及其之间的裂隙构成. 断裂纳米管的裂隙长度标记为 L , 在模拟中, 本文选取 L 分别为 0.80 和 1.00 nm. 石墨烯外的水层厚度设定为 2.00 nm. 模拟中碳原子采用的是非带电的勒纳德-琼斯粒子, 参数为 $\sigma_{CC} = 0.34$ nm, $\epsilon_{CC} = 0.36$ KJ/mol^[32], 水分子为 TIP3P 水分子模型^[33].

模拟体系运用 Gromacs 4.0.5^[34] 运算, 采用 NVT 系综, 用 Nose-Hoover 控温方法使得体系温度保持在 300.00 K^[35,36]. 为了在断裂纳米管内产生水分子净向流动, 本文在断裂纳米管两侧施加压强, 通过施加压强的方式让水分子的加速度为 0.10 nm/ps², 由此纳米管两端的压强差约为 236.00 MPa^[37,38]. 在计算粒子间存在的勒纳德-琼斯势能时, 该势能的截断半径选择为 1.40 nm, 在 XYZ 三个方向上采用周期性边界条件. 长程静电相互作用采用 PME 的计算方法^[39]. 本模拟总时长为 60.00 ns, 前 10.00 ns 用来稳定体系, 剩下的 50.00 ns 用来统计水分子在断裂纳米管内的特性.

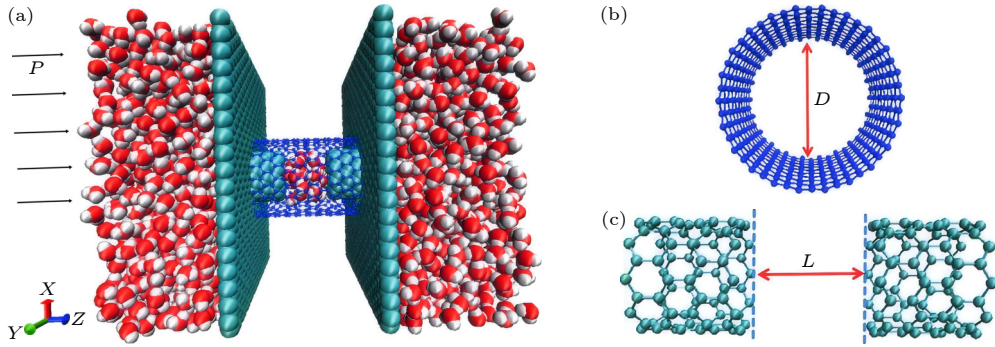


图 1 (a) 模拟框架图, 包括 2 片平行的石墨烯, 1 个断裂纳米管及其同轴包覆的完整纳米管和水层, 其中水分子用红白球表示, 石墨烯及断裂纳米管用青色表示, 压强方向如黑色箭头所示; (b) 同轴包覆完整纳米管示意图, 该纳米管的直径为 D ; (c) 断裂纳米管示意图, 该断裂纳米管的裂隙长度标记为 L , 断裂纳米管由 2 个分离的纳米管及间隙组成

Fig. 1. (a) Side view of the simulation framework, which includes two parallel sheets, a disjoint nanochannel covered by a coaxial nanochannel, and two water reservoirs. Carbon atoms are shown by the cyan balls, and water molecules are shown by the red balls and the white balls, respectively. The black arrows show the direction of the pressure difference. (b) The nanochannel with a diameter of D used to cover the disjoint nanochannel is displayed in blue. (c) The disjoint nanochannel with a non-gap length of L . The disjoint nanochannel is fabricated by two separated carbon nanotubes and a nanogap.

3 结果与讨论

3.1 同轴包覆纳米管直径对断裂纳米管中水分子传输的影响

当纳米管两侧的压强差较小时, 体系的热涨落现象会导致水分子在较短的断裂纳米管内的传输方向是双向的. 为了区分水分子在纳米管内的运动特点, 把水分子从断裂纳米管的左端传输到断裂纳米管的右端的量值标记为 N_{FR} , 把相反方向的水分子运动的量值标记为 N_{FL} . 因此断裂纳米管内的水分子单位时间流量 (V_f) 可运用下式计算:

$$V_f = (N_{FR} - N_{FL})/50. \quad (1)$$

如图 2 所示, 当 $L = 0.80$ nm, $D = 0$ nm 时, 该断裂纳米管的 V_f 极低. 当 D 从 0 nm 增加到 1.70 nm 时, V_f 并不是单一变化的趋势. 对于裂隙 $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管, 当 D 从 0 nm 增加到 0.93 nm, V_f 从一开始的每纳秒 1.20 个水分子急剧增长到每纳秒 22.40 个水分子. 然而, 在 D 从 0.93 nm 变化到 1.70 nm 时, V_f 经历小幅降低的过程, 在 D 从 0.93 nm 至 1.08 nm 变化时, V_f 从每纳秒 22.40 个水分子降低至 18.10 个水分子. 在 D 从 1.08 nm 至 1.70 nm 变化时, V_f 几乎维持在每纳秒 19.00 个水分子. 与此相对应的是, 对于 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管而言, 当 $D = 0$ nm 时, $V_f = 0$, 说明水分子此时不能通过 $L = 1.00$ nm 的无覆盖的断裂纳米管. 与 $L = 0.80$ nm 的无覆盖的断裂纳米管内的水分子传输特点类似, 对于裂隙

$L = 1.00$ nm 的断裂纳米管, 当 D 从 0 nm 增加到 0.93 nm, V_f 从起初的每纳秒 0 个水分子急剧增长到 23.00 个水分子. 然而, 在 D 从 0.93 nm 变化到 1.70 nm 时, V_f 经历一段降低的过程, 在 D 从 0.93 nm 至 1.08 nm 变化时, V_f 从每纳秒 23.00 个水分子降低至 16.50 个水分子. 在 D 从 1.08 nm 至 1.70 nm 变化时, V_f 几乎维持在每纳秒 18.00 个水分子.

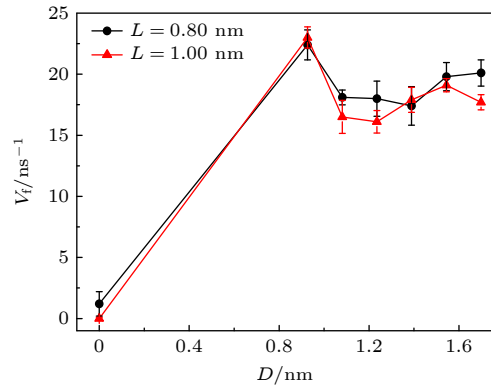


图 2 水分子通过断裂纳米管的单位时间流量 (V_f) 是 D 的函数

Fig. 2. The average water transfer rate V_f , through disjoint nanochannels as a function of D .

3.2 同轴包覆纳米管直径对断裂纳米管中水分子占据数的影响

图 3(a) 展示了 L 分别为 0.80 和 1.00 nm 的断裂纳米管内水分子的平均占据数 (N_1) 与 D 的关系. D 对断裂纳米管内的水分子平均占据数有显著

的调控效应. 对于裂隙长度分别为 0.80 及 1.00 nm 的断裂纳米管, 当 D 从 0 nm 变到 1.70 nm 时, N_1 表现出类似的变化趋势. 当 $D = 0$ nm 时, $L = 0.80$ nm 及 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管内并未完全充满水分子, $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管内的水分子平均占据数为 3.78, 裂隙长度为 1.00 nm 的断裂纳米管内的水分子平均占据数为 2.25. 当 D 从 0 nm 增加到 1.70 nm 时, 两种类型的断裂纳米管内的 N_1 均展现出向上的趋势. 但是随着 D 的增加, $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管的 N_1 增长要比 $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管的 N_1 要快. 当 $D = 0.93$ nm 时, $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管的 $N_1 = 10.67$, 而 $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管的 $N_1 = 10.28$, 此时, 两种断裂纳米管内的 N_1 并没有显著区别. 但当 D 从 0.93 nm 增加到 1.70 nm 时, 两种断裂纳米管的 N_1 表现出明显的差异, $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管的 N_1 从 10.67 急剧增加到 37.62, 而 $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管的 N_1 只是从 10.28 增加到 28.39. 如图 3(a) 所示, 在 D 从 0.93 nm 增加到 1.70 nm 的过程中, $L = 1.00$ nm 与 $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管的 N_1 差别越来越大. 图 3(b) 展示了两类断裂纳米管裂隙处水分子的平均占据数 (N_2) 与 D 的关系. 在 $D = 0$ nm 时, 两类断裂纳米管的 N_2 接近零, 当 D 从 0 nm 变到 1.70 nm 时, $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管的 N_2 从 0.28 增长到 23.08, 而 $L =$

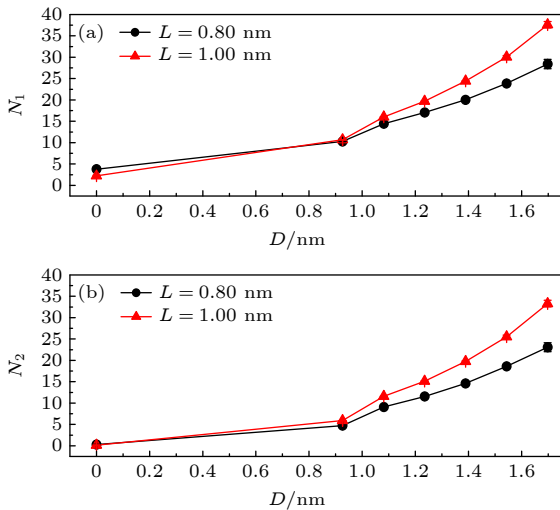


图 3 (a) 断裂纳米管内的水分子占据数 (N_1) 是 D 的函数; (b) 断裂纳米管裂隙处的水分子占据数 (N_2) 是 D 的函数

Fig. 3. (a) The average water occupancy N_1 in disjoint nanochannels, as a function of D ; (b) the average water occupancy N_2 within the nanogap region as a function of D .

1.0 nm 的断裂纳米管的 N_2 从 0.15 增长到 33.29. 由此说明, 在 D 从 0 nm 变到 1.70 nm 时, 两类断裂纳米管的 N_2 均随着 D 的增加而增加, 且在 D 从 0.93 nm 变化到 1.70 nm 时, $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管的 N_2 多于 $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管的 N_2 .

3.3 同轴包覆纳米管直径对断裂纳米管中的水-纳米管相互作用的影响

图 4(a) 展现了 $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管内水分子与纳米管间的勒纳德-琼斯势能与 D 的关系. 当 D 从 0 nm 增加到 1.70 nm 时, 该断裂纳米管内的水分子与纳米管之间的勒纳德-琼斯势能表现出一个尖峰和两个谷底的特点. 当 D 从 0.93 nm 到 1.70 nm 变化时, $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管内的水分子与纳米管之间勒纳德-琼斯势能的势能尖峰有升高的趋势. 正如图 4(b) 所示, $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管内的水分子与纳米管间的勒纳德-琼斯势能也与 D 相关, 该图展示出 1.00 nm 裂隙长度的断裂纳米管内的水分子与纳米管间的勒纳德-琼斯势能图像拥有一个能量尖峰

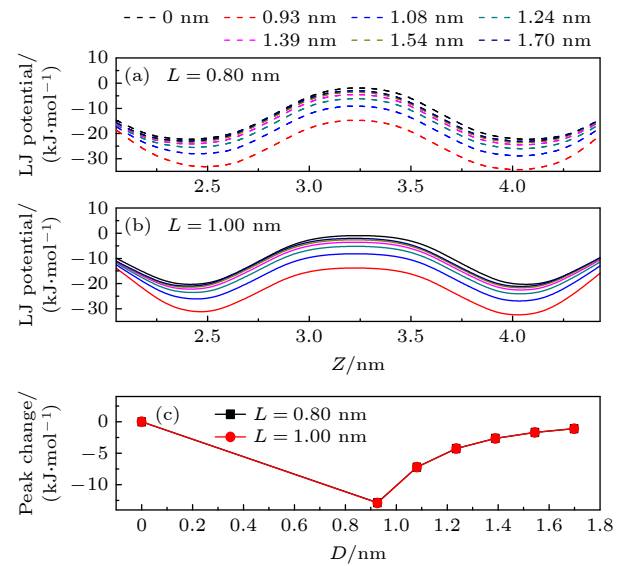


图 4 (a), (b) 当 $L = 0.80, 1.00$ nm 时, 断裂纳米管内的水分子与纳米管间勒纳德-琼斯势能是位置 z 的函数; (c) 勒纳德-琼斯势能尖峰相对于 $D = 0$ nm 的断裂纳米管下降程度

Fig. 4. (a), (b) The Lennard-Jones potential between water molecules and the disjoint nanochannel for $L = 0.80, 1.00$ nm as a function of position (z), respectively; (c) the peak change of the Lennard-Jones potential between water molecules and the disjoint nanochannel for $L = 0.80, 1.00$ nm compared to the peak of the interaction in the disjoint nanochannel with $D = 0$ nm, respectively.

两个能量谷底, 且当 D 从 0.93 nm 变化到 1.70 nm 时, 断裂纳米管内的水分子与纳米管之间的勒纳德-琼斯势能尖峰的位置随着 D 的增加而升高. 图 4(c) 展示了纳米管内的水分子与纳米管间的勒纳德-琼斯势能尖峰相对于 $D = 0$ nm 时勒纳德-琼斯势能尖峰降低的程度与 D 的关联关系. 对于 $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管, 当 D 从 0 增加到 0.93 nm 时, 势能尖峰变化为 -12.85 kJ/mol, 从 0.93 nm 增加到 1.70 nm 时, 势能尖峰变化为从 -12.85 kJ/mol 缩小到 -1.11 kJ/mol. 对于 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管, 当 D 从 0 nm 增加到 0.93 nm 时, 势能尖峰变化为 -12.86 kJ/mol, 从 0.93 nm 增加到 1.70 nm 时, 势能尖峰的变化为从 -12.86 kJ/mol 缩小到 -1.11 kJ/mol.

3.4 同轴包覆纳米管直径对断裂纳米管中连接处水桥的影响

为了形象展现水与纳米管相互作用变化对断裂纳米管连接处的水桥的影响, 本文选取 6 张典型

结构图. 如图 5(a) 所示, 对于 $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管, 如果 $D = 0$ nm, 此时的断裂纳米管连接处不能形成水桥. 如图 5(d) 所示, 对于 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管, 如果 $D = 0.00$ nm, 水分子链分成 2 段, 断裂纳米管连接处也不能形成水桥. 这说明在 $D = 0$ nm 时, 在 $L = 0.80$ 及 1.00 nm 的断裂纳米管内的连接处存在一影响水分子成链的势垒, 该势垒能打破水链, 使得断裂纳米管连接处不能形成稳定的水桥. 然而当 $D = 0.93$ nm 时, 如图 5(b) 及图 5(e) 所示, $L = 0.80$ 和 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管内的连接处存在水桥, 在裂隙位置形成水链. 值得注意的是, 由于存在较强的受限环境, 虽然在断裂纳米管连接处存在水桥, 但是水分子的数量不是很多, 且在断裂纳米管管壁与包覆纳米管管壁之间没有水分子. 当 $D = 1.70$ nm 时, 如图 5(c) 和图 5(f) 所展示, 此时在 $L = 0.80$ nm 及 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管内的连接处的水桥依然存在, 水分子在断裂纳米管内能够形成完整的水链, 而且由于受限环境的减弱, 在 $L = 0.80$ nm 及 $L =$

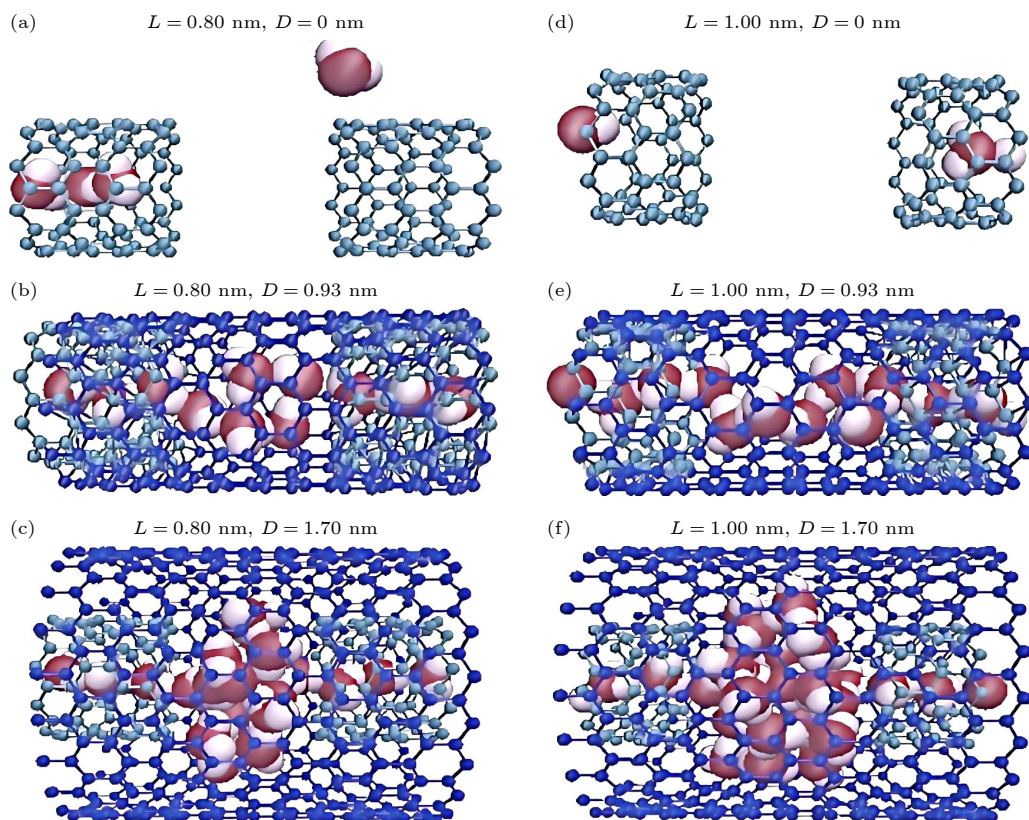


图 5 (a)–(c) $D = 0, 0.93, 1.70$ nm 时, $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管内的水分子的结构图; (e)–(f) $D = 0, 0.93, 1.70$ nm 时, $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管内的水分子的结构图

Fig. 5. (a)–(c) The structure of water molecules in disjoint nanochannels with $L = 0.80$ nm for $D = 0, 0.93, 1.70$ nm, respectively; (e)–(f) the structure of water molecules in disjoint nanochannels with $L = 1.00$ nm for $D = 0, 0.93, 1.70$ nm, respectively.

1.00 nm 的断裂纳米管的连接处存在的水分子数量比图 5(b) 及图 5(e) 所示的水分子数量多. 此时, 虽然水分子的受限环境改变, 而且能够填充断裂纳米管的连接处, 但是此时断裂纳米管管壁及包覆纳米管的管壁之间的区域依然没有发现水分子.

3.5 同轴包覆纳米管直径对断裂纳米管中水分子运动速度的影响

水分子在断裂纳米管内的平均运动速度 (v) 可表示为

$$v = \frac{1}{2500} \sum_{i=1}^{2500} \frac{1}{N_i(t_i - t_{i-1})} \sum_{j=1}^{N_i} r_j(t_i) - r_j(t_{i-1}), \quad (2)$$

式中 N_i 代表 t_i 及 t_{i-1} 时刻在断裂纳米管内共存的水分子数量, $r_j(t_i)$ 为 t_i 时刻断裂纳米管内的第 j 个水分子的 z 坐标, $t_i - t_{i-1} = 0.02$ ns.

图 6 给出 D 对 $L = 0.80$ nm 及 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管内的水分子运动速度的影响. 统计结果表明, 当 D 从 0 nm 增加到 1.70 nm 时, 裂隙长度分别为 0.80 及 1.00 nm 的断裂纳米管内水分子的平均运动速度并不是一个单调变化的过程. 随着 D 的增加, $L = 0.80$ nm 及 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管内水分子平均运动速度 (v) 有类似的变化趋势. 当 $D = 0$ nm 时, 在裂隙长度分别为 0.80 及 1.00 nm 的断裂纳米管内 v 非常小, 分别是 0.31 nm/ns 及 0.41 nm/ns. 当 D 从 0 nm 增加到 0.93 nm 时, 在裂隙长度分别为 0.80 及 1.00 nm 的断裂纳米管内 v 有显著向上的跃变. 当 $D = 0.93$ nm 时, 在 $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管内 v 达到 4.84 nm/ns, 在 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管内 v 也可达到 4.65 nm/ns. 在 $D = 0.93$ nm 时, 相对 $D = 0$ nm, 断裂纳米管内 v 有一个巨大增长. 然而, 当 D 在 0.93 nm 到 1.70 nm 变化时, $L = 0.80$ nm 及 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管内水分子的 v 有明显的下降特点. 对于 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管, 其内水分子的 v 大小从 4.65 nm/ns 逐渐降低到 0.79 nm/ns; 对于 $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管, 其内水分子的 v 大小从 4.84 nm/ns 持续降低到 1.24 nm/ns. 值得注意的是, 在 D 从 0.93 nm 增加到 1.70 nm 的过程中, 水分子在 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管内的 v 小于 0.80 nm 的断裂纳米管内的 v .

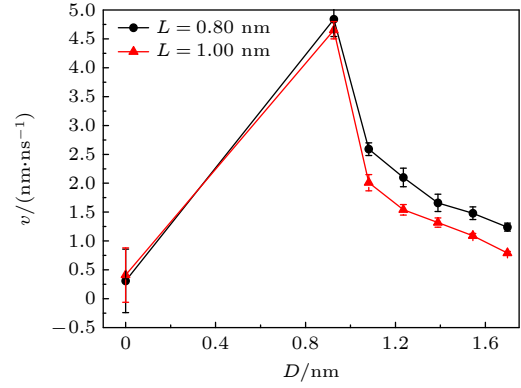


图 6 断裂纳米管内的水分子运动速度 (v) 是 D 的函数

Fig. 6. The average water velocity (v) in the disjoint nanochannels as a function of D .

3.6 同轴包覆纳米管直径对断裂纳米管中水分子有序度的影响

水分子的空间取向受到受限环境的影响, 本文采用下式计算水分子在断裂纳米管内的平均序参量 S , 并在图 7 展示了断裂纳米管内水分子的 S 与 D 的关系:

$$S = \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad (3)$$

式中 θ 为水分子电偶极矩方向与 z 轴正方向的夹角. 序参量 S 是描述受限环境中水分子偏向的一个重要参量, 纳米管内水分子的 S 越大, 说明水分子在纳米管内排列越有序, 反之, 纳米管内水分子的 S 越小, 说明纳米管内水分子排列越无序. 图 7 展示了 $L = 0.80$ nm 及 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管内水分子的 S 受到 D 的影响. 随着 D 的增加, 两类断裂纳米管内水分子的 S 并不是单调变化. 在 D 从 0 nm 增加到 0.93 nm 时, 两类断裂纳米管内的 S 均显著增加, 对于 $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管, 其内的 S 从 0.46 增加到 0.54, 对于 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管, 其内水分子的 S 从 0.29 增加到 0.52. 如果继续把 D 从 0.93 nm 增加到 1.70 nm, 两类断裂纳米管内水分子 S 均展现出降低的特点, 对于 $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管, 其内水分子的 S 从 0.54 降低到 0.06, 而对于 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管, 其内水分子的 S 从 0.52 降低到 0.03. 从图 7 可以看出, 在 D 从 0 nm 增加到 1.70 nm 的过程中, $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管内水分子的 S 要始终大于 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管内水分子的 S . 这说明在 D 从 0 至 1.70 nm 变化时, 在 $L = 0.80$ nm 的断裂纳米管内水分子排列

比 $L = 1.00$ nm 的断裂纳米管内水分子排列有序.

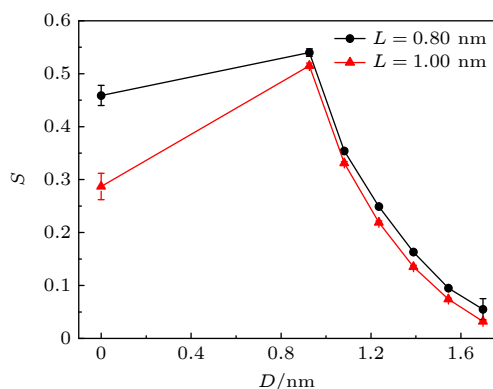


图 7 断裂纳米管内的水分子序参量 (S) 是 D 的函数
Fig. 7. The average order parameter of water molecules (S) in disjoint nanochannels as a function of D .

3.7 讨论

本文运用分子动力学模拟的方法研究了水分子在同轴包覆纳米管影响下通过裂隙长度较大的断裂纳米管的动力学特点. 同轴包覆纳米管的直径显著影响水分子通过裂隙较大的断裂纳米管. 相对于纳米管端口位置, 未包覆的断裂纳米管内裂隙位置水与纳米管的相互作用势能处于尖峰位置, 因此在未包覆的情况下, 水分子通过断裂纳米管会受到较强的阻力. 在包覆纳米管的情况下, 在裂隙位置水与纳米管的相互作用势能峰值降低, 包覆纳米管能够降低水分子通过断裂纳米管连接处的阻力. 因此包覆纳米管能够有效修复断裂纳米管连接处的水桥. 尽管目前已经提出一些修复断裂纳米管连接处水桥的方法, 但是必须施加很强的电场强度. 如果要修复裂隙长为 0.90 nm 的水桥, 电场的强度要达到 0.40 V/nm. 与此同时, 如果要修复裂隙更长的断裂纳米管连接处的水桥, 需要更强的电场强度. 即使使用太赫兹电场, 电场的强度也要达到 V/nm 量级. 这些方法不仅需要较强电场, 而且是被被动式修复断裂纳米管连接处的水桥, 一旦匀强电场或者太赫兹电场关掉, 断裂纳米管连接处的水桥仍然会打破, 断裂的水桥依然会复现. 为此, 本文提出一种主动修复断裂纳米管连接处水桥的方法. 当然本文还存在一些需要完善的地方. 首先本文采用的断裂纳米管为 (10, 0) 型纳米管, 该纳米管的半径直径较小, 水分子在其内受限为单链水链, 如果选择直径较大的断裂纳米管, 水分子通过时, 在包覆纳米管的作用下, 水分子的流通特性应该相应

改变. 其次, 本文选取的包覆纳米管的直径为 0—1.70 nm, 在这个范围内水分子只能填充断裂纳米管连接处, 在断裂纳米管管壁及包覆纳米管之间的区域并不存在水分子, 如果包覆纳米管的直径继续增加到较大值, 水分子通过断裂纳米管的传输特性应该更丰富. 再次, 体系的温度维持在 300.00 K, 宏观上通过热学变换理论可以有效调控热传输^[40], 如果该理论可以应用在纳米尺度水传输上, 必定产生更丰富的水传输的特点. 最后, 本文采用的纳米管的截面为圆形, 如果纳米管的截面选择成三角形、矩形、方形, 这些形状的截面能增强对截面影响断裂纳米管传输的理解.

4 结论

本文运用分子动力学模拟的方法研究了在同轴包覆纳米管影响下裂隙长度为 0.80, 1.00 nm 的断裂纳米管内的水分子传输特性. 同轴包覆纳米管能够降低水分子通过断裂纳米管连接处的阻力, 对修复断裂纳米管连接处的水桥起着重要作用, 随着包覆纳米管直径的增加, 水分子通过断裂纳米管的传输速度先增加后降低直至稳定. 断裂纳米管内的水分子占据数随着包覆纳米管的直径增加而增加, 水分子运动速度及水分子在断裂纳米管内的序参量随着包覆纳米管直径增加均先增加后降低. 本研究对主动式修复断裂纳米管连接处的水桥有参考意义.

参考文献

- [1] Sun Z W, He Y, Tang Y Z 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 060201 (in Chinese) [孙志伟, 何燕, 唐元政 2021 物理学报 **70** 060201]
- [2] Zhang Q L, Wang R F, Zhou T, Wang Y J, Liu Q 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 084207 (in Chinese) [章其林, 王瑞丰, 周同, 王允杰, 刘琪 2023 物理学报 **72** 084207]
- [3] Lau A W C, Sokoloff J B 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 194001
- [4] Wang Z H, Liu Y, Li Y Q, Qu Y Y, Zhou R H, Zhao M W, Li W F 2025 *Nano Lett.* **25** 8458
- [5] Sahimi M, Ebrahimi F 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 214506
- [6] Tao J B, Song X Y, Bao B, Zhao S L, Liu H L 2020 *Chem. Eng. Sci.* **219** 115602
- [7] Li W J, Zhou X Y, Lu H J 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 094702 (in Chinese) [李伟健, 周晓艳, 陆杭军 2024 物理学报 **73** 094702]
- [8] Liu Y, Zhu W D, Jiang J, Zhu C Q, Liu C, Slater B, Ojamae L, Francisco J S, Zeng X C 2021 *P. Natl. Acad. Sci. USA* **118** e210442118
- [9] Camargo A P, Jusufi A, Lee A G, Koplik J, Morris J F, Giovambattista N 2024 *Langmuir* **40** 18439
- [10] Liu Y, Jiang J, Pu Y Y, Francisco J S, Zeng X C 2023 *ACS*

Nano **17** 6922

- [11] Du W, Wang Y J, Yang J W, Chen J G 2024 *Phys. Rev. E* **109** L062103
- [12] Kohler M H, da Silva L B 2016 *Chem. Phys. Lett.* **645** 38
- [13] Zhao K W, Wu H Y, Han B S 2017 *J. Chem. Phys.* **147** 164705
- [14] Lipomi D J, Vosgueritchian M, Tee B C K, Hellstrom S L, Lee J A, Fox C H F, Bao Z N 2011 *Nat. Nanotechnol.* **6** 788
- [15] Tunuguntla R H, Henley R Y, Yao Y C, Pham T A, Wanunu M, Noy A 2017 *Science* **357** 792
- [16] Martincic M, Tobias G 2015 *Expert Opin. Drug Del.* **12** 563
- [17] Mun T J, Kim S H, Park J W, Moon J H, Jang Y, Huynh C, Baughman R H, Kim S J 2020 *Adv. Funct. Mater.* **30** 2000411
- [18] Li J Y, Yang Z X, Fang H P, Zhou R H, Tang X W 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 2710
- [19] Liu Y C, Wang Q 2005 *Phys. Rev. B* **72** 085420
- [20] Sam A, Prasad K V, Sathian S P 2019 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21** 6566
- [21] Qiu T, Meng X W, Huang J P 2015 *J. Phys. Chem. B* **119** 1496
- [22] Meng X W, Wang L Y 2023 *Chem. Phys. Lett.* **829** 140765
- [23] Meng X W, Wang L Y 2024 *Chem. Phys. Lett.* **849** 141424
- [24] Meng X W, Shen L 2020 *Chem. Phys. Lett.* **739** 137029
- [25] Ebrahimi F, Maktabdaran G R, Sahimi M 2020 *J. Phys. Chem. B* **124** 8340
- [26] Zhang Q L, Wu Y X, Yang R Y, Zhang J L, Wang R F 2021 *Chem. Phys. Lett.* **762** 138139
- [27] Zhang Q L, Wang Y J, Yang H, Deng Y F, Wang T Q, Yang R Y, Zhu Z 2025 *Phys. Fluids* **37** 012031
- [28] Meng X W, Li Y, Shen L, Yang X Q 2020 *EPL* **131** 20003
- [29] Meng X W, Li Y 2022 *Physica E* **135** 114980
- [30] Wang F, Zhang X K, Li S, Su J Y 2022 *J. Mol. Liq.* **362** 119719
- [31] Wu Y, Wang Z, Li S, Su J Y 2024 *Phys. Fluids* **36** 022006
- [32] Hummer G, Rasaiah J C, Noworyta J P 2001 *Nature* **414** 188
- [33] Jorgensen W L, Chandrasekhar J, Madura J D, Impey R W, Klein M L 1983 *J. Chem. Phys.* **79** 926
- [34] Hess B, Kutzner C, Van De Spoel D, Lindahl E 2008 *J. Chem. Theory. Comp.* **4** 435
- [35] Nose S 1984 *J. Chem. Phys.* **81** 511
- [36] Hoover W G 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1695
- [37] Wan R Z, Li J Y, Lu H J, Fang H P 2005 *J. Am. Chem. Soc.* **127** 7166
- [38] Li J Y, Gong X J, Lu H J, Li D, Fang H P 2007 *P. Natl. Acad. Sci. USA* **104** 3687
- [39] Darden T A, York D M, Pedersen L G 1993 *J. Chem. Phys.* **98** 10089
- [40] Yang F B, Zhang Z R, Xu L J, Liu Z F, Jin P, Zhuang P F, Lei M, Liu J R, Jiang J H, Ouyang X P, Marchesoni F, Huang J P 2024 *Rev. Mod. Phys.* **96** 015002

Influence of coaxial coated nanotubes on water transport in disjoint nanochannels*

MENG Xianwen[†]

(*School of Materials Sciences and Physics, China University of Mining and Technology, Xuzhou 221116, China*)

(Received 19 July 2025; revised manuscript received 5 August 2025)

Abstract

The challenge in transporting water molecules through one-dimensional, large, disjoint nanochannels arises from the breaking of the water bridge. Even under significant pressure differences, water molecules are difficult to transport through these large disjoint nanochannels. Restoring the broken water bridge is crucial for maintaining continuous water transport through disjoint nanochannels. Current repairing methods, including the application of uniform or terahertz electric fields, are passive solutions. Once the electric fields are removed, it will stop working, causing the bridge to break again. In this study, molecular dynamics simulations are employed to investigate water transport through disjoint nanochannels with large nanogaps mediated by the coverage of coaxial nanochannels. The results reveal that as the diameter of the covered nanochannel decreases, the peak interaction between water molecules and the nanochannel decreases, which facilitates the reformation of the water bridge within the nanogap region. The water transfer rate through the disjoint nanochannel exhibits a non-monotonic dependence on the covered nanochannel diameter: it increases rapidly initially, then decreases with further increase in diameter, eventually reaching a relatively stable flow rate. Increasing the diameter of the covered nanochannel enhances water occupancy within the disjoint nanochannel, while the velocity and order parameter of water molecules display an initial increase followed by a decrease with further increase in diameter. These results offer significant insights into understanding the influence of covered nanochannels on water transport through disjoint nanochannels and providing novel approaches for repairing broken water bridges in disjoint nanochannel systems.

Keywords: water molecules, disjoint nanochannels, repair

PACS: 31.15.at, 47.56.+r

DOI: [10.7498/aps.74.20250959](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250959)

CSTR: [32037.14.aps.74.20250959](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250959)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11605285) and the Key Academic Discipline Project of China University of Mining and Technology, China (Grant No. 2022WLXK17).

[†] E-mail: xwmeng@cumt.edu.cn

同轴包覆纳米管对断裂纳米管内水传输的影响

孟现文

Influence of coaxial coated nanotubes on water transport in disjoint nanochannels

MENG Xianwen

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 203101 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250959

CSTR: 32037.14.aps.74.20250959

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250959>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

电场方向对一维断裂纳米通道连接处水桥结构的影响

Structural influence of electric field direction on water bridges in one-dimensional disjoint nanochannels

物理学报. 2024, 73(9): 093102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240027>

1.1 μm 波段水分子的 CO_2 加宽系数

CO_2 -broadened coefficients of water vapor molecule in 1.1 μm band

物理学报. 2022, 71(20): 203301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220700>

第一性原理研究单个水分子在 $\text{PuO}_2(111)$ 和 (110) 表面吸附行为

First-principles study of adsorption behavior of single water molecule on (111) and (110) surfaces of PuO_2

物理学报. 2025, 74(15): 157101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250082>

不凝性气体对纳米通道内水分子流动传热影响的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of effect of non-condensable gases on heat transfer of water molecule flow in nanochannels

物理学报. 2024, 73(9): 094701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240192>

单壁碳纳米管受限空间内水的分布

Water distribution in confined space of single-wall carbon nanotube

物理学报. 2021, 70(6): 060201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201523>

金刚石表面纳米尺度水分子的相变观测

Phase transition observation of nanoscale water on diamond surface

物理学报. 2022, 71(6): 067601 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211348>