

电场方向对一维断裂纳米通道连接处水桥结构的影响*

孟现文[†]

(中国矿业大学材料与物理学院, 徐州 221116)

(2024 年 1 月 5 日收到; 2024 年 2 月 22 日收到修改稿)

电场影响纳米通道内的水分子的电偶极矩取向, 进而影响纳米通道内的水分子的传输. 为了有效发掘水分子在纳米通道内的传输特点, 必须研究更复杂的纳米通道结构. 最新一种构造复杂纳米通道的方式是构造断裂纳米通道. 在研究断裂纳米通道内的水分子的动力学特点时, 通常是在零电场或单一电场方向下进行的, 电场方向对断裂纳米通道内的水分子的影响机理尚不明确, 这制约了部分场控分子器件的设计. 为了探究该问题, 本文采用分子动力学模拟方法, 系统研究了电场方向从 0° 变化到 180° 的过程中, 电场方向对完整纳米通道以及断裂长度分别为 0.2 和 0.4 nm 的断裂纳米通道内的水分子的占据数、传输、水桥、电偶极矩偏向等性质的影响. 结果表明, 在 1 V/nm 的电场强度作用下, 这三种纳米通道内的水分子的占据数、传输等差别主要集中在电场方向与管轴夹角为 90° 时, 此时完整纳米通道内能形成稳定的水链, 断裂长度为 0.2 nm 的纳米通道的连接处能形成不稳定的水桥, 而断裂长度为 0.4 nm 的纳米通道的连接处不能形成水桥. 此外, 模拟发现当电场极化方向与管轴夹角为 90° 时, 增大电场的强度, 断裂纳米通道连接处的水桥更容易断裂.

关键词: 电场, 断裂纳米通道, 方向

PACS: 31.15.at, 47.56.+r

DOI: 10.7498/aps.73.20240027

1 引言

碳纳米管存在受限空间, 这使得碳纳米管在水处理、水淡化及气体分离等领域有广泛的应用价值^[1-6]. 相对于非受限空间的水分子, 受限在碳纳米管内的水分子展现出一些奇特的特点^[7,8]. 例如, 与直碳纳米管相比, 弯折角度为 35° 的弯碳纳米管内的水分子的传输能力是等长直碳纳米管内的水分子传输能力的 3.5 倍^[9]. 相对于体相水分子, 碳纳米管内的水分子之间的氢键网络被受限空间打破, 这导致在碳纳米管内的水分子的传输性质发生显著的变化. 模拟及实验已经证实, 碳纳米管内的水分子在碳纳米管内传输的速度极快, 这有助于提高

水处理及水淡化的效率^[10,11]. 碳纳米管内的水分子的高速流动常常归因于碳纳米管与水分子之间存在较小的摩擦系数, 当碳纳米管的半径减少时, 水分子与碳纳米管之间的摩擦系数降低^[12].

尽管碳纳米管内的水分子的传输研究已经取得系列进展, 但是用相对节能的方式调控水分子在碳纳米管内的传输依然是一种挑战. 由于水分子为极性分子, 电场常常用来调控碳纳米管内的水分子的传输动力学行为. 模拟证实电场影响碳纳米管内的水分子的黏度, 在半径小于 1.354 nm 的碳纳米管内施加电场会导致其内水分子的黏度升高, 而在半径大于 1.354 nm 的碳纳米管内施加电场会导致其内水分子的黏度降低^[13]. 随着电场强度增加, 碳纳米管内的水分子的结构从棱柱结构变化到螺旋

* 国家自然科学基金 (批准号: 11605285) 和中国矿业大学重点学科经费 (批准号: 2022WLXK17) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: xwmeng@cumt.edu.cn

结构,再变化到单链结构^[14].旋转电场能够打破水分子之间的氢键网络改变水分子的流动^[15].碳纳米管内的液滴在旋转电场的作用下,逐渐拉伸膨胀为碳纳米管内的薄膜^[16].如果在碳纳米管两端施加梯度电场,水分子在非均匀电场影响下通过碳纳米管内的传输能力发生变化^[17].电场的方向也会对碳纳米管内的水分子的占据数及传输产生影响^[18].在碳纳米管两端施加压强的情况下,分子模拟证实,电场的方向对碳纳米管内的水分子的占据数及传输产生影响^[19].即使在碳纳米管两端不施加压强,电场的方向依然会对碳纳米管内的水分子的占据数及传输产生影响^[20].当电场的强度从 0.1 V/nm 变化到 2.0 V/nm,水分子之间氢键的强度发生变化,这也导致碳纳米管内的水分子的扩散系数出现各向异性的特点.改变电场的方向能够在超疏水表面实现电浸润的转变^[21].在石墨烯碳纳米管的复合结构中,水分子的渗透率随着压强增大而增大,随着电场强度增大而降低^[22].在太赫兹电场影响下,碳纳米管内的单链水分子的红外吸收能力在平行管轴方向强于垂直管轴方向^[23].

为了有效发掘一维碳纳米管内的水分子的传输特性,必须考虑碳纳米管的结构.一维碳纳米管内的水分子很难受到电场方向的调控,在施加垂直电场的情况下,一维碳纳米管内的水分子甚至会出现扩散增强的现象^[24].最近研究中提出一种新型复杂碳纳米管,这种复杂碳纳米管为断裂碳纳米管.断裂碳纳米管由非连接的单独碳纳米管组成.断裂纳米管的断裂长度能够影响断裂连接处的水桥的稳定性,进而有效调控水分子在碳纳米管内的传输特点^[25].在不施加压强的一维断裂碳纳米管内,如果断裂长度达到 0.6 nm,断裂碳纳米管连接处的水桥已经不稳定;如果断裂的长度达到 0.9 nm,断裂碳纳米管的连接处不能形成水桥^[26].即使在一维断裂碳纳米管两端施加压强,断裂碳纳米管的断裂长度显著影响水分子通过断裂碳纳米管的流动特性,当断裂长度达到 1.8 nm,即使断裂碳纳米管两端的压强达到数千个大气压,也不能使水分子通过一维断裂碳纳米管^[27].模拟证实,在断裂碳纳米管两端施加平行于碳纳米管的轴线方向的匀强电场,能够修复断裂长度较大的断裂碳纳米管连接处的水桥^[28].同时在断裂碳纳米管的轴向施加电场及压强,水分子在断裂长度较大的断裂碳纳米管内的传输得到恢复^[29].除此之外,提高体系

的温度也能促进水分子通过断裂碳纳米管^[30].然而,目前研究断裂碳纳米管内的水分子的性质所施加的电场强度方向是单一的,电场角度对断裂碳纳米管连接处的水桥稳定性的影响依然不明确,这限制了部分场控分子器件的设计.为此,本文运用分子动力学模拟的方法探究电场方向对断裂纳米通道连接处的水桥稳定性及一维断裂纳米通道内的水分子传输等性质的影响.

2 模拟细节

为了探究电场方向对一维断裂纳米通道内的水分子传输的影响,采用分子动力学模拟的方法,模拟软件为 GROMACS 4.0.5^[31].图 1 展示了模拟体系,该体系包含两片相互平行的石墨烯,一个一维断裂纳米通道以及 1549 个水分子.两片平行石墨烯之间的间距固定为 2.380 nm.一维断裂纳米通道由 2 个相距 L 的 (10, 0) 型碳纳米管及其连接处组成.纳米通道的断裂长度标记为 L , L 的变化范围为 0—0.4 nm. $L = 0$ nm 的纳米通道为完整纳米通道.碳原子为非带电的 Lennard-Jones 粒子,碳原子间零势能距离 $\sigma_{CC} = 0.34$ nm,碳原子间势阱深度 $\epsilon_{CC} = 0.3612$ kJ/mol^[11].用 TIP3P 水分子模型表征水分子之间的相互作用^[32].模拟体系采用 NVT 系综,体系采用 Nose-Hoover 控温方法使得体系温度保持在 300 K^[33,34].

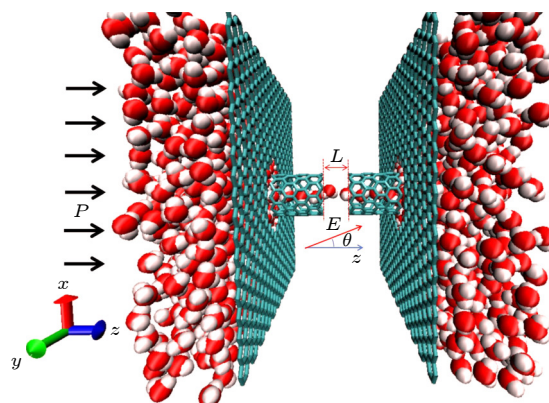


图 1 模拟框架图,包括 2 片石墨烯,1 个断裂纳米通道(断裂长度标记为 L).水分子用红白球表示,石墨烯及断裂纳米通道用青色表示,电场方向与 $+z$ 方向的夹角定义为 θ .
Fig. 1. Configuration of the simulation system. It contains two graphene sheets, a disjoint nanochannel with a nanogap (marked as L). Water molecules are shown in white and red. Carbon atoms are represented in cyan. The angle between the electric field direction and the $+z$ is defined as θ .

强度为 1 V/nm 的匀强电场施加在模拟体系中, 电场方向与 +z 方向的夹角定义为 θ , θ 的变化范围为 0° — 180° . 在模拟过程中, 体系的碳原子固定在初始位置, 水分子在外加压强的作用下通过纳米通道. 本文产生压强差的方式是通过让水分子的加速度为 0.1 nm/ps^2 , 由此纳米通道两端的压强差约为 236 MPa ^[35,36]. 体系间 Lennard-Jones 势能的截断半径选择在 1.4 nm , 在 xyz 三个方向上采用周期性边界条件. 采用 PME (Particle-Mesh Ewald) 的方法处理长程静电相互作用^[37-39]. 本模拟总时长为 60 ns , 前 10 ns 用来使得体系稳定, 剩下的 50 ns 用来统计水分子在纳米通道内的性质.

3 结果及讨论

3.1 电场方向对纳米通道中的水分子传输的影响

由于热涨落, 当纳米通道两端的压强差为零或者较小时, 水分子在较短的纳米通道内的传输方向是双向的. 为了表征水分子在纳米通道内的传输特点, 把水分子从纳米通道左端传输到纳米通道右端的量值标记为 N_{FR} , 而把水分子从纳米通道右端传输到纳米通道左端的量值标记为 N_{FL} . 纳米通道内的水分子单位时间平均流量 (V_f) 运用 (1) 式运算:

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

如图 2 所示, 当 $L = 0 \text{ nm}$ 时, 如果电场方向从 0° 变化到 180° , 完整纳米通道内的 V_f 变化非常小. θ 从 0° 变化到 90° 时, V_f 从 27.46 个水分子/ns 降低到 24.10 个水分子/ns; 当 θ 从 90° 变化到 180° 时, V_f 从 24.10 个水分子/ns 逐渐增加到 26.72 个水分子/ns. 结果表明 1 V/nm 的电场的方向对一维完整纳米通道内的水分子的传输影响较小. 然而, 当断裂纳米通道的断裂长度增加, 随着 θ 从 0° 变化到 90° , V_f 降低的趋势越来越显著. 对于 $L = 0.2 \text{ nm}$ 的断裂纳米通道而言, 当 θ 从 0° 变化到 90° 时, V_f 从 25.58 个水分子/ns 降低到 16.02 个水分子/ns; θ 从 90° 变化到 180° 时, V_f 从 16.02 个水分子/ns 逐渐增加到 24.78 个水分子/ns. 对于 $L = 0.4 \text{ nm}$ 的断裂纳米通道, 当 θ 从 0° 变化到 90° 时, V_f 从 25.54 个水分子/ns 降低到 0.50 个水分子/ns; 当 θ 从 90° 变化到 180° 时, V_f 从 0.50 个

水分子/ns 逐渐增加到 24.14 个水分子/ns. 因此, 电场方向对断裂长度较大的纳米通道内的水分子传输有明显的调控效应.

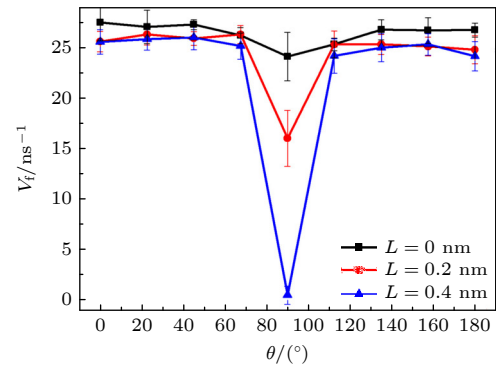


图 2 水分子通过完整纳米通道及断裂纳米通道的单位时间平均流量 (V_f) 随 θ 的变化

Fig. 2. Average water transfer rate, V_f , through complete nanochannels and disjoint nanochannels as a function of θ , respectively.

3.2 电场方向对纳米通道内的水分子占据数的影响

图 3 展示了不同纳米通道内的水分子的平均占据数 (N) 与电场方向 θ 的关系. 不同纳米通道内的水分子平均占据数随着 θ 的变化展现出不同的特点.

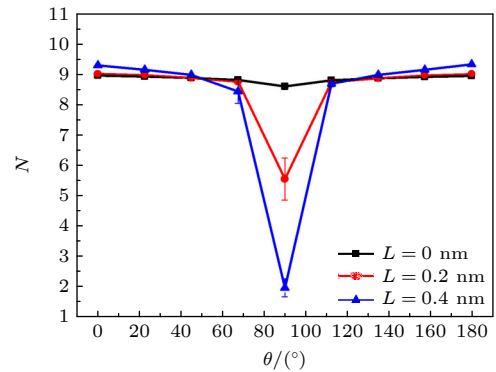


图 3 完整纳米通道及断裂纳米通道内的水分子平均占据数 (N) 随 θ 的变化

Fig. 3. Average water occupancy, N , in complete nanochannels and disjoint nanochannels as a function of θ , respectively.

对于 $L = 0 \text{ nm}$ 的完整纳米通道, 当 θ 从 0° 变化到 180° 的过程中, 完整纳米通道内的水分子平均占据数维持在 9 个左右. 因此, 1 V/nm 的电场的方向几乎不影响一维完整纳米通道内的水分子的平均占据数. 而对于 $L = 0.2 \text{ nm}$ 的断裂纳米通

道, 当 θ 从 0° 增加到 90° , N 从 9.01 降低到 5.54; 当从 90° 增加到 180° , N 逐渐从 5.54 增加到 9.01. 对于 $L = 0.4$ nm 的断裂纳米通道, N 受 θ 的影响变得更加明显. 当 $L = 0.4$ nm 时, 当 θ 从 0° 增加到 90° , N 从 9.30 急剧降低到 1.94; 当从 90° 增加到 180° , N 从 1.94 迅速增加到 9.33. 由此可见, 电场方向对断裂长度较大的纳米通道内的水分子的平均占据数有明显的调控效应.

3.3 电场方向对纳米通道内的水分子数分布概率的影响

在 θ 从 0° 增加到 90° 的过程中, 不同纳米通道内的水分子的 V_f 及 N 均会出现降低的趋势, 纳米通道内的水分子数分布一定会受到电场角度的影响. 图 4 展示了在不同电场角度的影响下, 纳米通道内的水分子数的平均分布概率. 纳米通道内的水分子数平均分布概率利用下式进行计算:

$$P(Z) = \frac{1}{12500} \sum_{i=1}^{12500} \frac{1}{n_i} dn_i, \quad (2)$$

其中 12500 为总帧数, n_i 为第 i 帧纳米通道内的水分子的占据数, dn_i 为纳米通道内在 $Z-Z+\Delta Z$ 范围内的水分子占据数, ΔZ 为 0.024 nm.

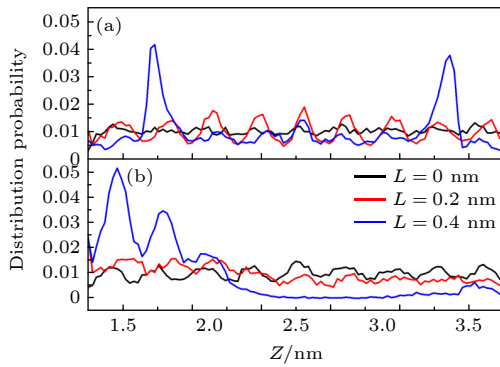


图 4 (a) 当 $\theta = 0^\circ$ 时, 纳米通道内不同位置水分子数的平均分布概率; (b) 当 $\theta = 90^\circ$ 时, 纳米通道内不同位置水分子数的平均分布概率

Fig. 4. (a) Average water distribution probability in nanochannels as a function of the positions when θ is 0° ; (b) average water distribution probability in nanochannels as a function of the positions when θ is 90° .

图 4(a) 为电场角度为 0° 时, 纳米通道内的水分子数的平均分布概率. 可以看出: 对于 $L = 0$ nm 的完整纳米通道, 其内的水分子数分布为波状分布; 对于 $L = 0.2$ nm 的断裂纳米通道, 断裂纳米通道内的水分子数平均分布依然是波状分布, 但是对

于 $L = 0.4$ nm 的断裂纳米通道, 水分子在其内分布有 2 个尖峰, 存在 2 个水分子数平均分布概率极大的位置. 结果表明在电场角度为 0° 时, 小的断裂长度不影响断裂纳米通道内的水分子数的平均分布概率, 大的断裂长度能够影响断裂纳米通道内的水分子数的平均分布概率. 如图 4(b) 所示, 电场角度为 90° 时, 纳米通道内的水分子数的平均分布概率已经发生变化. 可以看出, 对于完整纳米通道及 $L = 0.2$ nm 的断裂纳米通道, 其内的水分子数平均分布概率依然是波状分布, 但是对于 $L = 0.4$ nm 的断裂纳米通道, 其内的水分子数的平均分布概率已不再呈现出对称特点. 对于 $L = 0.4$ nm 的断裂纳米通道, 在方向为 90° 的电场影响下, 断裂纳米通道的断裂连接处的水分子数的平均分布概率接近于零, 水分子在断裂纳米通道左侧的平均分布概率比断裂纳米通道右侧水分子数的平均分布概率要高. 结果表明电场的方向能够影响断裂长度大的纳米通道内的水分子数的平均分布概率.

3.4 电场方向对纳米通道内的水分子运动速度的影响

纳米通道内的水分子的平均运动速度 (v) 采用下式运算:

$$v = \frac{1}{2500} \sum_{i=1}^{2500} \frac{1}{N_i(t_i - t_{i-1})} \sum_{j=1}^{N_i} r_j(t_i) - r_j(t_{i-1}), \quad (3)$$

式中 N_i 代表 t_i 及 t_{i-1} 时刻纳米通道内共有的水分子数量, $r_j(t_i)$ 为 t_i 时刻纳米通道内的第 j 个水分子的 z 坐标, $t_i - t_{i-1} = 0.02$ ns.

图 5 展示出电场角度对不同纳米通道内的水分子平均运动速度的影响, 完整纳米通道 ($L = 0$ nm) 及 0.2 nm 的断裂纳米通道内的水分子平均运动速度在电场角度从 0° 变化到 180° 的过程中几乎保持不变, 只是在电场角度为 90° 时, 纳米通道内的水分子平均速度稍微降低. 对于 $L = 0.4$ nm 的断裂纳米通道, 电场角度 θ 从 0° 增加到 90° 的过程中, 断裂纳米通道内的水分子平均运动速度从 5.48 m/s 急剧降低到 0.50 m/s; 电场角度 θ 从 90° 增加到 180° 的过程中, 断裂纳米通道内的水分子的平均运动速度从 0.50 m/s 急剧增加到 5.84 m/s. 这表明对于断裂长度比较大的纳米通道, 当电场角度从 0° 增加 90° 的过程中, 其内的水分子的运动受到阻碍作用, 当电场角度从 90° 增加到 180° 过程中, 其内的水分子恢复运动.

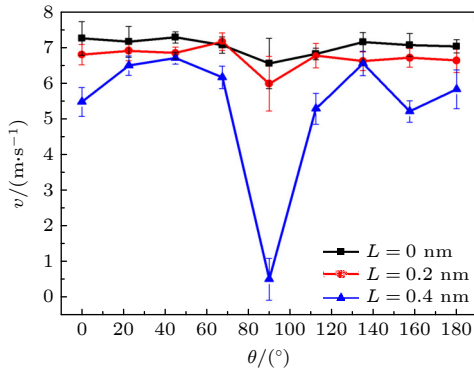


图 5 完整纳米通道及断裂纳米通道内的水分子平均运动速度 (v) 随 θ 的变化

Fig. 5. Average water velocity, v , in complete nanochannels and disjoint nanochannels as a function of θ , respectively.

3.5 电场方向对纳米通道内的水分子结构的影响

图 6 直观展示了在 1 V/nm 的电场影响下不同纳米通道内的水分子的结构变化. 图 6(a) 为电场角度为 0° 时, 完整纳米通道 ($L = 0$ nm) 内的水分子的结构图, 此时其内的水分子为紧密排列的一维链状结构. 图 6(b) 为电场角度为 0° 时, $L = 0.4$ nm 的断裂纳米通道内的水分子的结构图, 可以看出其内的水分子依然为紧密排列的一维链状结构. 0.4 nm 的断裂长度并未改变断裂纳米通道内的水分子一维链状结构, 在断裂纳米通道的连接处形成了稳定的水桥. 图 6(c) 为电场角度为 90° 时, 完整纳米通道内的水分子的结构图, 此时其内的水分子为紧密排列的一维链状结构, 方向为 90° 角度的电场并未打破完整纳米通道内的水分子一维链状结构. 然而如图 6(d) 所示, 当电场角度为 90° 时, $L = 0.4$ nm 的断裂纳米通道内的水分子的结构发生剧烈变化. 与图 6(c) 相比, 90° 角度的电场使得 $L = 0.4$ nm 的断裂纳米通道内的水分子不能形成一维链状结构, 即在电场作用下, $L = 0.4$ nm 的断裂纳米通道的连接处不能形成水桥结构.

3.6 电场方向对纳米通道内的水分子电偶极矩取向的影响

水分子为偶极分子, 在静电场的影响下, 水分子的电偶极矩偏转方向会发生变化. 图 7 展示了不同纳米通道内的水分子的电偶极矩方向与 z 轴正方向的平均偏向角 (ϕ) 随电场角度 (θ) 的变化, 具体展现出 3 个不同的阶段.

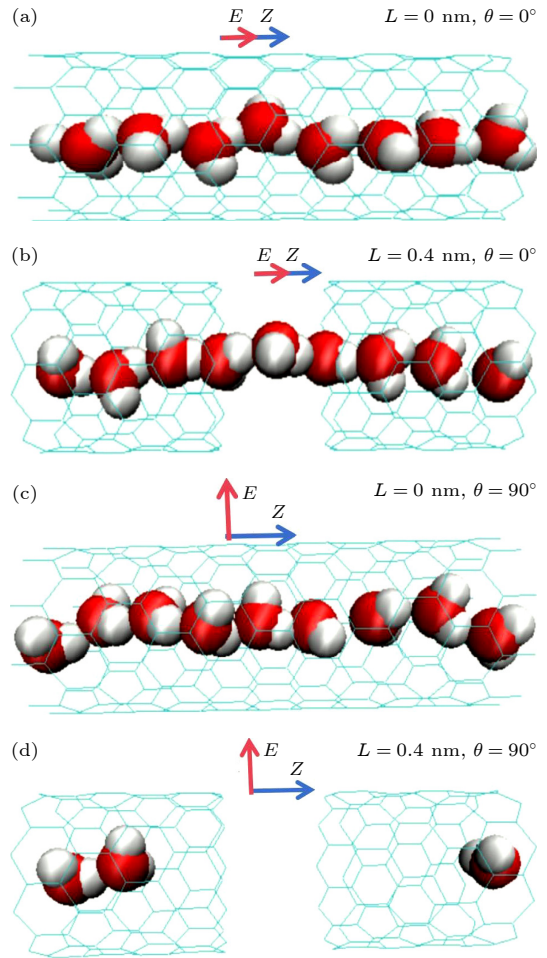


图 6 (a), (b) $\theta = 0^\circ$ 时, 完整纳米通道及断裂纳米通道内的水分子的结构图; (c), (d) $\theta = 90^\circ$ 时, 完整纳米通道及断裂纳米通道内的水分子的结构图

Fig. 6. (a), (b) Structure of water molecules in complete nanochannels and disjoint nanochannels when $\theta = 0^\circ$, respectively; (c), (d) structure of water molecules in complete nanochannels and disjoint nanochannels when $\theta = 90^\circ$, respectively.

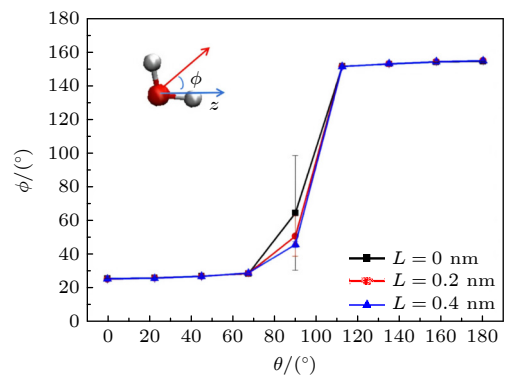


图 7 完整纳米通道及断裂纳米通道内的水分子平均电偶极矩偏向角 (ϕ) 随 θ 的变化

Fig. 7. Average angle between water dipole and $+z$ direction, ϕ , in complete nanochannels and disjoint nanochannels as a function of θ , respectively.

在第1阶段,当 θ 从 0° 变化到 67.5° 时,完整纳米通道($L = 0$ nm)及0.2, 0.4 nm的断裂纳米通道内的水分子的 ϕ 变化一致,此阶段三条线几乎重叠在一起,而且随着 θ 的增加 ϕ 几乎保持不变.例如当 $L = 0$ nm时,当 θ 从 0° 增加到 67.5° 时, ϕ 仅仅从 25.8° 增加到 28.6° .因此在第1阶段,当 θ 从 0° 增加到 67.5° 时,电场方向对纳米通道内的水分子电偶极矩平均取向的影响极小.在第2阶段,当 θ 从 67.5° 增加到 112.5° 时,三种纳米通道内的水分子的 ϕ 发生跃变.例如当 $L = 0$ nm时,如果 θ 从 67.5° 增加到 112.5° 时, ϕ 从 28.6° 跃变到 151.4° .在第2阶段,虽然三种纳米通道内的水分子的 ϕ 角变化趋势一致,但三条曲线不重合在一起.在 θ 为 90° 时,完整纳米通道($L = 0$ nm)内的水分子的平均 ϕ 角最大, $L = 0.4$ nm的断裂纳米通道内的水分子的平均 ϕ 最小.在第3阶段当 θ 从 112.5° 增加到 180° 时,三种纳米通道内的水分子的平均 ϕ 又变化一致,此阶段三条线又几乎重叠在一起,而且随着 θ 的增加 ϕ 几乎保持不变.例如当 $L = 0$ nm时,当 θ 从 112.5° 增加到 180° 时, ϕ 仅仅从 151.4° 增加到 154.2° .因此在第3阶段,当 θ 从 112.5° 增加到 180° 时,电场方向对纳米通道内的水分子电偶极矩取向的影响极小.因此电场方向影响纳米通道内的水分子电偶极矩的取向,在第1阶段纳米通道内的水分子电偶极矩正向排列;在第2阶段,纳米通道内的水分子电偶极矩从正向排列逐渐变成反向排列;而在第3阶段,纳米通道内的水分子电偶极矩为反向排列.

3.7 电场强度对纳米通道内的水分子占据数的影响

图8展示了电场强度为1, 2 V/nm时,三种纳米通道内的水分子平均占据数(N)与电场角度(θ)的关系.

图8(a)展示了在电场强度为1, 2 V/nm时,完整纳米通道($L = 0$ nm)内的水分子平均占据数(N)随电场角度的变化.对于完整纳米通道,在电场强度为1 V/nm时,当 θ 从 0° 变化到 180° 时,其内水分子的平均占据数几乎不变;当电场强度增加到2 V/nm时,在 θ 为 0° — 67.5° 及 112.5° — 180° 时,完整纳米通道内的水分子的平均占据数与电场为1 V/nm时完整纳米通道内的水分子平均占据数几乎重叠,而在 θ 为 90° 时,完整纳米通道内的

水分子的平均占据数急剧降低到0.36个水分子.由此说明在电场强度为2 V/nm及电场角度为 90° 时,完整纳米通道内的水分子已经不能成链.图8(b)展示了在电场强度为1, 2 V/nm时, $L = 0.2$ nm的断裂纳米通道内的水分子平均占据数 N 随电场角度的变化.对于 $L = 0.2$ nm的断裂纳米通道,在 θ 为 0° — 67.5° 及 112.5° — 180° 时,电场强度为1, 2 V/nm作用下,其内的水分子平均占据数几乎重叠,且数量变化极小;在 θ 为 90° 时,断裂纳米通道内的水分子的平均占据数均减少,在电场强度为1 V/nm及 θ 为 90° 时, $L = 0.2$ nm的断裂纳米通道内的水分子平均占据数降低到5.54,而在电场强度为2 V/nm及 θ 为 90° 时, $L = 0.2$ nm的断裂纳米通道内的水分子平均占据数降低到0.18个水分子.图8(c)展示了在电场强度为1, 2 V/nm时, $L = 0.4$ nm的断裂纳米通道内的水分子平均占据数 N 随电场角度的变化.图8(c)与图8(b)类似,只是在电场强度为1 V/nm及 θ 为 90° 时, $L = 0.4$ nm的断裂纳米通道内的水分子平均占据数降低到1.94,而在电场强度为2 V/nm及 θ 为 90° 时, $L = 0.4$ nm的断裂纳米通道内的水分子的平均占据数降低到0.23个水分子.由此可见,当电场方向与管轴夹角为 90° 时,相对于1 V/nm的电场强度,增大电场的强度,断裂纳米通道连接处的水桥越容易断裂.

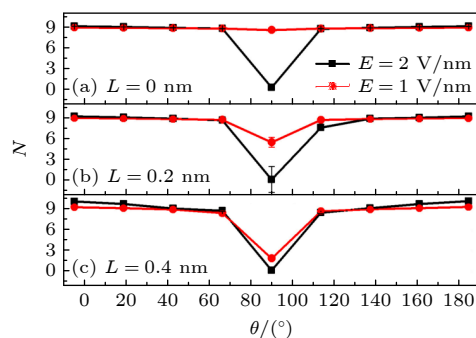


图8 (a)—(c) 电场强度 $E = 1, 2$ V/nm 时, 完整纳米通道 ($L = 0$ nm) 及 0.2, 0.4 nm 的断裂纳米通道内的水分子平均占据数 (N) 随 θ 的变化

Fig. 8. (a)—(c) Average water occupancy, N , in complete nanochannels and disjoint nanochannels under $E = 1, 2$ V/nm as a function of θ , respectively.

3.8 讨论

最近的一些研究表明电场的方向影响纳米通道内的水分子的传输^[18,19]. 纳米通道内的水分子的

扩散与受限形状、电场强度和电场方向相关^[24]. 除此之外, 电场的方向影响固液表面的气体分布, 选择气体分子或者水分子进入纳米通道^[2,40,41]. 为了发掘水分子在纳米通道内的特点, 纳米通道必须有更复杂的结构. 自从断裂纳米通道首次运用在分子动力学模拟以来, 水分子在断裂纳米通道内的特点依然有很多需要探究的地方.

本文确定了电场的方向能够影响断裂纳米通道内的水分子的一些特性. 特别是断裂纳米通道内的水分子单位时间流量、水分子占据数、水分子运动速度、水桥稳定及水分子平均偶极偏向等均受到电场角度的影响. 相对于完整纳米通道内的水分子的统计规律, 断裂长度较大的断裂纳米通道内的水分子的性质更容易受到电场角度的影响. 对于断裂长度较大的断裂纳米通道, 单位时间水分子流量、水分子占据数以及水分子运动速度在电场角度从 0° 增加到 90° 时随电场角度增加而降低, 在电场角度从 90° 增加到 180° 变化时随电场角度增加而增加. 这些结果增加了对断裂纳米通道内的水分子控制方式的认识.

本文存在一些局限. 首先, 电场的强度只是选择 1 和 2 V/nm, 而电场的强度能够影响断裂纳米通道内的水分子的动力学特点, 如果选择强度比较小的电场强度, 电场的方向可能不影响断裂纳米通道内水分子的动力学特点. 第二, 本文施加在断裂纳米通道两端的压强差为固定值, 如果采用较大的压强差, 模拟的结果会相应改变. 第三, 本文采用的断裂纳米通道的断裂长度最大值为 0.4 nm, 水分子不能从断裂纳米通道连接处逸出, 如果增大断裂长度, 水分子通过断裂纳米通道内的性质会有新的结果. 最后, 本文中纳米通道的水分子为一维链状结构, 如果纳米通道的半径增加, 纳米通道内水分子的结构逐渐会变成多链结构, 电场方向对半径较大的断裂纳米通道内的水分子的传输的调控也值得深入研究.

4 结 论

本文运用分子动力学模拟的方法研究了在匀强电场方向影响下一维完整纳米通道以及断裂长度为 0.2, 0.4 nm 的一维断裂纳米通道内的水分子占据数、传输、水桥、电偶极矩偏向等特点. 在 1 V/nm 的电场作用下, 三种纳米通道内的水分子

性质差别主要分布在电场极化方向与管轴夹角为 90° 时, 此种情况下断裂长度为 0.4 nm 的断裂纳米通道连接处不能形成水桥, 而完整纳米通道内能形成稳定的水链. 对于断裂长度为 0.4 nm 的断裂纳米通道内的水分子占据数、单位时间流速、水分子运动速度, 在电场角度从 0° 增加到 90° 时, 急剧降低, 而在电场从 90° 增加到 180° 过程中, 急剧增加. 当电场极化方向与管轴夹角为 90° 时, 增大电场的强度, 断裂纳米通道连接处的水桥更容易断裂.

参考文献

- [1] Fajardo-Diaz J L, Morelos-Gomez A, Cruz-Silva R, Ishii K, Yasuike T, Kawakatsu T, Yamanaka A, Tejima S, Izu K, Saito S, Maeda J, Takeuchi K, Endo M 2022 *Chem. Eng. J.* **448** 137359
- [2] Kang X, Meng X W 2022 *Chem. Phys.* **559** 111544
- [3] Corry B 2008 *J. Phys. Chem. B* **112** 1427
- [4] Zhang R N, Liu Y N, He M R, Su Y L, Zhao X T, Elimelech M, Jiang Z Y 2016 *Chem. Soc. Rev.* **45** 5888
- [5] Werber J R, Osuji C O, Elimelech M 2016 *Nat. Rev. Mater.* **1** 16018
- [6] Abramyan A K, Bessonov N M, Mirantsev L V, Chevrychkina A A 2018 *Eur. Phys. J. B* **91** 48
- [7] Park H G, Jung Y 2014 *Chem. Soc. Rev.* **43** 565
- [8] 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]
- [9] Qiu T, Meng X W, Huang J P 2015 *J. Phys. Chem. B* **119** 1496
- [10] Holt J K, Park H G, Wang Y M, Stadermann M, Artyukhin A B, Grigoropoulos C P, Noy A, Bakajin O 2006 *Science* **312** 1034
- [11] Hummer G, Rasaiah J C, Noworyta J P 2001 *Nature* **414** 188
- [12] Secchi E, Marbach S, Nigues A, Stein D, Siria A, Bocquet L 2016 *Nature* **537** 210
- [13] Farrokhbin M, Lohrasebi A 2023 *Eur. Phys. J. E* **46** 93
- [14] He Y C, Sun G, Koga K, Xu L M 2014 *Sci. Rep.* **4** 6596
- [15] Liu W C, Jing D W 2023 *J. Phys. Chem. Lett.* **14** 5740
- [16] Wang Y, Zhao Y J, Huang J P 2011 *J. Phys. Chem. B* **115** 13275
- [17] Zhang Q L, Yang R Y, Jiang W Z, Huang Z Q 2016 *Nanoscale* **8** 1886
- [18] Zhang Q L, Yang R Y 2016 *Chem. Phys. Lett.* **644** 201
- [19] Zhu J Z, Lan Y Q, Du H J, Zhang Y H, Su J G 2016 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** 17991
- [20] Shafiei M, Von Domaros M, Bratko D, Luzar A 2019 *J. Chem. Phys.* **150** 074505
- [21] Vanzo D, Luzar A, Bratko D 2021 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23** 27005
- [22] Zhang Z Q, Li C, Liu H L, Ge D H, Cheng G G, Ding J N 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 056102 (in Chinese) [张忠强, 李冲, 刘汉伦, 葛道哈, 程广贵, 丁建宁 2018 物理学报 **67** 056102]
- [23] 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]
- [24] de Freitas D N, Mendonca B H S, Kohler M H, Barbosa M C, Matos M J S, Batista R J C, de Oliveira A B 2020 *Chem. Phys.* **537** 110849

- [25] Sahimi M, Ebrahimi F 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 214506
- [26] Meng X W, Shen L 2020 *Chem. Phys. Lett.* **739** 137029
- [27] Ebrahimi F, Maktabdaran G R, Sahimi M 2020 *J. Phys. Chem. B* **124** 8340
- [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] Hess B, Kutzner C, Van De Spoel D, Lindahl E 2008 *J. Chem. Theory. Comp.* **4** 435
- [32] Jorgensen W L, Chandrasekhar J, Madura J D, Impey R W, Klein M L 1983 *J. Chem. Phys.* **79** 926
- [33] Nose S 1984 *J. Chem. Phys.* **81** 511
- [34] Hoover W G 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1695
- [35] Wan R Z, Li J Y, Lu H J, Fang H P 2005 *J. Am. Chem. Soc.* **127** 7166
- [36] Li J Y, Gong X J, Lu H J, Li D, Fang H P 2007 *P. Natl. Acad. Sci. USA* **104** 3687
- [37] Darden T A, York D M, Pedersen L G 1993 *J. Chem. Phys.* **98** 10089
- [38] Zhao Y Z, Su J Y 2018 *J. Phys. Chem. C* **122** 22178
- [39] Fang C, Huang D C, Su J Y 2020 *J. Phys. Chem. Lett.* **11** 940
- [40] Xie Z, Li Z, Li J Y, Kou J L, Yao J, Fan J T 2021 *J. Chem. Phys.* **154** 024705
- [41] Xie Z, Hao S Q, Wang W Y, Kou J L, Fan J T 2022 *J. Mol. Liq.* **363** 119852

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

Meng Xian-Wen[†]

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

(Received 5 January 2024; revised manuscript received 22 February 2024)

Abstract

The orientation of water molecules within nanochannels is pivotal in influencing water transport, particularly under the influence of electric fields. This study delves into the effects of electric field direction on water transport through disjoint nanochannels, a structure which is of emerging significance. Molecular dynamics simulations are conducted to study the properties of water in complete nanochannel and disjoint nanochannels with gap sizes of 0.2 nm and 0.4 nm, respectively, such as occupancy, transport, water bridge formation, and dipole orientation, by systematically varying the electric field direction from 0 to 180 degrees. The simulation results disclose that the electric field direction has little influence on water flow through complete nanochannels. However, as the size of the nanogap expands, the declining trend of water transfer rate through disjoint nanochannels becomes more distinctive when the electric field direction is shifted from 0 to 90 degrees under an electric field with a strength of 1 V/nm. Notably, results also reveal distinct behaviors at 90 degrees under an electric field with a strength of 1 V/nm, where the stable water chains, unstable water bridges, and no water bridges are observed in complete nanochannels, disjoint nanochannels with 0.2 nm gap, and 0.4 nm gap, respectively. Moreover, simulations indicate that increasing the electric field strength in a polarization direction perpendicular to the tube axis facilitates water bridge breakdown in disjoint nanochannels. This research sheds light on the intricate interplay between electric field direction and water transport dynamics in disjoint nanochannels, presenting valuable insights into various applications.

Keywords: electric field, disjoint nanochannels, direction

PACS: 31.15.at, 47.56.+r

DOI: 10.7498/aps.73.20240027

* 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).

[†] Corresponding author. E-mail: xwmeng@cumt.edu.cn

电场方向对一维断裂纳米通道连接处水桥结构的影响

孟现文

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

Meng Xian-Wen

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 093102 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240027

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240027>

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

电场诱导(MgO)₄储氢的理论研究

Theoretical study on the hydrogen storage properties of (MgO)₄ under external electric field

物理学报. 2019, 68(16): 163601 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190544>

电场对graphene/InSe范德瓦耳斯异质结肖特基势垒的调控

Tuning Schottky barrier in graphene/InSe van der Waals heterostructures by electric field

物理学报. 2020, 69(15): 157302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191987>

金刚石氮-空位色心单电子自旋的电场驱动相干控制

Coherent electrical control of single electron spin in diamond nitrogen-vacancy center

物理学报. 2022, 71(11): 117601 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20220410>

重离子在碳化硅中的输运过程及能量损失

Transport process and energy loss of heavy ions in silicon carbide

物理学报. 2021, 70(16): 162401 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210503>

变形及电场作用对石墨烯电学特性影响的第一性原理计算

First-principles calculation of effects of deformation and electric field action on electrical properties of Graphene

物理学报. 2018, 67(7): 076301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172491>

黑磷纳米通道内压力驱动流体流动特性

Pressure-driven fluid flow characteristics in black phosphorus nanochannels

物理学报. 2019, 68(17): 170202 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190531>