氮化硼纳米通道膜内水传输的分子动力学模拟

吴锦文[1]，朱志豪[1*]，康国栋[2*]，曹义鸣[2]

（1. 安庆师范大学 化学化工学院，安庆 246133；2. 中国科学院大连化学物理研究所，大连 116023）

摘要： 水资源污染和短缺问题日益严重，研发高效、可持续的膜法水处理技术受到人们的广泛关注。近年来，一维纳米管由于优异的水传输性能成为研究热点。本研究采用分子动力学（MD）模拟方法，从水分子的数量密度、结构和取向等方面探究了不同氮化硼纳米管（BNNTs）中水的传输特性。模拟结果显示，相同条件下，以氮原子作为入口端的锯齿型 BNNT（19，0）的水通量最小，水分子在 BNNTs 内会发生不规则的取向翻转且会通过增大键角来促进传输。其次，在孔径不同的纳米通道内，孔径越小，水分子越需要较大的平均取向角和键角以促进传输。而且在一定条件下，长膜更有利于水传输。温度越高，水分子在入口处堆积越少，从而促进水传输，此外，增大压强，水通量也增大。

关键词： 氮化硼；水传输；取向；分子动力学

中图分类号： TQ028；O647 **文献标志码：** A **文章编号：** 1007-8924（2025）05-0033-09

doi： 10.16159/j.cnki.issn1007-8924.2025.05.004

随着全球人口的增长和经济的快速发展，淡水资源日益短缺，海水淡化是缓解这一问题的有效途径[1]。由于在理论研究中表现出优异的水传输性能，一维纳米管成为纳米通道膜材料领域的研究热点。碳纳米管（CNTs）作为纳米管的首选材料，其流体输运行为一直都是理论和实验研究的重要方向之一[2-3]。例如，Hummer 等[4]发现 CNTs 可以作为水和质子的独特分子通道。而 Ortiz-Medina 等[5]通过添加聚酰胺等方法改善碳纳米管的离子截留性能。氮化硼纳米管（BNNTs）与碳纳米管结构类似，并且 B、N 原子的存在使 BNNTs 结构有更高的化学稳定性、更好的生物相容性以及优良的抗氧化性[6-7]。此外，BNNTs 还具有独特的电子特性和机械性能，这使得 BNNTs 成为了一种很有潜力的纳米通道材料[8]。

近些年，BNNTs 已经被用于膜领域的研究。Won 等[9]通过分子动力学（MD）模拟发现 BNNT（5，5）比 CNT（5，5）有更优良的水传输性质，水分子在 BNNT（5，5）中形成单串链，而 CNT（5，5）中几乎不充满水。之后 Won 等利用密度泛函理论（DFT）发现水分子在表面带电 BNNTs（5，5）、（6，6）和（10，10）中的扩散系数比未带电的纳米管中的扩散系数低，这是因为水分子在进入管后与氮原子形成氢键导致带部分电荷的水扩散变慢，而在 BNNT（9，9）中水扩散会变快[10]。此外，Mistry 等[2]研究表明，在 BNNTs 短膜中水传输的总阻力主要是孔端阻力。这些研究表明不同 BNNTs 中存在复杂的水分子输运行为。另一项研究中，Hilder 等[11]通过 MD 研究发现水分子在 BNNTs（5，5）和（6，6）中形成单排链，在（7，7）和（8，8）中形成有序螺旋管和四

收稿日期：2025-03-31；修改稿收到日期：2025-05-28

基金项目：安徽省教育厅自然科学项目（20230062，2023AH040071）

第一作者简介：吴锦文（2000-），女，山西临汾人，硕士研究生，主要研究方向为一维纳米通道内水传输的分子模拟. * 通讯作者，朱志豪，E-mail：zhuzhihao2020@163.com；康国栋，E-mail：kangguod@dicp.ac.cn

引用本文：吴锦文，朱志豪，康国栋，等. 氮化硼纳米通道膜内水传输的分子动力学模拟[J]. 膜科学与技术，2025，45（5）：33-41.

Citation：Wu J W，Zhu Z H，Kang G D，*et al*. Molecular dynamics simulation study of water transport in boron nitride nanotube membranes[J]. Membrane Science and Technology（Chinese），2025，45（5）：33-41.

边形管。Liang 等[12]研究表明，盐的排斥和水的渗透高度依赖于 BNNTs 的半径。除了纳米管的孔径外，BNNTs 的手性也对纳米管内部水传输有很大的影响。Kumar 等[13]研究发现水在锯齿形 BNNTs 的流动能力低于扶手型纳米管，这不仅与水流经过锯齿型纳米管时的摩擦系数更高有关，还与扶手型的对称结构有关。Sahu 等[14]研究表明，BNNTs 在本质上比 CNTs 更疏水且有更高的水渗透性。这些研究解释了 BNNTs 内水传输机制，但未见对通道内水构型的研究。

然而，目前对于 BNNTs 的水传输机制尚未形成完整的认识。因此，本研究考虑了纳米管的管径、手性、长度、温度以及压差的因素，构建了一系列不同条件下的 BNNTs 水传输模型。通过 MD 模拟，探究水分子在纳米孔通道内的传输特性，分析水分子在传输过程中的数量密度、平均取向角和键角等物理量，从而揭示纳米管径、手性等因素对水渗透性能的影响。

1 实验

1.1 模型构建

构建了锯齿型(19,0)，螺旋型(14,8)，以及(5,5)，(8,8)，(11,11)，(14,14)和(17,17)5 种不同孔径的扶手型 BNNTs[15]。三种 BNNTs 的结构如图 1 所示。BNNTs 的两端与石墨烯连接，以阻止水分子通过膜。模拟系统如图 2 所示，将不同 BNNTs 放入到水盒子中，盒子左侧为进料侧(有 1 500个水分子)，右侧为渗透侧(有 800 个水分子)，最外端放置两块刚性石墨烯作为活塞，左右两侧分别留有真空层，以便有足够的空间进行水传输。模拟盒子的 x 和 y 方向的尺寸约为 3.4 nm，z 方向尺寸约为 2.0 nm，与膜的长度有关。BNNTs 的轴向与 z 方向平行。表 1 列出了模拟系统的相关信息。

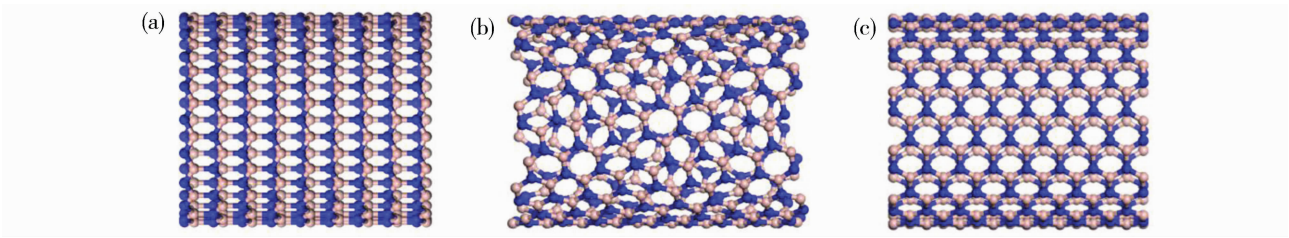


图 1 BNNT(19,0)(a)、BNNT(14,8)(b)及 BNNT(11,11)(c)管状图(淡粉色代表硼原子，深蓝色代表氮原子)

Fig. 1 Tubular diagram of BNNT (19, 0) (a), BNNT (14, 8) (b) and BNNT (11, 11) (c) (Light pink represents boron atoms and dark blue represents nitrogen atoms)

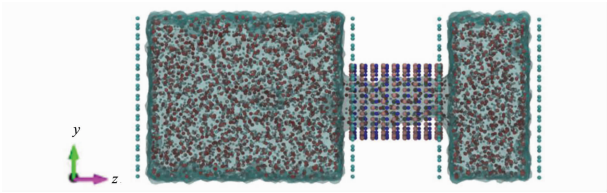


图 2 模拟系统

Fig. 2 Simulation system

表 1 BNNTs 的相关模拟信息

Table 1 Simulation information of BNNTs

	原子数量	类型	孔直径/Å	模拟时间/ns
BNNT(19,0)	8 858	锯齿型	15.417	3
BNNT(5,5)	8 820	扶手型	6.980	3
BNNT(8,8)	8 868	扶手型	11.230	3
BNNT(11,11)	8 878	扶手型	15.425	3
BNNT(14,14)	8 892	扶手型	19.655	3
BNNT(17,17)	8 890	扶手型	23.855	3
BNNT(14,8)	8 884	螺旋型	15.632	3

注：1 Å=10^{-10} m。

1.2 模拟过程

采用 LAMMPS 软件进行 MD 模拟。硼、氮原子采用 Dreiding 力场，Dreiding 力场适用于预测有机、生物和无机分子的结构、相对能量、旋转势垒和动力学，并且在之前相关研究中已经验证该力场在 BNNTs 中的有效性[16-17]。同时采用 TIP3P 柔性模型描述水分子，TIP3P 模型可以更准确地描述水分子的动态行为，具有较高的计算效率[12,18]。在模拟过程中，粒子对之间的相互作用将按照 Lennard-Jones 势和库仑势的模型来计算，截断半径为 10.0 Å。同时，静电力的长程相互作用使用 PPPM (particle-particle particle-mesh)算法计算，算法精度为 10^{-4}，在三个方向上都应用了周期边界条件，原子间的键合作用使用谐振势描述，并且使用混合势，包括谐振势和余弦平方势来描述原子间的角度。在模拟过程中，先进行能量最小化和预平衡，在 300 K下分别在 NVE 系综和 NPT 系综进行 0.1 ns

弛豫,其次,在非平衡态模拟之前进行了 0.1 ns 的预压缩(在进行温度分析时使用相应的分析温度进行预平衡)。之后,在 NVT 系综下进行 3.0 ns 的非平衡态分子动力学模拟(NEMD)。NEMD 模拟时,在 z 轴方向上对进料侧活塞石墨烯每个原子施加恒定的压力 f($f=p*A/n$,其中 p 为压差,A 为石墨烯的面积,n 为一侧石墨烯原子总数)。每 5 ps 保存一次轨迹,时间步长为 1 fs。将纳米孔通道分成几部分(其厚度为 2.5 Å),计算每个截面内所有水分子的平均取向角和水分子平均键角。

2　结果与讨论

2.1　手性对水传输的影响

BNNTs 有三种不同的手性结构,但目前还没有对这三种结构水传输机理的系统分析。因此,在本工作中,首先研究了 BNNTs 不同结构对水传输的影响,选取了孔径一致的锯齿型 BNNT(19,0)、扶手型 BNNT(11,11)、螺旋型 BNNT(14,8)三种氮化硼结构,在本工作中 BNNT(11,11)和 BNNT(14,8)入口端原子包括 B 和 N 两种原子,BNNT(19,0)表示 N 原子端作为入口端,BNNT(19,0)-B 表示 B 原子端作为入口端。在压差为 40 MPa,温度为 300 K 下进行 NEMD 模拟。结果如图 3 所示,在相同模拟条件下,N 原子作为入口端的锯齿型 BNNT(19,0)的水通量略低。首先,可能是由于锯齿型纳米管内部通道的不规则性、表面电荷分布的不均匀性导致水分子在锯齿型纳米管中的传输阻力更大,从而降低了水通量;其次,可能是由于氮原子的高电负性导致入口处带有较强的负电荷,从而与水分子的氧原子产生静电排斥作用,增加了水分子进入纳米管的阻力。相比之下,硼原子作为入口端时,静电作用较弱,水通量更高。

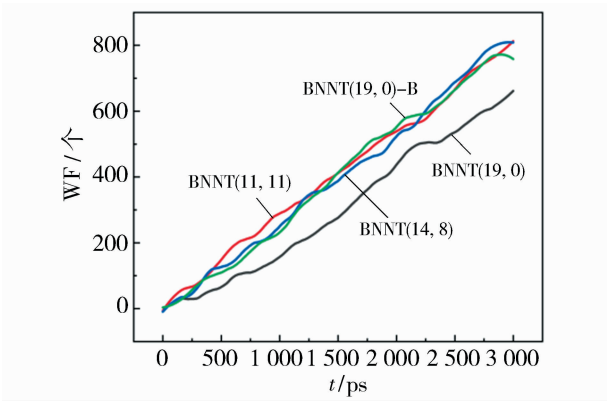


图 3　在 40 MPa、300 K 下,三种不同手性 BNNTs 的水通量

Fig. 3　Water flux (WF) of three BNNTs with different chiralities at 40 MPa and 300 K

为进一步研究不同手性结构 BNNTs 中水分子分布情况,统计了通过纳米管的水分子沿 z 轴即管道的一维数量密度分布,从图 4(a)可以看出在纳米管中水分子数量密度基本一致,呈现出波浪形(54～74 Å 为纳米管),水分子在通过管口时,数量密度分布发生了明显的突升,说明在此处发生了分子堆积现象,这是 BNNTs 孔端效应造成的[2]。水分子在管口末端聚集的位置不同主要是管的长短差异造成的。为了探究水分子在管内的数量分布,进一步统计了纳米管通道内 xy 截面的径向二维水分子数量密度。如图 4(b)～4(e)所示,可看出水分子在紧靠膜内侧数量密度最大,优先形成一层水壁,类似于环状层进行传输,这种现象是水分子与 BNNTs 内表面形成了氢键造成的[19-20]。

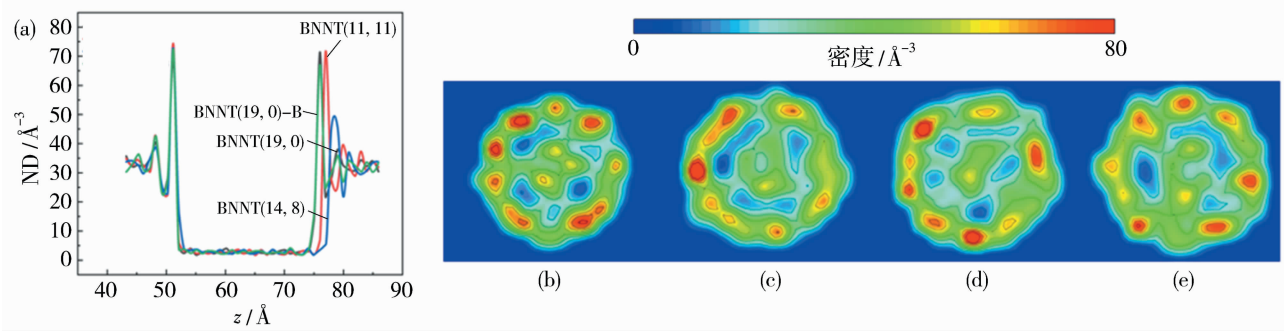


图 4　不同手性 BNNTs 中,水分子沿管道一维数量密度分布(a);锯齿型 BNNT(19,0)(b)、扶手型 BNNT(11,11)(c)、螺旋型 BNNT(14,8)(d)和锯齿型 BNNT(19,0)-B(e)径向二维水分子数量密度分布

Fig. 4　One-dimensional number density (ND) distribution of water molecules along the channel in BNNTs with different chiralities (a); radial two-dimensional ND distribution of water molecules in zigzag BNNT (19, 0) (b), armchair BNNT (11, 11) (c), spiral BNNT (14, 8) (d) and zigzag BNNT (19, 0)-B (e)

进一步探究了纳米管内水分子的构型变化机制，管内水分子取向角定义为水分子偶极矢量与纳米孔轴方向（正 z 轴）之间的夹角[21]。图 5 表示在连续 3 ns 下水分子平均取向角（AOA）的变化，发现在同一时刻下管内水分子的取向角不总是保持一致，说明水分子不是直链通过 BNNTs，而是通过调整方向来促进水的传输。在不同时刻，水分子通过 BNNTs 的平均取向角方向相反，说明在 BNNTs 中发生了翻转行为且这种行为是不规则的。与之不同的是，在 CNTs 中，水分子形成具有一致偶极子取向的单纵队结构[22]。这可能是因为 BNNTs 的表面是 B 和 N 交替排列的结构，B 与 N 的电负性不同，从而导致极性分布的不对称，水分子受到局部电场的影响，会通过偶极翻转降低与 BNNTs 管壁的摩擦阻力，从而发生不规则取向翻转[23]。此外，分析了通道内水分子平均键角（ABA）的变化，如图 6 所示。水分子进入纳米通道内，键角增大。这是因为在受限空间内，水分子调整键角以趋于直线，降低阻力进而促进传输。因此，水分子在通过纳米管时会增大键角，进行不规则的取向翻转。

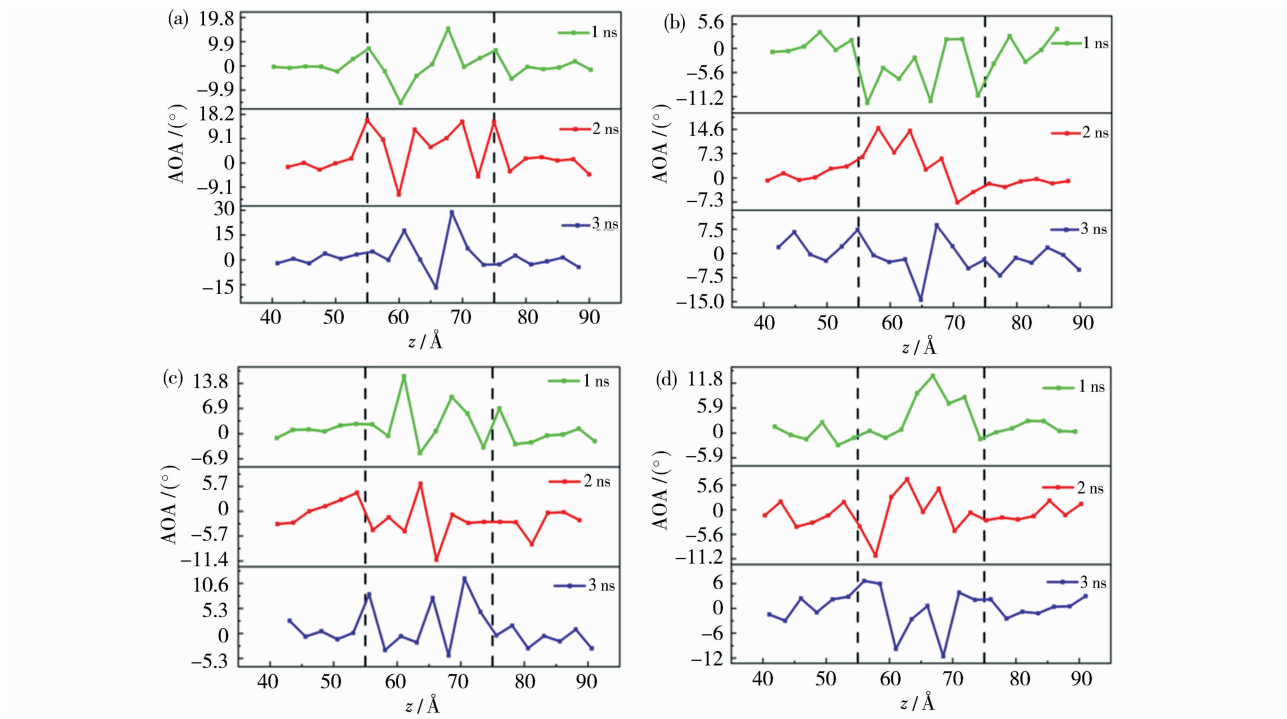


图 5 BNNT(19,0)(a)、BNNT(11,11)(b)、BNNT(14,8)(c)和 BNNT(19,0)-B(d)在连续 3 ns 下水分子平均取向角度

Fig. 5 Average orientation angles (AOA) of water molecules over continuous 3 ns in BNNT (19, 0) (a), BNNT (11, 11) (b), BNNT (14, 8) (c) and BNNT (19, 0)-B (d)

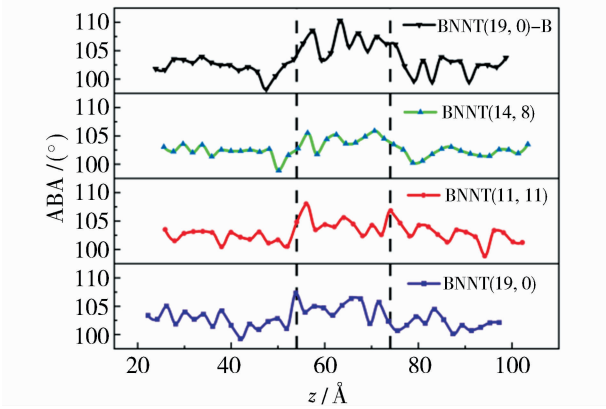


图 6 水分子通过不同 BNNTs 的平均键角变化

Fig. 6 Average bond angle (ABA) variation of water molecules passing through different BNNTs

2.2 孔径大小对水传输的影响

本研究选取了扶手型 BNNTs，探究不同孔径下水传输与取向之间的关系。首先构建了(5,5)、(8,8)、(11,11)、(14,14)和(17,17)5 种不同孔径的氮化硼纳米管（孔径大小如表 1 所示），在压差为 40 MPa、温度为 300 K 下进行 NEMD 模拟。如图 7 所示，在相同模拟条件下，孔径最小的(5,5)水通量几乎为 0，孔径最大的(17,17)在短时间内就达到了水传输的最大限度，显示出超大水通量，孔径越大，水通量就越大。这与之前在 CNTs 的 MD 模拟结果都相符合[24-25]。

相应地，研究了不同孔径下水分子通过纳米管

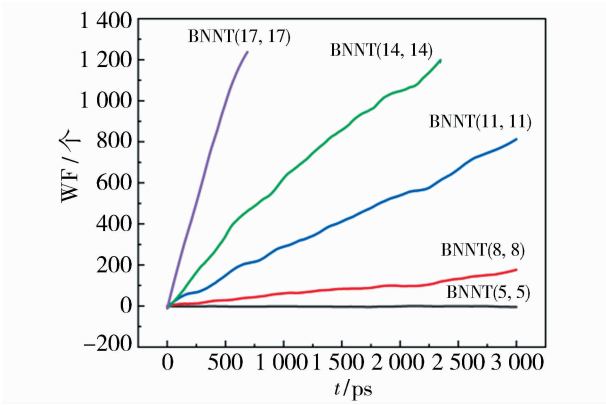


图 7　在 40 MPa、300 K 下,五种不同孔径 BNNTs 的水通量

Fig. 7　WF through five BNNTs with different pore sizes at 40 MPa and 300 K

的数量密度分布情况。从图 8(a)展示的水分子一维数量密度分布,发现水分子在出入口同样发生了分子堆积现象,这一现象在 BNNTs 水传输中普遍存在,孔径越大,入口阻力越小,管中水分子数量密度越高。图 8(b)~8(f)为水分子在不同孔径纳米管通道内 xy 截面的径向分布情况,BNNT(5,5)孔径仅有 6.980 Å,因而水分子数量密度极低。水分子在通过纳米管时,会遍布在管中,但由于 BNNTs 与水分子之间的相互作用,管内表面会吸引更多水分子形成环状层,类似于 CNTs 水分子的分布[26-27]。

为了探究水分子的构型变化,研究了管内水分子平均取向角。如图 9(a)所示,由于(5,5)的孔径太小,水分子在进入管道内时不是连续的,并且需要极大的取向角来促进水传输,随着孔径的增大,进入通道时所需要的取向角度逐渐变小。说明随着管径的增加,水分子的传输阻力降低,不需要进行取向的调整。键角变化如图 9(b)所示,可以发现在不同孔径的纳米管中,孔径越小,水分子键角越大。因此,推断出水分子在通过不同孔径 BNNTs 时,孔径越小,水传输阻力越大,越需要增大取向角和水分子键角来降低阻力,从而促进水传输。

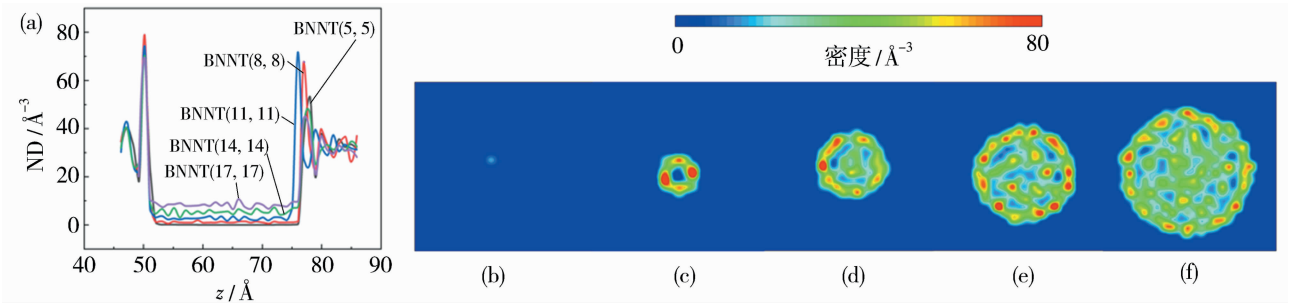


图 8　在不同孔径 BNNTs 中,水分子沿管道一维数量密度分布(a);BNNT(5,5)(b)、BNNT(8,8)(c)、BNNT(11,11)(d)、BNNT(14,14)(e)和 BNNT(17,17)(f)径向二维水分子数量密度分布

Fig. 8　One-dimensional ND distribution of water molecules along the channel in BNNTs with different pore sizes (a); radial two-dimensional ND distribution of water molecules in BNNT (5, 5) (b), BNNT (8, 8) (c), BNNT (11, 11) (d), BNNT (14, 14) (e) and BNNT (17, 17) (f)

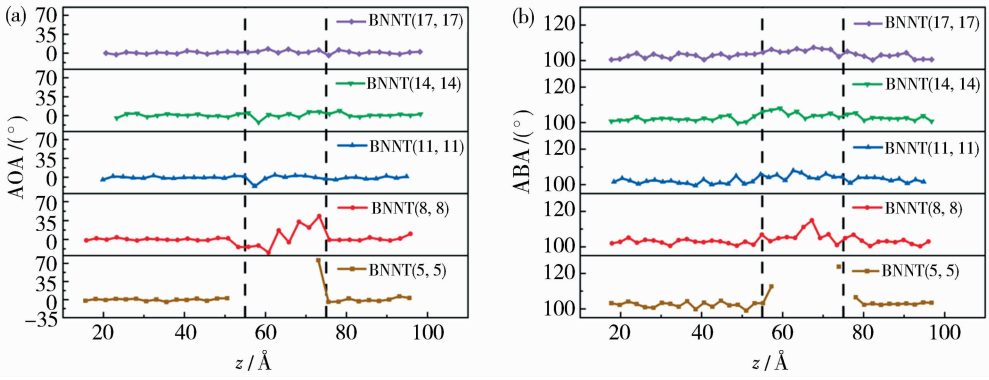


图 9　水分子通过不同孔径 BNNTs 的平均取向角度(a);水分子通过不同孔径 BNNTs 的平均键角变化(b)

Fig. 9　AOA of water molecules passing through BNNTs with different pore sizes (a); ABA variation of water molecules passing through BNNTs with different pore sizes (b)

2.3 长度对水传输的影响

本研究选取扶手型 BNNT(11,11)来探究长度对水传输的影响。分别构建了 20 Å、40 Å、80 Å 和 160 Å 4 种不同长度的氮化硼纳米管，在压差为 30 MPa、温度为 300 K 下进行 NEMD 模拟。如图 10(a)所示，在相同模拟条件下，长膜结构水通量更大。这很大程度上是由于在 BNNTs 水传输中，流动阻力由孔端阻力主导所致[2]。

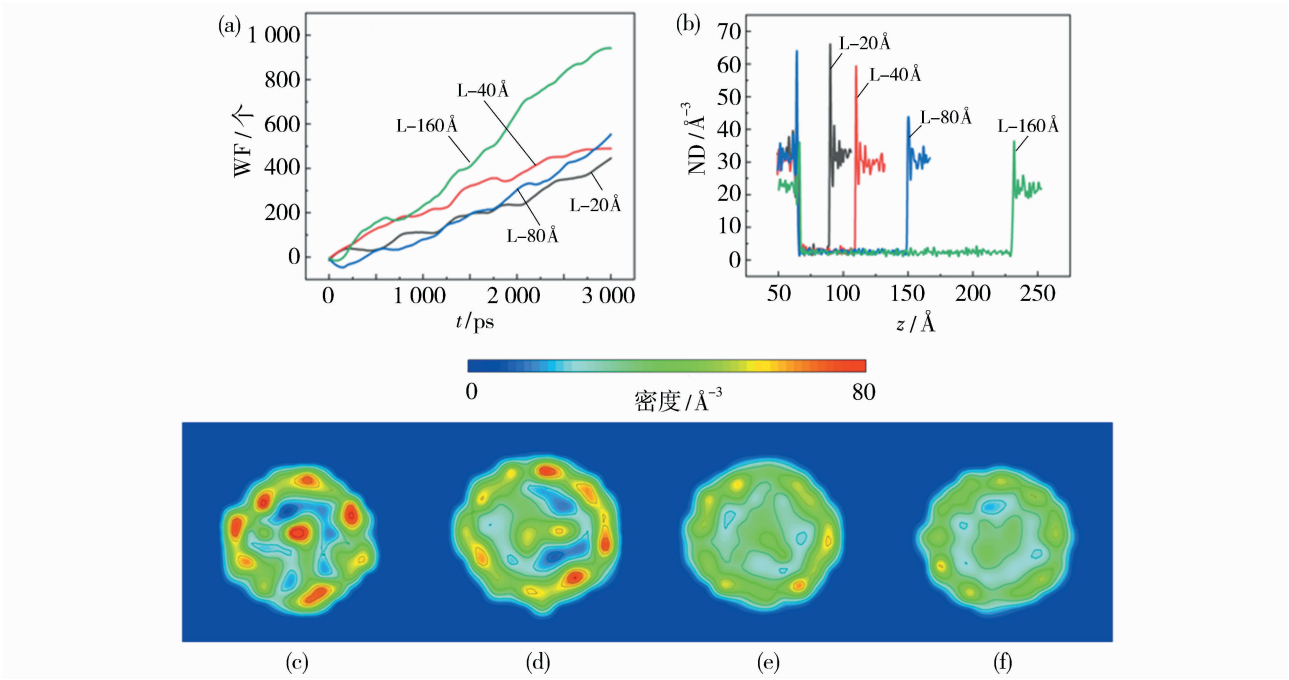


图 10 在 30 MPa、300 K 下，不同长度 BNNTs 的水通量(a)；BNNT(11,11)在不同长度下，水分子沿管道一维数量密度分布(b)；20 Å(c)、40 Å(d)、80 Å(e)、160 Å(f)的 BNNT(11,11)径向二维水分子数量密度分布

Fig. 10 WF of BNNTs of different lengths at 30 MPa and 300 K (a); one-dimensional ND distribution of water molecules along the channel in BNNT (11,11) at different lengths(b); radial two-dimensional ND distribution of water molecules in BNNT (11,11) at 20 Å (c), 40 Å (d), 80 Å (e) and 160 Å (f)

为进一步研究水分子分布情况，统计了水分子在管中的数量密度分布，从图 10(b)～10(f)可以发现长膜纳米通道在出口处水分子堆积较少，并且其通道内水分子数量密度较低。水分子在通过纳米管时，总阻力主要分为孔端阻力和纳米管内部阻力，Mistry 等[2]发现，当 BNNTs 长度在 0～200 Å 内，与末端阻力相比，通道内部流动阻力可以忽略不计。因此，增加纳米管长度，水分子在末端堆积减少导致阻力减弱，从而降低了管内水分子的整体密度。在模拟范围内，长度对水分子在管内平均取向角和键角都没有影响。水分子在进入管内时，依旧会选择增大键角来促进水传输。因而，在一定条件下，长膜更有利于水传输。

2.4 温度对水传输的影响

继续探究了温度对水传输的影响。对扶手型 BNNT(11,11)，在压差为 30 MPa，温度分别为 280 K、300 K、320 K、340 K 和 360 K 下进行 NEMD 模拟。如图 11(a)所示，在相同模拟条件下，随着温度升高，水通量是逐渐增大的[28]。在图 11(b)中，水分子在纳米管的出入口处均出现了堆积现象。随着温度的升高，纳米管入口处的水分子堆积现象显著减少。这一现象可归因于水分子在较高温度下动能的显著增强，导致氢键断裂频率增加，进而减弱了其在通过纳米管时所受到的入口阻力，有效提升了水的通量[27-28]。模拟发现，温度对水分子 xy 截面的径向分布与取向变化没有影响。因此，在 BNNTs 中进行水传输时，温度升高，入口阻力降低，从而促进了水传输。

2.5 压差对水传输的影响

最后探究了压差对水传输的影响。同样使用扶手型 BNNT(11,11)，在温度为 300 K，压差分别为 5 MPa、10 MPa、20 MPa、40 MPa 和 80 MPa 下进行 NEMD 模拟。如图 12(a)所示，在相同模拟条件下，随着压差增大，水通量是逐渐增大的。这符合

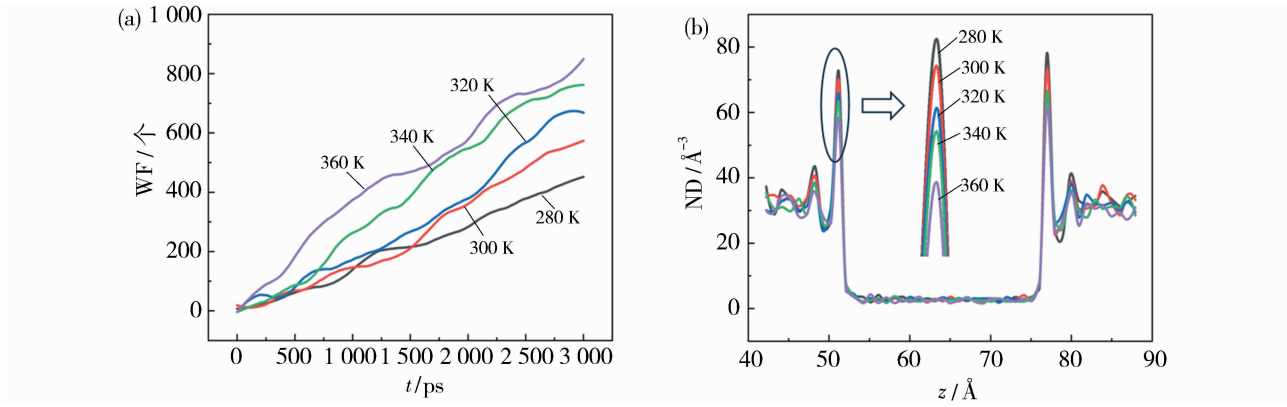


图 11　扶手型 BNNT(11,11)在不同温度下的水通量(a);不同温度下 BNNTs 水分子沿管道一维数量密度分布(b)

Fig. 11　WF through armchair BNNT (11, 11) at different temperatures (a); one-dimensional ND distribution of water molecules along the channel in BNNTs at different temperatures (b)

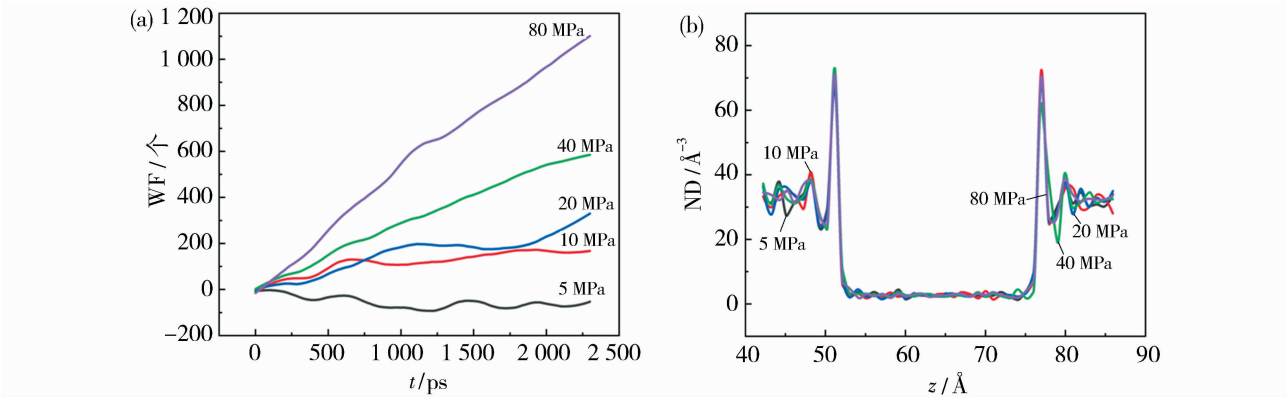


图 12　扶手型 BNNT(11,11)在不同压差下的水通量(a);不同压差下 BNNTs 水分子沿管道一维数量密度分布(b)

Fig. 12　WF through armchair BNNT (11, 11) under different pressure differences (a); one-dimensional ND distribution of water molecules along the channel in BNNTs under different pressure differences (b)

Hagen-Poiseuille 方程的相关规律($Q=\Delta p/R$,其中 Q 为体积流量,m^3/s;Δp 为管两端的压强差,Pa;R 为流阻,$Pa\cdot s/m^3$)。当压差增大时,水分子受到更强的驱动力,能够克服纳米管内表面的摩擦力和分子间相互作用力,从而加速通过纳米管。模拟发现,压差对水分子在管内数量密度及平均取向等因素没有影响。水分子在进入管内时,依旧会选择增大键角来促进水传输。因而,在一定条件下,增大压强,水通量增大。

3　结论

综上所述,本研究使用 MD 模拟探究了水在 BNNTs 中的传输特性。首先,研究了不同手性 BNNTs 中水的传输特性,通过模拟发现,相同条件下,氮原子作为入口端的锯齿型 BNNT(19,0)的水通量最小,此外,水分子在 BNNTs 内会发生不规则取向翻转且会通过增大键角来促进传输。其次,在孔径不同的纳米通道内,随着孔径的增大,内部水分子与膜之间相互作用逐渐减弱,水分子无序地遍布在管内,并且孔径越小,水分子越需要较大的平均取向角和键角来促进传输。而且在一定条件下,长膜更有利于水传输。最后探究了温度和压强对 BNNTs 水传输的影响,温度升高会降低入口阻力,从而促进了水传输,并且,增大压强,水通量也增大。本研究为 BNNTs 内水传输提供新的见解,为优良水传输通道的设计提供指导。

参考文献:

[1] Shahbabaei M, Elawadly R, Khodadadi J M, *et al*. Desalination performance investigation of TpPa-1 COF and MIL-47(Ⅴ) MOF bilayer membranes using molecular dynamics simulation[J]. Desalination, 2024, 576: 117315.

[2] Mistry S, Pillai R, Mattia D, *et al*. Untangling the

physics of water transport in boron nitride nanotubes [J]. Nanoscale, 2021, 13(43): 18096-18102.
[3] Radha B, Esfandiar A, Wang F C, *et al*. Molecular transport through capillaries made with atomic-scale precision[J]. Nature, 2016, 538(7624): 222-225.
[4] Hummer G, Rasaiah J C, Noworyta J P. Water conduction through the hydrophobic channel of a carbon nanotube[J]. Nature, 2001, 414(6860): 188-190.
[5] Ortiz-Medina J, Inukai S, Araki T, *et al*. Robust water desalination membranes against degradation using high loads of carbon nanotubes[J]. Sci Rep, 2018, 8(1): 2748.
[6] Xu T, Zhang K, Cai Q, *et al*. Advances in synthesis and applications of boron nitride nanotubes: A review [J]. Chem Eng J, 2022, 431: 134118.
[7] Zhang L, Li J, Peng G, *et al*. Charge-tunable water transport through boron nitride nanotubes[J]. J Mol Liq, 2018, 258: 98-105.
[8] Kim J H, Pham T V, Hwang J H, *et al*. Boron nitride nanotubes: Synthesis and applications [J]. Nano convergence, 2018, 5: 1-13.
[9] Won C Y, Aluru N R. Water permeation through a subnanometer boron nitride nanotube[J]. J Am Chem Soc, 2007, 129(10): 2748-2749.
[10] Won C Y, Aluru N R. Structure and dynamics of water confined in a boron nitride nanotube[J]. J Phys Chem C, 2008, 112(6): 1812-1818.
[11] Hilder T A, Gordon D, Chung S H. Salt rejection and water transport through boron nitride nanotubes[J]. Small, 2009, 5(19): 2183-2190.
[12] Liang L, Li J C, Zhang L, *et al*. Computer simulation of water desalination through boron nitride nanotubes[J]. Phys Chem Chem Phys, 2017, 19(44): 30031-30038.
[13] Kumar S, Govind Rajan A. Predicting quantum-mechanical partial charges in arbitrarily long boron nitride nanotubes to accurately simulate nanoscale water transport[J]. J Chem Theory Comput, 2024, 20 (8): 3298-3307.
[14] Sahu P, Ali S M. Studies on continuum breakdown and water transport behavior of nanotubes for water purification: Impact of temperature, nanotube material, and diameter[J]. ACS Appl Nano Mater, 2024, 7(8): 9228-9243.
[15] 武海顺, 贾建峰. 氮化硼纳米管的研究进展[J]. 化学进展, 2004, 16(1): 6-14.
[16] Mayo S L, Olafson B D, Goddard W A. Dreiding: A generic force field for molecular simulations[J]. J Phys Chem, 1990, 94(26): 8897-8909.
[17] Salavati M, Ghasemi H, Rabczuk T. Electro-mechanical properties of boron nitride nanotube: Atomistic bond potential and equivalent mechanical energy approach[J]. Comput Mater Sci, 2018, 149: 460-465.
[18] Azamat J, Sardroodi J J, Mansouri K, *et al*. Molecular dynamics simulation of transport of water/DMSO and water/acetone mixtures through boron nitride nanotube[J]. Fluid Phase Equilib, 2016, 425: 230-236.
[19] Lyu B, Wang M, Jiang J, *et al*. Molecular design of covalent-organic framework membranes for Li^+/Mg^{2+} separation: Significant charge effect[J]. J Membr Sci, 2022, 662: 120976.
[20] Ai Y, Li J, Zhu X, *et al*. Understanding the mechanism of permanganate ion rejection in TpPa-1/$Ti_3C_2T_2$ composite membranes via molecular dynamic simulation[J]. J Membr Sci, 2024, 698: 122607.
[21] Liu R, Liu Z, Zhao Y, *et al*. Role of carbon nanotube wetting transparency in rapid water transport for a nanopore membrane[J]. Nano Lett, 2024, 24(11): 3484-3489.
[22] Wan R, Lu H, Li J, *et al*. Concerted orientation induced unidirectional water transport through nanochannels[J]. Phys Chem Chem Phys, 2009, 11 (42): 9898-9902.
[23] Movlarooy T, Minaie B. First principles study of structural and electronic properties of BNNTs[J]. J Comput Electron, 2018, 17: 1441-1449.
[24] Meng X W, Wang L Y. Sodium chloride solution transport through a carbon nanotube with an embedded carbon nanotube via molecular dynamics simulations [J]. Chem Phys Lett, 2024, 849: 141424.
[25] Tao J, Song X, Zhao T, *et al*. Confinement effect on water transport in CNT membranes[J]. Chem Eng Sci, 2018, 192: 1252-1259.
[26] Alexiadis A, Kassinos S. Molecular simulation of water in carbon nanotubes[J]. Chem Rev, 2008, 108 (12): 5014-5034.
[27] Srivastava A, Hassan J, Homouz D. Effect of size and temperature on water dynamics inside carbon nanotubes studied by molecular dynamics simulation[J]. Molecules, 2021, 26(20): 6175.
[28] Song J, Liu L, Li Q, *et al*. Entrance resistance of water transport into carbon nanotubes: Insights from molecular dynamics simulations[J]. J Mol Liq, 2021, 331: 115739.

Molecular dynamics simulation study of water transport in boron nitride nanotube membranes

WU Jinwen[1], *ZHU Zhihao*[1], *KANG Guodong*[2], *CAO Yiming*[2]

(1. School of Chemistry and Chemical Engineering, Anqing Normal University, Anqing 246133, China;
2. Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian 116023, China)

Abstract: Water pollution and scarcity are becoming increasingly severe, driving significant attention to the development of efficient and sustainable membrane-based water treatment technologies. In recent years, one-dimensional nanotubes have emerged as a research hotspot due to their exceptional water transport properties. In this study, molecular dynamics (MD) simulations were employed to investigate the water transport characteristics in different boron nitride nanotubes (BNNTs) by analyzing the number density, structure and orientation of water molecules. The simulation results showed that, under the same conditions, the water flux of the zigzag BNNT (19, 0) with nitrogen atoms as the inlet end was the smallest. Water molecules will undergo irregular orientation inversion within BNNTs and promote transport by increasing the bond angle. Furthermore, in nanochannels with different pore sizes, smaller pore diameters required water molecules to adopt larger average orientation angles and bond angles to enhance transport. And under certain conditions, long membranes were more conducive to water transmission. Simulations were conducted over a temperature range of 280 K to 360 K, higher temperatures reduced the accumulation of water molecules at the entrance, thereby enhancing water transport. In addition, increasing the pressure also raised the water flux.

Key words: boron nitride; water transport; orientation; molecular dynamics

(上接第 18 页)

due to their ordered pore structure and high hydrophilicity. In this study, a dense seed layer was achieved by rubbing a pre-synthesized LTA seed sol onto a 200 mm macroporous α-Al_2O_3 support, followed by the fabrication of high-performance tubular LTA zeolite membranes via a secondary growth method. The effects of synthesis parameters were systematically investigated to optimize the LTA zeolite membrane morphology and separation performance, including the presence or absence of a PTFE liner in the autoclave, water-to-silica ratio in the seed sol, crystallization time, aging time of the synthesis solution, and rotation speed of the oven. Under optimal conditions, the tubular LTA zeolite membrane exhibited a high flux of 2.23 kg/(m^2 · h) and an ultrahigh separation factor of 22 050 for dehydrating 90% (mass fraction) ethanol/water at 348.15 K. These results highlight the exceptional potential of as-synthesized LTA membranes for scale-up industrial applications in solvent dehydration processes.

Key words: LTA zeolite membrane; pervaporation; ethanol dehydration; seed sol-assisted method

(上接第 32 页)

oil rejection: 98.1% ~ 99.4%]; and remarkable antifouling properties, achieving 90% flux recovery through simple chemical cleaning. Compared to pure Al_2O_3 membrane, the PCS-Al_2O_3 composite ceramic membrane fabricated under optimized conditions exhibited a 54% increase in porosity while its compressive strength did not significantly degrade, maintaining mechanical performance comparable to that of pure Al_2O_3 membranes, successfully overcoming the technical challenge in conventional ceramic membranes of balancing high porosity with high mechanical strength.

Key words: ceramic membrane; polycarbosilane; oil-water separation; phase inversion/sintering