

# 单层富勒烯薄膜脱盐应用的分子动力学模拟研究<sup>\*</sup>

刘思奕, 王丽雅, 夏 骏, 王睿杰, 唐 淳, 王成原

(江苏大学 土木工程与力学学院, 江苏 镇江 212013)

**摘要:** 海水淡化是最有希望解决全球淡水资源短缺的有效方案之一, 纳米技术的进步推动了各类用于水净化的纳米多孔膜的发展. 理论和实验研究发现了纳米多孔石墨烯的超高水透过和盐离子拒绝率. 然而精确创建、控制纳米级孔隙的大小和分布的操作难度极大地限制了纳米膜材料的实际化应用. 通过分子动力学模拟发现具有均匀有序纳米孔排列准四边形结构 (quasi-tetragonal phase, qTP) 的单层富勒烯 ( $C_{60}$ ) 薄膜在海水淡化方面的巨大潜力, 在保证 100% 阻盐率的同时, 与传统聚合物过滤膜相比, 单层富勒烯薄膜展示出卓越的透水性. 从原子尺度系统地研究了单层富勒烯薄膜结构的筛分机制, 发现钠离子、氯离子与水分子相比, 在穿膜运输过程中有大的能量障碍. 结果表明, 单层富勒烯薄膜是一种很有优势的海水淡化膜.

**关键词:** 海水淡化; 单层富勒烯薄膜; 水透过; 离子拒绝; 分子动力学

**中图分类号:** O34 **文献标志码:** A **DOI:** 10.21656/1000-0887.440118

## Molecular Dynamics Simulation of Monolayer Fullerene Membranes for Desalination

LIU Siyi, WANG Liya, XIA Jun,

WANG Ruijie, TANG Chun, WANG Chengyuan

(Faculty of Civil Engineering and Mechanics, Jiangsu University,  
Zhenjiang, Jiangsu 212013, P.R.China)

**Abstract:** Seawater desalination is one of the most promising solutions to fresh water shortage all over the world. The rapid development of nanotechnology led to the boom of nanoporous membranes for water purification. Recent theoretical and experimental studies reported ultra-high water permeability and salt rejection in nanoporous monolayer graphene. However, the difficulty of precisely creating nanometer-scale pores and controlling their distribution greatly limits its industrial application. Through molecular dynamics (MD) simulation, the monolayer quasi-tetragonal phase fullerene (qTPC<sub>60</sub>) was found to have tremendous potential as ultra-permeable membranes for desalination due to their uniform pore distribution. The monolayer fullerene membranes

\* 收稿日期: 2023-04-19; 修订日期: 2023-10-29

基金项目: 国家自然科学基金项目 (12102151; 12072134; 12102422); 江苏省博士后基金 (2021K113B)

作者简介: 刘思奕 (1998—), 女, 硕士 (E-mail: 2212023014@stmail.ujs.edu.cn);

王丽雅 (1989—), 女, 副教授 (通讯作者. E-mail: wangliya@ujs.edu.cn);

夏骏 (1992—), 男, 教授 (E-mail: xiajun@ujs.edu.cn);

王睿杰 (1990—), 男, 副教授 (E-mail: wangruijie@ujs.edu.cn);

唐淳 (1979—), 男, 教授 (E-mail: tangchun@ujs.edu.cn);

王成原 (1964—), 男, 教授 (E-mail: wangchengyuan@ujs.edu.cn).

引用格式: 刘思奕, 王丽雅, 夏骏, 王睿杰, 唐淳, 王成原. 单层富勒烯薄膜脱盐应用的分子动力学模拟研究[J]. 应用数学和力学, 2023, 44(12): 1491-1498.

exhibit high water permeability compared to conventional polymer filtration membranes. The work offers insights into the molecular mechanism of sieving, and the MD simulations show that  $\text{Na}^+$  and  $\text{Cl}^-$  ions have large energy barriers. This 2D monolayer carbon material with unique structure exhibits great potential in seawater desalination.

**Key words:** seawater desalination; monolayer fullerene; water permeability; ion rejection; molecular dynamics

## 0 引言

尽管水覆盖了地球表面的 75%,但超过 97%的水是以海洋中的盐水形式存在的,不能被人们直接用来生产生活.由于人口增长、工业化程度的发展以及能源需求的提高,预计淡水资源短缺问题将进一步恶化.海水淡化是最有希望解决全球淡水资源短缺的有效方案之一<sup>[1-4]</sup>,其中反渗透技术作为最常见的脱盐方法,使用半透膜过滤掉盐离子,但允许水通过.水透过率(water flux rate)和离子拒绝率(ion rejection rate)是衡量脱盐效率的两大关键指标<sup>[5]</sup>.对于传统过滤膜而言,水透过率和离子拒绝率之间存在着强烈的竞争关系.对其中任一指标的提 升都不可避免地 对另一指标产生不利影响.近年来,纳米技术的快速发展催生了大量全新的纳米膜材料,其原子级的厚度为实现脱盐过程中高水透过率和高离子拒绝率提供可能性<sup>[6-8]</sup>,纳米膜材料的发展和更新换代是促进膜分离技术大规模工业化应用的关键.在所有候选材料中,以带孔石墨烯为代表的多孔碳纳米材料表现出较高的物理稳定性和离子筛选特性,但实验中精准控制孔径大小均匀分布<sup>[6,9]</sup>、孔径悬键钝化<sup>[10-12]</sup>等一系列操作,无疑增加了制造成本.同时,限制二维纳米材料广泛应用 的挑战包括从大块晶体中剥离高纵横比和完整的纳米多孔单层的现有技术有限,在石墨烯纳米片中钻取均匀、高密度、大面积、亚纳米尺寸的孔隙,仍是难点问题.所以,人们便把目光投向自身具有特定孔洞、孔径的二维膜材料,像石墨炔本身具有的正三角形构型<sup>[7]</sup>,以及  $\text{MoS}_2$ 等<sup>[13-14]</sup>其他二维纳米材料<sup>[14]</sup>均展示出海水淡化的应用潜力.

富勒烯( $\text{C}_{60}$ )层状结构是以富勒烯为单元周期性拓展,并以簇间共价键形式构建的层状聚合物.近期, Hou 等<sup>[15]</sup>通过层间键分裂策略成功制备了新的二维材料单层富勒烯网状结构薄膜,由共价键连接笼状结构富勒烯组成,实验上观测到两种不同的晶格结构.与其他二维材料相比,单层富勒烯薄膜由于其笼状结构,具有更大的表面积.此外,单层富勒烯的力学性能计算也有了新的进展<sup>[16-19]</sup>.单层富勒烯薄膜具有良好的热力学稳定性和较高的载流子迁移率,其各向异性的光学、机械、电学和热电性质源于  $\text{C}_{60}$  团簇之间的不对称桥接,展现出单层富勒烯薄膜优异的力学性能和热力学稳定性.虽然现有的研究已经发现了单层富勒烯优异的力学性能,但单层富勒烯薄膜在海水淡化方面的潜在应用仍未被探索.

## 1 计算模型与方法

富勒烯单层薄膜脱盐的分子模型图如图 1 所示.单层富勒烯网状结构的两种晶格结构:准六边形(quasi-hexagonal phase, qHP)结构(以下简称为 qHPC<sub>60</sub>)和准四边形(quasi-tetragonal phase, qTP)结构(以下简称为 qTPC<sub>60</sub>).qHPC<sub>60</sub>是由中间富勒烯分子通过  $\text{sp}^3$  键连接周围六个富勒烯,形成具有正六边形结构的单层富勒烯薄膜;qTPC<sub>60</sub>是沿富勒烯的正交方向连接四个富勒烯实现,形成具有方形结构的单层富勒烯薄膜,如图 1(a)所示.NaCl 溶液进料侧和纯水渗透侧用单层富勒烯网状结构隔开.将 31 个  $\text{Na}^+$  离子和 31 个  $\text{Cl}^-$  离子随机放入 3 432 个水分子中,得到浓度为 0.5 mol/L 的盐溶液,在渗透侧放置 607 个水分子.在储液层两侧使用两个刚性可移动的石墨烯活塞,为了模拟溶液通过单层富勒烯薄膜的运输,在进料侧和渗透侧的石墨烯活塞上施加不同的压力,从而在进料侧产生跨膜压力差  $\Delta P = P_{\text{feed}} - P_{\text{permeate}}$ ,其中  $P_{\text{feed}}$  表示进料侧活塞上的压力,  $P_{\text{permeate}}$  表示渗透侧活塞上的压力,如图 1(b)所示.

所有的模拟均采用 LAMMPS 进行,为了减少计算成本,所有的碳原子均设置为刚性.原子之间的相互作用采用 12-6 Lennard-Jones (LJ) 势,碳的相互作用参数选用 Kayal 等<sup>[20]</sup>采用的参数,水和离子的相互作用参数由 Shao 等<sup>[21]</sup>提出.选择 SPC/E 水模型,并结合 SHAKE 算法对键和角度进行约束.不同原子之间的 LJ 交叉相互作用参数由 Lorentz-Berthelot 组合规则确定<sup>[21]</sup>.采用 (particle-particle particle-mesh, PPPM) 算法进行

远距离静电相互作用,精度为  $10^{-4}$ .通过 Nose-Hoover 恒温器将系统温度维持在 300 K.时间步长为 1.0 fs.在  $x$  和  $y$  方向上应用周期性边界条件.离子、水分子(SPC/E)和  $C_{60}$  的 LJ 参数以及电荷信息见表 1,其中  $1 \text{ kcal} = 4.186 \text{ kJ}$ .

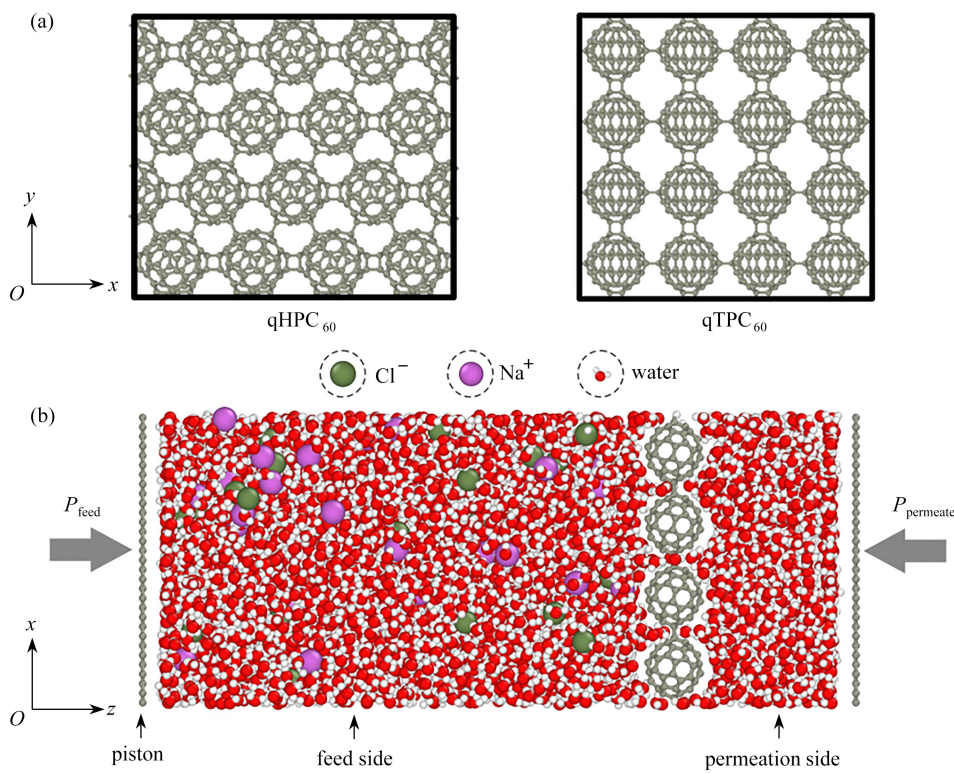


图 1 模型示意图

Fig. 1 Schematic of the simulation model

注 为了解释图中的颜色,读者可以参考本文的电子网页版本,后同。

表 1 离子、水分子(SPC/E)和  $C_{60}$  的 LJ 参数以及电荷信息

Table 1 The LJ parameters and partial charges for ions, water molecules (SPC/E), and carbon atoms of  $C_{60}$  and graphene

	site	$\sigma / \text{nm}$	$\epsilon / (\text{kcal/mol})$	$q / e$
ion	$\text{Na}^+$	0.333	0.002 772	1.0
	$\text{Cl}^-$	0.442	0.117 8	-1.0
water	H	0	0	0.423 8
	O	0.317	0.153 5	-0.847 6
$C_{60}$	C	0.340	0.086	0
graphene	C	0.340	0.086	0

首先,将进料侧和渗透侧活塞压力设置为大气压强 0.1 MPa,在此条件下弛豫模拟系统 5 ns,系统达到平衡后,在进料侧活塞上施加所需的 400 MPa 压力,而渗透侧保持不变.为了在有限的模拟时间内提高计算效率,选择了 400 MPa 的大渗透压力<sup>[22-24]</sup>.对活塞的原子施加的外力可以计算为

$$f = \frac{PA}{n},$$

其中,  $A$  是活塞的面积,  $n$  是活塞的碳原子个数.水通量随模拟时间呈线性增加,表明模拟系统达到稳态。

## 2 结果与讨论

生产高性能膜的关键:① 纳米孔具有足够的孔隙尺寸来筛选所需气体成分;② 高密度的选择性孔隙.首先,我们对两种构型的单层富勒烯薄膜进行简单分析,发现 qHPC<sub>60</sub> 孔隙面积小,孔隙分布密度相对较大,而



qTPC<sub>60</sub>孔隙面积相对较大,据估计在 qTPC<sub>60</sub>孔径内可以容纳最大的内切圆直径为 5.8 Å,在 qHPC<sub>60</sub>孔径内可以容纳最大的内切圆直径为 2.9 Å,如图 2 所示。

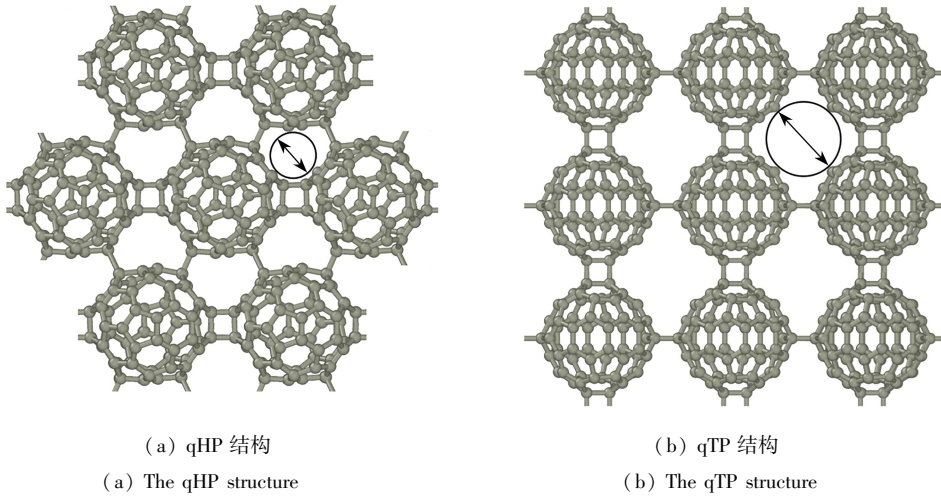


图 2 单层晶体结构顶部视图

Fig. 2 Top views of the monolayer crystal structure

## 2.1 单层富勒烯薄膜的脱盐性能

通过施加外部压力计算水通量,水分子以  $z$  方向从进料侧向渗透侧移动,进料侧水分子以恒定速度减少,而渗透侧水分子数目以相同速度增加,水分子数随模拟时间线性变化曲线,这意味着水流处于稳定状态。该线性状态下的斜率定义为水分子的水流率,如图 3 所示。除了水的渗透性,也统计了衡量膜排斥离子的能力的离子拒绝率。qTPC<sub>60</sub>相比于 qHPC<sub>60</sub>来说,具有高水透过率和高离子拒绝率。基于尺寸效应,较小孔径的 qHPC<sub>60</sub>阻碍水分子和离子的通过,无法进行物质运输;对孔径尺寸较大的 qTPC<sub>60</sub>可以实现水分子的传输,有效拒绝离子穿孔,具有较好的阻盐性能。

为了更好地衡量 qTPC<sub>60</sub>的透水性能与离子排斥性能,我们计算了单位面积、相同时间以及相同压力下的水流率,如图 4 所示。与目前工业上使用的膜材料(MFI 型沸石<sup>[25]</sup>、商业聚合物反渗透膜<sup>[26-27]</sup>、纳滤<sup>[26]</sup>和高通量反渗透膜<sup>[6,26,28]</sup>)相比,qTPC<sub>60</sub>展现出更高的水透过率和离子拒绝率。qTPC<sub>60</sub>周期性排列的孔隙结构很大程度上提高了膜的透水性能,展示出十足的水净化潜力。然而,值得注意的是,在实现对离子的完全拒绝的前提下,带孔石墨烯薄膜呈现更高的水透过率。

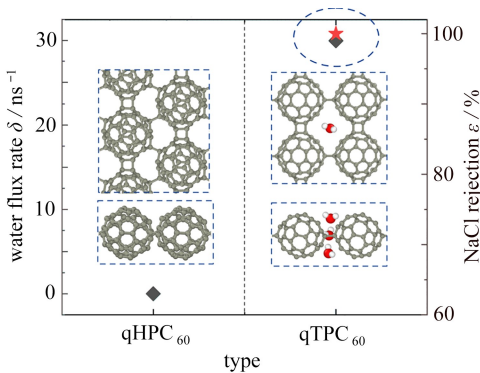


图 3 两种结构的富勒烯薄膜水通量和离子拒绝率

Fig. 3 Water fluxes and ion rejection rates of the monolayer crystal structures

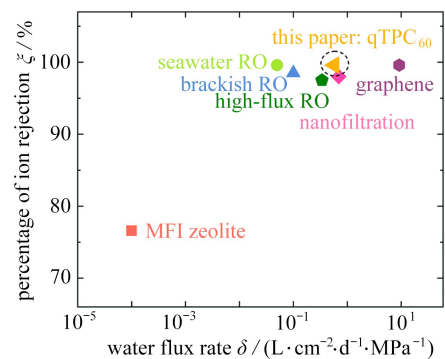


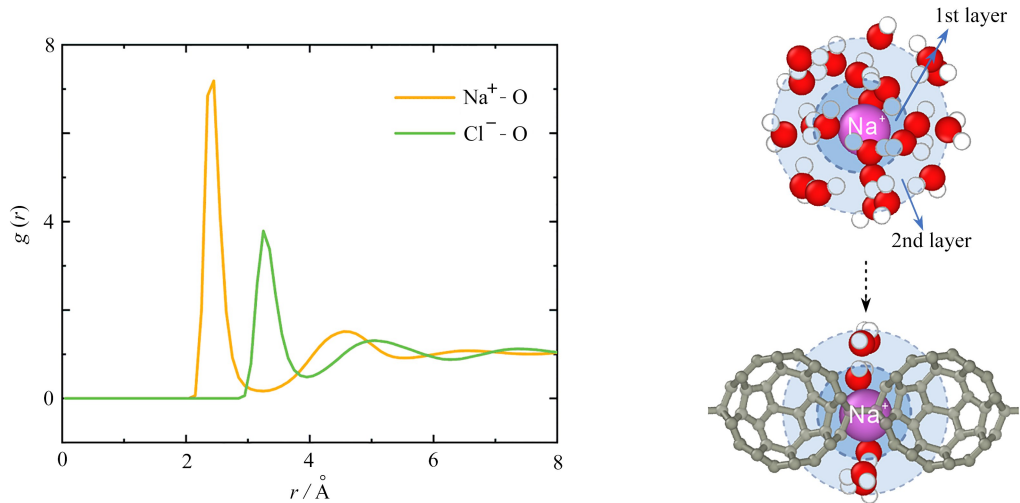
图 4 各类膜的离子排斥性能和透水性能

Fig. 4 The performance chart for qTPC<sub>60</sub> vs. various membranes

## 2.2 脱盐微观机理分析

在体相水中,离子与周围水分子相互作用形成相对稳定的水合结构,图 5(a)显示了体相水中 Na<sup>+</sup>离子和 Cl<sup>-</sup>离子距离水氧原子的径向分布函数(radial distribution function, RDF)曲线,RDF 曲线的第二个峰谷可

以得到离子的水化尺寸。 $\text{Na}^+$ 离子和  $\text{Cl}^-$ 离子的水化半径分别为  $5.35 \text{ \AA}$ ,  $6.35 \text{ \AA}$ <sup>[22]</sup>, 均大于  $\text{qTPC}_{60}$ 孔径, 因此, 水合离子在进入  $\text{qTPC}_{60}$ 孔隙时必须剥离一些水合水分子。表 2 总结了第一水化壳层 (Nc1) 和第二水化壳层 (Nc2) 对应的配位数。在体相水中, 离子第一和第二水化壳层中分别具有 5.6 个和 17.1 个水分子。当离子进入高度受限的通道内部时, 为了适应较强受限, 离子水合层内水分子重新排列组合, 导致水合层部分脱水。为此, 我们人为地将  $\text{Na}^+$ 离子用虚拟弹簧固定在通道中心位置, 以保持其可以在通道平面内不受限制运动。据估计,  $\text{Na}^+$ 离子要想通过  $\text{qTPC}_{60}$ , 其穿孔时刻第一水化壳层只有两个水分子。这意味着  $\text{Na}^+$ 离子要想穿过  $\text{qTPC}_{60}$ 需要足够大的能量从水化壳层中剥离大量水分子进入高度受限的通道, 而输入能量的不足, 使得  $\text{Na}^+$ 离子无法进行穿膜运输, 也印证了  $\text{qTPC}_{60}$ 的高阻盐性能。



(a) 体相水中,  $\text{Na}^+$ 离子、 $\text{Cl}^-$ 离子与水氧原子距离的 RDF 曲线

(b)  $\text{Na}^+$ 离子穿孔示意图

(a) Radial distribution function curves of distances between  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Cl}^-$  ions and water oxygen atoms in bulk water

(b) Schematic of the permeation of  $\text{Na}^+$  ions

图 5 体相水中,  $\text{Na}^+$ 离子和  $\text{Cl}^-$ 离子的径向分布

Fig. 5 The radial distribution of  $\text{Na}^+$  and  $\text{Cl}^-$  ions in bulk water

表 2 第一、第二水化壳层在体相水、 $\text{qTPC}_{60}$ 内部的配位数以及相应脱水数目

Table 2 Coordination numbers in the 1st and 2nd hydration shells and reduced numbers

	Bulk $N$	$\text{qTPC}_{60}$ $N$	reduced number $N_r$
Nc1	5.6	2.0	3.6
Nc2	17.1	3.2	13.9

离子脱水通常被认为是离子穿孔运输的能量势垒的来源。此外, 水合  $\text{Cl}^-$ 离子比  $\text{Na}^+$ 离子穿孔时刻会失去更多水合水分子, 这导致  $\text{Cl}^-$ 离子具有更高的能垒。 $\text{Na}^+$ 离子、 $\text{Cl}^-$ 离子与水分子相比, 在穿膜运输过程中需要额外的能量剥离水化壳层内部水分子实现脱水, 增加了  $\text{Na}^+$ 离子和  $\text{Cl}^-$ 离子穿孔运输的难度。

针对水分子的穿孔过程, 我们计算了系统内部水分子在穿孔过程中的相互作用能 (interaction energy) 随距离  $\text{qTPC}_{60}$ 高度  $Z$  的变化, 如图 6 所示。对于水分子来讲, 在距离富勒烯薄膜较远处, 水分子与薄膜之间无作用力。随着距离的减小, 二者之间的相互作用表现为强的吸引, 并逐渐增大; 当水分子进一步到达孔隙中心时, 相互作用引力迅速减小, 此时水分子只要跨越一个大约为  $0.1 \text{ eV}$  的能量势垒就能实现水分子跨膜传输。这也解释了  $\text{qTPC}_{60}$ 对盐离子和水分子筛选性差异的原因。

### 2.3 低维碳纳米通道中受限水结构对脱盐性能的影响机理分析

水分子通过孔隙时的结构直接影响膜的水通量和盐排斥率。从图 3(a)可知, 水分子在通过  $\text{qTPC}_{60}$ 时表现为单链运输状态, 这与已知碳纳米管 (carbon nanotube, CNT) (6,6) 水运输结构相似, 如图 7 所示。我们知道, 碳纳米管的快速水运输在于内部水分子彼此以氢键相连接, 形成单链结构快速自发通过管道<sup>[29-30]</sup>。为此, 我们比较了低维碳纳米材料常见类型的不同膜结构通道, CNT(6,6) 以及对应管径大小的单层纳米多孔石墨

烯(nanopore graphene, NPG)薄膜.

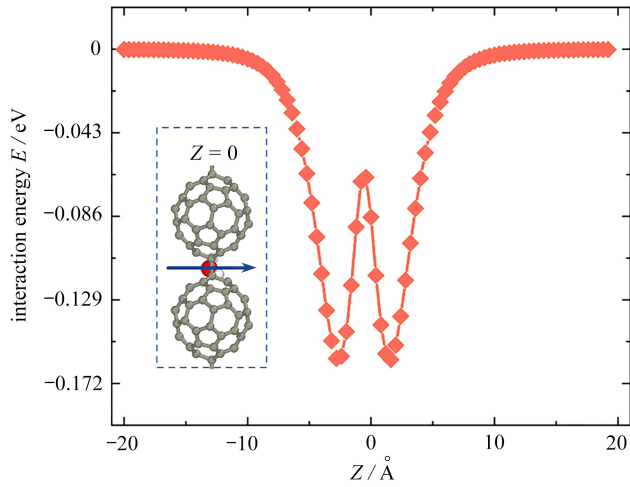
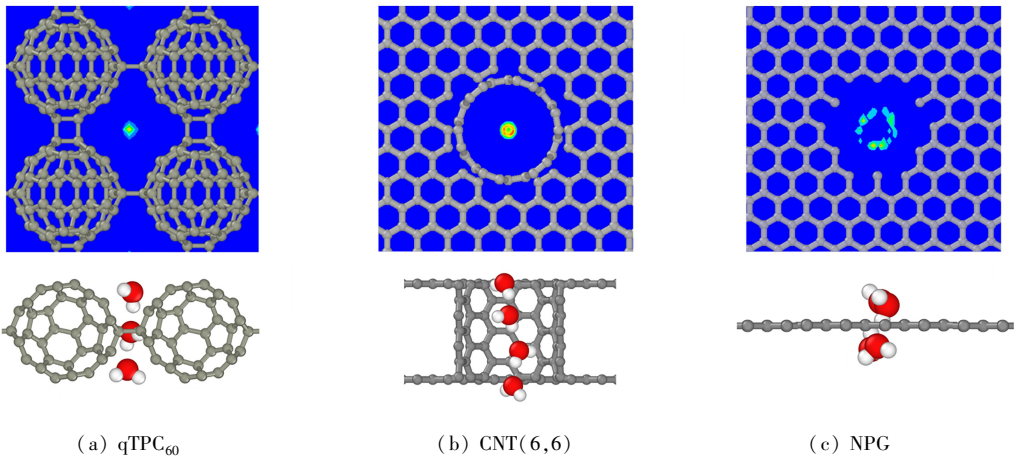


图6 水分子在不同位置与qTPC<sub>60</sub>的相互作用能

Fig. 6 The interaction energy of water molecules with qTPC<sub>60</sub> at different locations



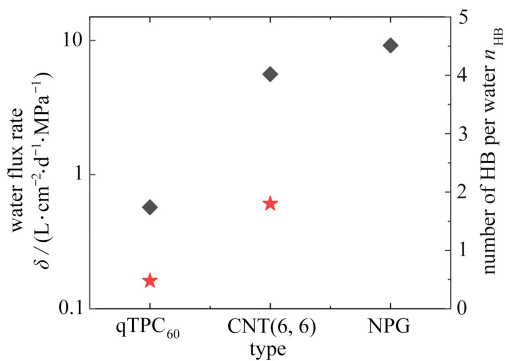
(a) qTPC<sub>60</sub>

(b) CNT(6,6)

(c) NPG

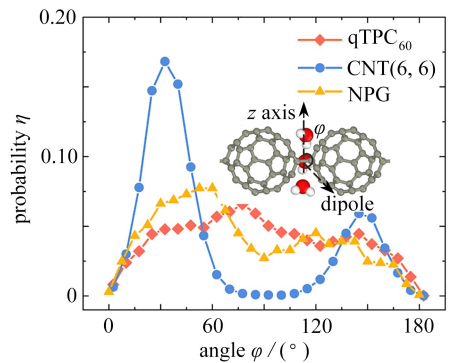
图7 qTPC<sub>60</sub>与CNT(6,6)、NPG内部密度云图以及水输运示意图

Fig. 7 Oxygen density contours and water transport of qTPC<sub>60</sub>, CNT(6,6) and NPG



(a) 水分子穿孔通量以及氢键个数

(a) The water flux rate and the number of hydrogen bonds (HB)



(b) 通道内部水分子偶极取向的概率分布

(b) The probability distribution of the dipole orientation of water molecules inside the channel

图8 qTPC<sub>60</sub>、CNT(6,6)及NPG对比

Fig. 8 The qTPC<sub>60</sub>, CNT(6,6) and NPG comparison

为了更直观地对比 3 种不同类型的通道内水的输运,我们计算了  $q\text{TPC}_{60}$ 、CNT 和 NPG 通道的水通量以及通道内部形成的氢键(hydrogen bond, HB)数目.定义当两个氧原子距离小于  $3.5 \text{ \AA}$ ,且  $\angle\text{OHO}$  大于  $120^\circ$  时,形成氢键<sup>[31]</sup>,如图 8(a)所示.定义  $\varphi$  为水偶极子与  $z$  轴正方向之间的夹角,如图 8(b)插图所示.计算表明,NPG 的水透过率优于 CNT(6,6),而 CNT(6,6)的水透过率高于  $q\text{TPC}_{60}$ .这也与 Suk 等<sup>[32]</sup>描述的一致,当孔径大于  $8 \text{ \AA}$  时,NPG 可以作为更高效的水输运载体,显著增加水流速率.但 NPG 通道内部氢键形式断裂频繁,没有特定氢键结构. $q\text{TPC}_{60}$ 与 CNT 相比,由于  $q\text{TPC}_{60}$ 内部水分子穿孔时没有形成牢固可靠的氢键形式.从图 8(b)水分子偶极取向的概率分布图中也可以看出: $q\text{TPC}_{60}$ 、NPG 内部的水分子没有特定的偶极取向偏好,也就是更趋于无序分布.而在 CNT(6,6)内部水链取向在  $30^\circ$ 与  $150^\circ$ 左右出现明显峰值,展示出高度有序的链状结构分布. $q\text{TPC}_{60}$ 内部水链构型不如 CNT 内部构型稳定.虽然在 100%阻盐率的情况下, $q\text{TPC}_{60}$ 的水透过率不如 CNT(6,6)和 NPG,但  $q\text{TPC}_{60}$ 结构自身具有均匀分布的孔道且孔径尺寸均一,可以规避对石墨烯进行后续处理加工问题,极大地降低了实验操作难度及工作量.

### 3 结 论

分子动力学模拟表明,二维富勒烯薄膜具有优异的海水淡化潜力.在两种不同的晶格结构中,对于小孔径的  $q\text{HPC}_{60}$ ,由于尺寸效应的影响,无法进行物质输运; $q\text{TPC}_{60}$ 具有足够的电子密度间隙来筛分离子以及高密度的选择性孔隙,展现出强烈的离子筛分特性.在分子动力学模拟过程中, $\text{Na}^+$ 离子、 $\text{Cl}^-$ 离子无法自发进入狭窄的  $q\text{TPC}_{60}$ 通道.这是由于输入能量的不足,使得  $\text{Na}^+$ 离子和  $\text{Cl}^-$ 离子无法从水化壳层中剥离大量的水分子进入高度受限的通道,表征了盐离子穿孔的能量势垒主要来源于离子脱水.最后,本文通过对比常见低维碳纳米通道水结构与孔隙结构的差异得出,具有特定偶极取向的水结构可以促进通道内部氢键的形成, $q\text{TPC}_{60}$ 中没有形成有序的链状结构以及氢键网络结构. $q\text{TPC}_{60}$ 在保持 100%阻盐率的同时,具有比商业反渗透膜的透水率高出数量级的优势.此外, $q\text{TPC}_{60}$ 本身所具有的天然均匀分布孔隙,可为新一代海水淡化膜的应用提供了新的可能性.

### 参考文献(References):

- [1] ANDREEVA D V, TRUSHIN M, NIKITINA A. Two-dimensional adaptive membranes with programmable water and ionic channels[J]. *Nature Nanotechnology*, 2021, **16**(2): 174-180.
- [2] WERBER J R, OSUJI C O, ELIMELECH M. Materials for next-generation desalination and water purification membranes[J]. *Nature Reviews Materials*, 2016, **1**(5): 16018.
- [3] ELIMELECH M, PHILLIP W A. The future of seawater desalination: energy, technology, and the environment [J]. *Science*, 2011, **333**(6034): 712-717.
- [4] GEISE G M, PARK H B, SAGLE A C. Water permeability and water/salt selectivity tradeoff in polymers for desalination[J]. *Journal of Membrane Science*, 2011, **369**(1/2): 130-138.
- [5] CORRY B. Water and ion transport through functionalised carbon nanotubes: implications for desalination technology[J]. *Energy Environment Science*, 2011, **4**(3): 751-759.
- [6] SURWADE S P, SMIRNOV S N, VLASSIOUK I V. Graphynes for water desalination and gas separation[J]. *Nature Nanotechnology*, 2015, **10**(5): 459-464.
- [7] QIU H, XUE M M, SHEN C. Graphynes for water desalination and gas separation[J]. *Advanced Materials*, 2019, **31**(42): e1803772.
- [8] YANG Y B, YANG X D, LIANG L. Large-area graphene-nanomesh/carbon-nanotube hybrid membranes for ionic and molecular nanofiltration[J]. *Science*, 2019, **364**(6445): 1057.
- [9] O'HERN S C, BOUTILLIER M S H, IDROBO J C. Selective ionic transport through tunable subnanometer pores in single-layer graphene membranes[J]. *Nano Letter*, 2014, **14**(3): 1234-1241.
- [10] COHEN-TANUGI D, GROSSMAN J C. Water desalination across nanoporous graphene [J]. *Nano Letter*, 2012, **12**(7): 3602-3608.
- [11] KONATHAM D, YU J, HO T A, et al. Simulation insights for graphene-based water desalination membranes



- [J]. *Langmuir*, 2013, **29**(38): 11884-11897.
- [12] SINT K, WANG B Y, KRAL P. Selective ion passage through functionalized graphene nanopores[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2008, **130**(49): 16448-16449.
- [13] FENG J D, GRAF M, LIU K. Single-layer MoS<sub>2</sub> nanopores as nanopower generators[J]. *Nature*, 2016, **536**(7615): 197-200.
- [14] CAO Z L, LIU V, FARIMANI A B. Water desalination with two-dimensional metal-organic framework membranes[J]. *Nano Letter*, 2019, **19**(12): 8638-8643.
- [15] HOU L, CUI X, GUAN B, et al. Synthesis of a monolayer fullerene network[J]. *Nature*, 2022, **606**(7914): 507-510.
- [16] PENG B. Monolayer fullerene networks as photocatalysts for overall water splitting[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2022, **144**(43): 19921-19931.
- [17] PENG B. Stability and strength of monolayer polymeric C<sub>60</sub>[J]. *Nano Letter*, 2023, **23**(2): 652-658.
- [18] YU L F, XU J Y, PENG B, et al. Anisotropic optical, mechanical, and thermoelectric properties of two-dimensional fullerene networks[J]. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 2022, **13**(50): 11622-11629.
- [19] YING P H, DONG H K, LIANG T, et al. Atomistic insights into the mechanical anisotropy and fragility of monolayer fullerene networks using quantum mechanical calculations and machine-learning molecular dynamics simulations[J]. *Extreme Mechanics Letters*, 2023, **58**: 101929.
- [20] KAYAL A, CHANDRA A. Exploring the structure and dynamics of nano-confined water molecules using molecular dynamics simulations[J]. *Molecular Simulation*, 2015, **41**(5/6): 463-470.
- [21] SHAO Q, ZHOU J, LU L, et al. Anomalous hydration shell order of Na<sup>+</sup> and K<sup>+</sup> inside carbon nanotubes[J]. *Nano Letter*, 2009, **9**(3): 989-994.
- [22] ZHANG X, WEI M, XU F, et al. Pressure-dependent ion rejection in nanopores[J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2020, **124**(37): 20498-20505.
- [23] ZHU F Q, TAJKHORSHID E, SCHULTEN K. Pressure-induced water transport in membrane channels studied by molecular dynamics[J]. *Biophysical Journal*, 2002, **83**(1): 154-160.
- [24] 齐进, 吴锤结. 可压缩 Navier-Stokes 方程的时空耦合优化低维动力系统建模方法[J]. *应用数学和力学*, 2022, **43**(10): 1053-1085. (QI Jin, WU Chuijie. Construction of spatiotemporal-coupling optimal low-dimensional dynamical systems for compressible Navier-Stokes equations[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2022, **43**(10): 1053-1085. (in Chinese))
- [25] LI L X, DONG J H, NENOFF T M. Desalination by reverse osmosis using MFI zeolite membranes[J]. *Journal of Membrane Science*, 2004, **243**(1/2): 401-404.
- [26] COHEN-TANUGI D, GROSSMAN J C. Water permeability of nanoporous graphene at realistic pressures for reverse osmosis desalination[J]. *Journal of Chemical Physics*, 2014, **141**(7): 074704.
- [27] GUILLEN G, HOEK E M. Modeling the impacts of feed spacer geometry on reverse osmosis and nanofiltration processes[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2009, **149**(1/3): 221.
- [28] HEIRANIAN M, FARIMANI A B, ALURU N R. Water desalination with a single-layer MoS<sub>2</sub> nanopore[J]. *Nature Communications*, 2015, **6**: 8616.
- [29] HUMMER G, RASALAH J C, NOWORYTA J P. Water conduction through the hydrophobic channel of a carbon nanotube[J]. *Nature*, 2001, **414**(6860): 188-190.
- [30] 曹玉玲, 何强胜, 刘闯. 考虑页岩塑性变形的水力裂缝与天然裂缝相交模拟研究[J]. *应用数学和力学*, 2023, **44**(6): 679-693. (CAO Yuling, HE Qiangsheng, LIU Chuang. Numerical simulation of hydraulic fractures intersecting natural fractures in shale with plastic deformation[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2023, **44**(6): 679-693. (in Chinese))
- [31] HE Z J, ZHOU J, LU X, et al. Ice-like water structure in carbon nanotube(8,8) induces cationic hydration enhancement[J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2013, **117**(21): 11412-11420.
- [32] SUK M E, ALURU N R. Water transport through ultrathin graphene[J]. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 2010, **1**(10): 1590-1594.