



### Weekly Seminar

#### 碳基芳香环-离子-水：基于石墨烯膜的离子筛分、非正常化学配比的 $\text{Na}_2\text{Cl}/\text{Na}_3\text{Cl}$ 晶体和疏水的芳香环在离子溶液中的亲水性

## 方海平教授

中国科学院上海高等研究院



**Time: 4: 00 Pm, Nov. 20, 2019 (Wednesday)**

**时间: 2019年11月20日 (周三) 下午4:00**

**Venue: Room W563, Physics building, Peking University**

**地点: 北京大学物理楼, 西563会议室**

### Abstract

自然界中水绝大部分以盐溶液的形式存在。芳香环结构（以碳原子为主体的环状结构，例如苯环）广泛的存在于碳基材料和生物分子中，如石墨烯、碳纳米管、富勒烯、芳香环氨基酸、DNA和RNA等。上世纪八十年代，人们发现富含 $\pi$ 电子的芳香环与离子之间有强的非共价键作用（离子- $\pi$ 作用）。由于离子与水之间存在水合作用，这样的竞争导致水溶液中的离子- $\pi$ 作用被大幅度减弱，从而在水溶液中的离子与芳香环的作用一直被忽视。我们认为，如果考虑到多芳香环效应和溶液中的多离子效应，水合离子- $\pi$ 作用会有质的提升。在这个报告中，将介绍我们在过去十几年中的相关进展，包括通过考虑热扰动导致的有序获得的奇异二维晶体：(1) 我们提出大量水合离子与碳纳米管上的芳香环之间的水合离子- $\pi$ 作用导致经常有离子被吸附在碳纳米管口，从而基本阻塞碳纳米管[1, 2]。(2) 我们提出并从实验上实现了用水合离子精确控制石墨烯膜的层间距，并展示了其出色的离子筛分性能[3]。(3) 我们预言在石墨和石墨烯表面会吸附一层具有反常化学计量比的二维离子晶体，我们称之为“反晶”[4]。(4) 我们发现对芳香环氨基酸和短肽，离子的存在提高了这些氨基酸和短肽中疏水芳香环与水分子之间的亲合力[5]，可能会导致一些蛋白折叠MD模拟的力场参数的修改。

[1] Liu et al., **Phys. Rev. Lett.** 115, 164502 (2015).

[2] Wang et. al., **Phys. Rev. Lett.** 121, 226102(2018).

[3] Chen et al., **Nature** 550, 380 (2017).

[4] Shi et al., **Nature Chem.** 10,776(2018)

[5] Shi et al., **Phys. Rev. Lett.** 117, 238102(2016)

### About the speaker

方海平，1985、1988山东大学物理系学士、硕士。1994中国科学院理论物理研究所博士。1994-2002复旦大学物理系博士后、讲师、副教授，其中1997-1998香港科技大学访问学者，2000-2001美国John Hopkins大学访问副教授。2002年至今，任中国科学院上海应用物理研究所研究员（2018年转上海高等研究院），中国科学院研究生院教授，博士生导师。目前为水科学和理论物理室主任。

长期从事从宏观到微纳米尺度的理论物理和其他领域的交叉学科研究。近年来主要侧重于界面水、纳米生物学和理论物理学的交叉研究，特别是受限尺度空间中水和离子的特性、及其诱导的生物分子特性和新材料开发等。这些研究将为海水淡化、污水处理、各种离子分离等技术，相关的药物、具有新颖光电磁性质的材料等的设计和实现等提供帮助。系列工作以通信作者发表在Nature、Nat. Nanotechnol、Nat. Chem.、PNAS、PRL、**Energy Environ. Sci.**、**JACS**等国际权威杂志上。被New Scientist、Chemical World、Nat. Nanotechnol.、Nat. Mater.、Nature Reviews Chemistry、Nature Chemistry等国际著名期刊报道。获中国科学院百人计划、国家杰出青年基金。