

基于光响应主客体相互作用及pH调控的“即插即用”纳流二极管

Pei Liu,¹ Pei Li,² Congcong Zhu,¹ Xiang-Yu Kong¹

1. 仿生智能材料与界面科学实验室, 中科院理化所, 北京, 北京

2. 化学学院, 北京航空航天大学, 北京, 北京

简介: 基于光响应主客体相互作用, 构建了光和pH调控的纳流二极管。实验条件下, 在不同光照条件下, 实现纳流二极管的功能化, 从而实现离子输运调控。利用 COMSOL Multiphysics 软件进行建模, 并利用软件中的“Electrostatics (Poisson equation)”和“Nernst-Planck without Electroneutrality”模块 (AC/DC模块) 进行建模仿真模拟, 得到稳态下的离子浓度分布, 通过积分得到通过界面的电流, 实现对实验结果的验证及解释。

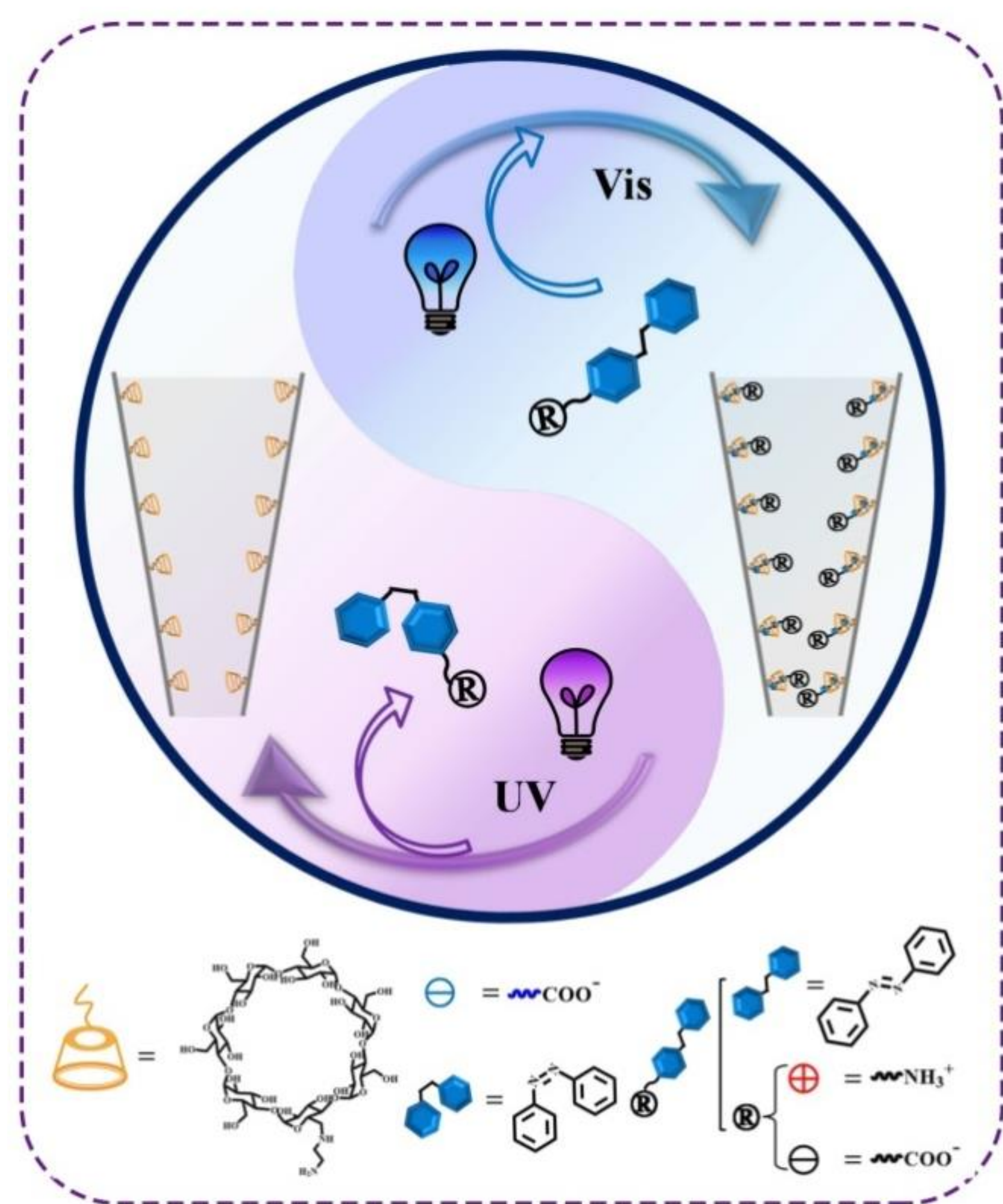


图 1. “即插即用”纳流二极管的工作原理。其中功能分子在不同光照条件下通过主客体相互作用实现纳米通道的功能化。

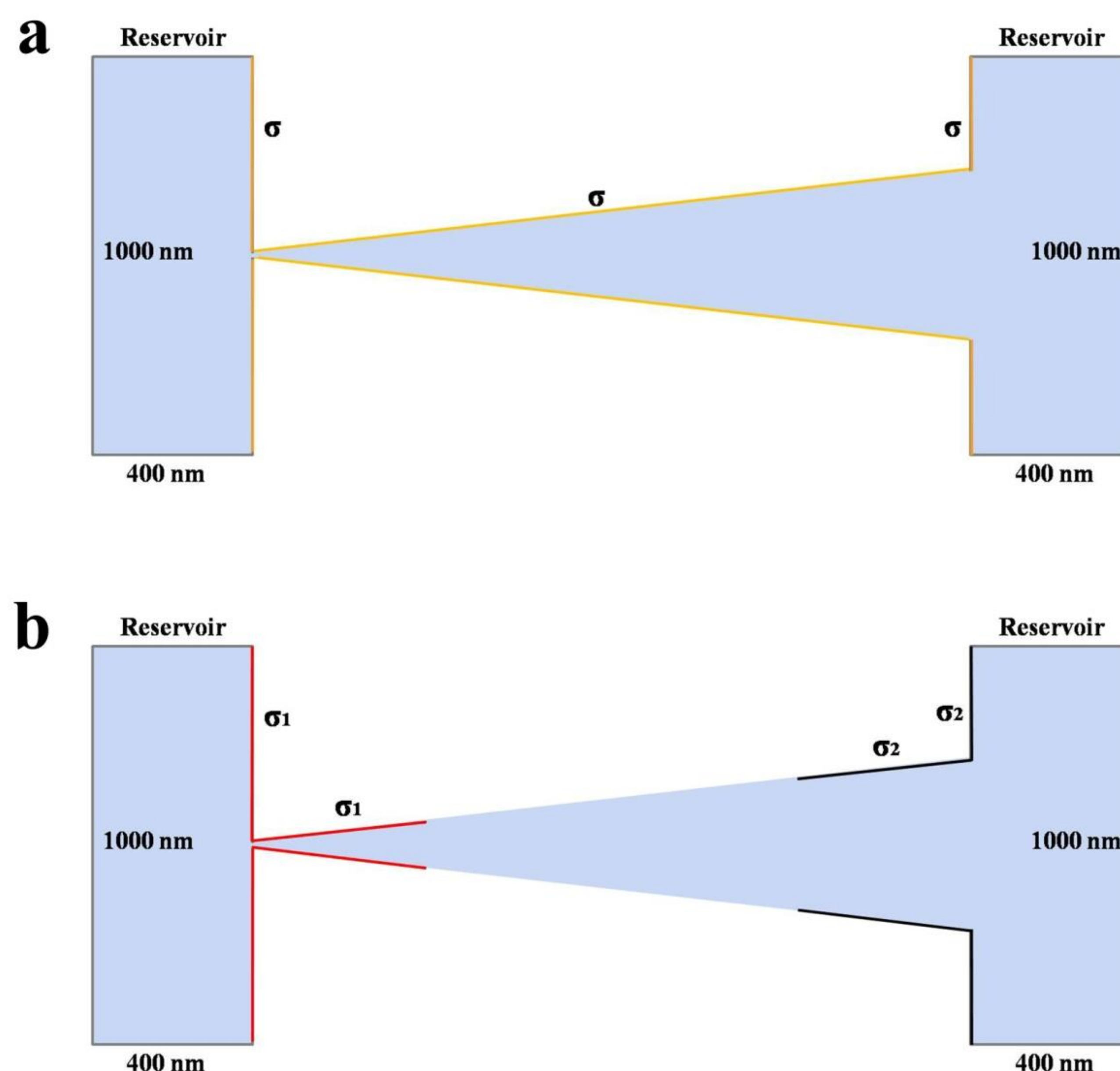


图 3. 纳流二极管的仿真建模。a). 对称性功能化系统; b)非对称性功能化系统

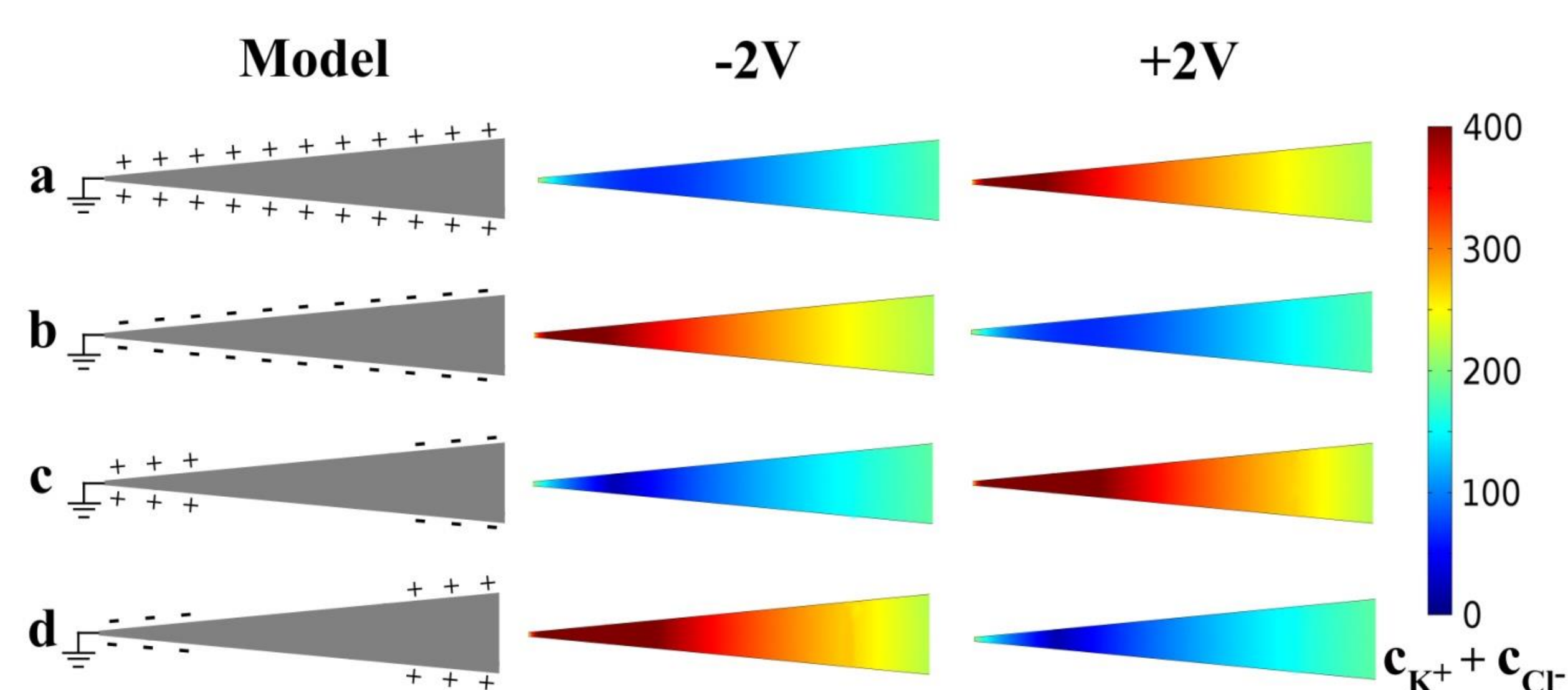


图 4. 理论模拟稳态下, 系统不同状态的离子分布情况。

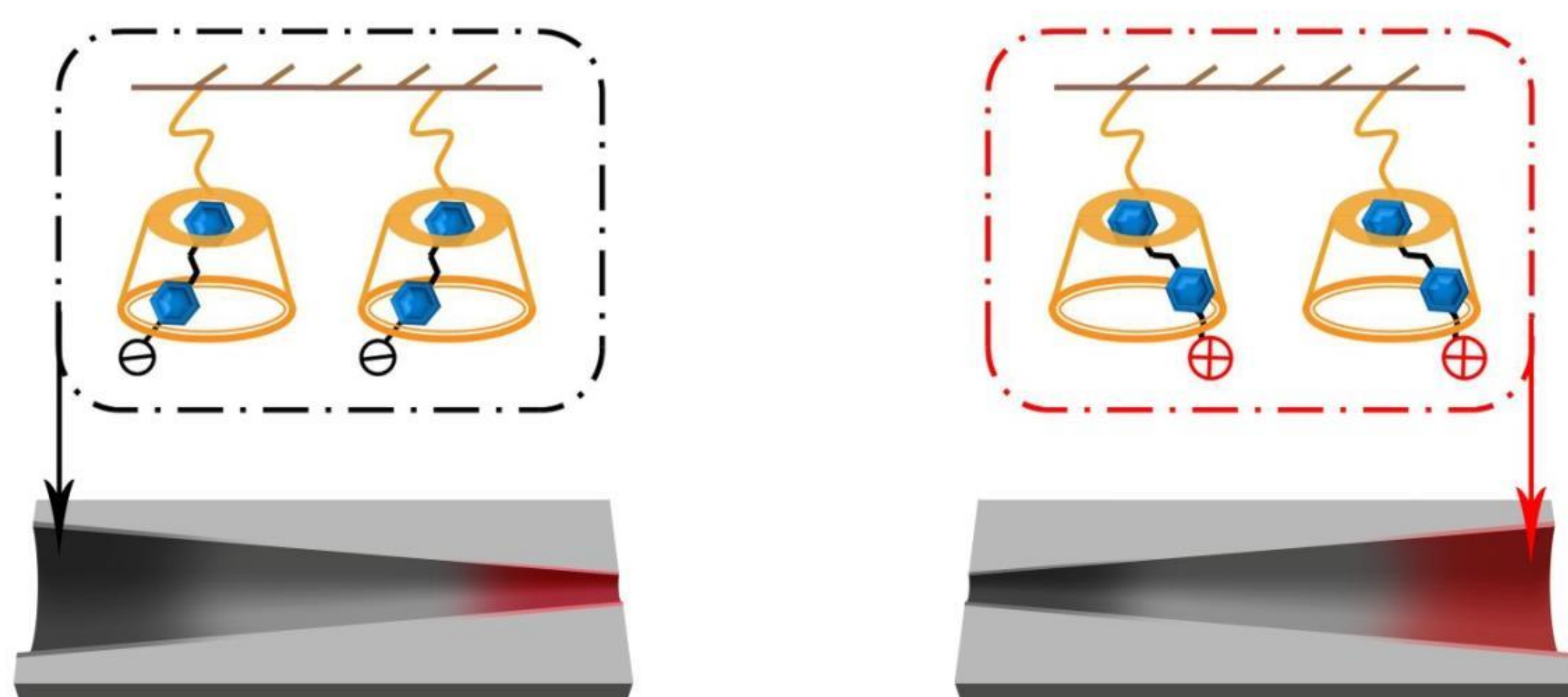


图 2. 功能化纳流二极管。通过分子间主客体相互作用, 实现纳米通道的非对称功能化。

结论: 通过 COMSOL 理论计算, 展示了所构建系统的离子输运特性。在非对称结构与非对称电荷分布条件下, 能够获得更强的离子整流特性, 也印证了该系统的“即插即用”特性。该系统提供了一种纳流二极管体系的设计思路, 并有望应用于光响应药物释放及纳流逻辑器件研究。