



环境工程学科基础研究领域亮点成果系列专稿

同济大学王志伟教授团队在聚酰胺膜去除小分子污染物机制及调控策略研究取得进展

WANG Zhiwei's research group at Tongji University, presents advances in mechanisms and regulation strategies for the removal of small molecule contaminants by polyamide membranes

废水深度处理与资源化是我国工业企业在“双碳”背景下实现绿色低碳转型与可持续发展的重要途径。膜分离技术具有分离效率高、过程无相变、易于自动化控制等优点，在工业废水深度处理与资源化领域得到广泛关注。然而，膜仍存在小分子特征污染物去除效果不佳的问题，制约了膜分离技术在工业废水深度处理中的推广应用。其本质原因是小分子特征污染物在膜截留层纳米孔道中的传质机制与盐类截然不同，唐南效应、介电排斥、孔径筛分、亲疏水等作用机制耦合交互。目前，依据传统盐类截留机制进行膜结构调控难以实现小分子污染物的高效去除，制约了小分子污染物去除效率。同济大学王志伟教授团队针对小分子污染物在膜聚酰胺层纳米孔道中的多元机制交互传质过程开展了系列研究，并在聚酰胺膜去除小分子污染物机制及调控策略研究取得重要进展。

传统实验方法难以有效解耦小分子污染物在聚酰胺膜纳米孔道中的复杂多元交互机制。团队通过耦合膜传质数学模型与梯度提升机器学习方法，开发了数据-知识共驱动机器学习模型(图 1)，探明了先验知识嵌入后模型对聚酰胺膜去除小分子污染物机制的预测性能，基于 SHAP 方法识别了不同类别的小分子污染物截留过程中的主导，定量比较了纳滤和反渗透膜截留机制的贡献，发现孔径筛分在纳滤、反渗透去除小分子污染物过程中均发挥主导作用(贡献率大于 60%)，纳滤过程中的电荷效应和亲疏水作用机制占比高于反渗过程。相关数据-知识共驱动机器学习方法，为环境领域微观多元交互机制解析提供了新思路。

为深入解析聚酰胺膜中孔径筛分作用的过程机制，团队探究了水合离子在纳滤亚纳米孔道中的传质分离特性，探明了阴阳离子限域耦合传质规律，明晰了高能垒离子主导跨膜传质过程的关键机理，提出了亚纳米膜孔内离子脱水诱导尺寸排阻的新机制，在此基础上通过膜孔与电荷的定向调节实现了亚埃级精度的离子选择性分离，一价离子分离因子相比商业纳滤膜提升 3 倍以上；同时在经典纳滤膜 DSPM-DE 模型的基础上拓展了介电效应机制，揭示了水合离子“可压缩度”是影响离子跨膜传质过程的重要因子，从热力学角度阐明了水合离子限域传质过程中的熵、焓驱动特性，发现了离子-膜官能团相互作用在提升离子熵驱动选择性过程中的重要作用，完善了纳滤分离传质理论，为开发高选择性纳滤膜材料提供了理论支撑。

受以上机制启发，团队提出了强化聚酰胺膜孔径筛分作用的纳米乳液介导界面聚合反应方法(NERIP)，基于纳米乳液辅助单体跨界面穿梭机制，在聚酰胺层表面形成纳米环形山结构，大幅增加聚酰胺层的比表面积与空腔含量，诱导形成超薄、高度交联、孔径更均匀的聚酰胺层。相较于传统纳滤膜，NERIP 纳滤膜的水渗透率提高 200% 以上 ($36.8 \pm 1.9 \text{ L m}^{-2} \text{ h}^{-1} \text{ bar}^{-1}$)，显著提升了小分子中性疏水微污染物的截留率(对双酚 A、羟苯甲酯、羟苯丙酯、黄体酮截留率均大于 96%)。进一步提出了基于两性亲水纳米片的界面聚合反应传质传热同步调控方法(MARIP, 图 2)，通过反应单体预富集、界面纳米气泡释放增强以及反应热传递方向限制，研发了具有高比表面积、高交联度的新型聚酰胺反渗透膜(MARIP 膜)。MARIP 膜对中性小分子污染物(如 NDMA) 的去除率大于 90% (传统反渗透膜为 30%~80%)。

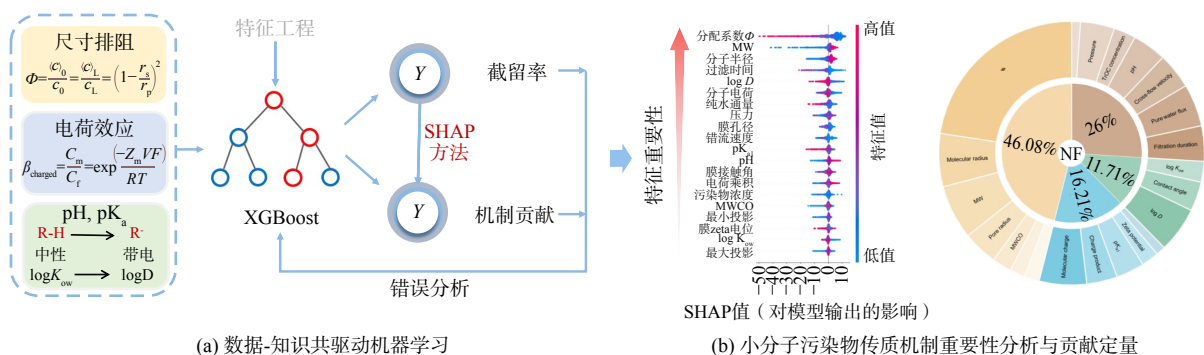


图1 人工智能辅助聚酰胺膜去除小分子污染物机制解析示意图

Fig. 1 Schematic of AI-assisted mechanism analysis for the removal of small molecule contaminants by polyamide membranes

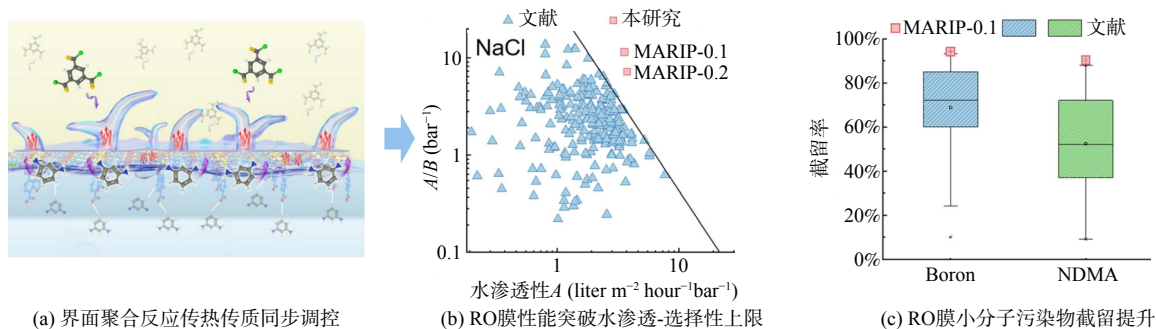


图2 聚酰胺膜传热传质调控强化小分子污染物去除策略示意图

Fig. 2 Schematic of thermal and mass transfer regulation for enhancing the removal of small molecule contaminants by polyamide membranes

上述研究得到了国家自然科学基金(批准号: 51925806, 51838009)的资助。相关成果发表于 Nature Water, 2023, 1(3): 281-290; Science Advances, 2022, 8(10): eabm4149; Environmental Science & Technology, 2024, 58(13): 5878-5888 等期刊。

(责任编辑: 金曙光)

供稿单位: 国家自然科学基金委员会工程与材料科学部工程科学三处。



王志伟, 同济大学教授、博士生导师, 同济大学环境科学与工程学院院长, 国家杰出青年科学基金获得者。入选国际水协会会员(IWA Fellow), 担任中国环境科学学会常务理事、IWA膜技术专家委员会秘书长、中国环境科学学会水处理与回用专委会副主任委员等。

主要从事污水处理与资源化研究工作, 近年来主持了国家重点研发项目、国家杰出青年基金、国家自然科学基金重点项目等, 深入开展了膜法污水处理与资源化理论探索、技术创新与工程应用, 构建了膜法污水处理与资源化能源化的方法、材料、反应器及工艺技术, 所研发技术在多座污水处理工程中获得成功应用。在 Nature Water, Science Advances, Environmental Science & Technology, Water Research 等期刊发表论文 200 余篇, Google Scholar 引用 20500 余次(H-index = 80); 出版专著 3 部; 编制国家标准、团体标准 5 项; 授权国家/国际发明专利 60 余件; 以第一完成人获教育部科技进步奖一等奖、华夏建设科学技术奖一等奖、日内瓦国际发明展金奖等奖励。