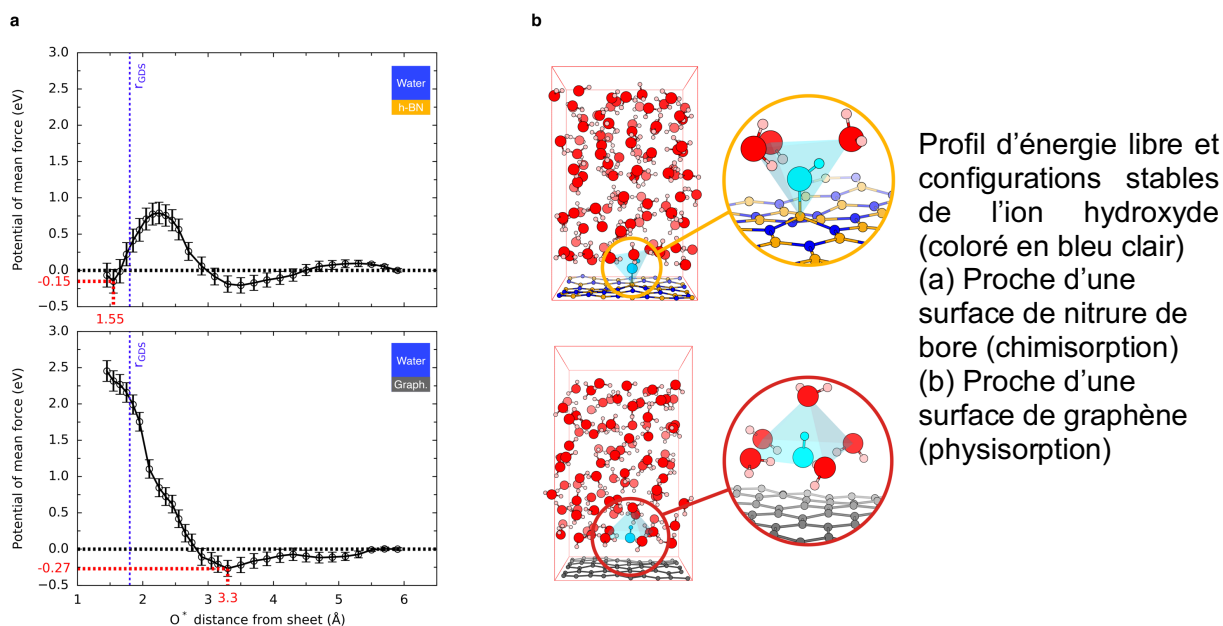


## Graphène et Bore-Azote hexagonal : des faux-jumeaux innovants pour produire l'énergie bleue !

Les nanomatériaux à base de carbone ou de nitrure de bore ont la réputation d'être inertes chimiquement. Pourtant des études récentes sur des matériaux bidimensionnels de nitrure de bore ou de carbone (type graphène) montrent que c'est loin d'être le cas. En particulier des mesures expérimentales de transport ionique de solutions salines et alcalines à travers des nanotubes mettent en évidence une conduction ionique exaltée, liée à une électrification gigantesque de leurs surfaces et restée inconnue jusqu'ici.

B. Grosjean, PhD SU, M.-L. Bocquet, DR CNRS et R. Vuilleumier, PR SU au sein du pôle de Chimie Théorique du département de chimie de l'ENS (UMR 8640 PASTEUR – ENS/CNRS/SU) ont élucidé le mécanisme qui confère ces propriétés électriques exceptionnelles au graphène et à son homologue à base de nitrure de bore. À partir de simulations de dynamique moléculaire *ab initio* en solvant explicite, ils montrent que les surfaces de ces matériaux se chargent considérablement via une adsorption des ions hydroxyde OH<sup>-</sup>. En particulier le mécanisme d'adsorption est radicalement différent entre ces matériaux jumeaux : l'ion hydroxyde présente une faible physisorption à la surface du graphène, mais une forte chimisorption à la surface du nitrure de bore. De manière surprenante, l'hydroxyde physisorbé sur le graphène conserve une excellente mobilité latérale par transfert de protons avec les molécules de la première couche d'eau. Et cette mobilité de la charge de surface est le paramètre clé pour prédire quantitativement les valeurs de conductance à faible concentration de sel.



La réactivité interfaciale exceptionnelle mise en évidence dans cette étude permet de comprendre l'intérêt de ces matériaux pour la production d'énergie bleue et le dessalement de l'eau.

---

## **Source :**

### **Versatile Electrification of Two-dimensional Nanomaterials in Water**

Benoît Grosjean<sup>1</sup>, Marie-Laure Bocquet<sup>1</sup>, and Rodolphe Vuilleumier<sup>1</sup>

<sup>1</sup>PASTEUR, Département de chimie, École normale supérieure, PSL University, Sorbonne Université, CNRS, 24 Rue Lhomond, 75005 Paris, France

*Nature Communications* **10**, 1656 (2019)

DOI: 10.1038/s41467-019-09708-7

---

## **Contact Chercheur :**

Marie-Laure BOCQUET, DR CNRS  
UMR 8640 PASTEUR (ENS/CNRS/SU)  
[marie-laure.bocquet@ens.fr](mailto:marie-laure.bocquet@ens.fr)

Rodolphe VUILLEUMIER, PR SU  
UMR 8640 PASTEUR (ENS/CNRS/SU)  
[rodolphe.vuilleumier@ens.fr](mailto:rodolphe.vuilleumier@ens.fr)

---

## **Contact Communication Chimie :**

Nicolas LEVY, Responsable Communication Chimie,  
Département Chimie ENS ([www.chimie.ens.fr](http://www.chimie.ens.fr))  
[nicolas.levy@ens.fr](mailto:nicolas.levy@ens.fr)