Au_n(*n*=2–9)团簇与乙醇分子相互作用的第一性原理研究

于永江* 王华阳 杨传路 陈建农

(鲁东大学物理学院, 山东 烟台 264025)

摘要: 利用密度泛函理论研究了 Au_n(*n*=2–9)团簇吸附一个乙醇分子的结构和电子性质. 研究表明: Au_n(*n*=2–9)团簇的最稳定构型为二维平面结构, Au₆团簇最稳定; 吸附过程是通过金团簇上一个特定的金原子与乙醇分子中氧原子相互作用完成, 形成了 20 种稳定构型; 金原子的配位数对吸附作用影响明显; 作为吸附主体的金团簇和被吸附的乙醇分子在吸附前后构型无明显变化, 它们之间为弱相互作用.

关键词: 金团簇; 乙醇分子; 密度泛函理论

中图分类号: O641; O647

First-Principles Investigation on the Interaction of Au_n(*n*=2–9) Clusters with Ethanol

YU Yong-Jiang* WANG Hua-Yang YANG Chuan-Lu CHEN Jian-Nong

(School of Physics, Ludong University, Yantai 264025, Shandong Province, P. R. China)

Abstract: The adsorption property of a single ethanol molecule on Au_n(*n*=2–9) clusters was investigated using density functional theory. The results show that the most stable structure of the Au_n(*n*=2–9) clusters is a two-dimensional plane structure. Among all the Au_n(*n*=2–9) clusters, the Au₆ cluster is the most stable. The adsorption is achieved by an interaction between a specific Au atom in the Au_n(*n*=2–9) clusters and an oxygen atom in ethanol resulting in the formation of 20 stable structures. The adsorption is strongly influenced by the coordination number of the Au atoms. The structures of Au_n clusters as the main adsorbing body and ethanol molecule change slightly in the process, which reveals that the interaction between the Au_n clusters and the ethanol molecules is a weak interaction.

Key Words: Au cluster; Ethanol molecule; Density functional theory

1 引言

金团簇由于其独特的物理和化学性质, 近年来引起人们的极大兴趣, 纳米尺度的金团簇及其化合物已被广泛地应用于催化反应、材料吸附和光的吸收中.^{1–3} 实验上对金团簇的研究主要集中在离子团簇上, 通过测定其迁移速率⁴和光电子能谱⁵获得有关的结构信息. 由于实验条件和测量技术的限制,

对中性金团簇的实验研究比较困难, 人们对其结构和性能的认识主要依赖理论研究. 分子和金的纳米微粒形成配合物的光学、电子和催化性质以及分子被吸附在金团簇或金的表面相互作用的实验和理论研究已见一系列报导.^{6–11} Geoffrey 等¹²结合红外光解离技术研究了小的金团簇和乙醇分子的相互作用, 发现了乙醇分子吸附态和气态的振动频率变

Received: November 16, 2010; Revised: January 6, 2011; Published on Web: March 1, 2011.

* Corresponding author. Email: ldyuyongjiang@yahoo.com.cn; Tel: +86-535-6672730.

The project was supported by the Natural Science Foundation of Shandong Province, China (Z2008A02) and Precision Instruments Upgrading Project Fund of Shandong Province, China (2010GJC20808-16).

山东省自然科学基金(Z2008A02)和山东省大型科学仪器设备升级改造技术研究项目(2010GJC20808-16)资助

© Editorial office of *Acta Physico-Chimica Sinica*

化. Dan 等¹³实验研究了金-钼催化醇生成醛, 转换频率极高, 显示出良好的工业应用前景. 吸附乙醇是催化过程至关重要的第一步, 本文采用密度泛函理论(DFT)方法研究小的 $\text{Au}_n(n=2-9)$ 团簇对一个乙醇分子的吸附作用, 以期从理论上对金团簇与乙醇的相互作用提供更丰富的信息.

2 计算方法

2.1 构型选取

在量子化学计算方法的发展过程中, 对中性金团簇及其离子的理论研究主要采用半经验紧束缚势、密度泛函方法和 Hartree-Fock 等方法,^{14,15} 不同方法以及相同方法选取不同的基组对结果都有一定的影响. Häkkinen 和 Landman¹⁶ 早期利用广义梯度近似(GGA)下的密度泛函方法研究了 $\text{Au}_n(n=2-10)$ 团簇结构, 最先发现了直至 Au_7 团簇最稳定构型均为平面结构, Au_8 及以后的团簇采用三维结构. Wang 等¹⁷ 结合 Gupta 紧束缚势和遗传算法搜索了 $\text{Au}_n(n=2-20)$ 团簇势能面, 并在局域密度近似(LDA)下寻找最低能量构型, 发现从 Au_7 开始三维结构更稳定, 其后的计算发现更大尺寸的 Au 团簇仍然偏爱平面结构. Wang 等¹⁸ 在遗传算法和 Gupta 多体势系统地搜索金属团簇初始结构基础上, 应用密度泛函理论和基于 LDA 或 GGA 的超软赝势和投影扩充波(PAW)方法分别系统地研究了金属团簇 $\text{Au}_n(n \leq 20)$ 的最稳定构型和电子性质. 发现 LDA 或 GGA 近似下, 最稳定构型存在一定的差异, LDA 方法中, Au 团簇最稳定构型从 Au_7 处就发生了从二维结构向三维结构的转化, 而 GGA 近似下 Au_{13} 的最稳定异构体仍然保持平面构型. Ajanta 等¹⁹ 采用密度泛函方法研究了 $\text{Au}_n(n=2-13)$ 团簇的结构和电子性质, 发现基态结构

均为平面结构. 韩哲等²⁰ 使用 4 种流行的泛函考查了若干 Au_{10} 团簇结构的稳定性, 认为 Au_{10} 团簇可能是金团簇从二维结构到三维结构演化的一个临界点. 本文考虑平面结构的 $\text{Au}_n(n=2-9)$ 团簇并进行优化计算.

2.2 密度泛函计算

采用分子模拟软件 Materials Studio 中的 DMol³ 模块²¹ 进行了模拟计算. DMol³ 使用原子数值函数作为原子基函数. 数值基组可以正确表示体系的电荷分布, 对电子极化效应进行精确的描述, 我们选用程序内置的带有极化方程的双数值基组(DNP), 金是重元素, 相对论效应明显, 计算中采用全电子相对论选项. DFT 交换相关势函数采用 GGA 的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 函数,²² 避免了 LDA 对原子间键长的低估和对能量的不正确估算. 金团簇没有磁性, 不需考虑电子自旋态选项. 几何优化中选用的收敛标准是: 能量 1.0×10^{-6} hartree (Ha), 力常数 4.5×10^{-3} Ha $\cdot$ nm⁻¹ 和步长 0.0002 nm. 自洽场的收敛标准是电子密度均方根的变化量小于 1×10^{-2} electron $\cdot$ nm⁻³. 为了确保得到的能量构型都是势能面上的极少值, 而不是过渡态或是亚稳态, 我们对所有最低能量构型都作了频率分析, 所有计算结果没有虚频, 确认为稳定结构.

3 结果与讨论

在研究金团簇和乙醇分子的相互作用之前, 首先优化了基态金团簇 $\text{Au}_n(n=2-9)$ 的稳定构型.

3.1 $\text{Au}_n(n=2-9)$ 团簇的稳定构型

图 1 分别给出了 $\text{Au}_n(n=2-9)$ 团簇的能量最低的稳定构型. 根据前面所述的方法, 分别进行了几何优化, 计算得到了其点群对称性结构、能量、平均键

图 1 $\text{Au}_n(n=2-9)$ 团簇的稳定构型
Fig.1 Stable structures of $\text{Au}_n(n=2-9)$ clusters

表1 从头算得到的 $Au_n(n=2-9)$ 团簇的结构参数Table 1 Structural parameters of $Au_n(n=2-9)$ cluster by *ab initio* methods

Au_n cluster	Symmetry	Average bond length / nm	Total energy / Ha	Second-order difference energy / eV	HOMO-LUMO energy gap / eV
Au_2	$D_{\infty h}$	0.2489	-36795.899	—	1.763
Au_3	D_{3h}	0.2620	-55193.867	-1.0497	1.343
Au_4	D_{2h}	0.2624	-73591.874	0.1362	1.678
Au_5	C_{2v}	0.2634	-91989.876	-0.6448	1.378
Au_6	C_{2v}	0.2633	-110387.902	1.1525	1.765
Au_7	C_s	0.2637	-128785.885	-0.8326	1.712
Au_8	D_{2h}	0.2614	-147183.899	0.4128	0.994
Au_9	C_{2v}	0.2651	-165581.898	—	0.732

HOMO: the highest occupied molecular orbital; LUMO: the lowest unoccupied molecular orbital

长和振动频率等参数性质,并根据总能量大小和振动频率判断它们是稳定几何结构.团簇的结构和性质参数见表1.其中 Au_2 团簇点群对称性为 $D_{\infty h}$,能量值为-36795.899 Ha,最高占据分子轨道(HOMO)-最低未占据分子轨道(LUMO)能隙为1.763 eV,键长为0.2489 nm,振动频率为184.8 cm^{-1} ,与实验得到的键长0.247 nm和振动频率191 cm^{-1} 符合得较好,²³也与以前报道中得到的金团簇的能量最低构型相符.^{19,24}计算了团簇的二阶差分能,二阶差分能可以用来检验团簇的稳定性,定义为:

$$\Delta_2 E(Au_n) = E(Au_{n-1}) + E(Au_{n+1}) - 2E(Au_n) \quad (1)$$

3.2 $Au_n(n=2-9)$ 团簇和乙醇分子的相互作用

Shafai等⁷已经研究了 $Au_n(n=3, 5, 7, 9, 13)$ 团簇和单个丙酮分子的相互作用,他们指出:当金原子或者金二聚物与丙酮分子的羰基氧相互作用的时候,得到最大的结合能(E_b),相比于C和H而言,Au更容易与O结合而相互成键,所以我们所选初始构型时认为氧原子是连接到顶点Au原子上的,即为 Au^*-O 吸附接触构型,在此直接参与吸附的金原子用 Au^* 表示.我们也尝试过优化其它类型的吸附点,比如桥位和空心位,通过优化最后都变成了顶点位的结构.另外我们也尝试金团簇与乙醇分子的氢原

子 Au^*-H 成键进行相互作用,几何优化后也会形成稳定结构,图2展示了 Au_3 通过 Au^*-H 与乙醇分子相互作用结构模型,但比 Au^*-O 作用较弱,不再展开讨论.

$Au_n(n=2-9)$ 团簇中的金原子有1-6六种配位情况,把它们分别用a、b、c、d、e和f表示,这样团簇中的 Au^* 可以根据配位数分别用a、b、c、d、e和f加以区分.图3中(2a)-(9f)展示了 $Au_n(n=2-9)$ 团簇吸附一个乙醇分子的24种选择性构型.由于 Au_2 和 Au_3 团簇各自的原子是等价的,所以吸附一个乙醇分子时都只有1种构型,分别是(2a)和(3b). Au_4 团簇的2个原子是二配位数,另外2个原子是三配位数原子,吸附乙醇分子时有(4b)和(4c)两种构型,依次类推 Au_5 、 Au_6 、 Au_7 、 Au_8 和 Au_9 吸附一个乙醇分子时各自有3种、2种、7种、2种和6种构型.

对上述24种初始构型分别进行结构优化,发现配合物 Au^*-O 成键方向性明显,它和 Au_n 团簇都处在一个平面内.除(7d-2)、(7e)、(9e)和(9f)四种特殊构型外,另外的20种构型吸附主体的金团簇结构和吸附位都无明显变化,形成了稳定结构.上述四种特殊构型优化后如图4所示,(7d-2)优化前后的金原子空间位置变化较大,已经变成了(7c)构型,(7e)和(9e)

图2 Au_3 团簇吸附乙醇分子通过不同的氢原子 Au^*-H 成键Fig.2 Ethanol molecule adsorbed by Au_3 cluster via Au^*-H bond

图3 $Au_n(n=2-9)$ 团簇吸附一个乙醇分子的24种构型Fig.3 Twenty four complexes of $Au_n(n=2-9)$ clusters adsorbing an ethanol molecule

构型的乙醇分子移向了2个配位数的金原子, 趋向于(7b-2)和(9b), (9f)构型中 Au^+-O 键长较大, 吸附能力最弱.

图4 (7d-2)、(7e)、(9e)和(9f)四种特殊构型

Fig.4 Four special complexes of (7d-2), (7e), (9e) and (9f)

$Au_n(n=2-9)$ 团簇与乙醇分子吸附作用后形成的配合物的结构性质和参数信息如表2所示. 其中一个重要的指标是配合物的吸附能 E_b , 用下式表示:

$$E_b = -(E_{Au_n(C_2H_5O)} - E_{Au_n} - E_{(C_2H_5O)}) \quad (2)$$

式中的负号是为了使吸附能为正, 代表吸附为放热反应, 且数值越大表示吸附越稳定, E_{Au_n} 为 Au_n 团簇的总能量, $E_{(C_2H_5O)}$ 为1个乙醇分子的总能量, $E_{Au_n(C_2H_5O)}$ 为吸附后构成的 $Au_n(C_2H_5O)$ 配合物的总能量.

3.3 讨论

金团簇和乙醇分子相互作用后, 乙醇分子结构略有变化, 其中C—C键长略有减小, C—O键长略

表2 $\text{Au}_n(\text{C}_2\text{H}_6\text{O})$ 配合物的结构参数
Table 2 Structural parameters of $\text{Au}_n(\text{C}_2\text{H}_6\text{O})$ complexes

Species	Bond length / nm				Mulliken charge / e			E_b / eV
	Au ⁺ —O	C—O	C—C	Au—Au(average)	O	Au ⁺	remark	
$\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$	—	0.1433	0.1522	—	—	—	—	
(2a)	0.2192	0.1469	0.1512	0.2473	−0.465	−0.020		1.427
(3b)	0.2187	0.1472	0.1513	0.2615	−0.479	0.055		1.297
(4b)	0.2340	0.1461	0.1515	0.2629	−0.463	−0.070		0.931
(4c)	0.2201	0.1470	0.1513	0.2629	−0.473	0.118		1.322
(5b)	0.2269	0.1466	0.1513	0.2633	−0.471	−0.013		1.179
(5c)	0.2271	0.1464	0.1513	0.2634	−0.458	0.067		1.116
(5d)	0.2366	0.1459	0.1514	0.2640	−0.442	0.162		0.925
(6b)	0.2285	0.1466	0.1513	0.2632	−0.476	−0.012		1.164
(6d)	0.2540	0.1453	0.1517	0.2638	−0.458	0.099		0.757
(7b-1)	0.2272	0.1467	0.1512	0.2641	−0.473	−0.019		1.182
(7b-2)	0.2267	0.1467	0.1512	0.2638	−0.477	0.005		1.208
(7b-3)	0.2276	0.1467	0.1513	0.2640	−0.468	−0.039		1.116
(7c)	0.2253	0.1466	0.1513	0.2636	−0.460	0.066		1.231
(7d-1)	0.2404	0.1456	0.1514	0.2642	−0.447	0.120		0.886
(7d-2)	0.2250	0.1468	0.1514	0.2635	−0.471	0.055	tend to (7c)	1.191
(7e)	0.4397	0.1470	0.1513	0.2639	−0.479	0.068	tend to (7b-2)	1.209
(8b)	0.2238	0.1469	0.1513	0.2614	−0.480	−0.008		1.240
(8d)	0.2428	0.1457	0.1516	0.2627	−0.451	0.087		0.853
(9b)	0.2249	0.1470	0.1512	0.2651	−0.478	−0.022		1.198
(9c-1)	0.2274	0.1467	0.1513	0.2651	−0.472	0.022		1.111
(9c-2)	0.2267	0.1467	0.1514	0.2651	−0.467	0.022		1.112
(9d)	0.2347	0.1461	0.1514	0.2651	−0.452	0.078		0.978
(9e)	0.4590	0.1470	0.1512	0.2651	−0.479	0.039	tend to (9b)	1.198
(9f)	0.3072	0.1436	0.1520	0.2652	−0.474	0.136	weak adsorption	0.698
Au_2O	0.1933							

E_b : adsorption energy

有增加. 作为吸附主体的金团簇结构和 Au—Au 平均键长变化不明显. 受周围 2 个配位数金原子的影响, Au_7 和 Au_9 团簇的配位数为 5 的金原子(7e)和(9e)不能与乙醇分子的氧原子发生吸附作用, 优化后构型分别趋向了(7b-2)和(9b)构型, 另外(7d-2)优化后金团簇结构发生了较大的变化, 趋向了(7c)构型, 对于(9f)构型, 从键长和吸附能看, 它们的相互作用已经很弱. 另外 20 种结构模型中 Au^+ 原子上的 Mulliken 电荷带正电或较少的负电, 它很容易与乙醇分子中

的氧原子发生作用, 形成稳定结构.

$\text{Au}_n(n=2-9)$ 团簇 HOMO-LUMO 能隙和二阶差分能随尺寸的变化曲线如图 5 所示, 表现出奇偶震荡变化, HOMO-LUMO 能隙整体趋势是随着 n 增加而减少, 可见金团簇随着原子数量的增加, 配合物分子结构趋向稳定. Au_6 具有较大的 HOMO-LUMO 能隙和二阶差分能, 更稳定.

通过 Au_2O 优化计算, 得出 Au—O 成键键长为 0.1933 nm, 氧原子和金原子的范德华半径分别是

图5 $\text{Au}_n(n=2-9)$ 团簇 HOMO-LUMO 能隙(a)和二阶差分能(b)随尺寸的变化曲线
Fig.5 HOMO-LUMO gap of $\text{Au}_n(n=2-9)$ clusters (a) and $\Delta_2E(\text{Au}_n)$ (b) change curves with cluster size

图6 配合物吸附能(a)和 Au^+-O 平均键长(b)与 Au^+ 配位数的变化关系Fig.6 Complexes adsorbing energy (a) and Au^+-O average bond length (b) changed with Au^+ coordination number 图7 配合物的平均吸附能(a)和 Au^+-O 平均键长(b)与金团簇尺寸的关系Fig.7 Complexes average adsorbing energy (a) and Au^+-O average bond length (b) changed with sizes of Au cluster

0.140 nm 和 0.217 nm,²⁵ 它们之和为 0.357 nm, 因配合物 $\text{Au}_n(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})$ 的 Au^+-O 平均键长 0.2509 nm 介于二者之间, 可以断定 $\text{Au}_n(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})$ 中 Au^+ 与 O 已经成键. 配合物 Au^+-O 成键方向性明显, 它和 Au_n 团簇都处在一个平面内. $\text{Au}_n(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})$ 配合物的吸附能都为正值, 说明它们已经形成了稳定结构.

图6显示了配合物的吸附能和 Au^+-O 平均键长与 Au^+ 配位数的关系, 可见配合物的吸附能随 Au^+ 配位数的增加而减少, Au^+-O 平均键长随 Au^+ 配位数的增加而增加, 说明金团簇随着 Au^+ 配位数的增加, 吸附一个乙醇分子的能力逐渐减弱. 2个和3个配位数的金原子由于各自的空间位阻效应相当, 因此它们的平均吸附能和 Au^+-O 平均键长大体相同, 吸附乙醇分子能力相同. 6个配位数的金原子通过氧原子与乙醇分子相互作用很弱.

图7显示了配合物的平均吸附能和 Au^+-O 平均键长与金团簇尺寸的关系, $\text{Au}_6(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})$ 的吸附能最小, Au^+-O 平均键长最大, 可见 Au_6 对乙醇的作用能力最弱.

4 结论

研究表明: $\text{Au}_n(n=2-9)$ 团簇吸附乙醇分子是通过 Au^+-O 成键完成的, 形成的 $\text{Au}_n(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})$ 配合物共有 20 种结构模型, 配合物 Au^+-O 键和 Au_n 团簇都处在一个平面内, 方向性明显. 作为吸附主体的金团簇和乙醇分子结构无明显变化. 吸附过程中金原子空间位阻效应明显, 金原子的配位数对吸附作用有较大的影响. Au_6 团簇最稳定, 对乙醇分子的吸附能力最弱.

致谢: 本文修改过程中得到了大连理工大学高科技研究院赵纪军教授的指导, 在此深表感谢.

References

- (1) Lee, T. H.; Ervin, K. M. *J. Phys. Chem.* **1994**, *98*, 10023.
- (2) Sara, L.; Fabrizio, C. *J. Chem. Phys.* **2004**, *120*, 10062.
- (3) Gu, J.; Wang, S. Y.; Gou, B. C. *Acta Phys. Sin.* **2009**, *58*, 3338. [顾娟, 王山鹰, 苟秉聪. 物理学报, **2009**, *58*, 3338.]
- (4) Furche, F.; Ahlrichs, R.; Weis, P.; Jacob, C.; Gilb, S.; Bierweiler, T.; Kappes, M. M. *J. Chem. Phys.* **2002**, *117*, 6982.

- (5) Häkkinen, H.; Yoon, B.; Landman, U. *J. Phys. Chem. A* **2003**, *107*, 6168.
- (6) Dietrich, G.; Krückeberg, S.; Lützenkirchen, K.; Schweikhard, L.; Walther, C. *J. Chem. Phys.* **2000**, *112*, 752.
- (7) Shafai, G. S.; Sharan, S.; Sailaja, K.; Vaishali, S.; Kanhere, D. *G. J. Chem. Phys.* **2007**, *126*, 014704.
- (8) Lavrich, D. J.; Wetterer, S. M.; Bernasek, S. L.; Scoles, G. *J. Phys. Chem. B* **1998**, *102*, 3456.
- (9) Li, Y. C.; Yang, C. L.; Sun, M. Y.; Li, X. X.; An, Y. P.; Wang, M. S.; Ma, X. G.; Wang, D. H. *J. Phys. Chem. A* **2009**, *113*, 1353.
- (10) Varganov, S. A.; Olson, R. M.; Gordon, M. S.; Metiu, H. *J. Chem. Phys.* **2002**, *119*, 2531.
- (11) Hayashi, T.; Tanaka, K.; Haruta, M. *J. Catal.* **1998**, *178*, 566.
- (12) Geoffrey, M. K.; Mark, B. K. *J. Phys. Chem. A* **2001**, *105*, 11197.
- (13) Dan, I. E.; Jennifer, K. E.; Philip, L.; Benjamin, S. E.; Albert, F. C.; Andrew, A. H.; Masashi, W.; Christopher, J. K.; David, W. K.; Graham, J. H. *Science* **2006**, *311*, 362.
- (14) Xiao, L.; Wang, L. S. *Chem. Phys. Lett.* **2004**, *392*, 452.
- (15) Han, Y. K. *J. Chem. Phys.* **2006**, *124*, 024316.
- (16) Häkkinen, H.; Landman, U. *Phys. Rev. B* **2000**, *62*, R2287.
- (17) Wang, J. L.; Wang, G. H.; Zhao, J. J. *Phys. Rev. B* **2002**, *66*, 035418.
- (18) Wang, S.; Wang, W. N.; Lu, J.; Chen, G. H.; Fan, K. N. *Acta Chim. Sin.* **2007**, *65*, 2085. [王顺, 王文宁, 陆靖, 陈冠华, 范康年. 化学学报, **2007**, *65*, 2085.]
- (19) Deka, A.; Deka, R. C. *J. Mol. Struct. - Theochem* **2008**, *870*, 83.
- (20) Han, Z.; Zhang, D. J.; Liu, C. B. *Acta Chim. Sin.* **2009**, *67*, 387. [韩哲, 张东菊, 刘成卜. 化学学报, **2009**, *67*, 387.]
- (21) Perdew, J.; Burke, P. K.; Ernzerhof, M. *Phys. Rev. Lett.* **1996**, *77*, 3865.
- (22) Delley, B. *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110*, 13632.
- (23) Bishea, G. A.; Morse, M. D. *J. Chem. Phys.* **1991**, *95*, 5646.
- (24) Mao, H. P.; Wang, H. Y.; Ni, Y.; Xu, G. L.; Ma, M. Z.; Zhu, Z. H.; Tang, Y. J. *Acta Phys. Sin.* **2004**, *53*, 1766. [毛华平, 王红艳, 倪羽, 徐国亮, 马美仲, 朱正和, 唐永坚. 物理学报, **2004**, *53*, 1766.]
- (25) Hu, S. Z.; Zhou, Z. H.; Cai, Q. R. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2003**, *19*, 1073. [胡盛志, 周朝晖, 蔡启瑞. 物理化学学报, **2003**, *19*, 1073.]

“国际化学年在中国”

——中国化学会第十三届胶体与界面化学会议通知

2011年7月20–25日, 中国日用化学工业研究院, 太原

联合国将2011年定为“国际化学年”(International Year of Chemistry). 中国化学会将在2011年期间, 以“化学——我们的生活, 我们的未来”为主题, 举办系列“国际化学年在中国”活动. 作为这次活动的一部分, 第十三届全国胶体与界面化学会议将在2011年7月20–25日在山西省太原市召开. 受中国化学会委托和国家自然科学基金委员会的委托和资助, 这次会议由中国日用化学工业研究院、山西大学化学化工学院联合承办.

本次会议, 中国化学会胶体与界面化学专业委员会诚邀全国从事胶体与界面化学科研、教学和开发的各类人士参加, 交流自2009年青岛会议以来我国在胶体与界面化学领域的最新研究进展, 展示胶体与界面化学在各个领域中的应用成果, 分析当前国际胶体与界面化学领域的研究动态、热点、前沿和发展趋势, 研讨学科发展规划和人才战略等问题, 促进我国胶体与界面化学事业的发展. 会议期间还拟邀请国际胶体与界面化学界著名专家访问讲座, 并安排新仪器、新产品发布活动.

会议形式: 大会报告、分组报告、墙报

会议内容: 1、两亲分子有序组合体及软物质; 2、表面活性剂与大分子之间的相互作用; 3、胶体分散体系的研究新进展; 4、界面化学与有序分子膜; 5、生命科学和先进材料制备中的胶体与界面化学; 6、胶体与界面化学研究中的新方法、新理论.

稿件要求: 每篇论文摘要为1或2页, 用Word97或更高版本排版, 激光打印在A4纸上, 一式两份寄送会议筹备组. 同时, 将稿件的电子版和图的原文件以邮件附件形式发送至: colloid2011@163.com. 论文摘要经组委会审查通过后, 将收入会议论文集, 文责自负. 会议日程安排等具体内容, 在第二轮通知和会议主页上发布.

论文格式: 参见会议主页征文样本和论文模板.

论文审理印刷费: 80元/页

会务费: 正式代表800元/人, 研究生(不含博士后)600元/人, 代表家属500元/人; 会议期间食宿费用自理.

征文截止日期: 2011年5月15日

产品展销: 会议期间欢迎国内外厂商进行商品展销, 有意者可与会务组联系.

联系人: 赵永红(13935134563; zyh-327@163.com)

张威(13453437591; chemzhangwei@163.com)

王国永(13703582149; ridci_gywang@163.com)

联系地址: 030001 山西省太原市文源巷34号中国日用化学工业研究院

联系电话: 0351-4084691; **传真:** 0351-2027036, 0351-4040802