[Article]

doi: 10.3866/PKU.WHXB201411191

www.whxb.pku.edu.cn

抗衡离子对硫酸盐表面活性剂气/液界面性质影响的分子动力学模拟

胡松青^{1,*} 纪贤晶¹ 范忠钰² 张田田¹ 孙霜青¹

(¹中国石油大学(华东)理学院, 山东 青岛 266580; ²华北油田公司勘探开发研究院, 河北 任丘 062552)

摘要: 采用全原子分子动力学方法研究了抗衡离子为第一主族离子(Li⁺、Na⁺、K⁺、Rb⁺和Cs⁺)的十二烷基硫酸盐表面活性剂的气/液界面性质. 通过分析体系中各组分的密度分布曲线, 考察表面活性剂单分子层在界面的聚集形态, 并利用径向分布函数分析了表面活性剂极性头基与抗衡离子间的相互作用. 研究表明: 随着抗衡离子半径的增大, 不同体系的界面水层厚度依次增加, 表面活性剂极性头基与抗衡离子形成的 Stern 和扩散层厚度也相应增加. 但表面活性剂吸附层的抗衡离子缔合度以及体系表面张力却随抗衡离子半径的增大而减小. 研究表明抗衡离子的差异对十二烷基硫酸盐表面活性剂气/液界面性质有很大影响.

关键词: 十二烷基硫酸盐; 抗衡离子; 气/液界面; 双电层; 分子动力学

中图分类号: O641; O647

Counterion Effects on the Properties of Sulfate Surfactants at the Air/Liquid Interface by Molecular Dynamics Simulation

HU Song-Qing^{1,*} JI Xian-Jing¹ FAN Zhong-Yu² ZHANG Tian-Tian¹ SUN Shuang-Qing¹

(¹College of Science, China University of Petroleum (East China), Qingdao 266580, Shandong Province, P. R. China;

²Exploration and Development Research Institute, Huabei Oilfield Company, Renqiu 062552, Hebei Province, P. R. China)

Abstract: Molecular dynamics (MD) simulations have been carried out to study the micro-interfaces between counterions (Li⁺, Na⁺, K⁺, Rb⁺, Cs⁺) and dodecyl sulfate surfactant at the air/liquid interface. The morphology of the monolayer was analyzed by the density profile of the surfactant components, and the interactions between the polar head groups of the surfactants and the counterions were analyzed using the radial distribution function (RDF). The results showed that the interfacial thickness and thicknesses of the Stern and diffusion layers increased as the radius of counterion increased, whereas the surface tension and the degree of counterion association at the adsorbed layer decreased as the radius increased. These results indicated that the different counterions had a significant effect on the adsorption behavior of the dodecyl sulfate surfactants at the interface.

Key Words: Dodecyl sulfate; Counterion; Air/liquid interface; Electrical double layer; Molecular dynamics

1 引言

阴离子表面活性剂以其优异的性能被广泛应用于日常生活和工业生产中, 如洗涤剂、食品添加剂、发泡剂、杀菌剂等.¹⁻⁴ 阴离子型表面活性剂在界面的吸附是其发挥效用的关键, 且与分子结构紧密

相关. 除亲水基和疏水基外, 抗衡离子对阴离子表面活性剂在界面的吸附行为也有较大影响.⁵⁻¹¹ 现有的实验手段如小角度中子散射、拉曼光谱、X射线衍射等被广泛应用于抗衡离子对表面活性剂气/液界面性质影响的研究中. Wang 和 Morgner¹² 利用中性

Received: October 14, 2014; Revised: November 19, 2014; Published on Web: November 19, 2014.

*Corresponding author. Email: ccupc@163.com; Tel: +86-532-86983170.

The project was supported by the National Natural Science Foundation of China (51201183), Promotive Research Fund for Excellent Young and Middle-Aged Scientists of Shandong Province, China (BS2013CL033), and CNPC Innovation Foundation, China (2011D-5006-0202).

国家自然科学基金(51201183), 山东省优秀中青年科学家基金(BS2013CL033)和中国石油科技创新基金(2011D-5006-0202)资助项目

© Editorial office of Acta Physico-Chimica Sinica

离子碰撞散射谱研究了抗衡离子 Na^+ 、 Cs^+ 对十二烷基硫酸盐表面活性剂的表面张力和界面双电层结构的影响,发现抗衡离子大小和溶解度对其在气/液界面的吸附有较大影响. Bordes等¹³通过电导率法考察了抗衡离子 Li^+ 、 Na^+ 、 K^+ 对氨基酸类表面活性剂溶液导电性能的影响,结果表明 Li^+ 与氨基酸类表面活性剂胶束结合最为稳定. 2004年, Gilányi等¹⁴通过测量吸附等温线考察了十二烷基硫酸盐 Li^+ 、 Na^+ 、 K^+ 、 Rb^+ 、 Cs^+ 的气/液界面性质,根据古埃-查普曼-斯特恩理论提出了新的模型用于解释阴离子表面活性剂在界面的吸附行为.

近年来,采用计算机分子模拟技术在分子原子水平上研究表面活性剂溶液性质的报道越来越多. Rakitin等¹⁵利用分子动力学模拟研究了抗衡离子 Li^+ 、 Na^+ 、 NH_4^+ 对十二烷基硫酸盐表面活性剂溶液中胶束结构的影响,结果发现,随着离子半径的增加,抗衡离子进入胶束结构的能力减弱. Hantal等¹⁶采用分子动力学方法研究抗衡离子(Li^+ 、 Na^+ 、 K^+ 、 Rb^+ 、 Cs^+)在两种表面浓度下对癸烷基硫酸盐表面活性剂吸附层的影响,并验证了所使用的吸附理论的正确性. 十二烷基硫酸盐是最常见的表面活性剂,但抗衡离子影响其气/液界面性质的模拟研究鲜有报道. 因此,本文以十二烷基硫酸盐为研究对象,采用全原子分子动力学方法,考察第一主族碱金属离子(Li^+ 、 Na^+ 、 K^+ 、 Rb^+ 、 Cs^+)对其气/液界面性质的影响规律,获得抗衡离子与表面活性剂微观作用机理.

2 计算方法和模型

首先利用 Visualizer 模块构建水分子和十二烷基硫酸盐表面活性剂分子,选择 COMPASS 力场¹⁷进行计算,并采用 Smart Minimizer 对分子进行初步优化,以消除搭建构型过程中可能出现的分子重叠. 其次,构建尺寸为 4×4 的包含16个^{18,19}十二烷基硫酸盐单分子层,并使表面活性剂单分子垂直于 x 、 y 轴组成的平面. 其中,每个表面活性剂分子的占有面积为 0.55 nm^2 ,与 Tajima等²⁰实验测得的数据相近. 构建完单层后,把表面活性剂极性头插入含900个水分子的厚度为3 nm的水层表面,水分子采用 SPC 势能模型. 有文献²¹表明2 nm厚度的水层就足以保证水层中的水分子性质接近本体溶液,同时也足以保证两个表面活性剂单层相互独立. 紧接着随机向水盒子中加入与表面活性剂同等数量的抗衡离子(Li^+ 、 Na^+ 、 K^+ 、 Rb^+ 、 Cs^+),以保证体系的电中性.

所有模型均采用三维周期性结构,以消除边界效应的影响. 为减小 z 方向上的周期性重复对体系的影响,在体系两侧分别加厚度为3 nm的真空层,详细的模型信息见表1.

全部模拟计算采用 Accelrys 公司的 Materials Studio 软件完成,并选择 NVT 系综对分子动力学模拟计算进行限制. 采用 Andersen 控温方法²²将温度控制在 298 K. 各分子的起始速度由 Maxwell-Boltzmann 分布随机产生,运用 velocity Verlet 算法²³解牛顿运动方程. 长程静电相互作用选择 Ewald 方法²⁴进行计算,范德瓦耳兹相互作用选择 atom based 方法计算,截断半径为 0.95 nm,截断距离之外的分子间相互作用能按平均密度近似方法进行校正. 模拟中时间步长选择 1 fs,每 1 ps 记录一次轨迹信息,模拟总耗时 4 ns,最后 1 ns 存储的轨迹文件用于后续结构和动力学分析.

3 结果和讨论

3.1 单分子层的结构性质

以十二烷基硫酸盐(CDS)为例讨论表面活性剂单分子层的结构性质. 图1(a)和(b)分别为十二烷基硫酸盐(CDS)体系的初始构型和平衡构型. 从图中可以发现,经过纳米级的模拟时间后,表面活性剂分子在气/液界面处发生聚集,形成稳定单层膜结构. 其中,表面活性剂亲水头基伸向水相,而疏水烷基链则向气相延伸. 抗衡离子吸附在表面活性剂头基周围,但也有少数抗衡离子游离于体相水中. 此外,模拟中还发现有极少量的水分子进入表面活性剂单分子层. 这与实验得到的表面活性剂在气/液界面的分布情况一致,^{25,26}表明采用分子动力学模拟方法研究表面活性剂在气/液界面的吸附具有一定的可行性.

通过研究体系中各组分的密度分布函数可以获得表面活性剂单分子层的详细结构特征. 图2为不

表1 各体系的具体模型参数

Table 1 Detailed model parameters of different systems

System	Box dimension/nm ³	Counterion	Number of counterions	Number of water molecules
LDS	2.91×2.91×13.84	Li^+	32	900
SDS	2.91×2.91×13.85	Na^+	32	900
PDS	2.91×2.91×13.89	K^+	32	900
RDS	2.91×2.91×13.87	Rb^+	32	900
CDS	2.91×2.91×13.84	Cs^+	32	900

LDS: lithium dodecyl sulfate; SDS: sodium dodecyl sulfate;
PDS: potassium dodecyl sulfate; RDS: rubidium dodecyl sulfate;
CDS: cesium dodecyl sulfate

图1 CDS体系的初始(a)和平衡(b)构型

Fig.1 Initial (a) and balanced (b) configurations for CDS system

同十二烷基硫酸盐/抗衡离子体系中各组分(烷基链、极性头基、水和抗衡离子)在 z 方向上的密度分布曲线(体系中心为横坐标起点). 从图中可以看出, 表面活性剂头基(峰值范围0.8–2.0 nm)处于水相中(峰值范围0–2.3 nm), 这表明 $-\text{SO}_4$ 头基进入到水层发生水化作用. 在距离体系中心1.5–2.3 nm的范围内, 水相密度和头基密度均逐渐降低, 这表明沿 z 轴方向表面活性剂头基的水化作用逐渐降低. 此外, 带正电的

抗衡离子(峰值范围0.8–1.5 nm)分布在带负电的头基周围(峰值范围0.8–2.0 nm)内, 说明由于静电相互作用, 抗衡离子与表面活性剂极性头基结合.

图2中另一个显著的特点是: 在距离体系中心1.0–2.5 nm的范围内, 存在一个明显的界面水分子层. 本节采用“10%–90%厚度原则”,²⁷ 即体相水密度由10%到90%的变化区间, 计算 LDS、SDS、PDS、RDS 和 CDS 体系的界面水层厚度分别为 0.808、

图2 各组分密度分布曲线

Fig.2 Density profiles of different components

(a) LDS; (b) SDS; (c) PDS; (d) RDS; (e) CDS

0.815、0.903、0.928 和 1.016 nm. 即各体系的界面水层厚度由小到大的顺序为 LDS<SDS<PDS<RDS<CDS. 抗衡离子半径越大, 体系界面水层厚度越大. 这是因为抗衡离子的半径越大, 在溶液中的迁移能力越弱, 对极性头基与水分子间的屏蔽作用越小, 从而导致该体系中表面活性剂头基与水分子的相互作用强于其它同主族抗衡离子, 界面水层厚度增大.

3.2 抗衡离子与极性头基间的相互作用

3.2.1 双电层的结构性质

阴离子表面活性剂在气/液界面吸附时, 溶解在水中的抗衡离子与表面活性剂会形成界面双电层结构, 且双电层的结构性质对研究表面活性剂极性头基与抗衡离子之间的相互作用极其重要. 因此, 本节利用径向分布函数(RDF)考察表面活性剂头基和抗衡离子形成的界面双电层结构.²⁸ 图3所示为表面活性剂头基中硫原子和抗衡离子间的径向分布函数 $g_{S-M}(r)$.

在图3中, 以十二烷基硫酸铯(CDS)为例, 发现头基和抗衡离子 Cs^+ 通过静电相互作用形成了结构良好的径向分布函数曲线. 在 0.376 nm 位置出现第一峰, 第一峰可代表 Stern 层, 且第一峰起始位置在 0.326 nm 处, 终止位置在 0.489 nm 处, 即 Stern 层厚度为 0.163 nm (0.489–0.326 nm). 另外, 在 0.598 nm 处出现第二个相对较弱的峰代表扩散层, 且扩散层厚度为 0.252 nm (0.741–0.489 nm). 对比不同体系头基和抗衡离子间的径向分布函数, 从 LDS 到 CDS 头基和抗衡离子聚集峰的强度逐渐减弱, 峰的位置依次右移. 表2中列出不同十二烷基硫酸盐/抗衡离子体系的 Stern 层和扩散层厚度. 从表中可以看出, 不同体系的 Stern 层和扩散层厚度满足顺序: LDS<

图3 表面活性剂头基和抗衡离子的径向分布函数
Fig.3 Radial distribution function (RDF) between the head group of surfactant and counterions

SDS<PDS<RDS<CDS, 即随抗衡离子半径的增加, 体系的 Stern 层和扩散层厚度相应增加. 这主要是因为随着抗衡离子半径增加, 抗衡离子进入界面层的能力减弱, 抗衡离子与表面活性剂头基距离增加, 且抗衡离子和头基之间的静电吸引作用减小, 头基对抗衡离子的束缚作用减弱, 从而使 Stern 层和扩散层厚度增加.

3.2.2 吸附层的抗衡离子缔合度

离子型表面活性剂在界面处发生吸附时, 由于静电相互作用, 部分抗衡离子会与带相反电荷的表面活性剂极性头基结合形成缔合结构. 图4所示为不同体系中表面活性剂吸附层的抗衡离子缔合结构. 平均每个表面活性剂离子所缔合的抗衡离子数目即为表面活性剂吸附层的抗衡离子缔合度,^{29,30} 用 N_0 表示:

$$N_0 = \frac{N_f}{K_0}$$

(1)

式中, N_f 表示与表面活性剂头基缔合的抗衡离子数目, K_0 代表体系中表面活性剂数目. 据模拟结果获得的不同体系吸附层的抗衡离子缔合度 N_0 列于表3. 从表中可以看出, 不同体系吸附层的抗衡离子缔合度 N_0 变化规律为: LDS>SDS>PDS>RDS>CDS, 即吸附层的抗衡离子缔合度随抗衡离子半径的增加而降低. 这主要是由于抗衡离子半径增加, 抗衡离子与表面活性剂头基距离增加, 静电相互作用减

表2 不同体系 Stern 层和扩散层厚度
Table 2 Thicknesses of stern layer and diffusion layer in different systems

System	Thickness/nm	
	Stern layer	diffusion layer
LDS	0.106	0.208
SDS	0.140	0.223
PDS	0.142	0.238
RDS	0.143	0.249
CDS	0.163	0.252

图4 吸附层的抗衡离子缔合结构
Fig.4 Structure of bridged counterions in adsorbed layer

小, 溶液中的抗衡离子向界面处迁移的能力减弱, 因此吸附层的抗衡离子缔合度降低。

3.3 极性头基和水分子的相互作用

表面活性剂极性头基与水分子间的相互作用对表面活性剂的吸附行为具有重要的影响。为深入研究抗衡离子对阴离子表面活性剂气/液界面吸附行为的影响, 本节计算了不同十二烷基硫酸盐/抗衡离子体系的极性头基中氧原子(O_h)与水中氧原子(O_w)之间的径向分布函数 $g_{O_h-O_w}(r)$, 如图5所示。从图中可看出, 在5种体系中, 水中氧原子在距离极性头基中氧原子0.245 nm附近出现第一个峰值, 即距离极性头基0.245 nm处存在第一水化层; 在0.472 nm附近出现了相对较弱的第二峰值, 代表极性头周围的第二水化层。两个水化层之间的距离为0.227 nm, 这一间距与分子间氢键的距离³¹相近, 表明第二水化层中水分子通过氢键作用与第一水化层中水分子相连。从表面活性剂头基和水分子的相互作用强度可以看出, 抗衡离子为 Li^+ 、 Na^+ 、 K^+ 、 Rb^+ 和 Cs^+ 时, 表面活性剂头基与第一水化层内水分子相互作用强度变化规律为: $LDS < SDS < PDS < RDS < CDS$, 为了深入研究抗衡离子对头基与水分子相互作用的影

响, 利用头基与水分子的径向分布函数计算头基周围配位水分子数目(见图6)。

从图6中可以看出, 5种体系中极性头基周围水分子的配位数由小到大的顺序为: $LDS < SDS < PDS < RDS < CDS$ 。即随着抗衡离子半径增加, 头基与水分子的相互作用增强, 进而导致头基周围水分子配位数的增加。这主要是因为随着抗衡离子半径增加, 抗衡离子进入头基周围水化层的能力减弱, 对头基与水分子间相互作用的屏蔽能力降低。CDS表面活性剂头基周围水分子配位数最大, 表明CDS极性头基周围水分子数目最多, 头基与水分子的作用最强。此时, 表面活性剂单分子层稳定性最好, 体系降低表面张力的能力最强。

3.4 表面张力

表面张力³²是描述表面结构和界面活性的基本参量。在分子动力学模拟中, 气/液体体系的表面张力可通过计算体系压力张量的分量获得, 具体参数可由Kirkwood-Buff公式计算得到:

$$\gamma_p = \frac{L_z}{2} \left[\langle P_z \rangle - \frac{\langle P_x \rangle + \langle P_y \rangle}{2} \right] \quad (2)$$

其中, P_x 、 P_y 、 P_z 分别是压力张量在 x 、 y 和 z 方向的分量, L_z 表示模拟体系中与气/液界面垂直的 z 轴方向的长度。根据公式(2)所计算的不同十二烷基硫酸盐/抗衡离子体系的表面张力如图7所示。5种体系的表面张力大小顺序为: $LDS > SDS > PDS > RDS > CDS$, 即随着抗衡离子半径的增大, 表面活性剂降低表面张力的能力增加。根据软硬酸碱理论,³³ 性质相似的粒子结合能力更强。其中, 第一主族碱金属离子柔软度³⁴的变化规律为: $Li^+ < Na^+ < K^+ < Rb^+ < Cs^+$, 而表面活性剂

表3 不同体系的抗衡离子缔合度
Table 3 Counterion association degree in different systems

System	N_i	K_0	N_0
LDS	16	32	0.50
SDS	15	32	0.47
PDS	11	32	0.34
RDS	9	32	0.28
CDS	6	32	0.19

N_i : number of bridged counterions; K_0 : number of surfactants;
 N_0 : counterion association degree of surfactant adsorption layer

图5 头基中氧原子(O_h)与水中氧原子(O_w)的径向分布函数
Fig.5 RDF between the oxygen atom (O_h) of head group and oxygen atom (O_w) of water molecules

图6 表面活性剂头基周围水分子配位数
Fig.6 Coordination number of water molecules around surfactant head group

图7 不同体系的表面张力

Fig.7 Surface tensions of different systems

极性头基硫酸根³⁵属于“软”离子。因此,抗衡离子从Li⁺到Cs⁺与十二烷基硫酸盐头基之间的结合能力依次增强,形成的分子结构稳定性依次增加,体系的表面张力依次降低。该模拟结果与实验中对应的十二烷基硫酸盐表面活性剂的表面张力¹⁴的变化规律相吻合。

4 结 论

采用分子动力学方法研究了十二烷基硫酸盐表面活性剂气/液界面吸附行为,并详细考察了抗衡离子不同时,体系在界面处的聚集状态和吸附行为的差异。

(1) 密度曲线结果表明,十二烷基硫酸盐表面活性剂在气/液界面处形成单层膜,且界面处存在明显的界面水层结构。抗衡离子为第一主族离子时,随着抗衡离子半径增加,不同体系的界面水层厚度变化规律为: LDS<SDS<PDS<RDS<CDS。

(2) 径向分布函数表明,抗衡离子为第一主族离子时,随着抗衡离子半径的增加不同体系Stern层和扩散层厚度均依次增加,极性头基与水分子的相互作用强度依次增加,且头基周围水分子配位数也随之增大。但吸附层的抗衡离子缔合度却随着离子半径的增加而降低。

(3) 表面张力的结果表明,抗衡离子为第一主族离子时,随着抗衡离子半径的增加,体系表面张力变化规律为: LDS>SDS>PDS>RDS>CDS,即抗衡离子半径增加,十二烷基硫酸盐表面活性剂表面张力依次降低。

References

(1) Xiao, H. Y.; Zhen, Z.; Sun, H. Q.; Cao, X. L.; Li, Z. Q.; Song,

- X. W.; Cui, X. H.; Liu, X. H. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2010**, *26* (2), 422. [肖红艳, 甄 珍, 孙焕泉, 曹旭龙, 李振泉, 宋新旺, 崔晓红, 刘新厚. 物理化学学报, **2010**, *26* (2), 422.] doi: 10.3866/PKU.WHXB20100216
- (2) Che, S.; Garcia-Bennett, A. E.; Yokoi, T.; Sakamoto, K.; Kunieda, H.; Terasaki, O.; Tatsumi, T. *Nat. Mater.* **2003**, *2* (12), 801. doi: 10.1038/nmat1022
- (3) Paria, S.; Khilar, K. C. *Adv. Colloid Interface Sci.* **2004**, *110*, 75. doi: 10.1016/j.cis.2004.03.001
- (4) Jang, S. S.; Lin, S. T.; Maiti, P. K.; Blanco, M.; Goddard, W. *J. Phys. Chem. B* **2004**, *108* (32), 12130. doi: 10.1021/jp048773n
- (5) Petkov, J. T.; Tucker, I. M.; Penfold, J.; Thomas, R. K.; Petsev, D. N.; Dong, C. C.; Golding, S.; Grillo, I. *Langmuir* **2010**, *26* (22), 16699. doi: 10.1021/la1021356
- (6) Manet, S.; Karpichev, Y.; Dedovets, D.; Oda, R. *Langmuir* **2013**, *29* (11), 3518. doi: 10.1021/la304341x
- (7) Li, H. H.; Imai, Y.; Yamanaka, M.; Hayami, Y.; Takiue, T.; Matsubara, H.; Aratono, M. *J. Colloid Interface Sci.* **2011**, *359* (1), 189. doi: 10.1016/j.jcis.2011.03.082
- (8) Wang, C. Y.; Morgner, H. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, *13* (9), 3881. doi: 10.1039/c0cp01600d
- (9) Harpham, M. R.; Ladanyi, B. M.; Levinger, N. E. *J. Phys. Chem. B* **2005**, *109* (35), 16891. doi: 10.1021/jp0527731
- (10) Schelero, N.; Hedicke, G.; Linse, P.; Klitzing, R. V. *J. Phys. Chem. B* **2010**, *114*, 15523. doi: 10.1021/jp1070488
- (11) Faeder, J.; Albert, M. V.; Ladanyi, B. M. *Langmuir* **2003**, *19* (6), 2514. doi: 10.1021/la026755w
- (12) Wang, C. Y.; Morgner, H. *Langmuir* **2009**, *26* (5), 3121.
- (13) Bordes, R.; Tropsch, J.; Holmberg, K. *J. Colloid Interface Sci.* **2009**, *338* (2), 529. doi: 10.1016/j.jcis.2009.06.032
- (14) Gilányi, T.; Varga, I.; Mészáros, R. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2004**, *6* (17), 4338. doi: 10.1039/b400958d
- (15) Rakitin, A. R.; Pack, G. R. *J. Phys. Chem. B* **2004**, *108* (8), 2712. doi: 10.1021/jp030914i
- (16) Hantal, G.; Pártay, L. B.; Varga, I.; Jedlovsky, P.; Gilányi, T. *J. Phys. Chem. B* **2007**, *111* (7), 1769. doi: 10.1021/jp066969c
- (17) Sun, H.; Ren, P.; Fried, J. R. *Comput. Theor. Polym. Sci.* **1998**, *8* (1), 229.
- (18) Li, C. X.; Li, Y.; Yuan, R.; Lv, W. *Langmuir* **2013**, *29* (18), 5418. doi: 10.1021/la4011373
- (19) Hu, X. Y.; Li, Y.; He, X. J.; Li, C. X.; Li, Z. Q.; Cao, X. L.; Xin, X.; Somasundaran, P. *J. Phys. Chem. B* **2011**, *116* (1), 160.
- (20) Tajima, K.; Muramatsu, M.; Sasaki, T. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1970**, *43*, 1991. doi: 10.1246/bcsj.43.1991
- (21) Yuan, S. L.; Cui, P.; Xu, G. Y.; Liu, C. B. *Acta Chim. Sin.* **2006**, *64* (16), 1659. [苑世领, 崔 鹏, 徐桂英, 刘成卜. 化学学报, **2006**, *64* (16), 1659.]
- (22) Andrea, T. A.; Swope, W. C.; Andersen, H. C. *J. Chem. Phys.* **1983**, *79*, 4576. doi: 10.1063/1.446373
- (23) Paterlini, M. G.; Ferguson, D. M. *Chemical Physics* **1998**, *236* (1), 243.

- (24) Darden, T.; York, D.; Pedersen, L. *J. Chem. Phys.* **1993**, *98*, 10089. doi: 10.1063/1.464397
- (25) Yuan, S. L.; Ma, L. X.; Zhang, X. Q.; Zhang, L. Q. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* **2006**, *289* (1/3), 2.
- (26) Yang, W. H.; Yang, X. Z. *J. Phys. Chem. B* **2010**, *114* (31), 10069.
- (27) Rivera, J. L.; McCabe, C.; Cummings, P. T. *Phys. Rev. E* **2003**, *67* (1), 011603.
- (28) Zhao, T. T.; Xu, G. Y.; Yuan, S. L.; Chen, Y. J.; Yan, H. *J. Phys. Chem. B* **2010**, *114* (15), 5025. doi: 10.1021/jp907438x
- (29) Ding, H. J.; Dai, Q. H.; Zhang, L. H.; Zhao, G. X. *Acta Phys. -Chim. Sin* **1994**, *10*, 54. [丁慧君, 戴庆红, 张君兰, 赵国玺. 物理化学学报, **1994**, *10*, 54.] doi: 10.3866/PKU.WHXB19940113
- (30) Zhao, G. X. *Physical Chemistry of Surfactants*; Peking University Press: Beijing, 1984; pp 263–270. [赵国玺. 表面活性剂物理化学. 北京: 北京大学出版社, 1984: 263–270.]
- (31) Yan, H.; Yuan, S. L.; Xu, G. Y.; Liu, C. B. *Langmuir* **2010**, *26* (13), 10448. doi: 10.1021/la100310w
- (32) Cheng, T.; Chen, Q.; Li, F.; Sun, H. *J. Phys. Chem. B* **2010**, *114* (43), 13736. doi: 10.1021/jp107002x
- (33) Collins, K. D. *Methods* **2004**, *34* (3), 309.
- (34) Collins, K. D.; Neilson, G. W.; Enderby, J. E. *Biophysical Chemistry* **2007**, *128* (2), 95.
- (35) Vlachy, N.; Jagoda-Cwiklik, B.; Vácha, R.; Touraud, D.; Jungwirth, P.; Kunz, W. *Adv. Colloid Interface Sci.* **2009**, *146* (1), 42.

2015年东方胶化杯全国胶体化学研究生优秀成果奖评选通知

为促进中国的胶体化学发展,鼓励这一领域青年学生的进取精神,2002年起特设立全国胶体化学研究生奖学金,以表彰优秀的胶体化学专业研究生。

申请资格与范围

全国范围内各大学、科研机构在读的胶体化学专业研究生(含博士生)均有资格申请。申请人应在胶体与界面化学领域取得较为突出的创新性结果。发表一定数量的优秀科研论文(含已接受)。申请人的所有成果必须是在研究生阶段进行或完成的。在职研究生不参与本奖学金评选。对于积极参加全国胶体与界面专业委员会学术活动的科研小组,将采取适度倾斜政策给予支持。

评选程序

(1) **本人申请:** 申请人需提交个人简历(含联系方式)、学术论文发表及已接受目录(含全部作者的正确顺序、期刊、年、卷(期)、页),发表论文的PDF文件,科研工作自评,论文工作概况。已接受文章须具备期刊的接收函(含Email)。并说明参加胶体与界面化学专业委员会的会议情况。

(2) **单位推荐:** 申请人须有本单位两名副教授以上职称的老师(含导师)推荐。各单位原则上最多推举两名。

(3) **专家评审:** 由胶体与界面化学专业委员会组织专家进行评审,确定获奖名单。

评选进程

2015年3月1日前递交个人申请与推荐材料(含电子版、纸版),经专家评审后于2015年4月正式公布并举行颁奖仪式。

联系人: 黄建滨 Tel: 010-62753557

Email: JBHuang@pku.edu.cn

邮寄地址: 北京大学化学与分子工程学院

邮政编码: 100871

本奖学金的设立获得了北京东方德菲胶体化学仪器有限公司大力支持与独家赞助。

本奖项评选工作的最终解释权在中国化学会胶体与界面化学专业委员会。

中国化学会胶体与界面化学专业委员会

2014年11月