

文章编号:1673-5005(2015)02-0130-07

doi:10.3969/j.issn.1673-5005.2015.02.021

烷烃修饰 SiO₂ 纳米颗粒油/水界面吸附特性的分子动力学模拟

罗健辉¹, 丁彬¹, 燕友果², 王平美¹, 陈海香², 张军², 胡松青²

(1. 中国石油集团科学技术研究院, 北京 100083; 2. 中国石油大学理学院, 山东青岛 266580)

摘要:采用分子动力学方法对比研究烷烃修饰前后 SiO₂ 纳米颗粒在油/水界面的吸附组装行为, 分析其密度分布、界面层厚度、界面张力等参量。结果表明:烷烃修饰后纳米颗粒疏水性增强, 能自发地快速向油/水界面扩散运移, 并在界面形成致密的组装单层膜; 烷烃修饰纳米颗粒在油/水界面的吸附能够有效降低界面张力, 提高水相对油相的携带能力。

关键词:分子动力学模拟; SiO₂ 纳米颗粒; 修饰; 烷烃; 组装; 界面张力

中图分类号:O 645.12 **文献标志码:**A

引用格式:罗健辉, 丁彬, 燕友果, 等. 烷烃修饰 SiO₂ 纳米颗粒油/水界面吸附特性的分子动力学模拟[J]. 中国石油大学学报:自然科学版, 2015, 39(2):130-136.

LUO Jianhui, DING Bin, YAN Youguo, et al. Molecular dynamics simulation of adsorption behavior of alkyl-modified SiO₂ nanoparticles at oil/water interface [J]. Journal of China University of Petroleum (Edition of Natural Science), 2015, 39(2):130-136.

Molecular dynamics simulation of adsorption behavior of alkyl-modified SiO₂ nanoparticles at oil/water interface

LUO Jianhui¹, DING Bin¹, YAN Youguo², WANG Pingmei¹, CHEN Haixiang², ZHANG Jun², HU Songqing²

(1. Research Institute of Science and Technology, CNPC, Beijing 100083, China;

2. College of Science in China University of Petroleum, Qingdao 266580, China)

Abstract: Molecular dynamics simulation was adopted to investigate the adsorption and assembly behavior of original and alkyl-modified SiO₂ nanoparticles at oil/water interface. Some parameters, such as density distribution, interfacial thickness, and interfacial tension were analyzed. The simulation results show that the hydrophobicity of alkyl-modified nanoparticles is strengthened. This induces the nanoparticles transfer to the oil/water interface, which forms a dense assembled monolayer. Also, the alkyl-modified nanoparticles at oil/water interface can effectively reduce the interfacial tension and increase the carrying capability of water phase to oil phase.

Keywords: molecular dynamics simulation; SiO₂ nanoparticles; modification; alkane; assembly; interfacial tension

化学驱主要包括聚合物驱、表面活性剂驱、碱驱和复合驱等, 单一的化学驱油剂往往只能提高洗油效率或者波及系数, 复合驱在地层中存在严重的色谱分离现象。纳米颗粒由于具有小尺寸效应、高表面活性等诸多优点被广泛用于食品、医药、化工等领域^[1-6]。在油田提高采收率方面, 纳米颗粒具有降压增注、调

剖堵水等提高波及系数的作用, 同时表面修饰后的纳米颗粒具有降低界面张力, 提高洗油能力的特性^[7-12]。纳米颗粒溶液体系的降压增注、调剖堵水已有大量研究^[7-10]。Dai 等^[13]通过环境透射电子显微镜观测了纳米颗粒在水/三氯乙烯界面的自组装结构, 发现纳米颗粒在界面处自组装成单层膜。Rana

收稿日期:2014-10-02

基金项目:中国石油科技创新基金项目(2013D-5006-0206); 中国石油天然气集团公司科学研究与技术开发项目(2011A-1001); 中央高校基础科研课题(13CX05019A)

作者简介:罗健辉(1962-), 男, 教授级高工, 博士, 主要从事油田化学方向的研究。E-mail:luojhpetrochina@163.com。

等^[14]采用动态界面张力测量方法研究纳米颗粒对水/甲苯界面张力的影响,表明纳米颗粒加入能降低体系的界面张力,且降低程度与纳米颗粒表面修饰基团的疏水性成线性关系。分子动力学(MD)模拟被广泛地应用于考察油/水界面行为^[15-20]。Frost 等^[21]采用 MD 模拟考察碳纳米颗粒在离子液体/水体系中向界面扩散运移的微观过程;Fan 等^[22]研究了单个 SiO₂ 纳米颗粒在癸烷/水界面的吸附形态,表明 SiO₂ 纳米颗粒表面修饰甲基的浓度即疏水性,对其界面稳定性起着重要作用。但是,目前关于纳米颗粒在油/水界面的吸附、组装结构对界面特性影响的系统研究较少^[23-26]。笔者选取 SiO₂ 纳米颗粒作为研究对象,采用 MD 方法考察烷烃修饰前后 SiO₂ 纳米颗粒在水相中的扩散及在油/水界面吸附组装行为,考察纳米颗粒与水、油相的相互作用,揭示纳米颗粒对油/水界面张力影响的微观机制。

1 模型和方法

1.1 模型构建

模拟工作采用 Materials Studio (MS) 软件完成,模拟中选择 COMPASS 力场^[27]。利用 MS 软件中 SiO₂ 晶体结构模型,采用“Build Nanostructure”命令构建直径 1.2 nm 表面完全修饰羟基的 SiO₂ 纳米颗粒模型(Nano-Pure,简称 NP)。在 NP 单侧修饰 4 条十二烷基链,获得部分烷烃修饰的 SiO₂ 纳米颗粒模型(Nano-Modified,简称 NM),修饰前后的分子结构如图 1 所示。

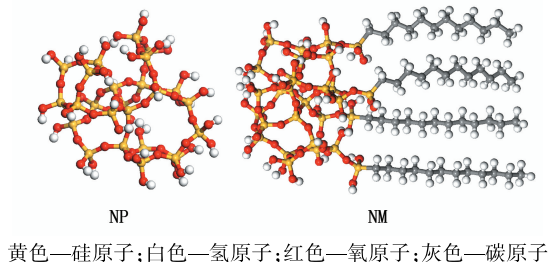
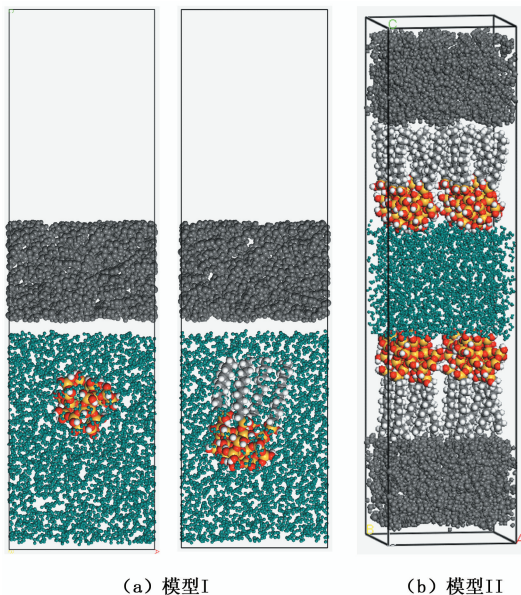


图 1 SiO₂ 纳米颗粒的分子结构

Fig.1 Structures of SiO₂ nanoparticles

为考察纳米颗粒在水相中向油/水界面的迁移行为,构建纳米颗粒的运移模型:构造 3.50 nm×3.50 nm×2.65 nm 的油相体系,油相采用正十六烷、萘和十氢萘按 60%、5%、35% 的比例(质量比)混合而成;构建含纳米颗粒(NP、NM)的水溶液体系,体系尺寸为 3.50 nm×3.50 nm×5.00 nm;通过“Build Layers”命令将油相和水相组合,在油相上添加厚度为 5.00 nm 的真空层,用于消除 z 轴方向周期性边界条件的影响,

构建模型(模型 I)如图 2 所示。



(a) 模型 I

(b) 模型 II

黑色—油分子;绿色—水分子;纳米粒子中原子的表示与图 1 一样

图 2 初始模型示意图

Fig.2 Initial configurations of systems

为考察纳米颗粒组装结构对油水界面性质的影响,构建纳米颗粒的油/水界面组装模型(模型 II,图 2)。组装模型采用界面研究中常用的对称模型。中间为含 1 200 个水分子的水相,尺寸为 3.50 nm×3.50 nm×2.93 nm;油/水界面处对称放置着由 4 个 NM 颗粒构成的组装层,NM 颗粒垂直于水相表面,修饰的烷烃链指向油相。

1.2 模拟细节

对模型 I:进行 1 000 ps 的正则系综(NVT) MD 模拟,模拟温度为 298 K;对于模型 II:首先进行 500 ps 等温等压(NPT) MD 模拟,压力为 0.1 MPa,然后再进行 1 000 ps NVT MD 模拟,模拟温度为 298 K。温度控制采用 Andersen^[28]方法;压强控制采用 Berendsen^[29]方法;库仑相互作用采用 Ewald^[30]方法计算;截断半径选取 0.95 nm,步长选择 1.0 fs,每 1 000 fs 记录一次体系的轨迹信息。

2 结果分析

2.1 SiO₂ 纳米颗粒的扩散运移过程

图 3 为考察周期内 NP、NM 颗粒向油/水界面运移的最终构型。模拟发现,相同时间内 NP 颗粒仍处在水相中;而 NM 颗粒则从水相运移到油/水界面处,其表面修饰的烷烃链已全部插入到油相中。为了揭示两个纳米颗粒运动形态差别的原因,计算了 NP、NM 颗粒与水分子的相互作用能,结果见表 1。

$$\Delta E = \frac{(E_{\text{Nano}} + E_{\text{Water}}) - E_{\text{Total}}}{V_{\text{Nano}}} \tag{1}$$

式中, ΔE 为单位体积相互作用能; E_{Total} 为纳米颗粒与水相体系的总能量; E_{Nano} 为纳米颗粒的能量; E_{Water} 为水相的能量; V_{Nano} 为纳米颗粒的占有体积。

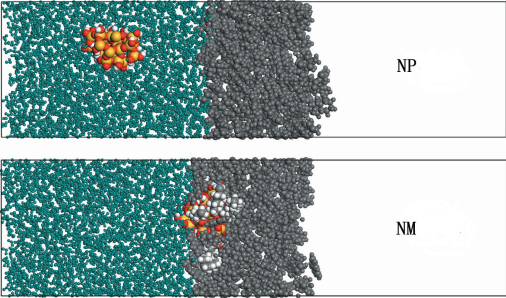


图 3 模型 I 的最终构型图

Fig.3 Final configurations of model I

表 1 单位体积纳米颗粒与水的相互作用能

Table 1 Unit volume interaction energy between nanoparticles and water molecules

kJ · mol ⁻¹ · nm ⁻³			
体系	ΔE_{Total}	$\Delta E_{\text{Electrostatic}}$	ΔE_{vdW}
NP	569.656	510.873	58.783
NM	361.124	265.481	95.643

相互作用能表示相互作用的强弱。由表 1 可知,单位体积上 NM 颗粒与水相的相互作用能小于

NP 颗粒与水相的相互作用能,表明 NM 颗粒在水中运动阻力小于 NP 颗粒的运动阻力,更容易向油/水界面扩散运移。此外,详细的能量分析表明纳米颗粒与水的相互作用主要源于它们之间的静电相互作用,NP 颗粒与水的静电相互作用远大于 NM 颗粒与水的静电相互作用,而 NM 与水的范德华作用略大于 NP 颗粒与水的范德华作用。由此可以看出,表面修饰的疏水烷烃链取代了 SiO₂ 表面亲水的羟基,大幅度削弱了纳米颗粒与水的静电相互作用,从而导致水与 NM 颗粒的相互作用能小于与 NP 颗粒的相互作用能,NM 颗粒更容易在水相中扩散运移。进一步通过分析纳米颗粒的均方位移曲线(MSD)考察其动态扩散过程(图 4),并通过下式计算纳米颗粒的扩散系数 D :

$$D = \frac{1}{6N} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N \langle |r_i(t) - r_i(0)|^2 \rangle. \tag{2}$$

式中, D 为分子的扩散系数; N 为体系中扩散分子数; $r_i(t)$ 为 t 时刻分子 i 的位置。计算表明,未修饰的纳米颗粒总的扩散系数及在 x 、 y 、 z 方向的扩散系数分别为 0.565×10^{-5} 、 0.129×10^{-5} 、 0.165×10^{-5} 、 $0.271 \times 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$;修饰烷烃后的 NM 颗粒相应地分别为 1.152×10^{-5} 、 0.120×10^{-5} 、 0.043×10^{-5} 、 $0.988 \times 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ 。

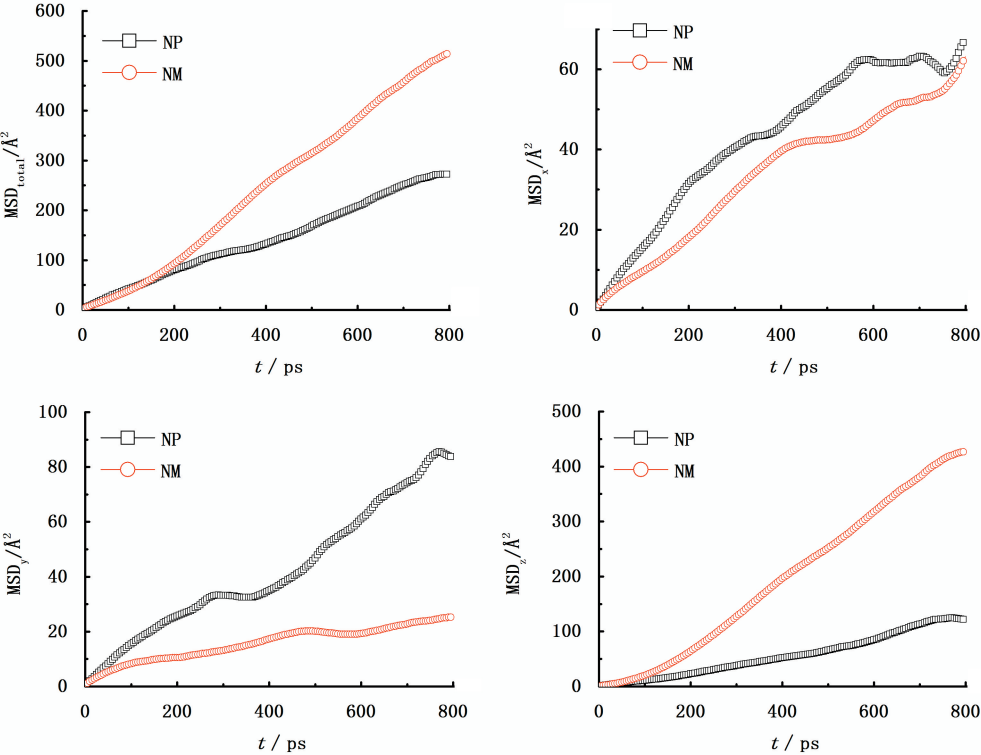


图 4 纳米颗粒的均方位移

Fig.4 Mean square displacements of nanoparticles

从图 4 和扩散系数看出,修饰烷烃的 NM 颗粒整体的扩散性能优于 NP 颗粒的, x,y,z 方向的 MSD 曲线和扩散系数 D 表明:NM 颗粒在 x,y 方向的扩散运移速度远小于 z 方向的扩散速度,而 NP 颗粒在 x,y 方向的扩散运移速度远大于 z 方向的。对比发现,在 x,y 方向上 NM 颗粒扩散能力小于 NP 颗粒的扩散能力,而在 z 方向上 NM 颗粒的扩散能力远大于 NP 颗粒的扩散能力。这些结果主要源于纳米颗粒与油相的作用,对于表面羟基化的 NP 颗粒,其与水相的作用强于与油相的作用,因此 NP 颗粒沿着 x,y 方向在水相中的运移能力大于沿着 z 轴向油相的运移能力;对于烷烃修饰的 NM 颗粒,其修饰烷烃与油相存在较强的吸引作用,因此 NM 颗粒沿着 z 轴向油相的运移能力大于沿着 x,y 方向在水相中的运移能力。上述研究表明,修饰疏水烷烃的纳米颗粒更容易向油水界面聚集。

2.2 纳米颗粒的组装行为

纳米颗粒从水相迁移到油/水界面后将组装成单层膜结构,从组装膜的界面构型及其对油/水界面张力的影响两个方面考察纳米颗粒的界面行为。

2.2.1 界面构型

为对比纳米颗粒对油/水界面结构的影响,分析油/水和 NM 颗粒/油/水体系的平衡构型,如图 5 所

示。由图 5 可见,对于油/水体系,油和水分子由于极性不同,互不相溶,其油/水体系界面平整;对于 NM 颗粒/油/水体系,NM 颗粒表面羟基化的部分浸入水相,修饰的烷烃插入油相,在界面形成单层膜结构,油/水界面通过 NM 颗粒相互“整合”在一起而变得凹凸不平。这种界面结构将有利于增强油、水两相之间的运动相关性,即水相对油相的携带能力将增强。为了更清晰地观察 NM 组装膜的结构以及油、水分子的界面分布,计算沿界面法向(z 方向)各种分子的密度分布曲线,结果如图 6 所示。

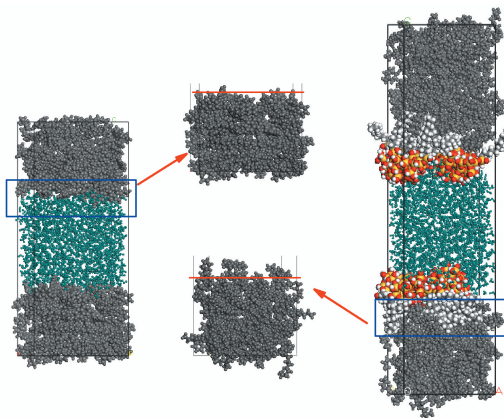


图 5 体系的平衡构型
Fig.5 Configurations of system

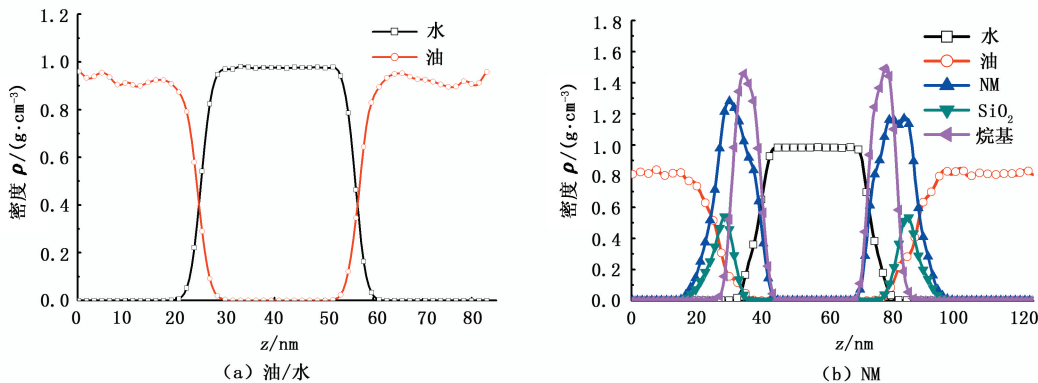


图 6 油/水和 NM 纳米颗粒/油/水体系中各组分的密度剖面

Fig.6 Density profiles of different components in system oil/water and NM nanoparticle/oil/water

由图 6 可见,油相和水相被 NM 颗粒体系分隔;对于 NM 颗粒上的烷烃,它们几乎全部进入油相(图 7)。

2.2.2 界面张力

$$\gamma = \frac{1}{2} L_z \left[p_{zz} - \frac{1}{2} (p_{xx} + p_{yy}) \right]. \tag{3}$$

式中, L_z 表示体系 z 轴方向的长度; p_{xx} 、 p_{yy} 、 p_{zz} 分别表示体系在 x,y,z 轴方向的压力张量。

界面张力是油/水界面的重要性质,由式(3)^[31] 计算得到油/水和 NM 颗粒/油/水体系的界面张力分别为 51.07 和 32.03 mN·m⁻¹。显然,NM 颗粒在油/水界面自组装成膜后,油/水界面张力显著降低,说明 NM 纳米颗粒具有降低油/水界面张力的性能。油/水界面张力降低的原因可以归咎于 NM 颗粒在油/水界面组装成膜后,导致油/水界面层厚度增加,油、水分子间相互作用加强。

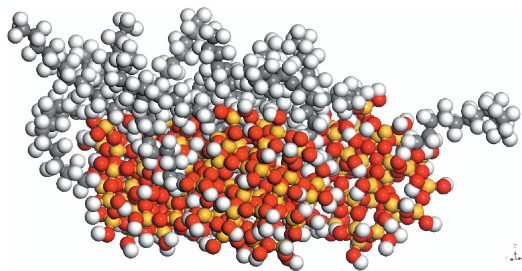


图 7 NM 纳米颗粒在油水界面的组装膜构型
Fig. 7 Configuration of NM nanoparticles monolayer at oil/water interface

根据“10% ~ 90% 表面厚度原则”和“90% ~ 90% 界面厚度原则”^[32],通过密度分布获得油相表面层厚度(t_{oil})、水相表面层厚度(t_{water})和油/水界面层厚度(t_{total}),结果列于表 2。由表 2 可知 NM 颗粒在界面自组装后体系的 t_{oil} 、 t_{water} 及 t_{total} 大幅度增加,表明 NM 颗粒加入后,界面区域内的油、水分子数增加,油/水界面区域扩展,平整的油/水界面变得凹凸不平。这主要是由于 NM 颗粒在油/水界面成膜后,亲水性的 SiO_2 浸入水相,疏水性的烷烃链插入油相,油水相的作用面积增加,相互作用增强,导致体系的界面张力降低。

表 2 体系的界面层厚度

Table 2 Interfacial thickness of two systems

体系	界面厚度 L/nm		
	t_{water}	t_{oil}	t_{total}
油/水	0.420	0.515	0.555
NM/油/水	0.769	1.390	2.250

油、水两相界面简图^[33]见图 8。其中, A_{aa} 、 A_{bb} 分别为油、水界面分子和主体分子的相互作用能; A_{ab} 、 A_{ba} 分别为界面油分子和界面水分子的相互作用能。

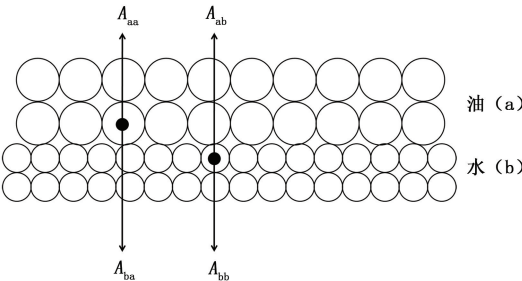


图 8 油、水两相界面简图

Fig. 8 Simplified diagram of interface between oil and water phases

根据界面张力产生机制,界面张力是单位面积上的界面自由能,即 $(A_{aa}-A_{ba})+(A_{bb}-A_{ab})$ 。对于油/水和 NM 颗粒/油/水体系,它们的 A_{aa} 和 A_{bb} 相

同, A_{ba} 、 A_{ab} 不同。计算得到油/水体系的 A_{ba} 、 A_{ab} 都等于 $-0.999\,89\text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{\AA}^{-2}$,而 NM 颗粒/油/水体系中 A_{ba} 、 A_{ab} 分别为 $-2.849\,91$ 、 $-2.071\,34\text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{\AA}^{-2}$ 。由此可见,NM 颗粒在油水界面组装成膜后, A_{ba} 、 A_{ab} 数值均明显增大,界面自由能大大降低,导致体系的界面张力显著下降。

综上所述,NM 颗粒在油/水界面组装成膜,羟基化的 SiO_2 部分浸入水相,烷烃链插入油相,界面层厚度增大,界面处的油、水分子数目增加,相互作用增强,界面自由能降低,从而导致界面张力下降。

3 结 论

(1)表面完全羟基化的 SiO_2 纳米颗粒由于羟基的强亲水性,在水相中运动受到较大的束缚,向油/水界面扩散运移能力较弱,难以运移到油/水界面进行吸附组装;对于烷烃修饰的纳米颗粒,由于修饰的烷烃链的疏水性,受到油相的吸引,能自发地向油/水界面运移。

(2)油/水界面处的 NM 纳米颗粒形成稳定的组装单层膜结构,羟基化的 SiO_2 部分浸入水相,烷烃链插入油相,油水界面变得凹凸不平,提高了水相对油相的携带能力。

(3)界面层厚度的增大使界面处的油、水分子数目增加,相互作用增强,界面自由能降低,从而导致界面张力下降。这种烷烃修饰的纳米颗粒可以有效地降低油/水界面张力。

参考文献:

[1] FARRELL H M, MALIN E L, BROWN E M, et al. Casein micelle structure: what can be learned from milk synthesis and structural biology? [J]. Current Opinion in Colloid & Interface Science, 2006,11(2/3):135-147.
[2] SAHOO S K, LABHASETWAR V. Nanotech approaches to drug delivery and imaging[J]. Drug Discovery Today, 2003,8(24):1112-1120.
[3] KIM K H, SANEDRIN R G, HO A M, et al. Direct delivery and submicrometer patterning of DNA by a nanofountain probe[J]. Advanced Materials, 2008,20(2):330-334.
[4] GEORGE M C, MOHRAZ A, PIECH M, et al. Direct laser writing of photoresponsive colloids for microscale patterning of 3D porous structures[J]. Advanced Materials, 2009,21(1):66-70.
[5] RAVIKUMAR C, SINGH K, BANDYOPADHYAYA R. Formation of nanoparticles of water-soluble molecules;

- experiments and mechanism [J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2010,114(19):8806-8813.
- [6] KARIMI A, FAKHROUEIAN Z, BAHRAMIAN A. Wettability alteration in carbonates using zirconium oxide nanofluids: EOR implications [J]. *Energy & Fuels*, 2012,26(2):1028-1036.
- [7] 顾锡奎, 杜芳艳, 王小泉. 化学深部调驱技术现状与进展[J]. *石油化工应用*, 2009,28(3):4-7.
GU Xikui, DU Fangyan, WANG Xiaoquan. Current situation and development of chemical deep oil displacement regulation technology[J]. *Petrochemical Industry Application*, 2009,28(3):4-7.
- [8] 朱红, 夏建华, 孙正贵, 等. 纳米二氧化硅在三次采油中的应用研究[J]. *石油学报*, 2006,27(6):96-99.
ZHU Hong, XIA Jianhua, SUN Zhenggui, et al. Application of nanometer-silicon dioxide in tertiary oil recovery [J]. *Acta Petrolei Sinica*, 2006,27(6):96-99.
- [9] 李俊华, 王佳, 周会强. 纳米硅材料在石油工业中的应用进展[J]. *应用化工*, 2012,41(1):167-173.
LI Junhua, WANG Jia, ZHOU Huiqiang. Application and development of nano-silicon materials in oil industry [J]. *Applied Chemical Industry*, 2012,41(1):167-173.
- [10] 陈馥, 熊俊杰, 匡绪兵, 等. 纳米技术在油田应用中的最新研究进展[J]. *应用化工*, 2010,39(8):1227-1230.
CHEN Fu, XIONG Junjie, KUANG Xubing, et al. Latest study of the application of nanotechnology in oilfield [J]. *Applied Chemical Industry*, 2010,39(8):1227-1230.
- [11] EMANUELE V, ROBERTO P. Pickering emulsions: interfacial tension, colloidal layer morphology, and trapped-particle motion[J]. *Langmuir*, 2003,19(17):6650-6656.
- [12] HENG F, ALBERTO S. Nanoparticle effects on the water-oil interfacial tension[J]. *Physical Review E*, 2012,86:051610.
- [13] SONG Y M, LUO M X, DAI L L. Understanding nanoparticle diffusion and exploring interfacial nanorheology using molecular dynamics simulations [J]. *Langmuir*, 2010,26(1):5-9.
- [14] RANA S, YU X, PATRA D, et al. Control of surface tension at liquid-liquid interfaces using nanoparticles and nanoparticle-protein complexes [J]. *Langmuir*, 2012,28(4):2023-2027.
- [15] CHANDA J, BANDYOPADHYAY S. Molecular dynamics study of a surfactant monolayer adsorbed at the air/water interface [J]. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2005,1(5):963-971.
- [16] YUAN S L, CHEN Y J, XU G Y. Molecular dynamics studies on octadecylammonium chloride at the air/liquid interface[J]. *Colloids and Surfaces, A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2006,280(1/3):108-115.
- [17] DOMINGUEZ H, RIVERA M. Mixtures of sodium dodecyl sulfate/dodecanol at the air/water interface by computer simulations [J]. *Langmuir*, 2005,21(16):7257-7262.
- [18] SCHWEIGHOFER K J, ULRICH E, BERKOWITZ M. Structure and dynamics of water in the presence of charged surfactant monolayers at the water-CCl₄ interface: a molecular dynamics study[J]. *Journal of Physical Chemistry B*, 1997,101(50):10775-10780.
- [19] DOMINGUEZ H. Computer simulations of surfactant mixtures at the liquid/liquid interface[J]. *Journal of Physical Chemistry B*, 2002,106(23):5915-5924.
- [20] WU R L, DENG M L, KONG B. Molecular dynamics simulations of ammonium surfactant monolayers at the heptane/water interface [J]. *Journal of Physical Chemistry B*, 2009,113(38):12680-12686.
- [21] FROST D S, DAI L L. Molecular dynamics simulations of nanoparticle self-assembly at ionic liquid-water and ionic liquid-oil interfaces[J]. *Langmuir*, 2011,27(18):11339-11346.
- [22] FAN H, RESASCO D, STRIOLO A. Amphiphilic silica nanoparticles at the decane-water interface: insights from atomistic simulations [J]. *Langmuir*, 2011,27(9):5264-5274.
- [23] PRAUS P, DVORSKY R, HORINKOVA P, et al. Precipitation, stabilization and molecular modeling of ZnS nanoparticles in the presence of cetyltrimethylammonium bromide[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2012,377(1):58-63.
- [24] WHITBY C P, FORNASIERO D, RALSTON J, et al. Properties of fatty amine-silica nanoparticle interfacial layers at the hexane-water interface [J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2012,116(4):3050-3058.
- [25] UDAYANA R J K, KALESKY J B R, et al. Molecular dynamics simulations of surfactant functionalized nanoparticles in the vicinity of an oil/water interface [J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2010,114(28):12151-12157.
- [26] HOANG V V. Molecular dynamics simulation of amorphous SiO₂ nanoparticles[J]. *Journal of Physical Chemistry B*, 2007,111(44):12649-12656.
- [27] SUN H. COMPASS: an ab initio force-field optimized for condensed phase applications-overview with details

- on alkane and benzene compounds[J]. *Journal of Physical Chemistry B*, 1998, 102(38): 7338-7364.
- [28] ANDREA T A, SWOPE W C, ANDERSEN H C. The role of long ranged forces in determining the structure and properties of liquid water[J]. *Journal of Chemical Physics*, 1983, 79(9): 4576-4584.
- [29] BERENDSEN H J C, POSTMA J P M, GUNSTEREN V W F. Molecular dynamics with coupling to an external bath[J]. *Journal of Chemical Physics*, 1984, 81(8): 3684-3690.
- [30] EWALD P. Die berechnung optischer und elektrostatischer gitterpotentiale[J]. *Annalen der Physik*, 1921, 369: 253-287.
- [31] CHANDA J, BANDYOPADHYAY S. Molecular dynamics study of surfactant monolayers adsorbed at the oil/water and air/water interfaces[J]. *Journal of Physical Chemistry B*, 2006, 110(46): 23482-23488.
- [32] JANG S S, LIN S T, MAITI P K, et al. Molecular dynamics study of a surfactant-mediated decane-water interface: effect of molecular architecture of alkyl benzene sulfonate[J]. *Journal of Physical Chemistry B*, 2004, 108(32): 12130-12140.
- [33] ROSEN J M, KUNJAPPU J T. *Surfactants and interfacial phenomena*[M]. New Jersey: John Wiley & Sons, Inc, 2004: 209.

(编辑 刘为清)