

NaSal/2SHNC 对 R_{14} HTAB 体系自组装行为的影响机制

孙浩玉¹, 张 琰², 高 阳³, 李嘉伟², 张英男², 燕友果², 张 军²

(1. 中国石化胜利石油工程有限公司钻井工艺研究院, 山东东营 257000; 2. 中国石油大学(华东)材料科学与工程学院, 山东青岛 266580; 3. 中国石油新疆油田公司勘探开发研究院, 新疆克拉玛依 834000)

摘要:采用粗粒化分子动力学(CGMD)模拟方法研究水杨酸钠(NaSal)和2-羟基萘-3-羧酸酯(2SHNC)两种有机盐对阳离子表面活性剂3-烷氧基-2-羟丙基三甲基卤化铵(R_{14} HTAB)自组装过程及组装体性能的影响。结果表明:球型胶束的形成经历成核、团簇融合2个阶段;蠕虫状胶束的形成经历成核、团簇融合和胶束融合3个阶段;囊泡形成经历成核、团簇融合、胶束融合、盘状胶束和盘状胶束卷曲5个阶段;与NaSal相比,2SHNC在低浓度下即能促进胶束融合自组装形成蠕虫状胶束,且能促进复杂胶束囊泡的形成,表现出更强的促进胶束融合能力;2SHNC形成的蠕虫状胶束体系在非轴向拉伸过程中表现出更强的抗拉强度,2SHNC/ R_{14} HTAB体系形成的蠕虫状胶束更长,得到的体系黏弹性更好。

关键词:有机盐类型;阳离子表面活性剂;自组装;黏弹性

中图分类号:TE 39 **文献标志码:**A

引用格式:孙浩玉,张琰,高阳,等. NaSal/2SHNC 对 R_{14} HTAB 体系自组装行为的影响机制[J]. 中国石油大学学报(自然科学版),2019,43(6):171-176.

SUN Haoyu, ZHANG Yan, GAO Yang, et al. Effecting mechanism of organic salts NaSal/2SHNC on self-assembly of cationic surfactant R_{14} HTAB[J]. Journal of China University of Petroleum(Edition of Natural Science),2019,43(6):171-176.

Effecting mechanism of organic salts NaSal/2SHNC on self-assembly of cationic surfactant R_{14} HTAB

SUN Haoyu¹, ZHANG Yan², GAO Yang³, LI Jiawei², ZHANG Yingnan², YAN Youguo², ZHANG Jun²

(1. Drilling Technology Research Institute of Shengli Petroleum Engineering Company Limited, SINOPEC, Dongying 257000, China;

2. School of Materials Science and Engineering in China University of Petroleum(East China), Qingdao 266580, China;

3. Research Institute of Exploration and Development, Xinjiang Oilfield Company, Karamay 834000, China)

Abstract: The self-assembly process and the mechanical property of 3-alkoxy-2-hydroxypropyltrimethylammonium halide (R_{14} HTAB) modulated by two kinds of organic salts of sodium salicylate (NaSal) and 2-hydroxynaphthalene-3-carboxylate (2SHNC) were investigated through the coarse-grained molecular dynamics (CGMD) simulation. The results show that the formation of spherical micelles undergoes two stages: nucleation and cluster fusion. The formation of worm-like micelles includes three stages: nucleation, cluster fusion and micelle fusion. And the vesicle formation has five stages: nucleation, cluster fusion, micelle fusion, disc-shaped micelles and disc-shaped micelle coiling. Compared with NaSal, 2SHNC presents stronger ability to promote micelle fusion, which can be confirmed by two facts: the first is that the worm-like micelle could be obtained at lower 2SHNC concentration; the second is that the 2SHNC could promote to form more complex micelle of vesicle. Furthermore, the worm-like micelle promoted by the 2SHNC exhibits stronger tensile strength tested by non-axial stretch.

收稿日期:2019-01-22

基金项目:国家重大专项子课题(2016ZX05022006);中央高校基本科研业务费专项(19CX05001A)

作者简介:孙浩玉(1978-),男,高级工程师,博士,博士后,研究方向为石油钻井工程技术。E-mail:sunhaoyu.oss@sinopec.com。

通信作者:燕友果(1980-),男,教授,博士,研究方向为分子模拟在石油工程领域的应用。E-mail:yyg@upc.edu.cn。

hing, meaning that the 2SHNC could induce to form longer worm-like micelle and possesses better viscoelastic.

Keywords: organic salt type; cationic surfactant; self-assembly; viscoelasticity

表面活性剂作为一种基本的组装基元,由于其特殊的两亲分子结构,在体相溶液中,表面活性剂具有逃离水相的趋势,可自发地组装形成各种形貌的胶束结构,例如球形、蠕虫状、囊泡、片层等。蠕虫状胶束因其特殊的黏弹性被广泛应用于油气田开发、减阻、生活用品等领域^[1-3]。蠕虫状胶束的构筑方法众多,例如:无机盐/表面活性剂混合构筑法^[4]、有机盐/表面活性剂混合构筑法^[5]、阴阳复配体系构筑法^[6]、聚合物/表面活性剂混合构筑法^[7]、纳米颗粒/表面活性剂混合构筑法^[8]等。其中有机盐/表面活性剂混合构筑蠕虫状胶束的基本原理是:有机盐通过屏蔽带电头基间的静电斥作用,使表面活性剂头基靠得更紧密,从而增加体系端部能量;同时有机盐的疏水尾链插入到胶束内核与表面活性剂的疏水尾链增强了疏水缔合作用;这两种作用共同促使胶束的形成^[9]。此外有机盐类型是影响蠕虫状胶束结构和性能的重要因素之一,魏西莲等^[10]采用实验方法研究有机盐类型对表面活性剂体系流变性能的影响,推测不同的有机盐在胶束表面吸附量不同,从而调控蠕虫状胶束的形貌,进而影响体系的零剪切黏度。蠕虫状胶束体系的研究大多采用实验手段,通过流变表征体系的剪切黏度、黏性弹性模量等宏观流变性能,通过小角度中子散射(SANS)、动态光散射(DLS)、低温透射电子显微镜(Cryo-TEM)等^[11-14]表征胶束尺寸、自组装形态等微观形貌,但难以观测蠕虫状胶束自组装形成的微观过程,无法定量表征分子之间的相互作用强度。分子动力学模拟^[15]尤其是粗粒化分子动力学和耗散粒子动力学,可以构建分子间的相互作用模型,用于考察微米、微秒量级空间和时间尺度内的表面活性剂自组装过程,通过提取构型参数、相互作用等参量揭示自组装机制,并通过抗拉强度计算揭示其黏弹性等力学性能。相关模拟能够弥补实验中无法观察微观过程并揭示分子原子间相互作用的不足。Noriyoshi等^[16]采用耗散粒子动力学(DPD)的方法研究表面活性剂自组装形成蠕虫状胶束的过程,揭示了蠕虫状胶束的自组装的过程可分为成核、球形胶束形成及长大、椭球型胶束形成及蠕虫状胶束形成与长大4个过程;Maiti等^[17]研究低聚表面活性剂的聚合度和联接基团长度对自组装结构的影响,发现随着聚合度的增加,表面活性剂自组装形貌由球形转变为蠕虫

状结构;Sangwai等^[18-19]研究水杨酸钠(NaSal)对CTAC胶束形貌转变的影响,发现水杨酸钠诱导球形胶束转变为棒状胶束的两种方式,一是水杨酸根插入到胶束内部改变胶束形貌,二是水杨酸根的插入改变胶束表面的Zeta电位,促使胶束融合,促进蠕虫状胶束的形成。笔者采用粗粒度分子动力学模拟的方法,以有机盐水杨酸钠(NaSal)和2-羟基萘-3-羧酸酯(2SHNC)两种有机盐为研究对象,研究两种有机盐类型对阳离子表面活性剂3-烷氧基-2-羟丙基三甲基卤化铵(R_n HTAB, $n=14$)体系自组装行为以及对组装体中蠕虫状胶束黏弹性能的影响。

1 模型及模拟方法

采用Gromacs 4.5.5程序包^[20],模拟表面活性剂体系为 $200\text{ Å} \times 200\text{ Å} \times 200\text{ Å}$ 盒子,设置盒子具有三维周期性边界条件,采用NPT系综,温度设定为300 K,压强为0.1 MPa,模拟的时间步长为20 fs,系统的控温方法采用Berendsen^[21],控压方法采用Berendsen。非键相互作用截断半径设定为12 Å,采用Gromacs标准移位函数分段处理的方法,对在标准移位半径0.9 nm到截断半径1.2 nm之间的范德华相互作用加入移位函数,静电相互作用在0~1.2 nm之间。所有的构型均模拟了1 μs来获得其平衡稳定结构。构型的可视化采用VMD(Visual Molecular Dynamics)软件^[22]实现。

模拟中采用Martini^[23]力场,根据分子结构和力场珠子的划分规则,图1给出了 R_{14} HTAB、NaSal、2SHNC的粗粒化示意图。其中 R_{14} HTAB的疏水尾

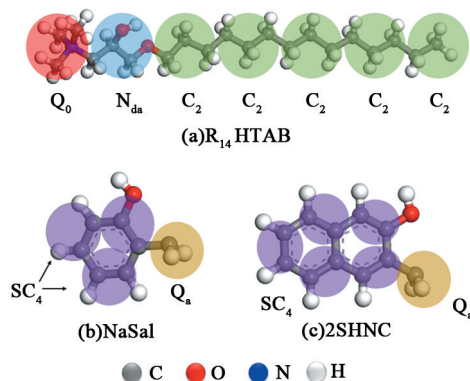


图1 全原子结构粗粒化示意图

Fig. 1 Full-atomic coarsegraining models

链由5个 C_2 珠子组成, C_2 珠子包含了3个疏水C

原子及与其成键的氢原子,亲水头基为 Q_0 和 N_{da} 两个珠子,其中 Q_0 带正电; $NaSal$ 由 3 个 SC_4 珠子和一个带负电的 Q_a 珠子构成^[24];2SHNC 由 5 个 SC_4 珠子和一个带负电的 Q_a 珠子构成。粗粒化的水珠子由 4 个水分子组成,体系中包含两种类型的水珠子,一种正常的水珠子 W,另外一种是水珠子 BW,采用两种水珠子的目的是为了打破溶液粒子统一大小的晶格参数,防止水形成有序晶体结构,BW 珠子占全部水珠子的 10%。

为考察有机盐浓度对表面活性剂 R_{14} HTAB 自组装的影响,模拟中固定盒子中 R_{14} HTAB 的个数为 900(浓度为 180 mmol/L),调控 $NaSal$ 与 2SHNC 的浓度分别为 0、36、72、108、144、180 mmol/L,与表面活性剂 R_{14} HTAB 对应的物质的量比 R_c (有机盐:表

面活性剂)分别为:0、0.2、0.4、0.6、0.8、1.0。

2 结果分析

2.1 不同复配下胶束的自组装过程

图 2 给出了两种有机盐浓度逐渐增加时表面活性剂的自组装平衡构型。对于 $NaSal$,随着浓度的增加,其胶束形貌经历了从球形到蠕虫再到枝状的转变。当 R_c 从 0 增加至 0.4 时,球形胶束个数逐步减少,胶束尺寸逐渐增大,说明 $NaSal$ 能够加速胶束的融合;当 $R_c=0.6$ 时,球形胶束融合形成短棒状的蠕虫状胶束;当 $R_c=0.8$ 时,蠕虫状胶束继续生长变长,胶束个数继续减少;当 $R_c=1.0$ 时,蠕虫状胶束融合形成树枝状胶束。

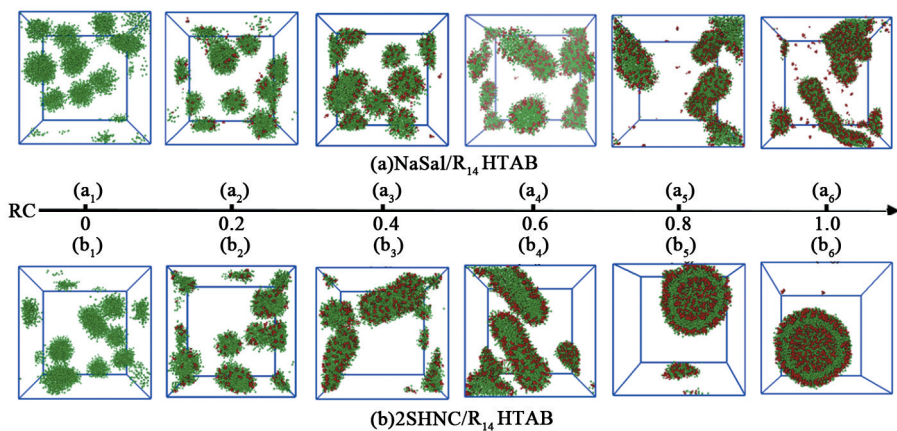


图 2 体系平衡构型

Fig. 2 Equilibrium configuration of system

对于 2SHNC,随着浓度的增加,其胶束形貌经历了从球形到蠕虫再到囊泡的转变。当 R_c 从 0 增加到 0.2 时,球形胶束个数逐渐减少,胶束尺寸逐渐增大,说明 2SHNC 同样可以加速球形胶束的融合;当 $R_c=0.4$ 时,球形胶束融合形成短棒状蠕虫胶束;当 $R_c=0.6$ 时,蠕虫状胶束继续生长变长,胶束个数继续减少;当 $R_c=0.8$ 和 1.0 时,胶束卷曲形成圆盘状胶束后继续卷曲形成囊泡。

对比两种有机盐的影响,复配体系形成蠕虫状胶束时所需要的有机盐 2SHNC 数量更低,且随着 2SHNC 个数的增加其胶束形貌转变更快。如 2SHNC 在 $R_c=0.2$ 时已经促使球形胶束转变为棒状的蠕虫状胶束,而 $NaSal$ 则在 $R_c=0.4$ 时才有这样的转化;另外,2SHNC 添加到 $R_c=0.8$ 后会获得囊泡胶束,但 $NaSal$ 在相同浓度时不能得到。上述对比说明了 2SHNC 具有更强的促进胶束融合的能力。

2.2 不同形貌胶束的自组装过程

表面活性剂在水溶液中形成不同形貌的胶束,其动态形成过程有助于了解胶束的生长动力学。在不同的有机盐添加浓度下,可以获得球形、蠕虫和囊泡 3 种胶束结构,通过提取 3 种蠕虫形貌形成过程中不同时刻的构型揭示其生长行为。

2.2.1 球形胶束形成过程

图 3 给出了球形胶束形成过程中最大胶束聚集数(N_m)的变化,可用于表征胶束融合过程中包含表面活性剂数目的变化。从图中可以看出:起初,随机分布在水溶液中的表面活性剂快速聚集形成许多小的球形胶束(时间小于 50 ns),对应的 N_m 较小;随后,临近的球形胶束融合形成较大的球形胶束(时间小于 100 ns), N_m 逐渐增大;当融合完成后,获得几个体积较大的稳定球形胶束(时间大于 100 ns),对应的 N_m 不再变化, N_m 对应数值为 200。

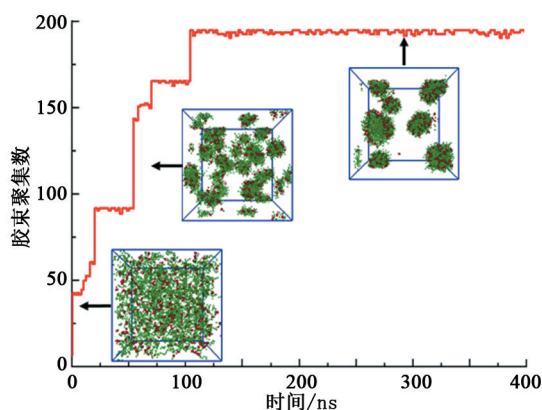


图3 球形胶束形成过程中 N_m 变化及对应的典型构型

Fig. 3 Evolution of N_m and corresponding typical configuration during formation of spherical micelles

2.2.2 蠕虫状胶束形成过程

图4给出了蠕虫的形成过程中 N_m 的变化曲线。在初始阶段,随机分布的表面活性剂形成大量小的球形胶束(时间小于50 ns),对应的 N_m 较小;然后,这些球形胶束继续融合, N_m 曲线中多个台阶表明发生了多次融合(耗时较长,时间小于250 ns);球形胶束融合后最终形成了稳定的蠕虫状胶束(时间大于250 ns), N_m 对应数值为300,大于形成稳定球形胶束的数值(200)。

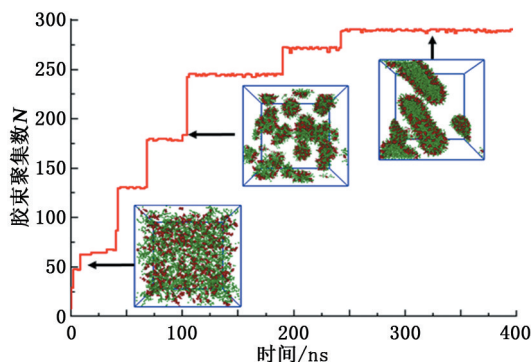


图4 蠕虫状胶束形成过程中 N_m 变化及对应的典型构型

Fig. 4 Evolution of N_m and corresponding typical configuration during formation of worm-like micelles

2.2.3 囊泡形成过程

图5给出了囊泡形成过程中 N_m 的变化。同上述球形和蠕虫胶束类似,起初随机分布的表面活性剂形成了大量小的球形胶束;随后这些球形胶束会融合形成几条蠕虫状胶束;随后这些蠕虫状胶束融合转化为一个巨大的层状结构,然后这层状结构弯曲并闭合形成囊泡。与前面两种结构相比,囊泡的形成经历了蠕虫到层状结构转变然后弯曲闭合的复杂过程,该结构的形成需要更强的融合能力,对应在

高浓度的有机盐 2SHNC 环境下形成。

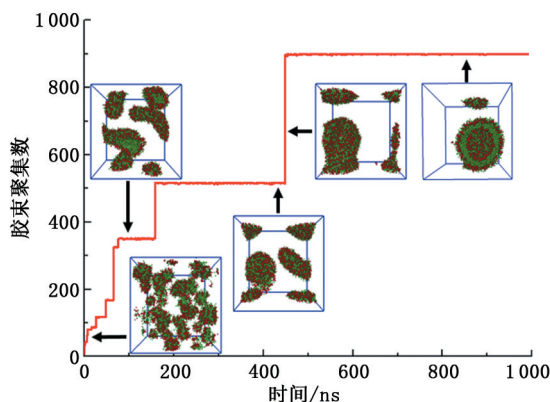


图5 囊泡形成过程中 N_m 变化及对应的典型构型

Fig. 5 Evolution of N_m and corresponding typical configuration during formation of vesicle micelles

2.3 胶束融合能力及蠕虫胶束力学性质

2.3.1 NaSal 和 2SHNC 体系的胶束融合能力

为了阐明 NaSal、2SHNC 促进胶束融合的能力,选取蠕虫状胶束作为对比。采用伞形抽样的方法分别计算两类有机盐体系中蠕虫状胶束在形成过程中的融合自由能(图2)。对于 NaSal,盐离子与表面活性剂摩尔浓度比 R_c 为 0.6 和 0.8 时形成了蠕虫;对于 2SHNC, R_c 为 0.4 和 0.6 时形成了蠕虫。分别计算 R_c 为 0.4、0.6、0.8 时胶束的融合自由能,结果见图6,其中融合自由能为负值表明胶束有自发融合趋势,绝对值越大表明融合能力越强。从图6看出,NaSal 在 $R_c = 0.6$ 时胶束的融合能力最大,2SHNC 在 $R_c = 0.4$ 时胶束的融合能力最大。另外,2SHNC 在胶束间距小于 65 Å 时融合自由能开始小于 0,开始发生融合;NaSal 需要胶束间距小于 55 Å 时融合自由能开始小于 0,融合才可以发生。相比 NaSal,2SHNC 在更低的浓度更远的距离就可以促进胶束的融合。因此 2SHNC 具有更强的促进胶束融合的能力。进一步分析两种有机盐融合能力不同的原因,可能是 2SHNC 具有两个苯环,而 NaSal 只有一个苯环,导致 2SHNC 与表面活性剂 R_{14} HTAB 的疏水尾链具有更强作用,能够更有效地促进了胶束的融合,这一模拟结果与已有的实验研究结果是一致的^[25]。

2.3.2 黏弹性能差异

蠕虫状胶束的长度和稳定性是其黏弹性能的重要评价指标之一。溶液中的蠕虫状胶束处于动态平衡,经历着断裂—融合的可逆过程。通过蠕虫状胶束断裂过程中的分离能间接评价可以形成蠕虫状胶束的长度及其稳定性。断裂需要的分离能越大意味着融合后的胶束不容易断裂,可以形成长度大且稳

定的蠕虫状胶束,对应的黏弹性能较好。通过计算蠕虫状胶束单轴拉伸过程中受力的变化曲线(图 7)评价胶束断裂的分离能。采用的是 NaSal 和 2SHNC 在 $R_c=0.6$ 获得的蠕虫状胶束。拉伸过程中受力的积分定义为单个蠕虫状胶束的分离能^[25]。图 7 表明:一方面,相比于 NaSal,2SHNC 的蠕虫状胶束可

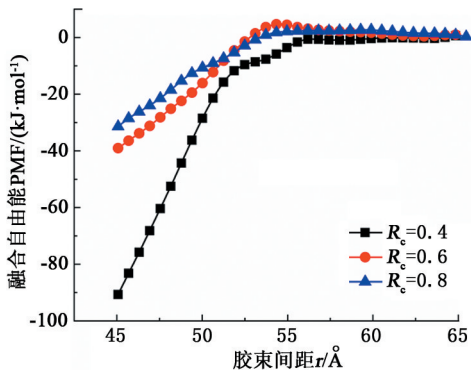


图 6 蠕虫状胶束形成过程中融合自由能的变化

Fig. 6 Variation of fusion free energy in formation of worm-like micelles

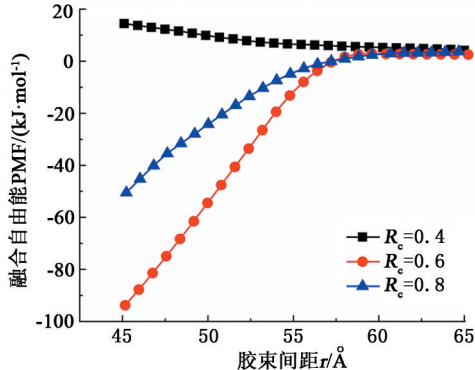


图 7 蠕虫状胶束在非轴向拉伸过程中受力的变化

Fig. 7 Variations of force in stretching of worm-like micelle

3 结 论

(1) NaSal/R₁₄ HTAB 和 2SHNC/R₁₄ HTAB 两种混合体系随着浓度的增加可以获得球形、蠕虫、囊泡 3 种胶束形貌,与实验观察结果一致。球形胶束融合形成棒状胶束,棒状胶束转变成层状胶束并卷曲闭合是蠕虫状胶束和囊泡形成的关键环节。

(2) 相比 NaSal,2SHNC 具有更强的促进胶束融合的能力,在更低的浓度下就可以诱导蠕虫状胶束的形成,而且可以获得形貌更加复杂的囊泡胶束。

(3) 2SHNC 可以促进更长且稳定的蠕虫状胶束形成,具有更优异的黏弹性能。

参考文献:

[1] CHU Z, FENG Y, SU X, et al. Wormlike micelles and

以拉伸的长度更大而保持不断裂;另一方面,2SHNC 的蠕虫状胶束在拉断过程中需要施加的力显著高于 NaSal 的蠕虫状胶束。在图 7 中通过对两条拉力曲线积分可以得到蠕虫状胶束的分离能,2SHNC 的分离能要远大于 NaSal 的分离能,说明 2SHNC 促进更长、黏弹性更好的蠕虫状胶束形成。

solution properties of a C₂₂-tailed amidosulfobetaine surfactant[J]. Langmuir, 2010,26(11):7783-7791.

[2] 韩冬,彭显强,郭尚平.表面活性剂对水湿砂岩的渗吸规律及其对采收率的影响[J]. 中国石油大学学报(自然科学版),2009,33(6):142-147.

HAN Dong, PENG Yuqiang, GUO Shangping, et al. Imbibition on behavior of surfactant in water-wet sandstone and its effects on recovery efficiency[J]. Journal of China University of Petroleum (Edition of Natural Science), 2009,33(6):142-147.

[3] 王业飞,焦翠.羧甲基化的非离子型表面活性剂与石油磺酸盐的复配试验[J]. 石油大学学报(自然科学版),1996,20(4):52-55.

WANG Yefei, JIAO Cui. Compound test of carboxymethylated nonionic surfactant and petroleum sulfonate[J]. Journal of the University of Petroleum, China (Edition of Natural Science), 1996,20(4):52-55.

[4] DAY G M, WD S M, JONES W. A strategy for predicting the crystal structures of flexible molecules: the polymorphism of phenobarbital [J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2007,9(14):1693-1704.

[5] FONTELL K, KHAN A, LINDSTROM B, et al. Phase equilibria and structures in ternary systems of a cationic surfactant (C₁₆ TABr or (C₁₆ TA)₂SO₄), alcohol, and water[J]. Colloid & Polymer Science, 1991,269(7):727-742.

[6] ZHANG Y, LUO Y, WANG Y, et al. Single-component wormlike micellar system formed by a carboxylbetaine surfactant with C₂₂ saturated tail[J]. Colloids & Surfaces A;

- Physicochemical & Engineering Aspects, 2013, 436: 71-79.
- [7] OELSCHLAEGE C, SUWITA P, WILLENBACHER N. Effect of counterion binding efficiency on structure and dynamics of wormlike micelles [J]. *Langmuir*, 2010, 26(10): 7045-7053.
- [8] BAI S, GUO J, SUN J, et al. Enhancement of NO₂-sensing performance at room temperature by graphene-modified polythiophene [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2016, 55(19): 5788-5794.
- [9] ASHISH V, RADHAKRISHNA S. Coarse-grained molecular dynamics simulations of the sphere to rod transition in surfactant micelles [J]. *Langmuir*, 2011, 27(11): 6628-6638.
- [10] GUO Y, CHEN X, SANG Q, et al. Comparative study of the viscoelastic micellar solutions of R₁₆ HTAC and CTAC in the presence of sodium salicylate [J]. *Journal of Molecular Liquids*, 2017, 234: 149-156.
- [11] LU H, SHI Q, WANG B, et al. Spherical-to-wormlike micelle transition in a pseudogemini surfactant system with two types of effective pH-responsive groups [J]. *Colloids & Surfaces A: Physicochemical & Engineering Aspects*, 2016, 494: 74-80.
- [12] ZISERMAN L, ABEZGAUZ L, RAMON O, et al. Origins of the viscosity peak in wormlike micellar solutions (1): mixed cationic surfactants, cryo-transmission electron microscopy study [J]. *Langmuir*, 2009, 25(18): 10483-10489.
- [13] AND V C, COSGROVE T, AND G M, et al. Rheology, cryogenic transmission electron spectroscopy, and small-angle neutron scattering of highly viscoelastic wormlike micellar solutions [J]. *Langmuir*, 2003, 19(20): 8536-8541.
- [14] WANG S, ZHAO K. Dielectric analysis for the spherical and rodlike micelle aggregates formed from gemini surfactant: driving forces of micellization and stability of micelle [J]. *Langmuir*, 2016, 32(30): 7530-7540.
- [15] 张军, 房体明, 王业飞, 等. 烷烃油滴在超临界二氧化碳中溶解的分子动力学模拟 [J]. *中国石油大学学报(自然科学版)*, 2015, 39(2): 124-129.
- ZHANG Jun, FANG Timing, WANG Yefei, et al. Molecular dynamics simulation of dissolution of n-alkanes droplets in supercritical carbon dioxide [J]. *Journal of China University of Petroleum (Edition of Natural Science)*, 2015, 39(2): 124-129.
- [16] ARAI N, YASUOKA K, MASUBUCHI Y. Spontaneous self-assembly process for threadlike micelles [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2007, 126(24): 244-249.
- [17] MAITI P K, LANSAC Y, GLASER M A, et al. Self-assembly in surfactant oligomers: a coarse-grained description through molecular dynamics simulations [J]. *Langmuir*, 2002, 18(5): 1908-1918.
- [18] SANGWAI A V, SURESHKUMAR R. Coarse-grained molecular dynamics simulations of the sphere to rod transition in surfactant micelles [J]. *Langmuir*, 2011, 27(11): 6628-6638.
- [19] SANGWAI A V, SURESHKUMAR R. Binary interactions and salt-induced coalescence of spherical micelles of cationic surfactants from molecular dynamics simulations [J]. *Langmuir*, 2012, 28(2): 1127-1135.
- [20] HESS B, KUTZNER C, VAND S D, et al. Gromacs 4: algorithms for highly efficient, load-balanced, and scalable molecular simulation [J]. *Journal of Chemical Theory & Computation*, 2008, 4(3): 435.
- [21] BERENDSEN H J C, POSTMA J P M, GUNSTEREN W F V, et al. Molecular dynamics with coupling to an external bath [J]. *Journal of Chemical Physics*, 1984, 81(8): 3684-3690.
- [22] HUMPHREY W, DALKE A, SCHULTEN K. VMD: visual molecular dynamics [J]. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 1996, 14(1): 33-38.
- [23] MARRINK S J, RISSELADA H J, YEFIMOV S, et al. The Martini force field: coarse grained model for biomolecular simulations [J]. *Journal of Physical Chemistry B*, 2007, 111(27): 7812-7824.
- [24] SANGWAI A V, SURESHKUMAR R. Coarse-grained molecular dynamics simulations of the sphere to rod transition in surfactant micelles [J]. *Langmuir*, 2011, 27(11): 6628-6638.
- [25] ZHANG J, ZHANG Y, LI J, et al. Effect of organic salt on the self-assembly of ammonium gemini surfactant: an experiment and simulation study [J]. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2018, 548: 198-205.

(编辑 刘为清)