“拟双子”阴离子表面活性剂在癸烷/水界面的分子动力学模拟

高斯萌* 夏坤 康志红 乃永宁 袁瑞霞 牛瑞霞*

(东北石油大学化学化工学院 大庆 163318)

摘要 采用全原子分子动力学模拟方法研究了壬基酚取代的系列烷基磺酸盐表面活性剂在癸烷/水界面的微观聚集行为,通过分析界面厚度、界面生成能和界面张力以及表面活性剂分子与水分子之间的径向分布函数和配位数,讨论了不同磺烷基链长度对壬基酚基取代烷基磺酸盐表面活性剂界面性质的影响。结果表明,磺烷基链长为12时,表面活性剂的界面张力最低,界面厚度和界面生成能最大。

关键词 壬基酚取代烷基磺酸盐; 分子动力学; 界面性质; 油水界面; 聚集行为

Molecular Dynamics Simulation of “Quasi-Gemini” Anionic Surfactant at the Decane/Water Interface

Gao, Simeng* Xia, Kun Kang, Zhihong Nai, Yongning
Yuan, Ruixia Niu, Ruixia*

(College of Chemistry and Chemical Engineering, Northeast Petroleum University, Daqing 163318)

Abstract Anionic surfactants play a key role in many industrial fields such as drug delivery, detergent, oil displacement and food processing because of their unique amphiphilic properties. The structure of surfactant in oil-water system has a great influence on the interfacial behavior. It is of great significance to study the structure and interfacial properties of surfactants. In this paper, the all-atomic molecular dynamics method was used to study the aggregation behavior of nonylphenol-substituted series of alkyl sulfonate surfactants (C_n -NPAS) at the decane/water interface. The effects of different sulfoalkyl chain lengths on the interfacial properties of nonylphenol-substituted alkyl sulfonate surfactants were investigated by analyzing the interface thickness, interface formation energy, interfacial tension, the radial distribution function and coordination number. Simulation results have shown that the interfacial thickness increases at first and then decreases as the length of sulfoalkyl chain increases. The same trend was found in the results of the interface formation energy (IFE). The absolute value of IFE follows the order of C_{12} -NPAS > C_{14} -NPAS > C_{10} -NPAS > C_{16} -NPAS > C_8 -NPAS, indicating that the C_{12} -NPAS is the most stable system in terms of energy which should be attribute to the stronger aggregation ability. Moreover, it is observed that the trend of interfacial tension is in agreement with that of interface formation energy and the interface thickness. Surfactant C_{12} -NPAS induces the minimum interfacial tension. The calculation results are consistent with the experimental data. Furthermore, the radial distribution function and the coordination number of water around the surfactant headgroup were obtained for evaluating the interaction strength between the hydrophilic headgroup and water molecules. The results are well in accordance with the trend of the interface formation energy and interfacial tension. This indicates that the length of alkyl tail affect the interaction between hydrophilic headgroup and water indirectly. Simulation results suggest that the length of alkyl tail plays a dominant role in the interfacial behaviors. We expect that the results of this study could be valuable for the understanding of mechanism and the design of high performance surfactants.

Keywords nonylphenol substituted alkyl sulfonate; molecular dynamics; interface property; oil-water interface; aggregation behavior

1 引言

表面活性剂由于其独特的两亲特性及其在溶液中的特殊存在方式、物理化学作用,应用范围日益广泛,主要用于日化、洗涤、农药、纺织、石油、页岩气等行业^[1~6]。在石油工业领域,表面活性剂几乎应用于各个生产环节,已成为石油、页岩气开采中必不可少的化学用品^[7~12]。理解表面活性剂产生界面性能的基本原理对于

设计新型高效的驱油表面活性剂具有十分重要的作用,近年来,许多科学家对表面活性剂的特性进行了广泛的实验研究。

随着计算机的快速发展,许多研究者将分子动力学方法用于研究油/水界面的微观作用机理和界面性质,利用全原子分子动力学模拟技术,可以在原子水平研究表面活性剂的双亲结构对其物理化学性质的影响。He 课

* E-mail: gaosimeng2006@126.com; niuruixia999@sina.com

Received October 12, 2019; published January 10, 2020.

Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 21606042), Northeast Petroleum University Cultivation Fund (No. 2017PYQZL-08) and Northeast Petroleum University Talent Engineering Research Start Fund (No. RC201724).

项目受国家自然科学基金(No. 21606042)、东北石油大学培育基金(No. 2017PYQZL-08)和东北石油大学人才工程科研启动基金(No. RC201724)资助。

课题组^[1]采用分子动力学模拟的方法研究了系列线性烷基苯磺酸盐在空气/水界面的聚集行为, 结果表明表面张力与烷基尾部的支化度及尾链长度有关. Jang 课题组^[13]采用分子动力学模拟方法研究了疏水尾链的异构化对癸烷/水界面上烷基苯磺酸盐界面性质的影响, 结果表明中等支化异构体 4-C₁₆ 的有效支链长度与油分子相近, 可能是导致界面处表面活性剂排布更紧密和产生超低的界面张力的主要原因. 孙课题组^[14]采用分子动力学模拟研究了羟基取代的烷基苯磺酸盐单层膜在水/气和气/水界面的密度分布、氢键结构和表面活性剂聚集结构的有序度, 探讨了表面活性剂结构和性质之间的关系. 石课题组^[15]采用分子动力学的方法研究了阴离子表面活性剂十六烷基苯磺酸盐在正十六烷-水界面上的聚集结构, 研究了苯环在碳氢链上的取代位置对油水界面性质的影响. 王课题组^[16]采用分子动力学模拟方法考察了 2-羟基-3,5-烷基苯磺酸钠表面活性剂分子在水/气界面形成单层膜的过程, 结果表明两条烷烃链间的相互作用增强了溶剂对表面活性剂分子的疏水作用.

在前期的工作中, 牛课题组^[17]合成了一类具有“拟双子”结构的壬基酚取代烷基磺酸盐表面活性剂, 采用旋转滴法测定了芳基烷基磺酸盐(C_n-NPAS, $n=8, 10, 12, 14, 16$)水溶液的油-水动态界面张力, 考察了表面活性剂烷基链长对油-水动态界面张力的影响, 结果表明 C₁₂-NPAS 体系能够产生最低界面张力. 油水体系中表面活性剂的结构对界面行为有很大的影响^[18], 研究表面活性剂结构与界面性质的关系具有重要意义. 本工作以壬基酚取代的烷基磺酸盐表面活性剂为研究对象, 采用全原子分子动力学方法模拟了壬基酚取代的烷基磺酸盐在癸烷/水界面的微观聚集行为, 以期能够从分子水平上探讨疏水尾链长度对癸烷/水界面行为的影响, 为实验进一步研究提供理论依据.

2 模拟方法

图 1 为不同碳链长度的壬基酚取代烷基磺酸钠表面活性剂的构型示意图, 记作 C_n-NPAS ($n=8, 10, 12, 14, 16$). 使用 packmol 程序^[19]构建了油/表面活性剂/水/表面活性剂/油的双界面模型, 其中包含了 10700 个水分子以及单侧 700 个正癸烷分子, 油/水两界面各包含 65 个表面活性剂分子. 为保持体系的电中性, 向水溶液中加入 260 个 Na⁺. 体系总尺寸为 8.0 nm×8.0 nm×15 nm. 所有模型均采用三维周期性结构, 以消除边界效应的影响.

全部模拟计算使用 gromacs2016 程序^[20]完成, 所有原子均采用 GAFF 力场^[21]进行模拟, 水分子采用 SPCE 模型, 原子电荷使用约束静电势(ESP)方法得到. 对于每一个体系, 首先采用最速下降法进行能量最小化. 随后采用分子动力学方法在 101.325 kPa、298 K 条件下分别进行正则系综(NVT)和等温等压系综(NPT)模拟各 10

ns. 压力和温度分别采用 Berendsen 恒压和 Velocity-rescale 恒温控制方法, 弛豫时间分别为 1.0 和 0.1 ps. 模拟中分子的键长使用 LINCS 算法进行约束. Lennard-Jones 相互作用的截止半径为 1.2 nm. 使用 Particle-Mesh Ewald (PME)求和法对静电相互作用的长程部分进行了计算. 最后在 NPT 系综下对各体系进行了 30 ns 的分子动力学模拟, 模拟步长为 2 fs. 通过 30 ns 时长的模拟, 体系势能、模拟盒子维度和界面张力等参数保持稳定. 模拟时间最后的 10 ns 轨迹用来分析. 采用 VMD 1.9.1 可视化程序观察动力学轨迹.

图 1 表面活性剂、正癸烷和水分子的构型图

Figure 1 Molecular structures of surfactants, decane and water molecule

3 结果与讨论

3.1 界面形态及密度分布

以 C₁₂-NPAS 为例讨论表面活性剂单分子层的聚集结构, 图 2(A)和(B)分别为 C₁₂-NPAS 体系的初始和平衡状态的界面聚集结构, 从图中可以看出, 在体系达到平衡之后呈现出明显的两相界面, 表面活性剂分子均聚集在正癸烷与水的界面处, 排布紧密. 两个亲水头基伸向

水相, 两条疏水烷基尾链伸向油相一侧. 从图 2(A)可以看出, 在初始结构中, Na^+ 均匀分布在水相, 平衡后由于表面活性剂极性头基阴离子与 Na^+ 的静电引力的作用, 使得 Na^+ 迁移到界面处, 主要聚集在表面活性剂的极性头基附近, 有极少量分布在水相. 此外, 从图 2(B)可以看出, 平衡后还有少量的水分子进入到表面活性剂分子层中.

图 2 C_{12} -NPAS 体系的初始(A)和平衡(B)构型

Figure 2 Initial (A) and balanced (B) configurations for C_{12} -NPAS system

为了更清晰地分析体系中各组分的分布情况, 图 3 给出了平衡后体系中各组分沿 Z 轴方向的密度分布. 从图中可以看出, 表面活性剂头基处于水相中, 表明亲水头基进入到水层发生水化作用. 带正电的 Na^+ 分布在带负电的头基周围, 说明由于静电相互作用, Na^+ 与表面活性剂极性头基结合. 经过计算得知, 每个体系中, 油相平均密度均接近 718 kg/m^3 , 水相的密度接近 1000 kg/m^3 , 这与 298 K 下正癸烷(725 kg/m^3)^[22]和水(998 kg/m^3)^[23]的实验密度相符, 说明模拟体系的模型构建合理, 力场选取和参数设置合适, 动力学模拟结果可以反映各个体系的界面现象和聚集行为.

3.2 界面厚度

体系的界面厚度可以直观地反映出界面吸附的强弱, 是考察界面性质的一个重要指标, 体系的界面厚度数值越大, 表明界面活性越强^[13]. 对于油/表面活性剂/水体系界面, 通常采用“90%~90%”原则对界面厚度进行计算^[24], 即采用油相密度的 90% 到水相密度 90% 之间的距离定义为界面厚度, 如图 4 所示. 界面厚度包含三部分, 分别是表面活性剂的厚度 $\sigma_{\text{surfactant}}$, 水相的厚度 σ_{water} 以及油相的厚度 σ_{oil} . 与油/表面活性剂/水的总界面厚度 σ_{total} 之间的关系可以由公式(1)定义.

$$\sigma_{\text{surfactant}} = \sigma_{\text{total}} - \sigma_{\text{oil}} - \sigma_{\text{water}} \quad (1)$$

图 3 C_n -NPAS 体系不同组分沿 Z 轴方向的密度分布

Figure 3 Density profiles of different system components Z axial direction for C_n -NPAS system

图 4 界面厚度定义

Figure 4 Definition of interfacial thickness

其中油相和水相的厚度分别为油相和水相密度的 10% 到 90% 之间的距离. 依据公式(1)计算得到了不同表面活性剂在油水界面的总界面厚度, 结果如图 5 所示, 没有表面活性剂的情况下, 正癸烷/水体系的界面厚度为 $3.77 \text{ \AA}$, 加入表面活性剂后, 两个烷基尾链和两个亲

水基团分别渗透到正癸烷和水分子中,使得体系的界面厚度均有不同程度的增加. 5 种表面活性剂体系的界面厚度大小顺序为 $C_{12}\text{-NPAS} > C_{14}\text{-NPAS} > C_{10}\text{-NPAS} > C_{16}\text{-NPAS} > C_8\text{-NPAS}$, 其中表面活性剂 $C_{12}\text{-NPAS}$ 导致水相厚度值变宽幅度最大,使得 $C_{12}\text{-NPAS}$ 体系的总界面厚度达到最大值.

图5 $C_n\text{-NPAS}$ ($n=8, 10, 12, 14, 16$) 的界面厚度、界面生成能和界面张力曲线

Figure 5 Interfacial thickness, interface formation energy and interfacial tension curves of surfactants $C_n\text{-NPAS}$ ($n=8, 10, 12, 14, 16$)

3.3 界面生成能

界面生成能够反映出界面体系的稳定性^[25], 为比较不同碳链长度对体系界面稳定性的影响, 对各个体系的界面生成能进行了计算. 界面生成能是指向油水界面插入 1 个表面活性剂分子后使体系降低的能量, 其值与表面活性剂极性头基和水分子、疏水尾链和正癸烷分子以及表面活性剂分子之间的相互作用相关. 计算公式如下:

$$IFE = \frac{E_{\text{total}} - E_{\text{decane-water}} - E_{\text{surfactant}}}{n} \quad (2)$$

公式(2)中, E_{total} , $E_{\text{decane-water}}$ 和 $E_{\text{surfactant}}$ 分别对应体系的总能量, 纯正癸烷/水体系的能量以及单个表面活性剂分子和两个 Na^+ 离子在真空状态下运行 200 ps 时的能量. n 为表面活性剂的总数量. 表面活性剂的加入使体系的总能量降低, 导致界面生成能是一个负值, 其绝对值越大, 形成的界面就越稳定. 计算得到的界面生成能如图 5 所示, 界面生成能数值的绝对值趋势为 $C_{12}\text{-NPAS} > C_{14}\text{-NPAS} > C_{10}\text{-NPAS} > C_{16}\text{-NPAS} > C_8\text{-NPAS}$, 其中 $C_{12}\text{-NPAS}$ 体系界面生成能的绝对值最大, 表明其界面最稳定, 表面活性剂分子之间排列最紧密, 最有利于形成界面, 该顺序与界面厚度值顺序相一致.

3.4 界面张力

界面张力是三次采油中衡量表面活性剂性能的一个重要指标^[26], 依据公式(3)^[27]对各体系的界面张力值进行了计算.

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

公式(3)中, p_{zz} 是指垂直于界面方向的分压, p_{xx} 和 p_{yy} 是平行于界面方向的分压. L_z 是 z 方向的长度. 在没有表面活性剂时, 对纯油/水体系模拟得到的界面张力值为 $(54.23 \pm 2.12) \text{ mN/m}$, 与该温度下的实验值 51.72 mN/m ^[28] 相一致, 说明当前模型和所使用的力场可以较准确地描述该界面体系. 计算得到的各体系界面张力值如图 5 所示, 从小到大的排列顺序为 $C_{12}\text{-NPAS} < C_{14}\text{-NPAS} < C_{10}\text{-NPAS} < C_{16}\text{-NPAS} < C_8\text{-NPAS}$, 该变化趋势与界面生成能及界面厚度的变化相一致. 其中 $C_{12}\text{-NPAS}$ 体系界面张力值最低, 说明 $C_{12}\text{-NPAS}$ 表面活性剂的两条疏水尾链与油相具有良好的相溶性, 反映出链长对界面性质具有较大影响. 该结果与牛课题组^[17] 的实验研究结论一致, 进一步说明研究体系所使用的模型和方法能够准确反映出体系的界面性质.

3.5 径向分布函数

径向分布函数 $g(r)$ 是描述分子体系结构的一个重要函数, 可以用来分析液体的微观结构, 通常将其定义为与 A 类中心原子距离为 r 的球壳中出现 B 类原子的概率, 该函数可以反映出两原子之间的相互作用关系^[29]. 峰值的位置对应 A-B 间的最可能距离. 为了获得表面活性剂亲水头基与水分子之间的相互作用信息, 我们对五个体系中, 表面活性剂磷酸基中的氧原子(O_s)和酚羟基中的氧原子(O_o)分别与水分子中的氧(O_w)之间的径向分布函数进行了统计, 结果如图 6 所示.

从图 6(A)中看出, 不同碳链长度的表面活性剂体系的 RDF 很相似, 即第一个峰值均出现在 $(0.236 \pm 0.002) \text{ nm}$ 的位置, 同时在 $(0.482 \pm 0.006) \text{ nm}$ 处也有一较强峰值, 两峰之间的距离约为 0.24 nm , 约等于一个氢键的距离 (0.27 nm), 说明第一水化层和第二水化层是通过氢键的相互作用而结合. 在图 6(B)中, 具有相似的趋势, 两个峰值分别位于 $(0.232 \pm 0.004) \text{ nm}$ 和 $(0.466 \pm 0.021) \text{ nm}$ 处, 相似的趋势与刘课题组^[30] 报道相符. 从两图中第二个峰值出现的高度可以看出, $C_{12}\text{-NPAS}$ 体系中两个亲水基团与水分子的作用最强, 可能是导致其形成最低界面张力的原因.

3.6 配位数

为了定量地描述表面活性剂亲水头基与水分子之间的相互作用, 我们采用公式(4)对表面活性剂磷酸基中的氧和酚羟基中的氧与水分子之间的配位数进行了计算^[31].

$$n = \int_{R_1}^{R_2} 4\pi r^2 \rho g(r) dr \quad (4)$$

图6 (A) O_S 与 O_W 的径向分布函数; (B) O_O^- 与 O_W 的径向分布函数
Figure 6 Radial distribution function. (A) $g(r)$ (O_S-O_W); (B) $g(r)$ ($O_O^- - O_W$)

在公式(4)中, r 表示水中氧原子(O_W)到表面活性剂磺酸基中的氧(O_S)和酚羟基中的氧(O_O^-)的距离。 r 为水相中氧原子的数密度。 $g(r)$ 为氧原子与表面活性剂头基的径向分布函数, R 代表峰的始末。 n 表示表面活性剂亲水头基周围水分子的配位数。 计算得到配位数的数值列于表1中。

表1 表面活性剂头基周围水分子配位数

Table 1 Coordination number of water molecules around surfactant head group

	First hydration shell		Second hydration shell		Total
	O_S-O_W	$O_O^- - O_W$	O_S-O_W	$O_O^- - O_W$	
C_8 -NPAS	0.21	0.25	0.46	0.32	1.24
C_{10} -NPAS	0.21	0.25	0.45	0.36	1.27
C_{12} -NPAS	0.22	0.26	0.49	0.37	1.34
C_{14} -NPAS	0.22	0.25	0.47	0.35	1.29
C_{16} -NPAS	0.22	0.25	0.46	0.34	1.27

可以看出随着烷基链长的变化, 尽管每个表面活性剂亲水基团周围水分子的总配位数相差不大, 但是仍然具有与界面张力、界面生成能和界面厚度相一致的变化趋势, 说明疏水尾链长度的变化能够影响到亲水头基与水的作用强度。 其中 C_{12} -NPAS 的亲水基团周围水分子

的配位数最大, 说明极性头基周围水分子数最多。 同时该体系的界面厚度和界面生成能均表现出最大值, 且具有最低的界面张力。 这是由于 C_{12} -NPAS 体系中表面活性剂分子的磺酸基尾链由 12 个碳原子构成, 靠近磺酸基的第三个碳原子与苯环相连接, 其裸露在油相中的有效碳链包含 10 个碳原子, 与油分子的碳链长度最为相近, 该表面活性剂结构中的疏水尾链与油分子之间具有最好的相容性, 与油分子之间相互作用力最强, 因此界面生成能最大, 界面张力最低, 表面活性剂在界面聚集得最为紧密。 分子之间作用力的增强, 增加了分子间极性头基之间的相互作用, 使表面活性剂分子中两个亲水头基之间形成了相对较大的空间, 能够容纳更多的水分子, 因此该结构亲水头基与水分子的作用力最强, 形成的径向分布函数峰值最高, 配位数最大。

为了直观地描述水分子在亲水性头基周围的分布情况, 在模拟体系中选取了一个表面活性剂分子和周围结合的水分子绘制出如图7所示的结构图。

图7 亲水性头基周围水分子排布

Figure 7 Arrangement of water molecules around hydrophilic head groups

4 结论

采用全原子分子动力学方法, 对壬基酚取代的不同链长烷基磺酸盐在癸烷/水界面的界面性质进行了模拟。 结果表明, 当烷基链长为 12 时, 体系具有最大的界面厚度和界面生成能, 以及最低的界面张力, 同时与水分子的结合作用最强, 研究结果与实验研究结果一致, 并对实验结果从微观层次进行了分析。 本研究工作表明分子动力学模拟是研究表面活性剂在油/水界面吸附行为的有力工具, 可用于研究油/水界面的微观作用机理, 并为三次采油中驱油用表面活性剂的选择和应用提供理论指导。

References

- [1] He, X. B.; Guvench, O.; Mackerell Jr., A. D.; Klein, M. L. *J. Phys. Chem. B* **2010**, *114*, 9787.
- [2] Yu, Y. X.; Zhao, J.; Guvench, O.; Bayly, A. E. *Chin. J. Chem. Eng.* **2008**, *16*, 517.
- [3] Zhao, W. W.; Wang, Y. L. *Acta Chim. Sinica* **2019**, *77*, 717 (in Chi-

- nese). (赵微微, 王毅琳, 化学学报, **2019**, 77, 717.)
- [4] Yan, H.; Guo, X. L.; Liu, C. B.; Yuan, S. L. *Langmuir* **2011**, 27, 5762.
- [5] Lin, C.; Pan, R. M.; Xing, P. *Chin. J. Org. Chem.* **2018**, 38, 3260 (in Chinese). (林超, 潘仁明, 邢萍, 有机化学, **2018**, 38, 3260.)
- [6] Zhao, Y.; Wang, C.; Chow, A. H.; Ren, K.; Gong, T.; Zhang, Z. R.; Zheng, Y. *Int. J. Pharm. B* **2010**, 383, 170.
- [7] Liao, G. Z.; Wang, Q.; Wang, H. Z.; Liu, W. D.; Wang, Z. M. *Acta Petroli Sinica* **2017**, 38, 196 (in Chinese). (廖广志, 王强, 王红庄, 刘卫东, 王正茂, 石油学报, **2017**, 38, 196.)
- [8] Yu, T.; Liu, H. J.; Ding, W. *Chin. J. Appl. Chem.* **2008**, 25, 1107 (in Chinese). (于涛, 刘红娟, 丁伟, 应用化学, **2008**, 25, 1107.)
- [9] Chen, X. M.; Chen, Y.; Liu, Y. *Chin. J. Chem.* **2018**, 36, 526.
- [10] Li, H. F.; Qiao, F. L.; Fan, Y. X.; Wang, Y. L. *Acta Chim. Sinica* **2018**, 76, 564 (in Chinese). (李浩飞, 乔富林, 范雅珣, 王毅琳, 化学学报, **2018**, 76, 564.)
- [11] Li, M.; Zhang, C.; Yang, X. *Chin. J. Chem.* **2017**, 35, 1706.
- [12] Li, Z. Q.; Guo, X. L.; Wang, H. Y.; Li, Q. H.; Yuan, S. L. *Acta Phys.-Chim. Sin.* **2009**, 25, 6 (in Chinese). (李振泉, 郭新利, 王红艳, 李青华, 苑世领, 物理化学学报, **2009**, 25, 6.)
- [13] Jang, S. S.; Lin, S. T.; Maiti, P. K.; Blanco, M.; Goddard, W. A.; Shuler, P. J. *Phys. Chem. B* **2004**, 108, 12130.
- [14] Sun, H. Q.; Xiao, H. Y.; Liu, X. H. *Sci. Chin. Chem.* **2011**, 54, 1078 (in Chinese). (孙唤泉, 肖红艳, 刘新厚, 中国科学: 化学, **2011**, 54, 1078.)
- [15] Shi, J.; Lv, K.; Yuan, S. L. *J. Shandong Univ. (Engineering Science)* **2012**, 42, 77 (in Chinese). (石静, 吕凯, 苑世领, 山东大学学报: 工学版, **2012**, 42, 77.)
- [16] Wang, Y. F.; Yu, W. Z.; Hu, S. Q. *J. Chin. Univ. Petro.* **2011**, 35, 153 (in Chinese). (王业飞, 于维钊, 胡松青, 中国石油大学学报, **2011**, 35, 153.)
- [17] Niu, R. X.; Wang, D. Q.; Wang, J. L.; Wang, C.; Song, H. *J. Chem. Ind. Eng.* **2016**, 67, 2944 (in Chinese). (牛瑞霞, 王大强, 王敬玲, 王超, 宋华, 化工学报, **2016**, 67, 2944.)
- [18] Tan, J. S.; Zhang, L.; Lim, F. C.; Cheong, D. W. *Langmuir* **2017**, 33, 4461.
- [19] Martínez, L.; Andrade, R.; Birgin, E. G. *J. Comput. Chem.* **2009**, 30, 2157.
- [20] Lundborg, M.; Lindahl, E. *J. Phys. Chem. B* **2014**, 119, 810.
- [21] Wang, J.; Wolf, R. M.; Caldwell, J. W.; Kollman, P. A.; Case, D. A. *J. Comp. Chem.* **2004**, 25, 1157.
- [22] Sastry, N. V.; Valand, M. K. *J. Chem. Thermodyn.* **1998**, 30, 929.
- [23] Pai, Y. H.; Chen, L. J. *J. Chem. Eng. Data* **1998**, 43, 665.
- [24] Hou, M. D.; Li, H. P.; Hu, Z. Z.; Song, H. W. *China Surfactant Detergent & Cosmetics* **2018**, 48, 243 (in Chinese). (侯孟蝶, 李惠萍, 胡子昭, 宋宏伟, 日用化学工业, **2018**, 48, 243.)
- [25] Hu, X. Y.; Song, X. W.; Li, Q. W.; He, X. J.; Li, Y. *Acta Chim. Sinica* **2009**, 67, 1691 (in Chinese). (胡晓莹, 宋新旺, 李全伟, 何秀娟, 李英, 化学学报, **2009**, 67, 1691.)
- [26] Olayiwola, S. O.; Dejam, M. *Fuel* **2019**, 241, 1045.
- [27] Jiang, R. J.; Luo, J. H.; Bai, R. B.; Jiang, B.; Zhou, G. *Chem. J. Chin. Univ.* **2017**, 38, 1804 (in Chinese). (江蓉君, 罗健辉, 白瑞兵, 江波, 周歌, 高等学校化学学报, **2017**, 38, 1804.)
- [28] Zeppieri, S.; Rodriguez, J.; López, R. A. *J. Chem. Eng. Data* **2001**, 46, 1086.
- [29] Wang, J.; Wang, J. X.; Zeng, F. G.; Wu, X. L. *Acta Chim. Sinica* **2010**, 68, 1653 (in Chinese). (王进, 王军霞, 曾凡桂, 吴秀玲, 化学学报, **2010**, 68, 1653.)
- [30] Liu, M. T.; Pu, M. F.; Ma, H. W. *Chem. J. Chin. Univ.* **2012**, 33, 1319 (in Chinese). (刘梅堂, 浦敏锋, 马鸿文, 高等学校化学学报, **2012**, 33, 1319.)
- [31] Liu, Z. Y.; Liao, Q.; Jin, Z. Q.; Zhang, L.; Zhang, L. *Acta Phys.-Chim. Sinica* **2016**, 32, 1168 (in Chinese). (刘子瑜, 廖琦, 靳志强, 张磊, 张路, 物理化学学报, **2016**, 32, 1168.)

(Cheng, B.; Fan, Y.)