

吐温 80/正构醇微乳体系形成过程的介观模拟

万紫媛, 吴芳, 李雁, 解新安, 李璐

(华南农业大学食品学院, 广东广州 510642)

摘要: 利用耗散粒子动力学(DPD)方法对吐温 80/正构醇(C2~C8)/丁酸乙酯/水四组分微乳体系形成过程进行了模拟, 研究了醇类浓度及烷链长度对微乳形成过程相行为及微观结构的影响。研究发现:正构醇浓度和烷链长度对体系自组装形态变化有显著影响, 当醇类浓度较低时, 微乳粒径随醇浓度的增大而增大, 当浓度增加到一定程度后, 继续增加醇浓度则导致微乳形态从球状依次变为管道状、网格状; 通过比较不同烷链长的微乳体系发生形态变化时醇的浓度大小, 发现醇烷链长的增加促使微乳体系在醇浓度较低时就发生形态转变, 且体系界面张力较快趋于稳定。同时, 研究发现醇链长的增加会使吐温 80/正构醇/丁酸乙酯/水体系的 W/O 型和双连续型微乳区增大。该结果为微乳类型及形态尺寸的调控从而实现蛋白质的选择性萃取提供指导。

关键词: 介观模拟; 微乳体系; 表面活性剂; 界面张力; 相变

文章编号: 1673-9078(2015)8-177-183

DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2015.8.029

Mesoscopic Simulation of Tween80/*n*-Alkanol Microemulsion System

WAN Zi-yuan, WU Fang, LI Yan, XIE Xin-an, LI Lu

(College of Food Science, South China Agriculture University, Guangzhou 510642, China)

Abstract: The Tween80/*n*-alkanol (C2~C8)/ethyl butyrate/water four-component microemulsion system was simulated using the dissipative particle dynamics (DPD) method. Effect of *n*-alkanol concentration and *n*-alkanol alkyl chain length on the phase behavior and microstructure during the formation of microemulsion was also studied. The simulation results indicated that the concentration and alkyl chain length of *n*-alkanol greatly affected morphological changes in the self-assembly of the system. When the *n*-alkanol concentration was low, particle size of the microemulsion increased with an increase in alcohol concentration. After the *n*-alkanol concentration was increased to a certain extent, a further increase in concentration led to a change in the structure of microemulsion from spherical shape to pipe-like and net-like shapes. A comparison of the *n*-alkanol concentrations when morphological changes occurred in microemulsion systems with different alkyl chain lengths revealed that an increase in alkyl chain length of *n*-alkanol promoted morphological changes in the microemulsion system at low *n*-alkanol concentrations and the interfacial tension of the system stabilized rapidly. In addition, the results showed that increasing chain length of alcohol increased the water/oil (W/O) and bicontinuous microemulsion region of Tween80/*n*-alkanol (C2~C8)/ethyl butyrate/water system. This result provides guidance for the control of type, morphology, and size of the microemulsion system, to thus achieve selective extraction of proteins.

Key words: mesoscopic simulation; microemulsion system; surfactants; interfacial tension; phase change

微乳是由水相、油相、表面活性剂及助表面活性剂在适当比例下自发形成的一种透明或半透明、低粘度、各向同性且热力学稳定的分散体系。该分散体系具有分散相质点粒径小, 界面张力低等特点, 被广泛等领域。近年来在食品工业中, 应用于新材料制备、

收稿日期: 2014-09-12

项基金目: 现代农业产业技术体系建设专项资金(CARS-23); 广州市科技计划项目(201510010099)

作者简介: 万紫媛(1989-), 女, 硕士研究生在读, 研究方向: 食品加工与贮藏

通讯作者: 李雁(1963-), 女, 博士, 副教授, 研究方向: 食品化学、分离提纯及农副产品综合利用; 解新安(1964-), 男, 博士, 研究员, 研究方向: 食品加工过程模拟与优化

生物医药、石油工业以及化妆品微乳萃取技术的发展日新月异, 在理论和实践领域中受到了高度的重视。

非离子型表面活性剂毒性和刺激性小, 可与多种类型的助表面活性剂混合使用, 具有很好的增溶效果, 因而常作为食品载体。醇类作为助表面活性剂, 是非离子型表面活性剂微乳中重要的组分之一, 它能够影响微乳的相行为及微乳区域的大小进而影响微乳的尺寸和结构, 而微乳的尺寸和结构是影响微乳萃取目标物质的重要因素之一^[1]。目前, 已有很多学者^[2-5]对非离子型表面活性剂尤其是吐温类的微乳进行实验研究, 分析了表面活性剂浓度、油水比、 K_m 值等对微乳相态间转变行为及水增溶量大小的影响。同时, 利用计算机模拟的方法从介观水平研究微乳自组装过程

及结构也逐渐引起重视。常用于介观尺度的计算机模拟方法有两种：耗散粒子动力学方法(DPD)和动态平均场密度泛函法(MesoDyn)。

DPD 是先进的介观模拟方法,跟传统的分子动力学和蒙特卡罗模拟相比,DPD 模拟允许更大的空间尺度和更长的时间尺度,可用于研究复杂体系的流体现象和相变过程^[6]。因此,研究者可利用 DPD 方法研究油/水/表面活性剂体系两相界面的微观结构和表面活性剂的分布形态及相互作用^[7-8]。解新安等^[9]利用 DPD 方法模拟了 Span60-Tween60-环己烷-淀粉乳液体系中淀粉微球的形成过程。郑璐丝等^[10]利用耗散粒子动力学模拟方法研究了乳化剂含量、淀粉含量、油相含量等对淀粉乳液相行为的影响。田一农等^[11]用介观模拟方法研究了 U 型微乳水相增溶过程中的相行为和微乳微观结构。然而,采用 DPD 方法研究醇类的浓度和结构变化对非离子型表面活性剂微乳形成过程的影响的报道尚不多见。本文拟对吐温 80/正构醇/丁酸乙酯/水微乳体系进行 DPD 模拟研究,通过改变正构醇的种类和浓度,考察助表面活性剂的链长和浓度对微乳体系形成过程中相行为及微观结构的影响,为调控微乳类型、形态和尺寸从而构建特异性微乳体系,实现微乳在萃取分离动植物蛋白等方面的实际应用提供理论基础。

1 模拟方法

1.1 粗粒化

DPD 模拟方法需将体系内的分子粗粒化,即用一个珠子代替分子中的几个基团,然后采用粗粒化后的珠子链模型代替分子链,珠子间通过弹簧简谐振子连接^[12]。在模拟过程中,每一个珠子受到的作用力包括保守力(F_{ij}^C)、耗散力(F_{ij}^R)和随机力(F_{ij}^D),其运动符合牛顿运动方程。

本研究中各分子的粗粒化过程如下:三个水分子作为一个珠子,用 W 表示,如图 1(a)所示;一个丁酸乙酯分子作为一个珠子,用 O 表示,如图 1(b)所示;正丙醇、正丁醇、正戊醇、正己醇、正辛醇各作为一个珠子,分别用 E、F、G、H、I 表示,如图 1(c)~图 1(g)所示;吐温 80 的结构如图 1(h)所示,虚线框内的基团作为一个珠子,分别用 A、B、C、D 表示,则吐温 80 分子可由珠子 A、B、C、D 和 O 表示。

1.2 相互作用参数的求解

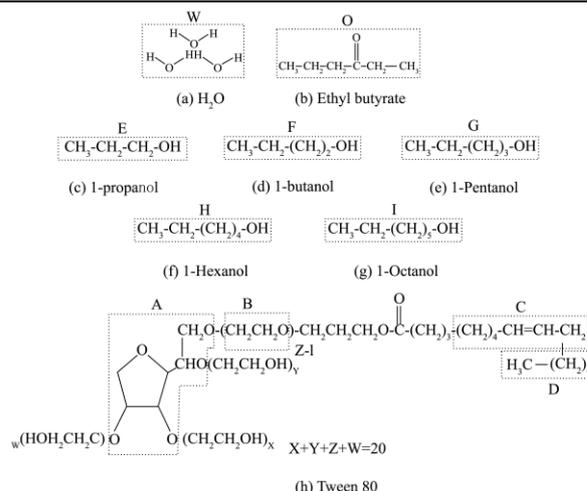


图 1 粗粒化模型示意图

Fig.1 Schematic illustration of coarse-grained models

在 DPD 模拟中,珠子间的相互作用参数 α_{ij} 代表了真实体系中原子和分子之间的各种复杂相互作用。珠子与珠子之间是否存在相互作用由截断半径 r_c 决定(DPD 模拟中,定义 $r_c=1$ DPD 单位)。根据下述 2 个公式可计算得出相互作用参数 α_{ij} ^[13]。

$$\alpha_{ij} \approx a_{ii} + 3.27 \chi_{ij} \quad (1)$$

$$\chi_{ij} = V_{bead} (\delta_i - \delta_j)^2 / kT \quad (2)$$

注:其中 V_{bead} 为珠子摩尔体积; α_{ii} 为相同珠子间的相互作用参数; α_{ij} 不同珠子间的相互作用参数; δ 为溶解度参数; χ 为 Flory-Huggins 参数。

利用 Materials Studio 软件(Accelrys 公司)中的 Discover 和 Amorphous Cell 模块在 Compass 力场下计算各珠子在 318 K、常压下的体积 V 及溶解度参数 δ ,然后利用公式(1)和(2)计算珠子之间的相互作用参数 α_{ij} ,列于表 1。

所有的模拟都在三维施加周期边界条件的正规系统中完成。在能清晰地看到整个微乳体系的形成过程及其微观结构的前提下,为了节约计算资源,本研究中盒子的尺寸为 $15 r_c \times 15 r_c \times 15 r_c$;同一分子内相邻珠子间存在弹性力,其弹性常数为 $4.0^{[7]}$;模拟体系的密度为 3;模拟的时间步长为 0.05,温度为 318 K;模拟的总步数为 10000 步。在本文中,模拟以无序体系为初态,体系的热力学物理量和结构相关的物理量(均方回转半径、均方末端距和结构因子等)在模拟时间范围内保持不变,则认为体系达到热力学平衡状态。

为排除模拟步长(即模拟时间)对微乳相结构形态的影响,本文选择了不同的模拟步数对吐温 80/正构醇(C_2 - C_8)/丁酸乙酯/水四组分微乳体系进行了 DPD 模拟,比较发现各组分聚集形态的变化均分为以下四

个阶段：(1) 无规则分散阶段；(2) 小型不规则聚集
体形成阶段；(3) 球状聚集体形成阶段；(4) 平衡稳
定阶段。当模拟步数大于 10000 时，即使经过更长的

模拟时间，体系各组分的分布状态变化微乎其微，热
力学趋于稳定，模拟达到平衡，因此本文所有模拟均
采用 10000 步。

表 1 DPD 模拟中的相互作用参数 α_{ij}

Table 1 Interaction parameters α_{ij} used in DPD simulation

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	W	O
A	25.00										
B	31.78	25.00									
C	28.16	37.07	25.00								
D	29.16	38.62	26.63	25.00							
E	30.61	25.05	36.35	37.89	25.00						
F	25.72	26.87	29.67	30.67	-	25.00					
G	25.34	27.74	29.00	29.96	-	-	25.00				
H	25.08	30.72	26.73	27.39	-	-	-	25.00			
I	25.00	30.33	27.51	25.20	-	-	-	-	25.00		
W	137.44	57.08	139.99	143.91	63.59	86.12	95.34	114.39	120.68	25.00	
O	25.14	31.62	26.63	27.30	30.74	26.14	25.72	25.01	25.20	122.47	25.00

2 结果与讨论

2.1 醇浓度及烃链长度对微乳自组装行为的影响

存在醇类助表面活性剂的微乳体系，在微乳结构形成过程中醇类逐步聚集于油水界面，与表面活性剂一起形成混合界面区，从而改变了原来由表面活性剂形成的界面区。因此，在水-油-表面活性剂体系中加入醇时，体系相行为将发生显著变化。模拟中吐温 80、丁酸乙酯、水的浓度不变，正构醇 ($C_2 \sim C_8$) 浓度变化范围为 1%~23%，为清楚地观察体系的演变过程，图 2~图 7 中未显示水分子。

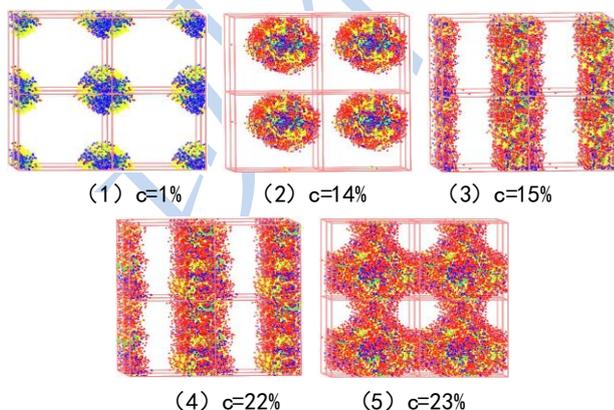


图 2 乙醇在不同浓度下微乳体系形态分布图

Fig.2 Distribution of microemulsion morphology with different concentrations of ethanol

Note: yellow: hydrophilic group; green: lipophilic group; red:

ethanol; blue: ethyl

由图 2、图 3 可知，当醇浓度较低 (1%) 时，助表面活性剂乙醇、正丙醇散乱分布在油水界面，嵌于表面活性剂之间；醇浓度增加至 14% 时，微乳粒径明显增大，醇大量聚集，吸附在表面活性剂表面，油水界面排列紧密；乙醇、正丙醇由于亲水性较强，倾向于分布在表面活性剂水相侧；浓度达 15% 后，球状结构转变为管道状；最后，醇浓度进一步升高导致管道状油相彼此交联而形成相互交错的网格状结构。

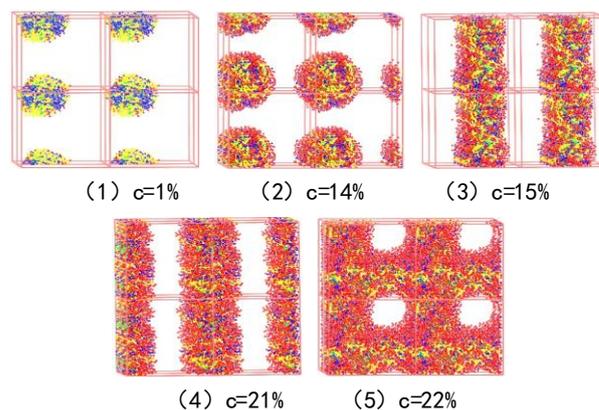


图 3 正丙醇在不同浓度下微乳体系形态分布图

Fig.3 Distribution of microemulsion morphology with different concentrations of 1-propanol

Note: yellow: hydrophilic group; green: lipophilic group; red: 1-propanol; blue: ethyl

随着链长的逐步增加，醇浓度的变化对微乳形态的影响越显著。如图 4、图 5 所示，与乙醇和正丙醇相比，正丁醇和正戊醇浓度分别增加到 12%、10% 时就出现了球状结构到管道状结构转变的现象，且形成

网格结构所需的醇浓度也较低，这与醇分子的大小及其在油水界面的分布有关；比较图 2 (2)、图 3 (2)、

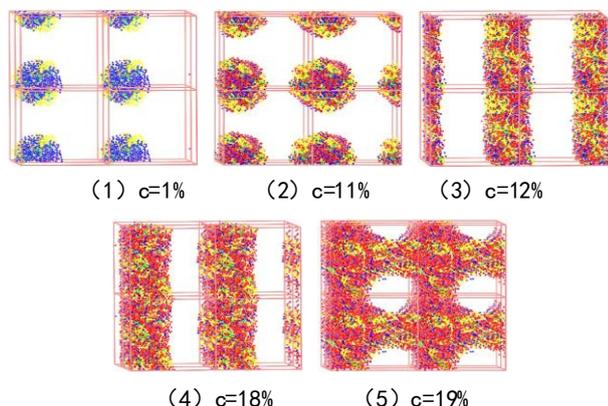


图 4 正丁醇在不同浓度下微乳体系形态分布图

Fig.4 Distribution of microemulsion morphology with different concentrations of 1-butanol

Note: yellow: hydrophilic group; green: lipophilic group; red: 1-butanol; blue: ethyl.

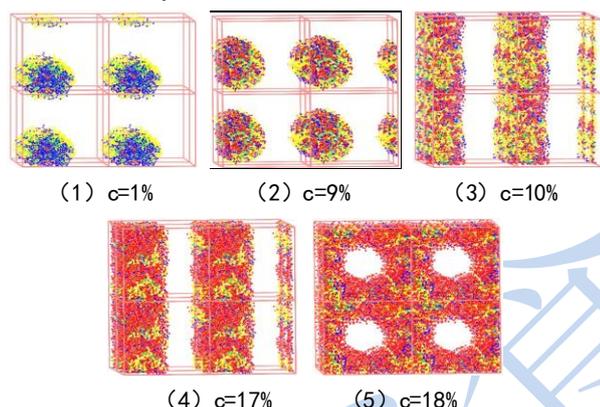


图 5 正戊醇在不同浓度下微乳体系形态分布图

Fig.5 Distribution of microemulsion morphology with different concentrations of 1-pentanol

Note: yellow: hydrophilic group; green: lipophilic group; red: 1-pentanol; blue: ethyl.

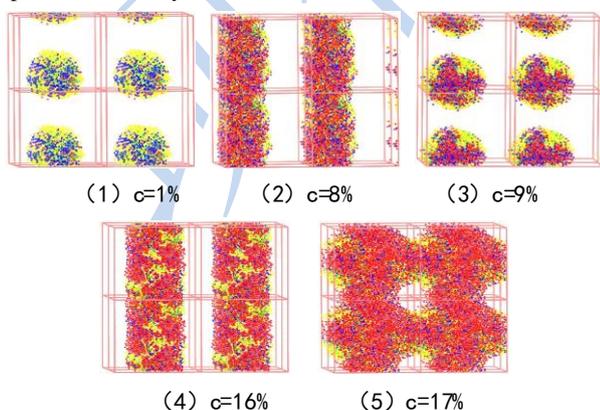


图 6 正己醇在不同浓度下微乳体系形态分布图

Fig.6 Distribution of microemulsion morphology with different concentrations of 1-hexanol

Note: yellow: hydrophilic group; green: lipophilic group; red: 1-hexanol; blue: ethyl.

图 4 (2) 和图 5 (2) 以及图 2 (3)、图 3 (3)、图 4 (3) 和图 5 (3) 可知，当醇链长较小时，醇主要分布在球和管道的表面，即亲水侧，随着链长的增加，醇的亲水性减弱，逐渐由表面活性剂的水相侧向油相侧转变。

图 6、图 7 所示，微乳形态为球状时，正己醇、正辛醇作为助表面活性剂均匀规律分布在表面活性剂油相侧；相比图 2、3 而言，正辛醇浓度仅 8% 时就可使微乳体系发生球状→管道状的转变，浓度减少了近一半。

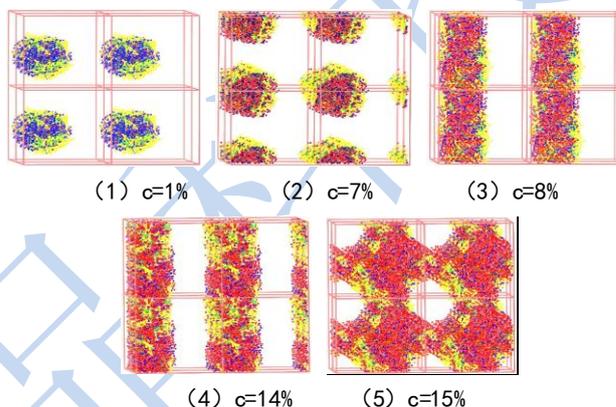


图 7 正辛醇在不同浓度下微乳体系形态分布图

Fig.7 Distribution of microemulsion morphology with different concentrations of 1-octanol

Note: yellow: hydrophilic group; green: lipophilic group; red: 1-octanol; blue: ethyl.

综合图 2~ 图 7，随着醇浓度的增加，不同正构醇的微乳体系形态变化均遵循“球状→管道状→网格状”的规律；醇的烷烃链越长，导致微乳形态发生变化所需的浓度越低；同时，由于正构醇类的亲水性随烷烃链长的增加而减弱，醇的分布随链长增加从表面活性剂水相侧逐渐向表面活性剂油相侧转移。体系中醇的浓度较低时，醇嵌于表面活性剂之间的空隙中，在一定程度上增大了表面活性剂亲油基团之间的距离，从而减小了亲油基团之间的内聚能，导致 R 比（内聚作用能比值）增大，界面的曲率半径增大，使得微乳球状结构膨胀即粒径增大，此时 $R < 1$ ，形成 O/W 型微乳液。醇浓度的增大将表面活性剂之间的空隙填满并吸附在表面活性剂表面，在油水界面排列更加紧密有序。继续增加醇的浓度，R 比增大导致微乳球状结构持续膨胀，使得所有表面活性剂和助表面活性剂聚集在一起形成管道状结构将油相包裹在内部，此时体系的连续相依旧为水相。最后，醇浓度的进一步升高导致管道状油相开始彼此交联而形成相互交错的网格状结

构, 此时 $R \approx 1$, 体系处于油相和水相均为局部连续的过渡态结构, 即为双连续型微乳。

2.2 醇浓度对微乳体系密度分布变化的影响

体系中各珠子的密度分布变化规律也能在一定程度上反映微乳形态。以乙醇为例, 图 8 为不同乙醇浓度下体系内各珠子在油水界面的密度分布图, 密度 $Density = N/L^3$, N 表示粒子总数, L 表示模拟空间边长。由图可以看出: 随着乙醇浓度的增大, 油相的密度峰逐渐变宽, 这进一步证实了当乙醇浓度升高时, 微乳球状结构会因膨胀而粒径增大; 当乙醇的浓度增加到 10% 后, 乙醇的密度峰开始明显拔高, 说明界面上的乙醇含量增加会使得界面吸附层的厚度增加; 继续增加乙醇的浓度, 当浓度达 23% 时, 水相的密度凹谷和油相的密度峰开始消失, 密度曲线逐渐变平缓, 体系会从微乳球状结构慢慢向管道状、网格状转变。改变正构醇的种类, 模拟结果与乙醇的密度分布变化规律一致。

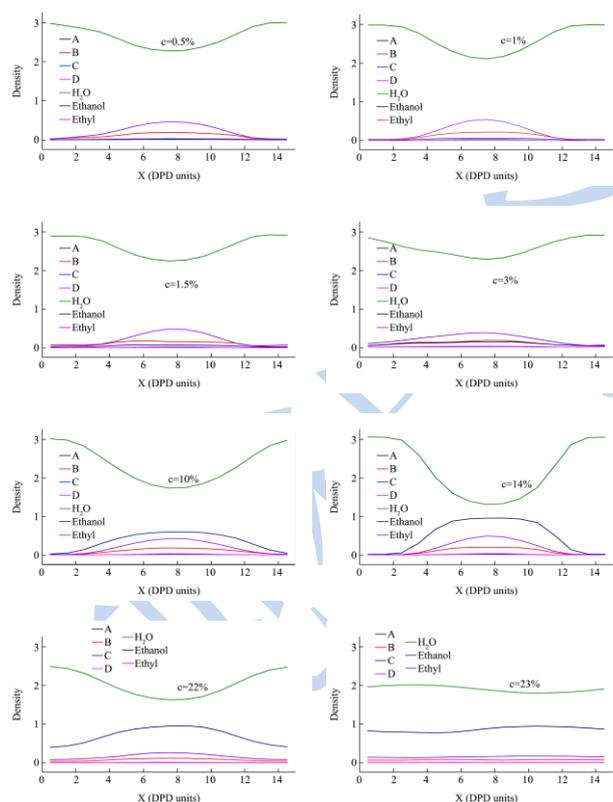


图 8 不同乙醇浓度下体系中各珠子沿 x 轴方向的界面密度分布图

Fig.8 Surface density distribution of different beads along the x-axis direction with different ethanol concentrations

Note: ABCD: coarse-grained beads of Tween80.

2.3 醇浓度和烃链长度对体系油水界面张力的影响

的影响

作为非离子型表面活性剂微乳中非常重要的组分之一, 醇类的作用之一就是降低界面张力。液-液界面张力起源于界面两侧分子对界面上分子的不同吸附引力, 它的变化可以反映体系宏观相分离过程中表面活性剂和助表面活性剂在界面上的吸附程度。因此本文研究了不同烷烃链长醇类的浓度对油水界面张力的影响。

界面张力值 (σ_{DPD}) [81] 为 DPD 模拟输出的结果, 计算公式如下:

$$\sigma_{DPD} = \int \left\{ \bar{p}_{xx}(\bar{x}) - \frac{1}{2} [\bar{p}_{yy}(\bar{x}) + \bar{p}_{zz}(\bar{x})] \right\} d\bar{x},$$

注: 该方程适用于界面法线沿 X 方向, \bar{p} 为无因次压力。

由图 9 可知, 随着醇类的加入, 醇浓度在 0%~15% 的范围内, 体系油水界面张力值随其浓度的增加显著降低, 醇浓度增加至 15% 后, 界面张力逐渐趋于稳定; 且极性越小即碳链越长的醇, 达到稳定时界面张力值越高。醇类具有较高的界面活性, 能够有效地降低体系的界面张力, 比较不同链长醇类对界面张力的影响, 乙醇的界面活性最高, 正丙醇次之, 正辛醇的活性最低, 故可推测醇类的界面活性与其自身结构有关, 烷烃链越长, 体系界面张力越低。首先, 由于各正构醇羟基的极性不同, 其对降低体系界面张力的贡献也不同。醇中羟基的极性随烷烃链长度的增加而逐渐减小, 对界面张力降低的贡献也就越小, 而且正构醇存在自身的界面张力, 大小与醇烷烃链长度成正比, 烷烃链越短, 微乳体系界面张力也越小。其次, 由于界面面积是一定的, 分子量较小的醇可以更多地吸附在界面上, 因而界面张力也越低。

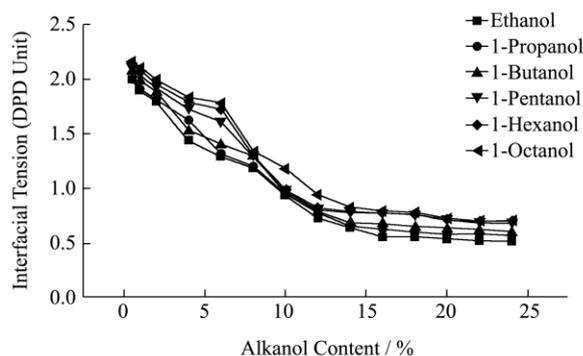
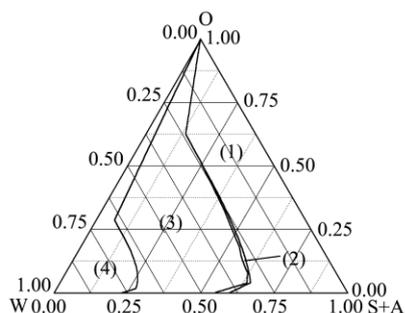
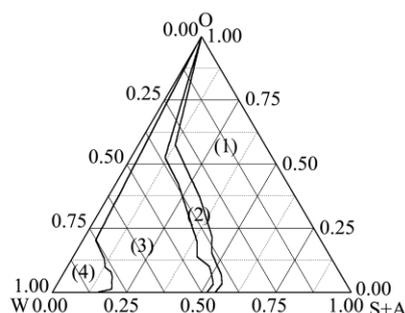


图 9 体系界面张力与醇浓度的关系图

Fig.9 Relationship between interfacial tension and n-alkanol concentrations



(a) ethanol

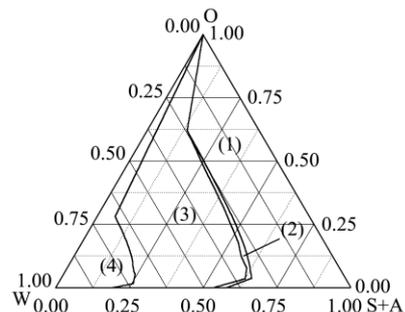


(f) 1-octanol

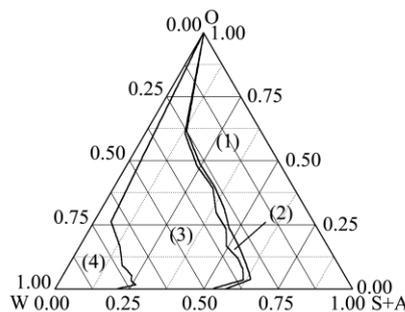
图 10 吐温 80/丁酸乙酯/醇/水微乳的拟三元相图

Fig.10 Pseudo-ternary phase diagrams of Tween80/ethyl butyrate/alcohol/water systems

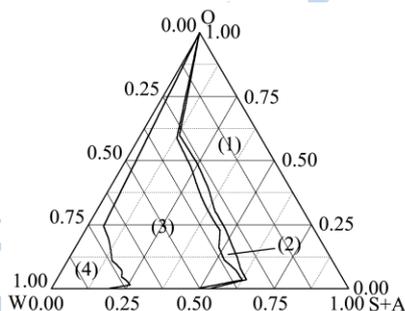
Note: (1): water-in-oil; (2): bi-continuous; (3): ineffective region; (4): oil-in-water; (O): ethyl butyrate; W: water; S+A: Tween80+n-Alkanol.



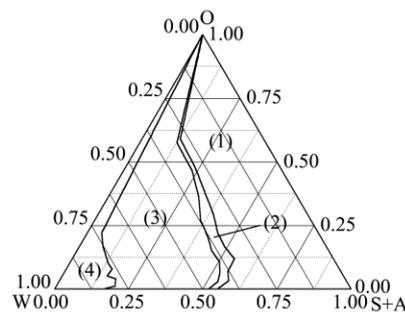
(b) 1-propanol



(c) 1-butanol



(d) 1-pentanol



(e) 1-hexanol

2.4 醇烃链长度对微乳相行为的影响

为考察醇类烃链长对微乳有效区域面积大小的影响，本研究对以不同碳原子个数的正构醇为助表面活性剂的体系进行了模拟，其中 $K_m=1:1$ ，吐温 80+正构醇混合物与丁酸乙酯物质的量比分别为 10:0、9:1、8:2、7:3、6:4、5:5、4:6、3:7、2:8、1:9、0:10，然后观察各体系在不同含水量下的模拟结果。以吐温 80+正构醇 (S+A)、丁酸乙酯 (O)、水 (W) 分别为三个顶点，绘制拟三元相图，如图 10 所示。

由图 10 可以看出，随着正构醇 (乙、丙、丁、戊、己、辛醇) 碳原子个数的增加，微乳有效区和类型都发生了明显的变化：W/O 型微乳和双连续型微乳区逐渐增大，O/W 型微乳区逐渐减小。根据 R 比理论，在微乳体系存在着三个相区，分别是油相区 (O)、水相区 (W) 和界面区 (C)。界面区以表面活性剂为主体，还包括部分吸附在表面活性剂亲水基团附近的水相分子及亲油基团附近油相分子，被认为是具有一定厚度的区域。R 比反映了界面区与水区和界面层与油区的亲和性相对大小，决定了界面层优先弯曲趋势。在本研究采用的体系中，随着正构醇烷烃链的增长，极性减小，亲水性减弱，越易分散到油相中去，此时界面上的醇使得 R 比值增大，导致界面区与油区的混溶性随之增大，与水区的混溶性逐渐减小，界面区将开始逐渐趋向于铺展于油区，即界面弯曲凸向油区，促使体系发生 O/W 型微乳→双连续型微乳→W/O 型微乳转变，同时 W/O 型微乳区域和双连续型微乳区域明显增大，O/W 型微乳区域明显减小。即随着正构醇烃链的增长，体系容易形成 W/O 型微乳。这与完茂林^[4]实验发现的“短链醇可以形成 W/O 和 O/W 微乳，

较长链醇倾向形成 W/O, 难以形成 O/W”这一结果相吻合。

3 结论

本文利用 DPD 方法模拟研究了正构醇类助表面活性剂对微乳形成过程相行为的影响, 得出以下结论:

3.1 醇类的浓度对微乳的粒径以及结构形态有显著影响, 具体表现为: 随着醇浓度的增大, 微乳粒径逐渐增大, 继续增大醇浓度, 微乳的结构形态会发生明显变化, 由球状向柱状、网格状转变。而且醇的烷烃链越长, 导致微乳形态发生变化所需的浓度越低。

3.2 醇类对微乳体系油水界面张力的影响与其浓度及自身结构相关, 具体表现为: 体系界面张力值随醇浓度的增加先显著降低后趋于平衡; 醇类烷烃链越长, 体系界面张力趋于稳定所需的醇浓度也越低。

3.3 醇类烃链的长度对微乳体系的相行为有较大影响。加入短链醇的体系能够很好的形成 W/O 型微乳和 O/W 型微乳; 随着烃链的增长, 体系逐渐倾向形成 W/O 型微乳, 双连续型微乳区也逐渐增大。

3.4 综上, 耗散粒子动力学 (DPD) 方法可以直观地展现出微乳的形成过程, 并清楚地显示出微乳粒径大小、结构形态等信息, 这有助于了解复杂的微乳体系, 掌握其形成规律, 根据实际需求来调控微乳的类型及形态尺寸, 大大简化了在微乳体系制备过程中助表面活性剂的筛选过程, 从而指导其在蛋白质萃取及其他食品研究领域的应用。

参考文献

- [1] 陈复生, 程小丽, 李里特, 等. 反胶束萃取大豆蛋白过程中动力学的研究[J]. 中国粮油学报, 2010, 5: 24-29
CHENG Fu-sheng, CHENG Xiao-li, LI Li-te, et al. Studies on the kinetics in reverse micelle systems extraction of soy protein [J]. Journal of the Chinese Cereals and Oils Association, 2010, 5: 24-29
- [2] 张佩华, 梅子, 傅玉颖, 等. 食品级单辛酸甘油酯微乳液的抑菌研究[J]. 食品工业科技, 2013, 34(16): 125-130
ZHANG Pei-hua, MEI Zi, FU Yu-ying, et al. Fabricated of fully-dilutable of food-grade microemulsion systems with glycerol monocaprylate as oil [J]. Science and Technology of Food Industry, 2013, 34(16): 125-130
- [3] 赵嘉敏, 陈中, 林伟锋. 吐温-80 制备食品级微乳的稳定性评价[J]. 食品与发酵工业, 2011, 3: 75-78
ZHAO Jia-min, CHEN Zhong, LIN Wei-feng. Stability evaluation of food grade microemulsions with Tween-80 [J]. Food and Fermentation Industries, 2011, 37(3): 75-78

- [4] Liu F, Zhong R, Wang Z. Formulation of conjugated linoleic acid microemulsion using mixed nonionic surfactants [J]. Journal of Dispersion Science and Technology, 2010, 31(6): 715-721
- [5] Liao Q, Chai J, Bai T, et al. Effect of oil/water mass ratios on the composition and solubilization of microemulsion systems containing tween/alcohol/alkane/NaCl solution [J]. Tenside Surfactants Detergents, 2013, 50(3): 186-191
- [6] Groot R D. Mesoscopic simulation of polymer-surfactant aggregation [J]. Langmuir, 2000, 16(19): 7493-7502
- [7] Maiti A, McGrother S. Bead-bead interaction parameters in dissipative particle dynamics: relation to bead-size, solubility parameter, and surface tension [J]. The Journal of Chemical Physics, 2004, 120(3): 1594-1601
- [8] Deguillard E, Pannacci N, Creton B, et al. Interfacial tension in oil-water-surfactant systems: On the role of intra-molecular forces on interfacial tension values using DPD simulations [J]. The Journal of Chemical Physics, 2013, 138(14): 144102
- [9] 解新安, 丁年平, 刘焕彬, 等. 淀粉微球形成过程的介观模拟及实验[J]. 化学学报, 2011, 69(2): 169-175
XIE Xin-an, DING Nian-ping, LIU Huan-bin, et al. Mesoscale simulation and experiments of synthesis of starch microspheres [J]. Acta Chimica Sinica, 2011, 69(2): 169-175
- [10] 郑璐丝, 解新安, 丁年平, 等. 淀粉乳液形成过程主要影响因素的耗散粒子动力学模拟与实验[J]. 高等学校化学学报, 2011, 32(11): 2657-2662
ZHENG Lu-si, XIE Xin-an, DING Nian-ping, et al. Dissipative particle dynamics simulation and experiments of main influence factors of conformation of starch emulsion [J]. Chemical Journal of Chinese Universities, 2011, 32(11): 2657-2662
- [11] 田一农, 解新安, 李雁, 等. U 型微乳水相增溶过程微观结构的模拟[J]. 化工学报, 2012, 63(6): 1816-1822
TIAN Yi-nong, XIE Xin-an, LI Yan, et al. Mesoscopic simulation of microstructure changes in U-type microemulsion with water phase solubilizing [J]. Journal of Chemical Industry and Engineering, 2012, 63(6): 1816-1822
- [12] Bai Z, Guo H. Interfacial properties and phase transitions in ternary symmetric homopolymer-copolymer blends: A dissipative particle dynamics study [J]. Polymer, 2013, 54(8): 2146-2157
- [13] Li Y, Guo Y, Bao M, et al. Investigation of interfacial and structural properties of CTAB at the oil/water interface using dissipative particle dynamics simulations [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2011, 361(2): 573-580

[14] 完茂林,鲁传华,张玉莲,等.醇的链长对非离子表面活性剂微乳增溶水量的影响研究[J].安徽大学学报:自然科学版,2007,4:73-76

WAN Mao-lin, LU Chuan-hua, ZHANG Yu-lian, et al. Effect

of chain length of alcohols on the water content of microemulsion with nonionic surfactant [J]. Journal of Anhui University Natural Science Edition, 2007, 4: 73-76

现代食品科技