

引用格式:刘峰,韩春硕,郁林军,等.分子动力学模拟表面活性剂驱油的研究进展与展望[J].油气地质与采收率,2024,31(3):78-87.

LIU Feng, HAN Chunshuo, YU Linjun, et al. Research progress and prospects of surfactant flooding in molecular dynamics simulation[J]. Petroleum Geology and Recovery Efficiency, 2024, 31(3): 78-87.

## 分子动力学模拟表面活性剂驱油的研究进展与展望

刘峰<sup>1</sup>, 韩春硕<sup>1</sup>, 郁林军<sup>2</sup>, 张益<sup>1</sup>, 刘彦成<sup>3</sup>, 高晓泉<sup>1</sup>, 杨凯<sup>1</sup>

(1. 西安石油大学石油工程学院, 陕西西安 710065; 2. 中国石油长庆油田分公司第十二采油厂, 甘肃庆阳 745400;  
3. 中联煤层气有限责任公司生产支持中心, 北京 100015)

**摘要:**表面活性剂在油田三次采油中具有广泛应用,从微观上对表面活性剂驱油的作用机理进行研究具有重要意义。近年来,分子动力学(Molecular Dynamics, MD)模拟已成为油气田开发研究的一种重要方法。运用MD模拟方法对表面活性剂进行研究已成为热点。通过MD模拟计算系统中所有运动粒子的牛顿方程数值解,分析原子位置随时间变化的规律。利用MD模拟研究表面活性剂分子的微观行为,从而探究表面活性剂分子的性能和微观驱油机理,MD模拟界面处表面活性剂的运动及聚集状态,分析界面处表面活性剂分子对界面体系的影响,对表面活性剂的现场应用具有一定的指导意义。为此,基于MD模拟的原理概述,首先对MD模拟中的力场、边界条件、系综类型和数值算法进行了总结;其次重点阐释了MD模拟表面活性剂驱油的微观机理,包括降低油水界面张力,改变表面润湿性,增加界面电荷及乳化作用等;介绍了MD模拟在表面活性剂驱油的应用实例;最后提出了MD模拟在表面活性剂驱油的发展方向,包括与生产相近的驱油环境、新型表面活性剂的设计、理论与实验的关系、分子力场和势能模型的优选、复合与多功能一体化表面活性剂的研发等。

**关键词:**表面活性剂;分子动力学;驱油机理;提高采收率;微观

文章编号:1009-9603(2024)03-0078-10

DOI:10.13673/j.pgre.202308025

中图分类号:TE357

文献标识码:A

## Research progress and prospects of surfactant flooding in molecular dynamics simulation

LIU Feng<sup>1</sup>, HAN Chunshuo<sup>1</sup>, YU Linjun<sup>2</sup>, ZHANG Yi<sup>1</sup>, LIU Yancheng<sup>3</sup>, GAO Xiaoquan<sup>1</sup>, YANG Kai<sup>1</sup>

(1. College of Petroleum Engineering, Xi'an Shiyou University, Xi'an City, Shaanxi Province, 710065, China; 2. No. 12 Oil Production Plant, Changqing Oilfield Company, CNPC, Qingyang City, Gansu Province, 745400, China; 3. Production and Support Center, China United Coalbed Methane Corporation Ltd., Beijing City, 100015, China)

**Abstract:** Surfactants are widely used in the tertiary recovery of oilfields, and it is of great significance to study the mechanism of surfactant flooding from the microscopic point of view. In recent years, molecular dynamics (MD) simulation has become essential for oil and gas field development research. The use of MD simulation to study surfactants has become a hot spot. Through MD simulation, the numerical solutions of Newton's equations are calculated for all the moving particles in the system, and the change in atomic positions with time is analyzed, from which some laws are found. MD simulation can be used to study the microscopic behavior of surfactant molecules to explore the properties of surfactant molecules and the microscopic flooding mechanism. MD simulation of the movement and aggregation state of surfactants at the interface and the analysis of the influence of surfactant molecules at the interface on the interfacial system are of some guiding significance for the field application of surfactants. To this end, based

收稿日期:2023-08-25。

作者简介:刘峰(1984—),男,陕西泾阳人,副教授,博士,从事非常规油气藏开发研究。E-mail:xsyuliufeng@163.com。

基金项目:国家自然科学基金项目“基于分子模拟的页岩气吸附微观机理研究”(51804253)和“致密油储层人工裂缝网络形成机制及其流体多场耦合渗流理论研究”(52074226),陕西省科技厅一般项目-工业领域“高含水油藏CO<sub>2</sub>驱开发过程中的渗流及碳埋存规律研究与应用”(2023-YBGY-316),油气藏地质及开发工程全国重点实验室项目“压裂液在页岩气储层中渗吸与滞留的控制机理研究”(PLN2023-20),西安石油大学研究生创新与实践能力培养计划“基于分子动力学的表面活性剂驱油影响机理及因素研究”(YCS22213062)。

on the principle overview of MD simulation, firstly, the force field, boundary conditions, system types, and numerical algorithms in MD simulation are summarized; secondly, the microscopic mechanisms of MD simulation of surfactant flooding are highlighted, including the reduction of oil-water interfacial tension, the change in surface wettability, the increase in interfacial charge and emulsification, etc.; then, examples of the application of MD simulation in surfactant flooding are presented. Finally, the development directions of MD simulation technology in surfactant flooding are proposed, including the flooding environment similar to production, the design of new surfactants, the relationship between theory and experiment, the selection of molecular force field and potential energy model, and the research and development of composite and multifunctional integrated surfactants.

**Key words:** surfactant; molecular dynamics; flooding mechanism; EOR; microscopic

随着油田的开采,水驱采收率降低,经济效益不高,已经不再适用于继续开发。化学驱被认为是三次采油中最适合中国油田的强化采油方式之一,化学驱提高原油采收率已成为油田开发的主要研究方向<sup>[1]</sup>。目前常见的化学驱包括聚合物驱、碱驱和表面活性剂驱<sup>[2]</sup>。聚合物驱主要通过引入一些特殊基团提高驱替液的黏度和耐温抗盐性,提高驱油效率<sup>[3]</sup>。碱驱是一种可以有效提高稠油开采效率的技术,然而在开采过程中易出现腐蚀、结垢等问题,限制了其应用范围<sup>[4]</sup>。表面活性剂驱在三次采油中具有巨大的应用前景。但对表面活性剂驱油的微观机理以及不同分子之间的作用规律尚不清楚,严重限制了表面活性剂的性能改进和广泛应用。

利用分子动力学(Molecular Dynamics, MD)模拟的方法在微观条件下明晰某种驱油机理已逐渐可行。中外学者对于表面活性剂驱油机理多通过降低界面张力和改变表面润湿性的能力来评价表面活性剂驱油的好坏<sup>[5]</sup>。这些研究并未涉及表面活性剂特殊的“双亲”结构中亲水基团和疏水基团在驱油过程中,微观分子之间的相互作用和运动机理,以及驱油过程中分子层面上界面活性的微观变化,而这些变化和机理对于在微观下研究表面活性剂驱油机理及新型表面活性剂的设计非常重要,而目前中外对微观上的表面活性剂驱油机理研究尚不多。

MD模拟是一种以原子为基本单元构建分子模型,模拟分子之间相互作用和运动行为的方法,通过基本原理所构筑的算法得到分子体系的物理或化学性质<sup>[6-7]</sup>。MD模拟在预测纳米尺度的临界性质和解释宏观现象方面具有重要作用<sup>[8]</sup>,作为一项集数学、物理、化学和生物学于一体的前沿技术,在近几十年得到了巨大的发展和完善,已成为应用最广泛的模拟方法之一。随着计算机技术的不断发展,计算能力得到了突飞猛进的提高,也开始在许多领域显示出其强大的能力,特别是在石油与天然气领域<sup>[9-10]</sup>。因此,MD可以模拟表面活性剂分子在界面处的分子运动及聚集状态<sup>[8,11]</sup>,进而分析表面

活性剂驱油的微观机理,并对MD模拟的表面活性剂驱油的发展前景进行展望。

## 1 MD模拟方法

### 1.1 概述

为直观高效地进行机理研究,往往需建立可以求解的数学模型。但是现场试验和室内实验对于物质内部的分子运动、化学反应只能做到粗略的探究,无法进行深层次的剖析,究其原因,在较为有限的维度上很难真正观察某些性质或者跟踪其变化,同时现场试验或室内实验还存在危险的实验环境和高昂的花销成本,也无法进行苛刻环境下的实验(如超高温和超高压),且所得出的实验结果和理论所求的结果往往存在较大差距。计算机技术的飞速进步得以弥补现场试验的局限,为机理类的研究工作架起了一座桥梁,计算机仿真模拟可以有效地对实验进行高精度复现。

分子模拟技术基于分子结构单元的模拟,通过分子间相互作用和分子运动特性的分析,以及模拟结果与实验结果的比较认识某一机理,将分子模拟与实验相结合往往可以达到相辅相成的效果<sup>[12-16]</sup>。MD模拟借助了粒子动力学方程,满足经典牛顿力学定律。除了粒子的动力学方程外,MD模拟还具有系统的宏观物理特性,可以在人为设定的条件下模拟出各种粒子间的微观行为<sup>[16]</sup>。分子势能可看作是简单几何坐标的函数<sup>[17-18]</sup>,通常表示为:

$$E = E_{\text{弯曲}} + E_{\text{拉伸}} + E_{\text{扭转}} + E_{\text{静电}} + E_{\text{范德华}} + E_{\text{其他}} \quad (1)$$

在外力场影响下,模拟过程中原子和分子的轨迹由牛顿运动定律和原子与分子之间的相互作用力决定。分子系统的物理、化学和热力学性质可以通过模拟确定<sup>[18]</sup>。

在应用MD模拟对表面活性剂驱油机理研究时,一般通过分子模拟软件Material Studio或Lammps进行模拟,具体研究方法如图1所示。

随着计算机科学技术的迅速发展,计算能力得

到突飞猛进的提高,MD模拟在许多领域开始显示出其强大的能力。利用MD模拟可在微观上深入认识诸多科学问题<sup>[20-28]</sup>。

### 1.2 MD模拟要点

在MD模拟开始前,根据所有相互作用的分子或原子,建立一个系统,利用该系统表征实际情况。进行模拟时,基于牛顿运动定律和统计力学原理模拟原子和分子随时间变化的行为和相互作用。MD模拟的结果提供了原子随时间变化的轨迹,据此可以确定系统的热力学性质、关联函数等一系列微观表征<sup>[29]</sup>。

#### 1.2.1 力场

在MD模拟中,原子或分子间势能通过力场表示,既是计算原子之间的力,也是描述势能与原子坐标关系的数学表达式<sup>[30-32]</sup>。由数学函数呈现,这些函数描述了系统的势能以及由此产生的力。力场大致可分为经典力场和反作用力场2类。适当力场的选择决定了模拟结果的可靠性,在MD模拟中常用的力场包括COMPASS力场、CVFF力场、CHARMM力场和CFF力场等(表1)。力场包括键和非键相互作用的参数,如键拉伸、角度弯曲、扭转旋转,以及范德华力和静电相互作用。尽管在过去的几十年里已经产生了许多种力场,但经典力场仍然是现代MD模拟研究的热点。为了提高早期模型的有效性、精度和适应性,开发了新的模型。为了产生合理的MD模拟结果,必须选择正确的力场和模型。

#### 1.2.2 边界条件

为了能够准确地预测宏观性质,模拟系统必须

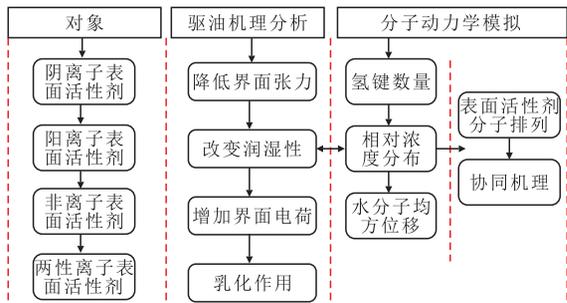


图1 MD模拟方法<sup>[19]</sup>

Fig.1 Research method of surfactant flooding mechanism<sup>[19]</sup>

表1 MD模拟中的常用力场信息

Table1 Common force field information in MD simulation

力场	类型	适用范围
COMPASS <sup>[29]</sup>	第二代力场	有机小分子、聚合物、高分子
CVFF <sup>[30]</sup>	传统力场	有机小分子、生物分子
CHARMM <sup>[32]</sup>	传统力场	生物分子、有机小分子
CFF <sup>[33]</sup>	第二代力场	有机小分子、生物大分子

包含足够数量的粒子,并且模拟时间足够长是至关重要的<sup>[34]</sup>。系统的大小不可避免地会受到计算能力的限制,位于模型表面的粒子可能会受到各个方向不同的力,所以提出了引用边界条件解决上述问题。边界条件一般包括周期边界条件和非周期边界条件。MD模拟使用周期边界条件模拟无限系统,可以实现模拟箱中重复模拟一个极小的尺度单元。采用周期边界条件可以模拟三维块状晶体和二维平面<sup>[35]</sup>。在周期边界条件下,原子之间的相互作用可以跨越边界,原子可以自由地离开盒子的一边,从另一边重新进入,使模拟系统中的粒子数得以保持,并且保证了系统密度恒定以满足实际情况。然而,对于孤立的系统,如孤立的纳米粒子、原子均不会与结合的正离子发生作用,因此,采用非周期边界条件,模拟盒的尺寸必须足够大。但受限于计算能力,建立大尺寸模拟盒在部分环境下难以实现,这也是通常选用周期边界条件而不采用非周期边界条件的原因。

#### 1.2.3 系综类型

MD模拟测量系统中的时间平均值,以获得系统的统计平均值<sup>[36]</sup>。MD模拟可以在不同的系综中进行。MD模拟中常用的系综包括:微正则系综(NVE)、正则系综(NVT)、等温等压系综(NPT)。这些系综控制模拟系统中的温度、体积和粒子数。

#### 1.2.4 数值算法

MD模拟将时间分解离散的步骤称为时间积分算法。时间积分算法是MD模拟通常所用的数值算法<sup>[37-39]</sup>。在每一个时间步中,原子的位置和速度都会根据作用在原子上的力进行更新。时间步长应该足够小,以准确捕捉系统的动态。在MD模拟中应用最为广泛的时间积分算法是Verlet算法,该算法继承了MD的不变流形,即使对于离散时间步长也适用。

## 2 表面活性剂驱油机理

表面活性剂是在低浓度下吸附于体系两相界面上改变界面性质,在较高浓度下产生增溶的物质<sup>[40]</sup>。根据在水中的解离方式,表面活性剂大致可分为阴离子表面活性剂、非离子表面活性剂、阳离子表面活性剂和两性离子表面活性剂4类<sup>[41-42]</sup>。从降低油水界面张力、改变表面润湿性、增加表面电荷以及乳化作用4方面,对表面活性剂驱油机理的研究进展进行阐述。

## 2.1 降低油水界面张力

表面活性剂驱油的主要目的是降低油水界面张力,使油在多孔介质中易于驱替<sup>[43-48]</sup>。表面活性剂在固-液界面及液-液界面的吸附使原本不相容的两相接触在一起,一定程度上减小了不同相之间的界面张力,进而减小了黏附功,从而使得原油容易脱附,提高了驱油效率。MD模拟中界面张力可以通过计算系统压力张量的分量获得,其计算公式为<sup>[27]</sup>:

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

界面形成能(IFE)也是评价表面活性剂降低界面张力能力的重要参数,其计算公式为<sup>[49]</sup>:

$$IFE = \frac{E_{\text{total}} - (nE_{\text{single}} + E_{\text{blank}})}{n} \quad (3)$$

界面形成能绝对值越大,其界面越稳定,表面活性剂的界面活性越高。说明表面活性剂与界面作用越强,界面张力越低。ALONSO等采用MD模拟研究了表面活性剂和盐对油水界面张力的影响,认为:一方面盐离子能够与表面活性剂相互作用,改变其界面分子分布,从而影响油水界面张力;另一方面,阴离子对表面活性剂的吸引力小于阳离子,从而产生了极化界面的双电层,这可能是使得油水界面张力降低的一个原因<sup>[50]</sup>。PENG等采用MD模拟方法研究了3种典型表面活性剂在正十二烷-水和正十二烷+沥青质-水界面上的吸附行为,认为表面活性剂和沥青质分子在降低界面张力方面具有不同的协同效应<sup>[51]</sup>。FU等运用MD模拟研究了4种不同离子类型的表面活性剂在油水界面上的行为,发现在动力学平衡后,SDS和CTAB呈近似规则排列,非极性基团插入到油相中,极性基团延伸到水相中,AEO-9分子的长链头部基团在界面处铺展堆积,BS-12不规则分布,部分分子浸入油相中,认为不同离子类型的表面活性剂对于降低油水界面张力的能力都存在最佳浓度<sup>[52]</sup>。因此,降低油水界面张力能力的大小直接反映了表面活性剂驱油能力的优良。

## 2.2 改变表面润湿性

许多研究表明,在表面活性剂驱油过程中,油藏润湿性由油湿向水湿的转变机理是提高采收率的关键因素之一<sup>[53-55]</sup>。由于表面活性剂的双亲结构,可使油湿岩层由亲油表面转变为亲水表面,有助于驱替出亲油储层孔隙中的剩余油。润湿反转的发生使毛细管力的方向发生改变,由阻力转变为动力,驱油效率得以提高。对于润湿性,一般通

过表观接触角评价,其表达式为:

$$\gamma_{sv} = \gamma_{sl} + \gamma_{lv} \cos \theta_Y \quad (4)$$

一般认为,接触角为 $90^\circ \sim 180^\circ$ 时不能在表面形成润湿。对于粗糙且充满化学性的表面,液滴在表面上的润湿状态可以用Wenzel模型描述,其表达式为:

$$\cos \theta_w = r \cos \theta_Y \quad (5)$$

对于光滑表面, $r=1, \theta_w=\theta_Y$ ;对于粗糙表面, $r>1$ ,当 $\theta_w < \theta_Y$ 时,表面变得更加亲水;当 $\theta_w > \theta_Y$ 时,表面变得更加疏水。

JAN等采用MD模拟方法研究了表面活性剂对方解石润湿性的影响,认为阳离子表面活性剂能够更有效地从表面除去羧酸盐化合物,从而改变润湿性,而非离子和阴离子表面活性剂几乎不会改变润湿性<sup>[56]</sup>。JULIUS等运用MD模拟研究了阳离子表面活性剂改变润湿性中羧酸盐疏水性的影响,认为长尾羧酸盐使方解石表面有更强的油湿性的趋势,羧酸盐的疏水性对于阳离子表面活性剂润湿性反转有很大影响<sup>[41]</sup>。BAI等通过MD模拟研究了不同类型的表面活性剂和Smart Water离子对白云石矿物润湿性的影响,认为羧酸盐可以使白云石表面更亲油,阳离子表面活性剂能更有效地逆转润湿性,其中阳离子表面活性剂对润湿性的影响通过削弱油相和羧酸盐之间的相互作用实现<sup>[39]</sup>。因此,阳离子表面活性剂改变润湿性的效果最好,不同离子类型的表面活性剂与其他油田化学品复配或许可以更有效地改变润湿性。

## 2.3 增加表面电荷

在原油驱替过程中,表面活性剂的吸附直接受电荷的电性和大小的影响。吸附在油滴和岩石表面的表面活性剂可以增加表面电荷密度,并增加油滴与岩石表面之间的静电排斥力,并使油滴易于被驱替,去除表面介质,从而提高驱油效率<sup>[57-58]</sup>。LI等运用MD模拟研究了不同表面活性剂水滴的聚结行为,结果表明,水分子间的静电引力在液滴聚结过程中起主导作用,正负电荷在表面活性剂层两端聚集,进一步增强了液滴偶极和聚集能力,适量的表面活性剂可以提高液滴的临界电场强度<sup>[59]</sup>。MOOSAVI等进行了MD模拟,研究表面活性剂与 $\text{SiO}_2$ 的相互作用,认为表面活性剂与 $\text{SiO}_2$ 的相互作用改变了表面层的结构,从而改变了表面电荷密度<sup>[60]</sup>。LIU等运用MD模拟研究了阴离子表面活性剂在不同电荷状态下在方解石表面的吸附行为,发现SDBS在带10个正电荷的表面上最稳定,在未带

电表面吸附最不稳定<sup>[61]</sup>。随着表面活性剂尾碳链长度的增加, SDBS的吸附能变弱, 扩散系数增加。因此, 表面电荷的改变也会改变表面活性剂的吸附稳定性。

#### 2.4 乳化作用

表面活性剂在油水界面上的吸附可稳定水包油乳状液, 原油乳化后, 在叠加贾敏效应的推动下, 水在地层均匀前进, 被洗下来的原油越来越多, 乳化油在前进过程中不易黏附回润湿储层表面, 聚集在一起甚至形成油带, 并逐渐扩大, 油带的形成和扩大使得原油易于开采, 提高了驱油效率。GOSWAMI等发现乳化降低了原油黏度, 同时也降低了注入端压力, 从而提高了采收率<sup>[62]</sup>。ZHANG等通过MD模拟研究了乳化油滴的结构, 模拟结果表明沥青质和树脂分子的堆积结构形成了油滴的网状结构, 当引入非离子表面活性剂时, 其中一些表面活性剂可以吸附在油滴表面并改变其亲水性, 其他物质会进入油滴内部, 破坏油滴内部沥青质或树脂的堆积结构<sup>[32]</sup>。AHMADI等采用MD模拟方法研究了在混合体系下阴离子表面活性剂分子结构和浓度对乳化与破乳的影响, 认为增加表面活性剂浓度可以强化破乳过程并在水和十四烷之间产生清晰的相分离<sup>[63]</sup>。CHENG等采用MD模拟方法研究了渗透剂胶束对重油液滴的乳化行为, 认为表面活性剂两性头部之间的水桥结构通常形成于乳化油滴的水化层周围, 在乳化过程中, 油滴周围的亲水/疏水表面积比至关重要<sup>[64]</sup>。因此, 对油滴结构的探究是乳化作用的重要一环。

### 3 表面活性剂在MD模拟驱油中的应用

目前对表面活性剂驱油效果的研究, 多从界面形成能(IFE)、径向分布函数(RDF)、均方位移(MSD)、相对浓度分布(RCD)和界面密度分布等方面入手。

#### 3.1 单一表面活性剂驱油MD模拟

MD模拟从微观上展现了分子结构组成、表面活性剂分子在界面处的复杂行为, 也展现了现场试验中一些难以解释的情况。

LIU等采用MD模拟方法研究了阴离子表面活性剂在方解石表面不同电荷状态下的吸附行为<sup>[61]</sup>。利用吸附能、均方位移、相对浓度分布和径向分布函数对吸附过程进行了系统分析。结果表明, 十二烷

基磺酸钠在方解石表面的吸附最强。随着表面活性剂尾部碳链长度的增加, 十二烷基磺酸钠的吸附能变弱, 主要归因于表面活性剂之间的范德华力相互作用。FU等对具有不同离子类型的表面活性剂进行MD模拟, 探究表面活性剂的界面活性和协同效应, 发现不同离子类型的表面活性剂降低油水界面张力效果完全不同<sup>[52]</sup>。

吕锦涛等使用MD模拟方法选取了3种表面活性剂: 十二烷基磺酸钠(SDS)、三甲基十六烷基溴化铵(CTMAB)和聚甘油脂肪酸酯(PGFE), 研究了表面活性剂微观驱油机理。结果表明, 3种表面活性剂驱油能力由高到低的顺序为: SDS>PGFE>CTMAB<sup>[65]</sup>。LVANOVA等通过MD模拟研究了在水/正癸烷界面下电解质浓度和温度对阳离子表面活性剂的结构、力学性质和热性能的影响。结果表明, 芥酸二-羟乙基-甲基氯化铵(EHAC)具有最佳的盐度, 且界面张力最小<sup>[66]</sup>。相比之下, 十六烷基三甲基氯化铵(CTAC)溶液的界面张力在所有NaCl浓度下均增加。这为研究表面活性剂的界面行为随盐度的变化规律提供了重要的基础。

JIA等采用MD模拟方法研究了油层条件下 $\alpha$ -烯烃表面活性剂(单尾结构的AOS)和烯烃内部表面活性剂(双尾结构的IOS)在油(癸烷)-水界面的吸附过程。结果表明, 在高浓度条件下, IOS可以显著降低界面张力, 且在界面处形成的单分子膜比AOS更稳定。同时双尾结构在界面性能方面优于单尾结构的, 这对于提高采收率中表面活性剂的设计、制造和优选具有很大的参考价值<sup>[67]</sup>。由此来看, MD模拟具有强大的功能, 可对表面活性剂微观驱油不同分子之间的相互作用规律进行研究, 以系统揭示表面活性剂分子结构和溶液环境变化与界面自组装行为间的相互关系, 为发展新型表面活性剂和提高表面活性剂性能, 提高驱油效率提供理论依据。

#### 3.2 复合表面活性剂驱油MD模拟

BARBOSA等采用全原子MD模拟研究了4种盐和2种不同的非离子表面活性剂在水-正庚烷界面体系条件下的结构和热力学性质。模拟结果表明, 表面活性剂分子的结构和热力学行为相对不受特定盐种的影响。表面活性剂之间的相互作用在决定界面行为方面具有关键作用<sup>[68]</sup>。

BAI等运用MD模拟方法研究了二脱氧腺苷/阴离子表面活性剂混合物在空气/水界面上的界面行为, 阐明了单分子膜的自组装过程和动力学性

质,探讨了表面活性剂结构对表面活性的影响。MD模拟表明,不同的二脱氧腺苷/阴离子表面活性剂混合物具有不同的表面活性,十二烷基磺酸钠与二脱氧腺苷之间的相互作用最强,胺基水化程度较高,优于其他阴离子表面活性剂与二脱氧腺苷的相容性,表现出更强的协同效应<sup>[36]</sup>。李侠清等通过MD模拟研究了原油存在下三元复合体系降低界面张力的机理,认为界面厚度越大,表面活性剂和复合体系的界面张力越低<sup>[69-70]</sup>。REN等采用MD模拟研究了3种甜菜碱与3种不同链长的扩链表面活性剂混合体系的界面性质,研究表明,甜菜碱的空间位阻效应与扩链表面活性剂PO链长协同影响表面活性剂的界面排列和界面张力<sup>[19]</sup>。YUAN等通过MD模拟研究了表面活性剂助采油过程的机理,认为水通道对油的分离具有关键作用。通过对原油与方解石表面吸附能的分析得出,表面活性剂对原油的分离是有效的<sup>[37]</sup>。目前,表面活性剂性能是研究的热点和难点,根据表面活性剂性质,结合MD模拟,将表面活性剂与其他纳米流体复配,研究其协同驱油机理将是未来提高采收率研究的主要方向之一。

## 4 结论与展望

(1)表面活性剂驱油的主要机理包括降低油水界面张力,改变表面润湿性,增加界面电荷及乳化作用等。在MD模拟过程中有待进一步考虑实际因素,如孔隙几何形状、储层矿物组分、润湿性、原油组分、地层水矿化度、温度和压力的影响等。

(2)MD模拟通过微观条件下观察不同分子间的运动和相互作用规律,了解复杂环境下表面活性剂驱油的微观机理。因此,MD模拟对于新型的表面活性剂驱油可进行先导性研究论证,探明技术可行性,为新型表面活性剂的设计、筛选和制造,构建分子结构与界面性能之间的定量关系,降低生产成本提供了理论依据,为针对性的设计与合成具有特殊结构的新型表面活性剂提供指导。

(3)MD模拟使理论联系实际,在微观与宏观之间架起了一座桥梁。MD模拟可以揭示表面活性剂驱油的微观机理,获得实验难以控制和难以观察到的微观信息,对实验起到指导和补充作用。同时,实验研究的结果也可以为MD模拟计算提供依据和约束条件,验证模拟结果的准确性。因此,通过MD模拟研究表面活性剂和各原子之间的界面性质的

协同效应,得到定量的构效关系,进而提高理论与实验的结合程度。

(4)MD模拟可以深入了解表面活性剂驱油的微观过程,但模拟体系涉及表面活性剂、油分子、水分子、黏土表面以及层间离子之间复杂的相互作用,模拟时需要重点考虑合适的分子力场和势能模型。

(5)目前,表面活性剂驱油面临吸附损失大,难以满足高温高盐油藏价格昂贵等难题。因此,通过MD模拟研究多种不同功能表面活性剂,表面活性剂与其他纳米流体复配体系,解释表面活性剂与其他流体间不同类型分子的相互作用规律,进一步认识多功能一体化表面活性剂、复合表面活性剂驱油的机理和过程,是MD模拟在表面活性剂驱油的重要发展方向,也是促进油田三次采油复杂化学驱技术开发与应用的基础。

### 符号解释

- $E$  —— 分子势能, kJ/mol;
- $E_{\text{blank}}$  —— 不含表面活性剂的空白体系能量, kJ/mol;
- $E_{\text{single}}$  —— 含有一个表面活性剂分子的体系能量, kJ/mol;
- $E_{\text{total}}$  —— 体系总能量, kJ/mol;
- $E_{\text{范德华}}$  —— 范德华力, kJ/mol;
- $E_{\text{静电}}$  —— 静电力, kJ/mol;
- $E_{\text{拉伸}}$  —— 键拉伸能, kJ/mol;
- $E_{\text{扭转}}$  —— 二面角扭转能, kJ/mol;
- $E_{\text{弯曲}}$  —— 键角弯曲能, kJ/mol;
- $E_{\text{其他}}$  —— 键角弯曲能、键拉伸能、二面角扭转能、静电力和范德华力之间相互作用引起的能量变化, kJ/mol;
- $IFE$  —— 界面形成能, kJ/mol;
- $L_z$  —— 系统在 $z$ 方向的长度, nm;
- $n$  —— 体系中表面活性剂分子的数量, 个;
- $P_{xx}$  —— 平行于界面压力张量的 $x$ 方向切向分量, mN/m;
- $P_{yy}$  —— 平行于界面压力张量的 $y$ 方向切向分量, mN/m;
- $P_{zz}$  —— 垂直于界面压力张量的 $z$ 方向切向分量, mN/m;
- $r$  —— 粗糙因子, 无量纲;
- $\gamma$  —— 界面张力, mN/m;
- $\gamma_{\text{sl}}$  —— 固-液界面张力, mN/m;
- $\gamma_{\text{sv}}$  —— 固-气界面张力, mN/m;
- $\gamma_{\text{lv}}$  —— 气-液界面张力, mN/m;

$\theta_v$  —— 杨氏接触角, ( $^\circ$ );

$\theta_w$  —— 接触角, ( $^\circ$ ).

### 参考文献

- [1] 孙福街. 中国海上油田高效开发与提高采收率技术现状及展望[J]. 中国海上油气, 2023, 35(5): 91-99.  
SUN Fujie. Status and prospects of efficient development and EOR technologies in China offshore oilfields [J]. China Offshore Oil and Gas, 2023, 35(5): 91-99.
- [2] 王哲, 曹广胜, 白玉杰, 等. 低渗透油藏提高采收率技术现状及展望[J]. 特种油气藏, 2023, 30(1): 1-13.  
WANG Zhe, CAO Guangsheng, BAI Yujie, et al. Development status and prospect of EOR technology in low-permeability reservoirs [J]. Special Oil & Gas Reservoirs, 2023, 30(1): 1-13.
- [3] 杨付林, 范勐. 新型稠油耐垢复合碱驱体系制备与性能评价[J]. 大庆石油地质与开发, 2018, 37(6): 98-102.  
YANG Fulin, FAN Meng. Preparation and performance evaluation of the new-type scale-resistant complex alkaline flooding system for the heavy Oil [J]. Petroleum Geology & Oilfield Development in Daqing, 2018, 37(6): 98-102.
- [4] 闫健, 侣彬凡, 孙晓东, 等. 页岩油储层超临界CO<sub>2</sub>吞吐用气溶性表面活性剂性能评价[J]. 断块油气田, 2023, 30(4): 566-571.  
YAN Jian, LI Binfan, SUN Xiaodong, et al. Performance evaluation of gas soluble surfactants for supercritical CO<sub>2</sub> huff and puff in shale oil reservoirs [J]. Fault-Block Oil & Gas Field, 2023, 30(4): 566-571.
- [5] 苏龙. 三次采油用表面活性剂油/水界面吸附行为的理论研究[D]. 济南: 山东大学, 2020.  
SU Long. Theoretical study on adsorption behaviors of surfactants for enhanced oil recovery at oil/water interface [D]. Jinan: Shandong University, 2020.
- [6] 张瑞琪, 伊卓, 刘希, 等. 分子模拟技术在油田用丙烯酰胺聚合物中的应用进展[J]. 石油化工, 2022, 51(6): 726-733.  
ZHANG Ruiqi, YI Zhuo, LIU Xi, et al. Application of molecular simulation technology in polyacrylamide used in oil field [J]. Petrochemical Technology, 2022, 51(6): 726-733.
- [7] ZAHARIEV K T, TADJER V A, IVANOVA N A. Transfer of non-ionic surfactants across the water-oil interface: A molecular dynamics study [J]. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2016, 506: 20-31.
- [8] 徐建平, 袁远达, 谢青, 等. 分子动力学在聚合物驱油中的应用研究进展[J]. 油气藏评价与开发, 2021, 11(3): 414-421.  
XU Jianping, YUAN Yuanda, XIE Qing, et al. Advance in application of molecular dynamics simulation in polymer flooding [J]. Petroleum Reservoir Evaluation and Development, 2021, 11(3): 414-421.
- [9] AHMADI Mohammadali, ALIABADIAN Ehsan, LIU Benjieming, et al. Comprehensive review of the interfacial behavior of water/oil/surfactant systems using dissipative particle dynamics simulation [J]. Advances in Colloid and Interface Science, 2022, 309: 102774.
- [10] 石玉江, 刘国强, 钟吉彬, 等. 基于大数据的测井智能解释系统开发与应用[J]. 中国石油勘探, 2021, 26(2): 113-126.  
SHI Yujiang, LIU Guoqiang, ZHONG Jibin, et al. Development and application of intelligent logging interpretation system based on big data [J]. China Petroleum Exploration, 2021, 26(2): 113-126.
- [11] 刘博. 分子模拟技术在油田助剂领域的应用研究[J]. 涂层与防护, 2021, 42(10): 16-19.  
LIU Bo. Application of molecular simulation technology in oil field additives [J]. Coating and Protection, 2021, 42(10): 16-19.
- [12] SHEN K, CUI L, YANG L, et al. Molecular dynamics simulations of the nickel removal from crude oil by neutral and charged spherical polymer brushes [J]. Fuel, 2023, 345: 128179.
- [13] GERMÁN P, FILIPA M C, GONÇALO M C S, et al. Coarse-grain molecular dynamics simulation framework to unravel the interactions of surfactants on silica surfaces for oil recovery [J]. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2023, 670: 131583.
- [14] 钱英强, 杨雪, 刘晓强, 等. 烟道气驱替石英狭缝孔中页岩气的分子模拟[J]. 石油实验地质, 2023, 45(3): 560-565.  
QIAN Yingqiang, YANG Xue, LIU Xiaoqiang, et al. Molecular simulation of the displacement of shale gas in quartz slit by flue gas [J]. Petroleum Geology & Experiment, 2023, 45(3): 560-565.
- [15] 李晶辉, 韩鑫, 黄思婧, 等. 页岩干酪根吸附规律的分子模拟研究[J]. 油气藏评价与开发, 2022, 12(3): 455-461.  
LI Jinghui, HAN Xin, HUANG Sijing, et al. Molecular simulation of adsorption law for shale kerogen [J]. Petroleum Reservoir Evaluation and Development, 2022, 12(3): 455-461.
- [16] 丛奇, 陈君青, 卢贵武, 等. 利用分子动力学模拟研究页岩吸附能力的影响因素及微观机理的综述[J]. 中南大学学报: 自然科学版, 2022, 53(9): 3 474-3 489.  
CONG Qi, CHEN Junqing, LU Guiwu, et al. Review on influencing factors and microscopic mechanism of shale adsorption capacity by molecular dynamics simulation [J]. Journal of Central South University: Science and Technology, 2022, 53(9): 3 474-3 489.
- [17] AMIRHOSSEIN F F, ABDOLNABI H, GHASEM Z, et al. Molecular dynamics modeling and simulation of silicon dioxide-low salinity water nanofluid for enhanced oil recovery [J]. Journal of Molecular Liquids, 2021, 339: 116834.
- [18] 袁远达. 分子模拟技术在聚合物驱油中的应用研究进展[J]. 石油化工应用, 2021, 40(1): 1-9.  
YUAN Yuanda. Research progress on the application of molecular simulation technology in polymer flooding [J]. Petrochemical Industry Application, 2021, 40(1): 1-9.
- [19] REN Jia, XIAO Hongyan, CAO Xulong, et al. Molecular dynamics simulation study on interfacial behaviors of betaines and

- extended surfactants [J]. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2023, 666: 131323.
- [20] 康志红. “拟双子”表面活性剂的分子动力学模拟[D]. 大庆: 东北石油大学, 2019.
- KANG Zhihong. Molecular dynamics simulation of “pseudo-gemini” surfactant [D]. Daqing: Northeast Petroleum University, 2019.
- [21] DENSY A F S D, MAIA C B K, VIEIRA G J M, et al. Chitosan derivatives as surfactant carriers for enhanced oil recovery: experimental and molecular dynamic evaluations of polymer-surfactant interactions [J]. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2023, 671: 131644.
- [22] 汪新光, 郇金来, 彭小东, 等. 基于数字岩心的致密砂岩储层孔隙结构与渗流机理[J]. *油气地质与采收率*, 2022, 29(6): 22-30.
- WANG Xinguang, HUAN Jinlai, PENG Xiaodong, et al. Flow mechanism and pore structures of tight sandstone based on digital core analysis [J]. *Petroleum Geology and Recovery Efficiency*, 2022, 29(6): 22-30.
- [23] CAO G, DU T, BAI Y, et al. Effects of surfactant molecular structure on the stability of water in oil emulsion [J]. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 2021, 196: 107695.
- [24] WANG L, ZHANG Y, ZOU R, et al. Molecular dynamics investigation of DME assisted CO<sub>2</sub> injection to enhance shale oil recovery in inorganic nanopores [J]. *Journal of Molecular Liquids*, 2023, 385: 122389.
- [25] 张恒, 苑世领. 分子动力学模拟在三次采油中的应用[J]. *中国科学: 化学*, 2021, 51(6): 761-771.
- ZHANG Heng, YUAN Shiling. Application of molecular dynamics simulation in enhanced oil recovery [J]. *Scientia Sinica: Chimica*, 2021, 51(6): 761-771.
- [26] MENG Junqi, WANG Lijuan, LÜ Chunhui, et al. Molecular simulation of the regulation mechanism of the hydrophilic structure of surfactant on the wettability of bituminous coal surface [J]. *Journal of Molecular Liquids*, 2023, 383: 122185.
- [27] SHEN Rongqi, BAI Qingshun. Influence of ionic strength and surfactant concentration on the alkane contaminant desorption in solution: A molecular dynamics simulation [J]. *Journal of Molecular Liquids*, 2022, 349: 118154.
- [28] HE F, WANG X, WU Q, et al. Identification of potential ATP-competitive cyclin-dependent kinase 1 inhibitors: De novo drug generation, molecular docking, and molecular dynamics simulation [J]. *Computers in Biology and Medicine*, 2023, 155: 106645.
- [29] LI Xujun, SUN Jingli, WEI Xueying, et al. Molecular dynamics study with COMPASS II forcefield on nucleation and growth mechanism of sodium chloride in supercritical water [J]. *The Journal of Supercritical Fluids*, 2023, 202: 106053.
- [30] ASENSIO J L, MARTIN P M, JIMENEZ B J. The use of CVFF and CFF91 force fields in conformational analysis of carbohydrate molecules. Comparison with AMBER molecular mechanics and dynamics calculations for methyl  $\alpha$ -lactoside [J]. *International Journal of Biological Macromolecules*, 1995, 17(3/4): 137-148.
- [31] 肖波, 程杰成, 江波. 表面活性剂体系驱油效果分子动力学模拟研究[J]. *油田化学*, 2010, 27(3): 291-294.
- XIAO Bo, CHENG Jiecheng, JIANG Bo. A molecular dynamical simulation study on oil displacement efficiency of surfactant systems [J]. *Oilfield Chemistry*, 2010, 27(3): 291-294.
- [32] ZHANG Hengming, LIU Shasha, WANG Xueyu, et al. Molecular dynamics study on emulsified oil droplets with nonionic surfactants [J]. *Journal of Molecular Liquids*, 2022, 346: 117102.
- [33] WANG Yue, SHAO Haodong, ZHANG Chengxu, et al. Molecular dynamics for electrocatalysis: Mechanism explanation and performance prediction [J]. *Energy Reviews*, 2023, 2(3): 100028.
- [34] SALIM B, BHUSAN B D. Molecular dynamics simulation in concrete research: A systematic review of techniques, models and future directions [J]. *Journal of Building Engineering*, 2023, 76: 107267.
- [35] MAO Qian, FENG Muye, JIANG Xizhuo, et al. Classical and reactive molecular dynamics: Principles and applications in combustion and energy systems [J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2023, 97: 101084.
- [36] BAI Yang, WEN Weixiang, GAO Yujuan, et al. Molecular dynamics simulations of the structure - property relationships of DDA/anionic surfactant mixtures at the air/water interface [J]. *Journal of Molecular Liquids*, 2022, 368: 120804.
- [37] YUAN Shundong, WANG Shiyan, WANG Xueying, et al. Molecular dynamics simulation of oil detachment from calcite surface in aqueous surfactant solution [J]. *Computational and Theoretical Chemistry*, 2016, 1092: 82-89.
- [38] JI B, JIANG B, YUAN L, et al. Experimental and molecular dynamics simulation study on the influence of SDS and JFC composite ratios on bituminous coal wettability [J]. *Process Safety and Environmental Protection*, 2023, 174: 473-484.
- [39] BAI S, JAN K, MOHAMMAD P. Wettability reversal on dolomite surfaces by divalent ions and surfactants: An experimental and molecular dynamics simulation study [J]. *Langmuir: the ACS Journal of Surfaces and Colloids*, 2021, 32(22): 6 641-6 649.
- [40] 宋文玲, 李强, 曾志林. 二元复合驱中表面活性剂的提采机理分析[J]. *油田化学*, 2023, 40(1): 76-92.
- SONG Wenling, LI Qiang, ZENG Zhilin. Mechanism of enhanced oil recovery by surfactant in polymer-surfactant dual composite flooding [J]. *Oilfield Chemistry*, 2023, 40(1): 76-92.
- [41] JULIUS T, JAN K, MOHAMMAD P. Effect of oil carboxylate hydrophobicity on calcite wettability and its reversal by cationic surfactants: An experimental and molecular dynamics simulation investigation [J]. *Journal of Molecular Liquids*, 2023, 380: 121663.

- [42] 尉振业,杨昌华,成鹏飞.表面活性剂在油气田开发中的作用机制与应用[J].精细石油化工进展,2022,23(5):46-54.  
YU Zhenye, YANG Changhua, CHENG Pengfei. Mechanism and application of surfactant in oil and gas field development [J]. Advances in Fine Petrochemicals, 2022, 23(5): 46-54.
- [43] 鲍博,史嘉威,冯嘉,等.基于微流控技术的表面活性剂强化驱油研究进展[J].石油学报,2022,43(3):432-442.  
BAO Bo, SHI Jiawei, FENG Jia, et al. Research progress of surfactant enhanced oil recovery based on microfluidics technology [J]. Acta Petrolei Sinica, 2022, 43(3): 432-442.
- [44] GAO S, BAO X, YU L, et al. Molecular dynamics study of “quasi-gemini” surfactant at n-decane/water interface: The synergistic effect of hydrophilic headgroups and hydrophobic tails of surfactants on the interface properties [J]. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2022, 634: 127899.
- [45] 关文婷,张晓芹,蔡志彪,等.大庆油田三类油层弱碱三元复合驱表面活性剂浓度优化[J].大庆石油地质与开发,2023,42(2):99-107.  
GUAN Wenting, ZHANG Xiaoqin, CAI Zhibiao, et al. Surfactant concentration optimization of weak alkali ASP flooding system for Class III reservoirs in Daqing Oilfield [J]. Petroleum Geology & Oilfield Development in Daqing, 2023, 42(2): 99-107.
- [46] 李婷,谢安,倪振,等.表面活性剂协同低盐度水驱提高致密油藏采收率研究[J].特种油气藏,2023,30(1):114-119.  
LI Ting, XIE An, NI Zhen, et al. Study on enhancing the oil recovery of tight oil reservoirs by surfactant combined with low-salinity water flooding [J]. Special Oil & Gas Reservoirs, 2023, 30(1): 114-119.
- [47] 李宗阳,杨勇,王业飞,等.不同水油黏度比下乳化对稠油复合驱的影响[J].油气地质与采收率,2023,30(1):146-152.  
LI Zongyang, YANG Yong, WANG Yefei, et al. Effects of emulsification on combination flooding in heavy oil reservoirs at different water-oil viscosity ratios [J]. Petroleum Geology and Recovery Efficiency, 2023, 30(1): 146-152.
- [48] 张民,孙志刚,于春磊,等.普通稠油原位乳化降黏驱微观渗流特征可视化研究[J].油气地质与采收率,2023,30(3):152-158.  
ZHANG Min, SUN Zhigang, YU Chunlei, et al. Visualization of microscopic flow characteristics for in-situ emulsification and viscosity reduction development in common heavy oil reservoirs [J]. Petroleum Geology and Recovery Efficiency, 2023, 30(3): 152-158.
- [49] JIA Jihui, LI Jingwei, LIANG Yunfeng, et al. Molecular dynamics study on performance of olefin sulfonate at the decane - water interface: effect of molecular architecture [J]. Fuel, 2022, 308: 122013.
- [50] ALONSO G, GAMALLO P, MEJÍA A, et al. Assessing salt-surfactant synergistic effects on interfacial tension from molecular dynamics simulations [J]. Journal of Molecular Liquids, 2019, 299: 112223.
- [51] PENG Baoliang, XIAO Shafei, WANG Yuanyuan, et al. On the synergistic effect of asphaltene and surfactant to reduce n-dodecane - water interfacial tension: insights from molecular dynamics simulations [J]. Molecular Simulation, 2022, 48(12): 1133-1142.
- [52] FU Lippei, GU Feng, LIAO Kaili, et al. Molecular dynamics simulation of enhancing surfactant flooding performance by using SiO<sub>2</sub> nanoparticles [J]. Journal of Molecular Liquids, 2022, 367: 120404.
- [53] GAN J, WANG D, XIAO Z, et al. Experimental and molecular dynamics investigations of the effects of ionic surfactants on the wettability of low-rank coal [J]. Energy, 2023, 271: 127012.
- [54] 郭东红,李森,袁建国.表面活性剂驱的驱油机理与应用[J].精细石油化工进展,2002,17(7):36-41.  
GUO Donghong, LI Sen, YUAN Jianguo. Flooding mechanism and application of surfactant flooding [J]. Advances in Fine Petrochemicals, 2002, 17(7): 36-41.
- [55] 王威,张云宝,王楠,等.表面活性剂驱油机理分析及现状研究[J].当代化工,2019,48(8):1850-1852.  
WANG Wei, ZHANG Yunbao, WANG Nan, et al. Mechanism analysis and current situation of surfactant flooding [J]. Contemporary Chemical Industry, 2019, 48(8): 1850-1852.
- [56] JAN K, SHIXUN B, MOHAMMAD P. Effects of surfactant charge and molecular structure on wettability alteration of calcite: insights from molecular dynamics simulations [J]. The Journal of Physical Chemistry B, 2021, 125(4): 1293-1305.
- [57] 李联中,田浩然.适合特低渗透油藏的表面活性剂驱油体系研究及应用[J].西安石油大学学报:自然科学版,2022,37(3):86-92.  
LI Lianzhong, TIAN Haoran. Research and application of surfactant flooding system suitable for ultra-low permeability reservoir [J]. Journal of Xi'an Shiyou University: Natural Science Edition, 2022, 37(3): 86-92.
- [58] 汪侠.表面活性剂研发现状及未来发展前景研究[J].化工设计通讯,2023,49(4):55-57.  
WANG Xia. Research on research and development status and future development prospects of surfactants [J]. Chemical Engineering Design Communications, 2023, 49(4): 55-57.
- [59] LI N, SUN Z, PANG Y, et al. Microscopic mechanism for electrocoalescence of water droplets in water-in-oil emulsions containing surfactant: A molecular dynamics study [J]. Separation and Purification Technology, 2022, 289: 120756.
- [60] MOOSAVI S S, ZOLGHADR A R. Structural transitions of anionic, cationic, and nonionic surfactant solutions confined between amorphous SiO<sub>2</sub> slabs: molecular dynamics simulations [J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2022, 61(50): 18390-18399.
- [61] LIU Zilong, WANG Ning, LI Yanxiang, et al. Charge-modulated calcite surface for anionic surfactant adsorption from molecular dynamics simulations [J]. Surfaces and Interfaces,

- 2022, 33: 102234.
- [62] GOSWAMI R, CHATURVEDI K R, KUMAR R S, et al. Effect of ionic strength on crude emulsification and EOR potential of micellar flood for oil recovery applications in high saline environment [J]. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 2018, 170: 49-61.
- [63] AHMADI M, HOU Q, WANG Y, et al. Spotlight on reversible emulsification and demulsification of tetradecane-water mixtures using CO<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> switchable surfactants: Molecular dynamics (MD) simulation [J]. *Energy*, 2023, 279: 128100.
- [64] CHENG Y, YUAN S. Emulsification of surfactant on oil droplets by molecular dynamics simulation [J]. *Molecules*, 2020, 25 (13): 3 008.
- [65] 吕锦涛,赵会军,田浩,等.表面活性剂驱油机理的实验探究与动力学模拟[J].*石油炼制与化工*,2019,50(10):18-24.  
LÜ Jintao, ZHAO Huijun, TIAN Hao, et al. Experimental study and dynamic simulation of surfactant enhanced oil recovery mechanism [J]. *Petroleum Processing and Petrochemicals*, 2019, 50(10): 18-24.
- [66] LVANOVA A A, CHEREMISIN A N, BARIFCANI A, et al. Molecular dynamics study of the effect of sodium and chloride ions on water-surfactant-hydrocarbon interfaces [J]. *Chemical Physics: A Journal Devoted to Experimental and Theoretical Research Involving Problems of Both a Chemical and Physical Nature*, 2021, 548: 111243.
- [67] JIA Jihui, LI Jingwei, LIANG Yunfeng, et al. Molecular dynamics study on performance of olefin sulfonate at the decane - water interface: effect of molecular architecture [J]. *Fuel*, 2022, 308: 122013.
- [68] BARBOSA G D, BARA J E, TURNER C E. Molecular simulation of glycerol-derived triether podands for lithium ion solvation [J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2022, 24(16): 9 459-9 466.
- [69] 李侠清,张星,王增敏,等.不同类型表面活性剂在石英表面和油/水界面吸附行为的分子动力学模拟[J].*矿产保护与利用*, 2021,41(2):44-51.  
LI Xiaqing, ZHANG Xing, WANG Zengmin, et al. Molecular dynamics simulation of adsorption behavior of different surfactants on quartz surface and oil/water interface [J]. *Conservation and Utilization of Mineral Resources*, 2021, 41(2): 44-51.
- [70] NUMIN M S, HASSAN A, JUMBRI K, et al. Interfacial tension reduction mechanism by alkaline-surfactant-polymer at oil-water interface from experimental and molecular dynamics approaches [J]. *Journal of Molecular Liquids*, 2022, 356: 119006.

编辑 单体珍