

热水化学驱体系与稠油组分间相互作用及其理论模拟研究

韩玉贵¹, 刘长龙¹, 赵鹏¹, 郑雯雯², 刘岳鹏², 李轶²

(1. 中海石油(中国)有限公司天津分公司, 天津 300452; 2. 天津大学理学院, 天津 300072)

摘要 为了探究温度和聚合物化学剂对稠油性质的影响, 通过扫描电子显微镜、傅里叶变换红外光谱仪以及流变仪对稠油组分进行了分析. 由扫描电子显微镜观察到沥青质表面形态不规则, 胶质表面粗糙且具有孔道结构. 傅里叶变换红外光谱检测出3种稠油组分具有芳香烃的特征吸收峰. 通过流变性能测试研究了聚合物化学剂的投加量、矿化度、温度和pH值对稠油流变性能和体相结构特性的影响. 结果表明, 聚合物投加量对稠油的储能模量和损耗模量有显著影响, 而矿化度的增加则增强了稠油的复数黏度, 酸性和碱性条件下稠油的黏弹性较中性条件更强. 通过理论计算研究发现, 添加聚合物化学剂可以降低稠油的黏度, 在较高的温度下效果更加显著. 沥青质与聚合物化学剂之间的相互作用最强, 其次为胶质, 与油分的相互作用最弱. 聚合物化学剂对稠油组分的径向分布函数无明显影响, 主要影响界面处的稠油组分. 聚合物化学剂与沥青质可以形成氢键, 添加聚合物化学剂后, 沥青质内部的氢键数量减少, 与聚合物化学剂之间的氢键数量增加. 温度升高会减少氢键数量, 尤其是沥青质与聚合物化学剂之间的氢键.

关键词 热水化学驱; 流变性能; 理论计算; 分子动力学模拟

中图分类号 O647; O641

文献标志码 A

doi: 10.7503/cjcu20230456

Interaction Between Hot Water Chemical Drive System and Thick Oil Components and Theoretical Simulation Research

HAN Yugui¹, LIU Changlong¹, ZHAO Peng¹, ZHENG Wenwen², LIU Yuepeng², LI Yi^{2*}

(1. China National Offshore Oil Corporation, Tianjin Branch, Tianjin 300452, China;

2. School of Science, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

Abstract To investigate the effects of temperature and polymer chemistry on the properties of thick oil, the thick oil fractions were analyzed by scanning electron microscopy, Fourier transform infrared spectrometer and rheometer. scanning electron microscopy. Results indicated that the asphaltene surface morphology was irregular, and the colloid surface was rough and had a pore structure. Fourier infrared spectroscopy detected three thick oil fractions with characteristic absorption peaks of aromatic hydrocarbons. Rheological performance test was conducted to investigate the effects of polymer chemical addition, mineralization, temperature and pH on the rheological performance and interfacial film properties of thick oil. The experimental results showed that the polymer dosage had a significant effect on the energy storage modulus and loss modulus of the thick oil, while the increase of mineralization enhanced the complex viscosity of the thick oil, and the viscoelasticity of the thick oil was stronger under acidic and alkaline conditions than that under neutral conditions. It was found through theoretical studies that the addition of polymer chemistries reduced the viscosity of thick oil and the effect was more pronounced at higher temperatures. The interaction between bitumen and polymer chemicals was the strongest, followed by colloid and the weakest

收稿日期: 2023-10-31. 网络首发日期: 2024-03-22.

联系人简介: 李轶, 女, 博士, 教授, 主要从事油田开发与分析方面的研究. E-mail: liyi@tju.edu.cn

基金项目: 国家自然科学基金(批准号: 22176140, 22376157)资助.

Supported by the National Natural Science Foundation of China(Nos. 22176140, 22376157).

interaction with oil components. The polymer chemical had no significant effect on the radial distribution function of the thick oil components, and mainly affected the thick oil components at the interface. Polymer chemicals and bitumen could form hydrogen bonds, and the addition of polymer chemicals decreased the number of hydrogen bonds within the bitumen and increased the number of hydrogen bonds with the polymer chemicals. The increase of temperature decreased the number of hydrogen bonds, especially between the asphaltene and the polymer chemical.

Keywords Hot water chemical drive; Rheological property; Theoretical calculation; Molecular dynamics simulation

常规注水开发和化学驱采油开发过程在提高稠油采收率方面发挥了重要的作用^[1,2]。然而,随着石油开采的深入,也带来了一系列问题。常规注水开发可能导致水淹油和地面沉陷的问题^[3],而化学驱采油则面临着注入剂成本高和剂量控制等挑战。开发化学驱与热结合技术是实现海上稠油油田高效、深度开发、降低石油开采成本、提高石油采收率的有效途径^[4]。化学驱与热结合技术的核心是将化学驱采油和热驱采油相结合,通过在油藏中注入热能和化学剂,提高稠油的流动性和采收率。与传统的常规注水开发和化学驱采油方法相比,化学驱与热结合技术具有更高的采收率提升潜力和更低的环境影响^[5,6]。目前,化学驱与热结合技术的研发仍面临着一些挑战。首先,该技术尚未成熟,国内外的相关研究成果和应用案例较少,未大规模应用^[7-9]。其次,热与化学驱复合增效机理的复杂性使得研发过程更加困难。热驱采油通过加热油层来降低油的黏度,提高采收率;而化学驱采油则通过改变油藏中的物理化学性质来提高采收率。两种方法的相互作用和协同效应需要深入研究和理解,以确定最佳的操作参数和注入剂配比。

本文提取了稠油中的沥青质、胶质和油分等活性物质,利用扫描电子显微镜、傅里叶变换红外光谱仪等对各组分的形貌和性质进行了研究,利用流变仪考察了不同温度、聚合物化学剂的质量浓度、矿化度以及pH值对稠油组分的影响。采用理论计算构建了分子动力学模型,模拟探究了在不同温度和有无化学剂添加情况下的黏度、各组分间的相互作用、径向分布函数以及氢键数量的变化。本研究通过理论计算与实际生产相结合,为稠油开发提供了理论依据和技术支撑。

1 实验部分

1.1 试剂与仪器

渤海脱水稠油由中海石油(中国)有限公司天津分公司提供;正己烷(C_6H_{14}),分析纯,天津津东天正精细化学试剂厂;丙酮(C_3H_6O),分析纯,天津市大茂化学试剂厂;氯化钙($CaCl_2$,纯度96%),氯化钠($NaCl$)、碳酸钠(Na_2CO_3)、碳酸氢钠($NaHCO_3$)、硫酸钠(Na_2SO_4 ,纯度99%),天津市江天化工技术有限公司;氯化钾(KCl ,纯度99%),天津希恩思生化科技有限公司;氯化镁($MgCl_2$,纯度98%),天津风船化学试剂科技有限公司;聚合物(聚丙烯酰胺改性材料,分子量约 $4 \times 10^6 \sim 5 \times 10^6$,主要由苯环、 $-NH_2$ 、 $C=O$ 等结构组成),自制。

SU8010型扫描电子显微镜(SEM),日本日立公司;DHR-2型DHR流变仪,沃特斯中国有限公司;HT-II型石油混调器,无锡市石油仪器设备有限公司;ZNCL-BS 180型搅拌加热器,巩义市予华仪器有限公司;Nicolet in10型傅里叶变换显微红外光谱仪,美国Thermo Fisher公司。

1.2 实验过程

1.2.1 稠油组分分离 取适量稠油样品,加入过量正己烷搅拌溶解稠油样品,离心后不溶物质为沥青质,上层液体蒸发去除环己烷后加入过量丙酮搅拌溶解,沉淀为胶质,剩余液体蒸发去除丙酮后为油分。

1.2.2 扫描电子显微镜测试 根据扫描电子显微镜样品测试的要求,将用溶剂萃取法分离后的组分进行加热烘干、制样、喷金等处理过程,然后观察其在不同放大倍数下的微观结构。

1.2.3 稠油流变性能测定 将2 mL制备的稠油置于流变仪的样品台上,设定样品台上下夹具的间距为1000 μm ,并刮除多余溢出样品。在振动频率0.1~1.0 Hz、剪切速率7.344 s^{-1} 、温度25 $^{\circ}C$ 、固定应力1.0 Pa的条件下,测试不同稠油的复数黏度。调整流变仪参数,在振动频率0.5 Hz、剪切速率

7. 344 s^{-1} 、温度 $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ 、固定应力 1.0 Pa 的条件下测定相应稠油的储能模量和损耗模量。

1.2.4 不同浓度聚合物化学剂、矿化度稠油样的制备 制备含有不同浓度聚合物化学剂的过程如下：首先，将 1 L 油样加入 HT-II 型石油混调器中，然后分别加入不同量的聚合物化剂，并在一定转速下，使其充分混合均匀，加入聚合物化学剂的浓度分别为 $200, 400, 600, 800$ 和 1000 mg/L 。不同矿化度油样的制备过程同含有不同浓度聚合物化学剂的过程一致，不同之处在于其中加入了不同浓度的金属盐（如 KCl , NaCl , MgCl_2 , CaCl_2 , Na_2CO_3 和 NaHCO_3 等）。

1.2.5 理论计算模拟 (1) 分子动力学模型的构建. 稠油分子结构复杂，主要包括沥青质、胶质和油分 3 部分. 典型的沥青质组分有 3 种，分别是 $\text{C}_{25}\text{H}_{32}\text{O}_2\text{S}$, $\text{C}_{27}\text{H}_{34}\text{O}_3$ 和 $\text{C}_{33}\text{H}_{38}\text{O}$. 典型的胶质组分包括 $\text{C}_{21}\text{H}_{26}$, $\text{C}_{24}\text{H}_{32}\text{S}$, $\text{C}_{24}\text{H}_{32}$, $\text{C}_{24}\text{H}_{32}$, $\text{C}_{20}\text{H}_{26}\text{S}$, $\text{C}_{22}\text{H}_{28}$. 典型的轻油组分包括己烷(36个)、庚烷(36个)、辛烷(40个)、壬烷(46个)、环己烷(24个)、环庚烷(40个)、苯(40个)和甲苯(15个). 除沥青质、胶质和油分等活性组分外，其余各处以水填充，并加入了 Mg^{2+} , Ca^{2+} , K^+ , HCO_3^- , CO_3^{2-} , Cl^- , Na^+ 和 SO_4^{2-} 等无机盐离子，模拟真实油水状态. (2) 分子模拟参数设置. 所有的分子动力学(MD)模拟均在软件 GROMACS 2019.3^[10] 中进行. 胶质、沥青质、油分和聚合物化学剂使用 GAFF 力场^[11]，力场参数通过 Amber18 中的 Antechamber 工具得到，其中原子电荷使用 RESP 电荷^[12]，拟合静电势使用的计算级别为 B3LYP/6-31G(d). 水分子采用 TIP3P 水模型进行描述. 将所有分子置于一个周期性正方体模拟盒子中，体系的能量最小化是通过交替使用最速下降法和共轭梯度法进行. 之后在恒温恒压系综(NPT)下以恒定温度($50, 100$ 和 $150\text{ }^{\circ}\text{C}$)和压力($1.01325\times 10^5\text{ Pa}$)模拟 50 ns . 使用 V-rescale 热裕^[13]和 Parrinello-Rahman 压裕^[14]进行温度和压力控制. 邻居列表搜索和非键相互作用的截断半径均取 1.2 nm ，化学键使用 LINCS^[15]算法进行约束. 所有的可视化、氢键统计以及径向分布函数 $[g(r)]$ 的计算均在 VMD^[16] 中进行.

2 结果与讨论

2.1 稠油各组分的形貌及性质

首先，根据稠油中各种组分在不同溶剂中的溶解度差异，采用溶剂萃取法进行分离. 利用正己烷和丙酮将稠油分为沥青质、胶质和油分(饱和烃与芳香烃). 采用 SEM 观察了沥青质和胶质的形貌[图 1(A)和(B)]. 可以看出，沥青质表面呈不平整沟壑状分布、结构紧密，具有少许孔道结构和一些不规则块状颗粒. 胶质则表面粗糙，具有一定的孔道结构，有少量丝状胶质分布在表面. 对沥青质、胶

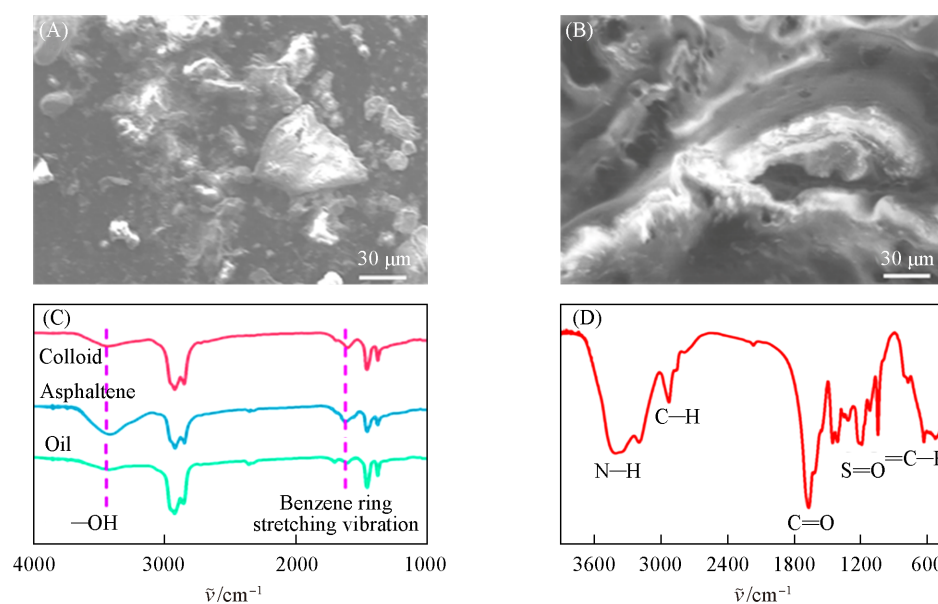


Fig. 1 SEM images of asphaltene(A) and colloid(B), FTIR spectra of asphaltene, colloid, oil(C) and polymer chemicals(D)

质和油分进行了FTIR测试,结果如图1(C)所示,可以看出,3种物质的红外光谱结构类似,都具有芳香烃物质的特征峰.图1(D)为聚合物化学剂的红外光谱.可以看出,聚合物化学剂存在 3425 cm^{-1} 处N—H的伸缩振动峰, 2932 cm^{-1} 处烷烃的伸缩振动峰, 1665 cm^{-1} 处羰基的特征峰, 1617 cm^{-1} 处氨基的弯曲振动峰, 1451 和 1407 cm^{-1} 处 $-\text{CH}_2-$ 的弯曲振动峰, 1207 和 1041 cm^{-1} 处磺酸基的特征峰, 628 cm^{-1} 处苯环氢的特征峰.

2.2 聚合物化学剂质量浓度对稠油流变性的影响

使用DHR流变仪对样品的流变性能进行测试,图2(A)~(C)分别是不同质量浓度的聚合物化学剂稠油的复数黏度、储能模量和损耗模量的曲线.通常,复数黏度增大,稠油体相结构的稳定性也随之增大.由图2(A)可以看出,质量浓度为0,200和 400 mg/L 的稠油初始复数黏度分别为 5.20 , 4.37 和 $3.87\text{ Pa}\cdot\text{s}$,说明随着聚合物质量浓度的增加,稠油的复数黏度呈下降的趋势,缔合型聚合物对稠油具有明显的降黏效果.而当聚合物浓度为 600 和 800 mg/L 时,复数黏度呈增加趋势,但总体仍低于不加聚合物时的复数黏度.当聚合物浓度增加到 1000 mg/L 时,复数黏度进一步增加.这可能是由于当聚合物浓度过大时,其在稠油中超过吸附饱和值,继续增加反而会使稠油整体的黏度增加,达不到最理想的降粘度效果.储能模量代表体相结构的弹性强度,储能模量越大,体相结构的弹性越强,这就导致降粘度难度增大.如图2(B)所示,稠油的储能模量随聚合物质量浓度的增加也呈先下降后上升的趋势,并且随着测试时间的延长,稠油的储能模量波动较大,这再次说明聚合物的投加量对于破坏体相结构稳定性起着重要作用^[17].通常,损耗模量越大,体相结构的黏性越强,降粘度难度越大.如图2(C)所示,随着聚合物投加量的增加,损耗模量也呈现先下降、后上升的趋势,但总体来说,损耗模量均小于不添加聚合物时的值,即聚合物的投加减弱了所得稠油体相结构的黏性,这进一步表明了聚合物对于体相结构稳定性的破坏,与复数黏度、储能模量测量所得结论基本一致.

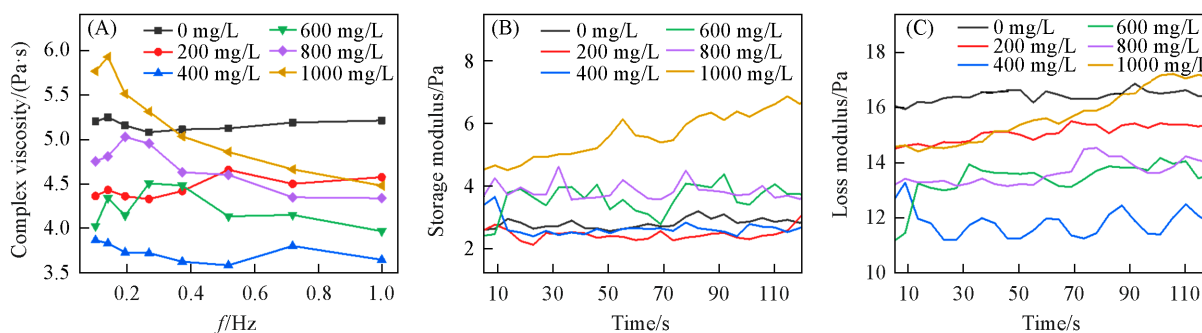


Fig. 2 Effect of polymer chemical mass concentration on the complex viscosity(A), storage modulus(B) and loss modulus(C) of thick oils

2.3 矿化度对稠油流变性的影响

为了明确稠油流变性与矿化度之间的关系,在聚合物加量为 600 mg/L 的条件下研究了矿化度对聚合物稠油的流变性能的影响.如图3(A)所示,矿化度对于稠油的复数黏度的影响较大.当矿化度为

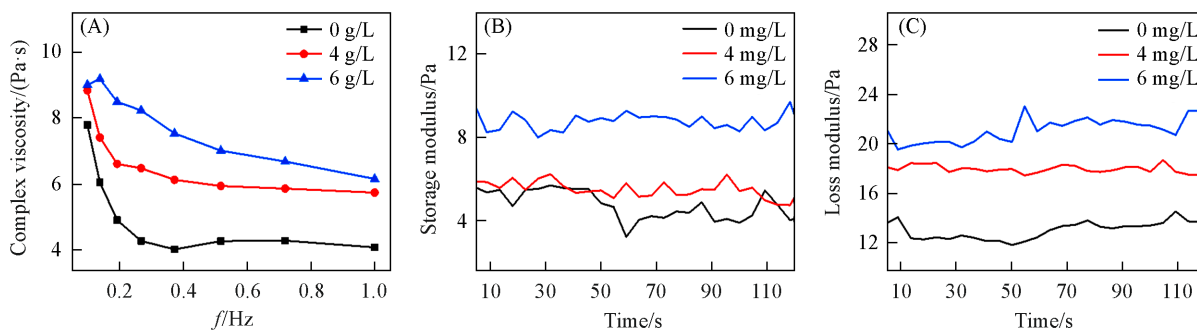


Fig. 3 Effect of mineralization on the complex viscosity(A), storage modulus(B) and loss modulus(C) of thick oils

0 g/L时,稠油在剪切频率为0.1 Hz时的复数黏度为7.79 Pa·s. 当矿化度为4和6 g/L时,相应的复数黏度为8.83和9.00 Pa·s. 这说明稠油的复数黏度随着矿化度的增加而增大,这可能是由于无机盐离子的引入导致分子间缔合效应增强,聚合物产生超分子结构,导致黏度增加^[18,19].

同时,随着矿化度的增加,稠油的储能模量和损耗模量均逐渐增大[图3(B)和(C)],这也是由于无机盐离子的引入增强了分子间缔合效应,进而增强了油水体相结构的强度.

2.4 温度对稠油流变性的影响

稠油复数黏度、储能模量、损耗模量随测量温度的变化情况分别见图4(A)~(C). 测量温度升高至50 °C时,复数黏度、储能模量和耗能模量均随之减小,这说明稠油的粘弹性特征均随温度的升高而降低. 这是因为黏度与分子间内聚力紧密相关^[20],原油含胶质、沥青质越多,内聚力就越大,黏度也就越高. 随着温度升高,稠油内粒子的布朗运动加剧,使得稠油内部的胶质、沥青质等结构变得松散^[21],内聚力降低,使得稠油的粘弹性特征明显减弱^[22].

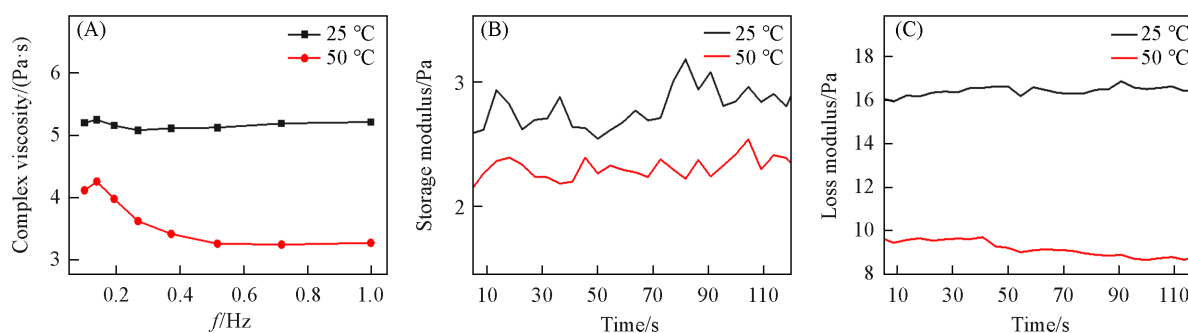


Fig. 4 Effect of temperature on the complex viscosity(A), storage modulus(B) and loss modulus(C) of thick oils

2.5 pH值对稠油流变性的影响

为了探究pH值对稠油粘弹性的影响,分别在酸性、中性和碱性环境下对稠油的流变性能进行了测试,结果分别如图5(A)~(C)所示,酸性和碱性条件的复数黏度、储能模量和损耗模量均高于中性条件下对应的数值,并且酸性条件较碱性条件下的数值更高,这说明酸性和碱性体系均可以增强稠油的体相粘弹性,且酸性体系的效果更为显著,这也相应增加了酸性条件下的降粘难度. 并且随测试时间的延长,稠油的储能模量和损耗模量几乎保持不变,这表明在不同pH值下,稠油的体相结构弹性几乎维持不变,具有较好的体相稳定性^[23].

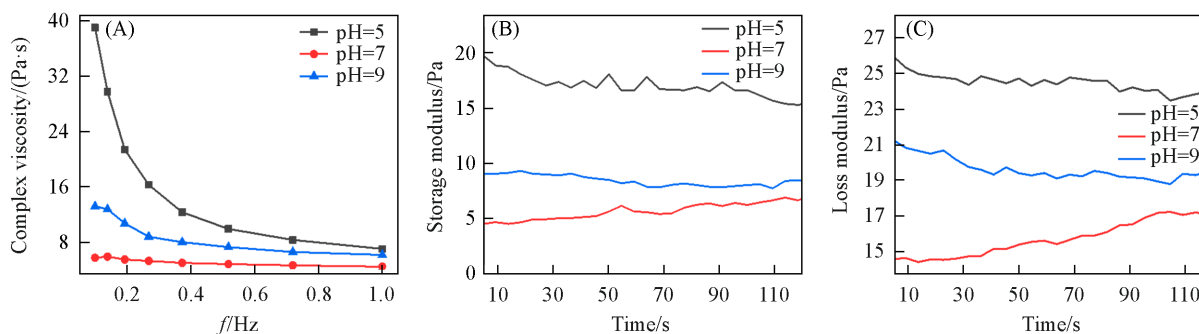


Fig. 5 Effect of pH on the complex viscosity(A), storage modulus(B) and loss modulus(C) of thick oils

2.6 分子动力学模拟

为了进一步探究稠油与聚合物化学剂之间的机理,采用理论计算来对聚合物化学剂进行进一步探究. 图6(A)和(B)为建立的分子动力学模拟模型,探究了有无聚合物化学剂条件下在50, 100和150 °C时稠油内部以及稠油各组分与聚合物化学剂之间的关联.

首先,探究了黏度的变化[图6(C)],可以看出,相同温度时,加入聚合物化学剂的黏度比不添加聚合物化学剂的黏度低,说明添加聚合物化学剂有助于降低稠油黏度. 在有聚合物化学剂和无聚合物

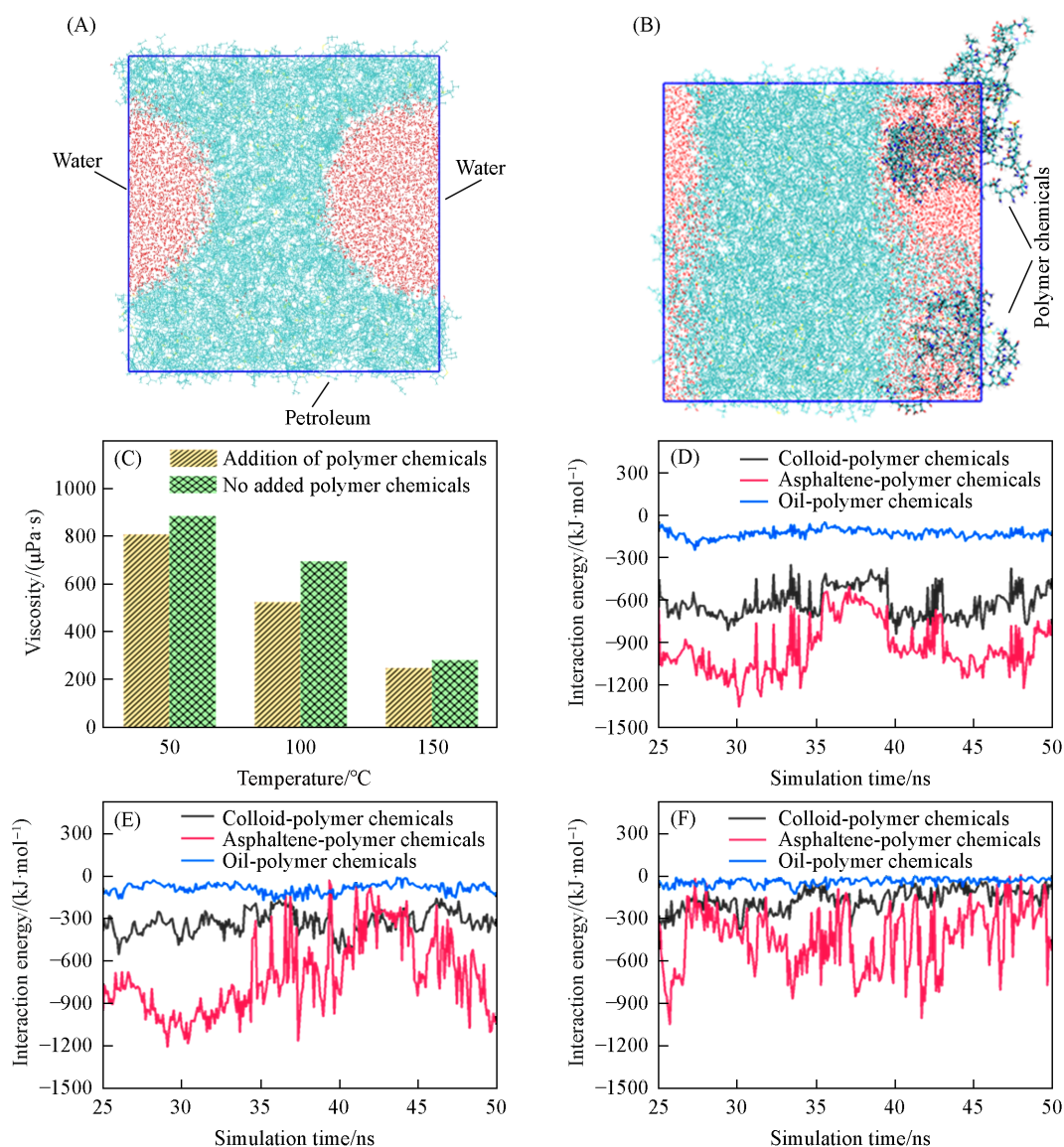


Fig. 6 Molecular dynamics simulation models without(A) and with(B) polymer chemical, comparison of viscosity with and without chemical at different temperatures(C), comparison of interaction energies between polymer chemical and different components within the thick oil at 50(D), 100(E) and 150 °C(F)

(A) Red area represents water, green area represents oil.

化学剂的情况下,黏度都随温度的升高而降低,这是因为温度升高,液体分子的运动速度增加,分子间的相互作用力减弱,导致黏度降低.通过探究温度与聚合物化学剂对黏度的影响发现,升高温度对黏度的影响更大,高温时油样的黏度较低温时下降明显.

探究了聚合物化学剂与稠油中不同组分之间的相互作用[图6(D)~(F)].可以看出,在不同温度下,聚合物化学剂与沥青质、胶质和油分之间均存在相互作用,其中聚合物化学剂与沥青质的相互作用是最大的,其次是胶质,与油分的相互作用最小.聚合物化学剂与沥青质的相互作用较大是因为二者之间可以形成氢键,产生相互作用^[24].

聚合物化学剂与油分相互作用较小的原因是聚合物化学剂含有极性集团,使其更加亲水,油分疏水,因其多为烷基、苯环.聚合物化学剂与油分大多只在界面存在接触,这导致相互作用较小.此外,随着温度升高,聚合物化学剂与胶质之间的相互作用有所减少,这可能是由于随着温度的升高,分子间运动加快,物质之间相互作用波动较大,使得聚合物化学剂与胶质之间的相互作用减弱,温度升高

引起的分子之间运动加快同样使得聚合物化学剂与沥青质之间相互作用出现较大的波动。

图7展示了稠油重质组分与热水/化学剂的径向分布函数。径向分布函数 $g(r)$ 定义为局部密度与平均密度之比。 $g(r)$ 可以说明在某个粒子周围距离为 r 范围内,其它粒子存在的概率,可以反映出体系中分子聚集的特性^[25]。由图7可以看出,温度的高低和聚合物化学剂有无对于稠油组分间的径向函数分

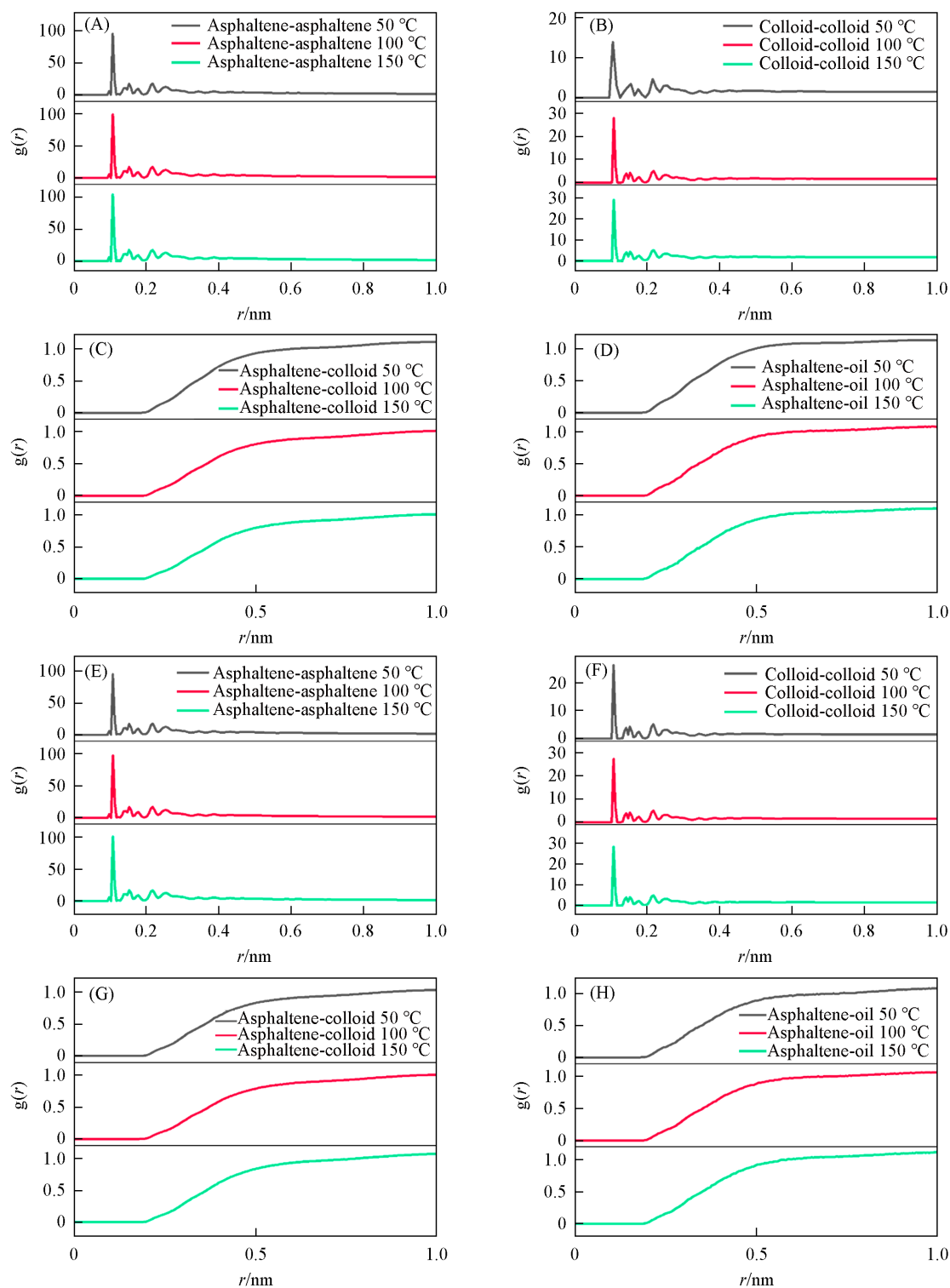


Fig. 7 Radial distribution function between components of thick oil at different temperatures with(A—D) and without(E—H) added chemicals asphaltene-asphaltene(A, E), colloid-colloid(B, F), asphaltene-colloid(C, G), asphaltene-oil(D, H)

布并无明显影响,这可能是由于升高温度后稠油组分内部分子聚集并无明显变化,而加入聚合物化学剂只对界面处的稠油组分产生影响,但无法改变内部整体分子的特性. 沥青质-沥青质、胶质-胶质都在 0.1~0.2 nm 左右存在分子聚集特性,这是由于两种组分之间存在氢键相互作用. 0.2~0.4 nm 之间的分子聚集特性可能是因为存在 π - π 键相互作用. 沥青质-胶质、沥青质-油分之间在 0.2 nm 后存在明显的疏水相互作用峰.

图 8(A)~(C)分别为在 50, 100, 150 °C 下有无聚合物化学剂氢键数量的变化情况. 沥青质内部可以形成氢键, 沥青质和化学剂之间可以形成氢键, 印证了是由于氢键的形成从而导致聚合物化学剂和沥青质之间具有强的相互作用^[26-28]. 也可以看出, 添加聚合物化学剂后沥青质内部的氢键数量在一定程度上出现下降, 这是因为添加聚合物化学剂后, 沥青质与化学剂形成氢键而减少了沥青质内部的氢键数量^[29,30]. 沥青质与聚合物化学剂之间氢键数量的增加进一步证明了沥青质与化学剂之间存在氢键作用. 随着温度升高, 添加聚合物化学剂前后的氢键数量变化进一步减少, 150 °C 时添加聚合物化学剂前后氢键的数量几乎不变, 这是由于高温使得分子运动加快, 聚合物化学剂与沥青质氢键之间相互作用

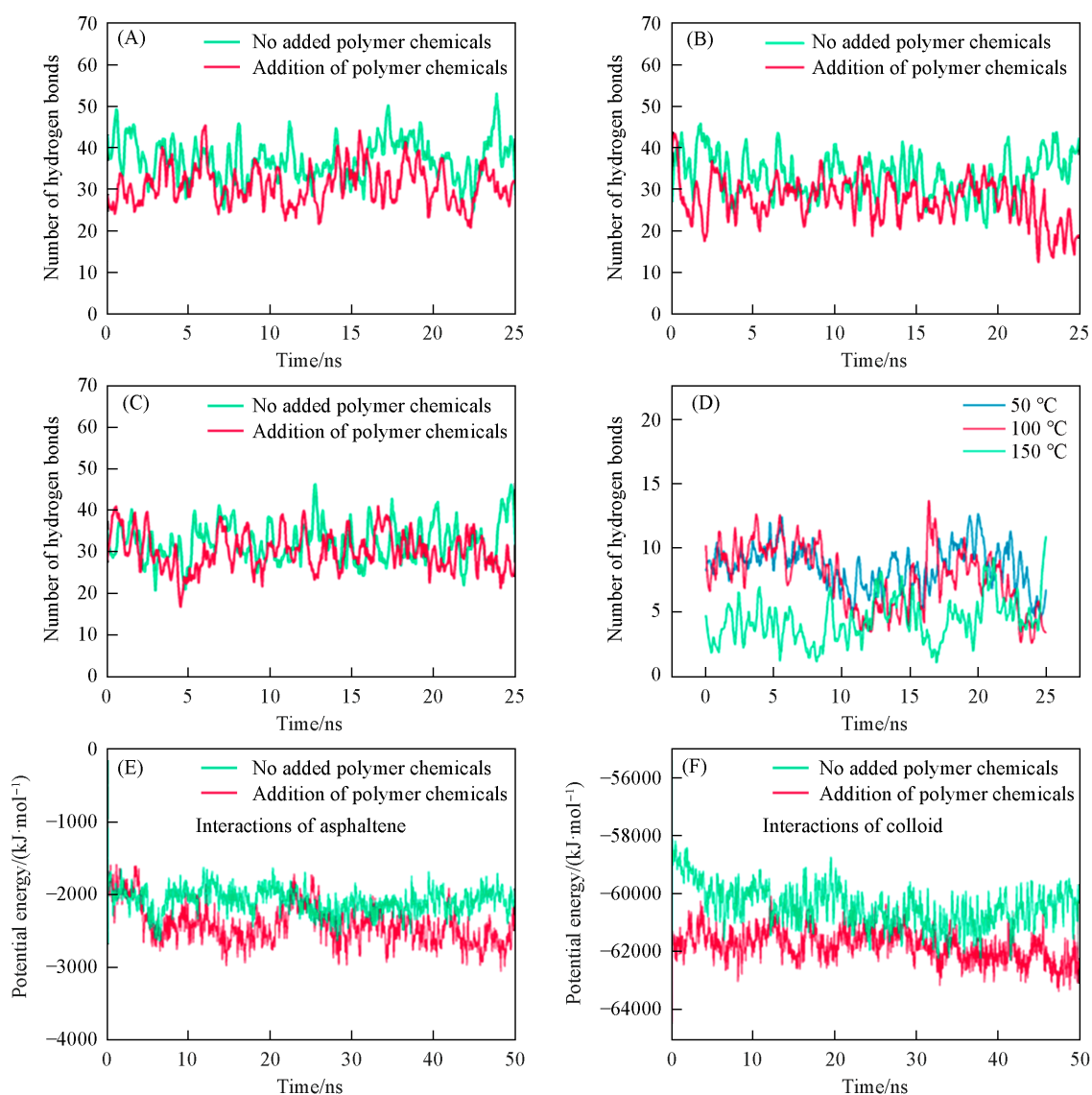


Fig. 8 Number of hydrogen bonds within asphaltene with and without polymer chemical at 50(A), 100(B), 150 °C (C), number of hydrogen bonds between asphaltene and polymer chemical at different temperatures(D), comparison of the internal interactions between asphaltene(E) and colloid(F) with and without polymer chemicals at 50 °C

用减弱,甚至被破坏.同时在150 °C时,沥青质与聚合物化学剂之间的氢键数量相较于50和100 °C时出现明显下降[图8(D)],也进一步说明高温会减弱聚合物化学剂与沥青质之间的相互作用.随后探讨了沥青质和胶质内部相互作用.研究发现,加入聚合物化学剂之后,内部相互作用有所减小,这是由于聚合物化学剂的加入破坏了沥青质和胶质内部的氢键和 π 键,削弱沥青质和胶质的内部作用.但相互作用减少效果并不明显[图8(E)和(F)],这是由于聚合物化学剂主要作用于界面上,并没有进入到油相内部,因此对分子内部相互作用的影响有限.

3 结 论

根据原油中各种组分在不同溶剂中的溶解度差异,采用溶剂萃取法将稠油分为沥青质、胶质和油分,使用扫描电子显微镜、傅里叶变换红外光谱等测试对3种组分进行了分析.研究了不同条件对稠油的流变性能的影响,聚合物质量浓度的增加会导致稠油的复数黏度先下降、后上升,聚合物投加量对稠油的储能模量和损耗模量有显著影响,矿化度的增加增强了稠油的复数黏度和体相结构强度,温度升高降低了稠油的粘弹性特征,酸性和碱性条件下稠油的粘弹性较中性条件更强,且酸性体系效果更显著.以上结果对于理解和控制稠油的稳定性具有重要意义.通过理论计算和分子动力学模拟探究了聚合物化学剂对稠油黏度和组分之间相互作用的影响.结果表明,添加聚合物化学剂可以降低稠油黏度,并且温度对黏度的影响更大.聚合物化学剂与沥青质之间的相互作用最大,其次是胶质,与油分的相互作用最小.聚合物化学剂与胶质之间的相互作用随温度升高而减少.此外,聚合物化学剂对稠油组分的径向分布函数无明显影响,说明其主要影响界面处的稠油组分.聚合物化学剂与沥青质之间形成氢键,而与油分相互作用较小.添加聚合物化学剂后,沥青质内部的氢键数量减少,而与聚合物化学剂之间的氢键数量增加.温度升高会进一步减少氢键数量,尤其是沥青质与聚合物化学剂之间的氢键.此外,聚合物化学剂的加入会在一定程度上削弱沥青质和胶质内部的相互作用.

参 考 文 献

- [1] Liu D., Liao H., Feng H. C., Wu T. T., Geng Z. G., *China Offshore Oil Gas*, **2023**, 35(2), 101—110(刘东, 廖辉, 冯海潮, 吴婷婷, 耿志刚. 中国海上油气, **2023**, 35(2), 101—110)
- [2] Xing X. X., *Petrochem. Ind. Technol.*, **2020**, 27(4), 371—372(邢晓璇. 石化技术, **2020**, 27(4), 371—372)
- [3] Ma B. P., *Petrochem. Ind. Technol.*, **2018**, 25(9), 248(马宝鹏. 石化技术, **2018**, 25(9), 248)
- [4] Zhang J., Liang D., Kang X. D., Xu W. J., Tang X. X., Huang X. D., Hua C., *China Offshore Oil Gas*, **2021**, 33(5), 87—93(张健, 梁丹, 康晓东, 徐文江, 唐晓旭, 黄晓东, 华朝. 中国海上油气, **2021**, 33(5), 87—93)
- [5] Shu Q. L., Zheng W. G., Zhang Z. P., Yang X. M., Wu W., Wu G. H., Zhao H. Y., Zheng X., *Pet. Geol. Recovery Effic.*, **2021**, 28(6), 12—21(束青林, 郑万刚, 张仲平, 杨晓敏, 吴伟, 吴光焕, 赵红雨, 郑昕. 油气地质与采收率, **2021**, 28(6), 12—21)
- [6] Wang R., Lun Z. M., Lv C. Y., Wang Y. Q., Tang Y. Q., Wang X., *Pet. Geol. Recovery Effic.*, **2021**, 28(5), 81—86(王锐, 伦增珉, 吕成远, 王友启, 唐永强, 王欣. 油气地质与采收率, **2021**, 28(5), 81—86)
- [7] Zhang Z. H., Jin Y., Zhang J., Tang E. G., Wei Z. J., Liang D., Li P. H., *Geofluids*, **2022**, 2022, 2224321—2224332
- [8] Liao H., Wu T. T., Deng M., Du C. X., Cui Z., *Contem. Chem. Ind.*, **2019**, 48(11), 2623—2625(廖辉, 吴婷婷, 邓猛, 杜春晓, 崔政, 当代化工, **2019**, 48(11), 2623—2625)
- [9] Liao H., Wang G., Deng M., Geng Z. G., Dang S. G., *Contem. Chem. Ind.*, **2021**, 50(01), 200—203(廖辉, 王刚, 邓猛, 耿志刚, 党胜国, 当代化工, **2021**, 50(1), 200—203)
- [10] Hess B., Kutzner C., van der Spoel D., Lindahl E., *J. Chem. Theory Comput.*, **2008**, 4(3), 435—447
- [11] Wang J., Wolf R. M., Caldwell J. W., Kollman P. A., Case D. A., *J. Comput. Chem.*, **2004**, 25(9), 1157—1174
- [12] Bayly C. I., Cieplak P., Cornell W., Kollman P. A., *J. Phys. Chem.*, **1993**, 97(40), 10269—10280
- [13] Bussi G., Donadio D., Parrinello M., *J. Chem. Phys.*, **2007**, 126(1), 014101
- [14] Parrinello M., Rahman A., *Phys. Rev. Lett.*, **1980**, 45(14), 1196—1199
- [15] Hess B., Bekker H., Berendsen H. J., Fraaije J. G., *J. Comput. Chem.*, **1997**, 18(12), 1463—1472
- [16] Humphrey W., Dalke A., Schulten K., *J. Mol. Graph.*, **1996**, 14(1), 33—38
- [17] Zhang M., Sun Z. G., Yu C. L., Wu G. H., Sun B. Q., Wu X. Y., *Pet. Geol. Recovery Effic.*, **2023**, 30(3), 152—158(张民, 孙志刚, 于春磊, 吴光焕, 孙宝泉, 吴秀英. 油气地质与采收率, **2023**, 30(3), 152—158)
- [18] Liu Y. G., Zhao P., Han Y. G., Song X., Han Z. P., Xie L. B., Li Z., Jia X. Q., Li Y., *Chem. J. Chinese Universities*, **2020**, 41(3), 498—504(刘义刚, 赵鹏, 韩玉贵, 宋鑫, 韩志鹏, 谢良波, 李壮, 贾晓庆, 李轶. 高等学校化学学报, **2020**, 41(3), 498—504)

- [19] Fei D. T., Guo J. X., Sun J. F., Cao L. L., Meng L., Xia H. R., *Fine Chem.*, **2022**, 39(5), 1072—1080(费东涛, 郭继香, 孙建芳, 曹丽丽, 孟霖, 夏海容. 精细化工, **2022**, 39(5), 1072—1080)
- [20] Zhang H., *J. Chongqing Univ. Sci. Technol. (Nat. Sci. Ed.)*, **2020**, 22(4), 40—44(张鸿, 重庆科技学院学报(自然科学版), **2020**, 22(4), 40—44)
- [21] Qi C., Li D. Y., Li D. X., *Modern Chemical Research*, **2016**, 45(3), 466—468, 472(齐超, 李东妍, 李东昕. 当代化工, **2016**, 45(3), 466—468, 472)
- [22] Zhang Y., Chu W., Zhang L. L., Cao Y. B., Wang J. Q., *Oilfield Chem.*, **2023**, 40(1), 93—101(张玉, 初伟, 张龙力, 曹嫣缤, 王继乾, 油田化学, **2023**, 40(1), 93—101)
- [23] Wu T., Liu Z. L., Wang Q. X., Yu X. T., Luo S., Qiao D. K., Li Y. B., *Contem. Chem. Ind.*, **2023**, 52(2), 257—262(吴婷, 刘志龙, 王秋霞, 于晓涛, 罗珊, 乔德康, 李一波. 当代化工, **2023**, 52(2), 257—262)
- [24] Deng J. P., Li H. B., Liao J. J., He G., Liu S. S., Zhang X., *Petrochem. Ind. Appl.*, **2022**, 41(11), 30—35(邓金玘, 李华斌, 廖建军, 何刚, 刘思思, 张肖. 石油化工应用, **2022**, 41(11), 30—35)
- [25] Cui M. Y., Yang H. X., Jiang H. X., Sun R. X., Jin Y., Wang C. Y., *Petrochem. Technol.*, **2022**, 51(11), 1312—1316(崔梦雨, 杨红霞, 姜会心, 孙瑞雪, 金雨, 王创业. 石油化工, **2022**, 51(11), 1312—1316)
- [26] Wei S. C., Yao Z. L., Bian H., Kan A. T., Gao Z. J., Zhu L. J., Xia D. H., *Acta Petrol. Sin. (Petrol. Proc. Sec.)*, **2021**, 37(3), 556—565(韦胜超, 姚志林, 卞贺, 阚爱婷, 高智健, 朱丽君, 夏道宏. 石油学报(石油加工), **2021**, 37(3), 556—565)
- [27] Du C., Li D., Shi C., Du Z., Han W., Zhu Y., Dong H., Fan X., Wang C., *J. Mol. Struct.*, **2022**, 1254, 132361
- [28] Xu M., Zhu Y., Du C., Liu J., Wang C., Na Z., Shang J., Li D., *J. Mol. Liq.*, **2023**, 387, 122640
- [29] Tang Y., Fu Z., Ma F., Zhao P., Hou Y., Jiang X., Peng C., *Constr. Build. Mater.*, **2023**, 402, 133028
- [30] Yang Q., Yu C., *ACS Appl. Nano Mater.*, **2023**, 6(14), 13048—13062

(Ed.: V, K, S)