

بررسی تأثیر ماده فعال سطحی آنیونی سدیم دودسیل سولفات بر کشش بین سطحی دودکان و آب به صورت آزمایشگاهی و شبیه سازی مولکولی

کلثوم ملکشاهی فر

گروه شیمی فیزیک، دانشگاه علوم و تحقیقات اهواز، اهواز، ایران

احسان علی پناهی، بهروز بیاتی*⁺

گروه مهندسی شیمی، دانشگاه ایلام، ایلام، ایران

چکیده: در این مطالعه، با استفاده از روش تجربی و شبیه سازی دینامیک مولکولی به بررسی عملکرد ماده فعال سطحی آنیونی سدیم دودسیل سولفات در کاهش کشش بین سطحی آب و نفت که در ازدیاد برداشت مهم است پرداخته شده است. برای این منظور، کشش بین سطحی محلول آب و قطره دودکان در دو حالت بررسی شد که در حالت اول، محلول تنها شامل مولکول‌های آب و دودکان بود و در حالت دوم ماده فعال سطحی سدیم دودسیل سولفات به محلول افزوده شد. در حالت دوم سامانه‌ها به دو صورت انجام شد که در یکی سامانه‌ای که ۳۲ مولکول ماده فعال سطحی، ۱۲۰ مولکول دودکان و ۸۰۰ مولکول آب داشت با عنوان سامانه (SDS_1) معرفی شد، کشش بین سطحی (IFT) این سامانه از 54.83 mN/m به 7.32 mN/m کاهش یافت و سامانه‌ای که در آن تعداد مولکول‌های آب و دودکان نصف شده بودند، یعنی ۶۰ مولکول دودکان و ۴۰۰ مولکول آب ولی با همان تعداد مولکول ماده فعال سطحی یعنی ۳۲ مولکول که با عنوان سامانه (SDS_2) معرفی شد، کشش بین سطحی از 59.06 mN/m به 8.28 mN/m کاهش یافت. یافته‌ها نشان داد که در حالت دوم، افزودن ماده فعال سطحی آنیونی سدیم دودسیل سولفات به محلول آب و دودکان موجب کاهش کشش بین سطحی می‌شود، از سویی با بررسی و مقایسه تعداد مولکول‌های هر دو سامانه SDS_1 و SDS_2 در حالت دوم دریافت شد که نسبت مولکول‌ها در روند کاهش کشش بین سطحی تأثیر دارد. طبق یافته‌ها، هرچه تعداد مولکول‌های ماده فعال سطحی نسبت به آب و آلکان بیش‌تر باشد، کاهش کشش بین سطحی آن بیش‌تر است. همچنین برای بررسی اثر غلظت ماده فعال سطحی در تعداد ثابت آب و آلکان (۱۶ مولکول ماده فعال سطحی، ۱۲۰ مولکول دودکان و ۸۰۰ مولکول آب)، شبیه سازی مولکولی انجام شد (SDS_3). نتیجه‌ها نشان داد که کشش بین سطحی به 12.66 mN/m کاهش یافت. که عملکرد کم‌تری نسبت به حالت SDS_1 دارد.

واژه‌های کلیدی: کشش بین سطحی؛ ماده فعال سطحی آنیونی؛ شبیه‌سازی دینامیک مولکولی.

KEYWORDS: Interfacial tension; Anion surfactant; Molecular dynamic simulation; Enhanced oil recovery.

*E-mail: b.bayati@ilam.ac.ir

*عهده دار مکاتبات

مقدمه

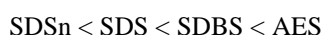
روش‌های ازدیاد برداشت، برای افزایش تولید از مخازن نقش به‌سزایی دارند. یکی از روش‌های کارآمد ازدیاد برداشت، تزریق ماده فعال سطحی می‌باشد. ماده فعال سطحی‌ها باعث تغییر ترشوندگی و کاهش زاویه تماس آب و سنگ مخزن شده و در نتیجه به حرکت نفت به تله افتاده توسط نیروهای مویینه کمک می‌کنند، *توماس و همکاران*^(۱). با این حال با وجود پژوهش‌های گسترده در مقیاس میدانی آزمایشگاهی و به دست آمدن نتیجه‌های بسیار خوب به دلیل پیچیدگی‌های موجود و کندی فرایند در عمل می‌توان با استفاده از شبیه‌سازی مولکولی اثر مواد و شرایط گوناگون را کم‌تر بررسی کرد. *قجاوند و همکاران*^(۲) دو ماده فعال سطحی سدیم دودسیل سولفات (SDS) و هگزادسیل تری متیل آمونیوم برمید (C₁₆TAB) با خلوص بالای ۸۰٪ را به صورت تجربی مورد بررسی قرار دادند و در حضور آب معمولی و آب شور عملکرد فعالیت سطحی و غلظت بحرانی میسل (CMC) در فرایند ازدیاد برداشت را در دو دمای ۲۵ °C و ۵۰ °C گزارش کردند. کشش سطحی ماده فعال سطحی کاتیونی C₁₆TAB در دمای ۲۵ °C برابر ۳۵ mN/m و در دمای ۵۰ °C برابر ۳۳ mN/m بود و بیش‌ترین کاهش کشش سطحی ماده فعال سطحی آنیونی SDS در دمای ۲۵ °C برابر ۲۹ mN/m و در دمای ۵۰ °C برابر ۲۸ mN/m بود. نتیجه‌ها نشان داد با افزایش دما کشش سطحی بیش‌تر کاهش یافته است. براساس نتیجه‌های به دست آمده مقادیر CMC برای ماده فعال سطحی کاتیونی در این دمای ۲۵ °C و ۵۰ °C به ترتیب برابر ۰/۰۰۰۳ (w/w) و ۰/۰۰۰۲ (w/w) و برای ماده فعال سطحی آنیونی SDS در دمای ۲۵ °C و ۵۰ °C به ترتیب برابر ۰/۰۰۴ (w/w) و ۰/۰۰۵ (w/w) است و سپس با بررسی تأثیر آب با شوراب رقیق در مقایسه با آب معمولی دریافتند که امکان تشکیل میکرومولسیون‌های آب در نفت افزایش یافته و مقدار راندمان تولید نفت بیش‌تر می‌شود، در این میان ماده فعال سطحی کاتیونی هگزادسیل تری متیل آمونیوم برمید در مقایسه با ماده فعال سطحی آنیونی سدیم دودسیل سولفات از پتانسیل بالاتری برای خارج کردن نفت از سنگ کربناته برخوردار بود. *احصایی و همکاران*^[۳] به بررسی سه ماده فعال سطحی تجاری آمفوتری NX-1510، TR-880 و NX-2760 و ماده فعال سطحی‌های بر پایه مایع یونی [C1][C12 mim] به صورت تجربی پرداختند. نتیجه‌ها نشان داد، ماده فعال سطحی TR-880 که بلندترین زنجیره هیدرو کربنی در میان مواد فعال سطحی‌های به‌کار برده را دارد بالاترین قابلیت را

در کاهش کشش بین سطحی و همچنین بهبود ترشوندگی را داراست. همچنین آن‌ها تأثیر فورمولاسیون آب بر بازده ماده فعال سطحی تزریق شده را بررسی کردند و بدین منظور، دو منبع آب سازند و خلیج فارس را مورد بررسی قرار دادند. مواد فعال سطحی به‌کار برده شده برای شرایط شوری بالا طراحی شده بودند. نتیجه‌ها نیز نشان داد که هنگام به‌کارگیری ترکیب‌های شیمیایی، بازده آب سازند در کاهش کشش بین سطحی و بهبود ترشوندگی ماده فعال سطحی تزریق شده و همچنین ماده فعال سطحی‌های طبیعی مانند رزین و آسفالتین بیش‌تر است لیکن پیش از به‌کارگیری ترکیب‌های شیمیایی، آب دریا به صورت آب هوشمند عمل کرده و ترشوندگی را بهبود می‌بخشد. *پوریا حیدری و همکاران*^[۴] اثر شوراب رقیق را بر ازدیاد برداشت در ماسه سنگ‌ها بررسی کردند آن‌ها با بررسی تأثیر ماده فعال سطحی آنیونی سدیم دودسیل بنزن سولفات‌ها به همراه آب هوشمند بر ازدیاد برداشت دریافتند که تزریق همزمان شوراب رقیق به همراه ماده فعال سطحی موجب کاهش کشش بین سطحی می‌شود (۲۶٪ از کل نفت موجود در ماسه متراکم شده). *چشم‌گرم و اسفندیاری*^[۵] تأثیر مواد آلکالینی را در مجاورت مواد فعال سطحی در کاهش کشش بین سطحی و تغییر ترشوندگی بررسی کردند و اثر غلظت و زمان ماندگاری ماده فعال سطحی‌ها در حضور ماده آلکالینی کربنات سدیم روی یکی از مخازن جنوب ایران را مورد بررسی قرار دادند که در آزمایش‌های خود از ماده فعال سطحی آنیونی سدیم دودسیل بنزن سولفات (SDS) و ماده آلکالینی کربنات سدیم استفاده کردند. نتیجه‌های به دست آمده از آزمایش‌ها نشان داد که ماده فعال سطحی (SDS) باعث کاهش کشش بین سطحی و تغییر ترشوندگی سنگ مخزن به وضعیت آب‌دوستی می‌شود. همچنین در حضور سدیم کربنات کشش بین سطحی و زاویه تماس به مقدار بیش‌تری کاهش می‌یابد که از عامل‌های تأثیرگذار بر میزان برداشت نفت است. روند تغییرهای زاویه تماس در غلظت‌های گوناگون ماده فعال سطحی (SDS) نخست کاهش و سپس افزایشی می‌باشد. در نتیجه غلظتی از کربنات سدیم که در آن کم‌ترین زاویه تماس با سنگ به دست آمده است به عنوان غلظت بهینه ماده آلکالینی در هر درصد وزنی از ماده فعال سطحی (SDS) در نظر گرفته می‌شود. با افزودن درصد وزنی بیش‌تر از ۰/۲ درصد از ماده فعال سطحی (SDS) کشش بین سطحی محلول ماده فعال سطحی و نفت مخزن آسماری کاهش محسوسی نداشته و کم‌تر نمی‌شود. در نتیجه برای انجام آزمایش‌ها در حضور کربنات سدیم به عنوان متغیر و برای بهینه‌سازی درصد وزنی

(۱) Thomas s. et al

(۲) Xu J., et al

تطابق خوبی را نشان داد. آن‌ها سرانجام قابلیت کاهش کشش بین سطحی در چهار سامانه را به صورت زیر نشان دادند:



پنگ شی و همکاران^(۱) [۷] به بررسی تأثیر چهار ماده فعال سطحی گوناگون آنیونی و ماده فعال سطحی غیر یونی، ماده فعال سطحی Zwitterion و ماده فعال سطحی Gemini پرداختند. نتیجه‌های به دست آمده از شبیه سازی مولکولی نشان داد که ماده فعال سطحی Gemini بیشترین تأثیر را در کاهش کشش بین سطحی دارد.

سون جانگ و همکاران^(۲) [۸] به بررسی تأثیر تغییر ساختارهای گوناگون ماده فعال سطحی آلکیل بنزن سولفونات و مقایسه شبیه سازی مولکولی و آزمایشگاهی پرداختند و روند آن‌ها را بر کاهش کشش بین سطحی گزارش کردند با توجه به نتیجه‌های به دست آمده نشان دادند که ماده فعال سطحی هگزا دکان بنزن سولفونات (4-C16) که دارای یک گروه بنزن سولفوناته است، بیشترین تأثیر در کاهش کشش بین سطحی را دارد.

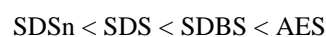
هکتور دامینگز^(۳) [۹] اثرهای توزیع بار در ماده فعال سطحی SDS را بررسی کرد وی در آن از ساختار مولکولی همانند، توزیع بار گوناگون را به صورت یک مولکول کاتیونی و یک مولکول آنیونی در نظر گرفت. نتیجه‌های شبیه سازی وی نشان داد که ماده فعال سطحی کاتیونی یک لایه جداگانه و ماده فعال سطحی آنیونی یک لایه ویژه خود را دارا می‌باشند و مشخص شد که مکان‌های متفاوت ماده فعال سطحی توسط توزیع بار مولکول در سطح مشترک مخلوط مشخص می‌شود که جهت‌گیری‌های متفاوت را براساس توزیع بار مولکول نشان داد. همچنین دیده شد اختلاف پتانسیل الکتریکی در سطح مشترک به توزیع بار در مولکول‌ها در مخلوط بستگی دارد و استفاده از مواد فعال سطحی گوناگون تأثیر بسیار زیادی در کاهش کشش بین سطحی میان آب و نفت دارد.

مطالعه‌های گسترده‌ای در زمینه ازدیاد برداشت و بهبود کیفیت نفت صورت گرفته است. تیرجو و همکاران [۱۰، ۱۱] به بررسی پارامتر حلالیت، و اثر نمک‌های NaCl، MgCl₂ و CaCl₂ و با توجه به حضور کاتیون‌های Na⁺، Mg²⁺ و Ca²⁺، تجمع آسفالتین که به ترتیب دارای روند افزایشی، کاهش و افزایشی است و اثر مهارکننده‌های رسوب آسفالتین و تأثیر آن‌ها را در روند رشد آسفالتین برای بهبود کیفیت نفت پرداختند که با بررسی این موارد

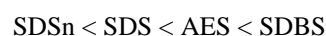
۰٫۲ درصد وزنی در نظر گرفته می‌شود. جیفنگ و همکاران [۶] به بررسی چهار ماده فعال سطحی آنیونی، سدیم دودسیل سولفونات (SDSn)، سدیم دودسیل سولفات (SDS)، سدیم دودسیل بنزن سولفونات (SDBS) و سدیم دودسیل دی (اوکسی اتیلن) اتروسولفات (AES)، بر روی کشش بین سطحی آب و نفت با استفاده از شبیه سازی مولکولی و روش تجربی پرداختند که ترتیب تأثیر مواد فعال سطحی نامبرده در هر دو روش به ترتیب زیر می‌باشد:



آن‌ها با بررسی انرژی تشکیل بین سطحی (IFE)، ضخامت لایه آب و آلکان در کل سامانه و تابع توزیع شعاعی بین نفت و آب نتیجه‌های به دست آمده از آنالیزهای گوناگون را بررسی کردند. نتیجه‌ها نشان داده که مقدار IFE منفی می‌باشد. افزوده شدن ماده فعال سطحی به سامانه باعث کاهش انرژی در بیش تر حالت‌های سامانه می‌شود. کاهش انرژی سامانه نسبت برخوردی بین مولکولی ماده فعال سطحی-آلکان و ماده فعال سطحی-آب، بزرگ بودن IFE و قوی بودن برخوردی بین ماده فعال سطحی-آلکان و ماده فعال سطحی-آب را می‌تواند مشخص کند. آن‌ها به بررسی ضخامت سطح مشترک (غلظت نسبی بر حسب فاصله برای سامانه آب و نفت حول محور Z، محاسبه ضخامت‌های t_{oil}، t_{water} و t_{total}) برای چهار سامانه پرداختند و نتیجه‌ها به صورت زیر گزارش شده است: دیده شد که مقایسه ضخامت لایه‌های هر چهار سامانه با سامانه‌های دیگر امکان‌پذیر است. نتیجه کلی برای t_{water} به صورت زیر است:



و برای t_{oil} بصورت زیر می‌باشد:



به‌طور کلی نتیجه‌ها برای t_{oil} و t_{water} یکسان است و با هم تطابق دارند. نتیجه‌ها برای t_{total} هم به صورت SDSn < SDS < AES < SDBS می‌باشد. مورد بعدی که مورد مطالعه قرار گرفت تابع توزیع شعاعی (RDF) است. پروفیل تابع توزیع شعاعی (RDF) مقدارهای نسبی چگالی و توصیف O_w و O_s را مشخص می‌کند. دیده شد که شدت پیک اول در سامانه‌های SDSn و SDBS نسبت به سامانه‌های SDS و AES بیش‌تر است. با اندازه‌گیری کشش بین سطحی بین آب و دودکان خالص مقدار ۵۶٫۲۳ mN/m گزارش شد، که با نتیجه‌های تجربی کشش بین سطحی ۵۲٫۲۵ mN/m

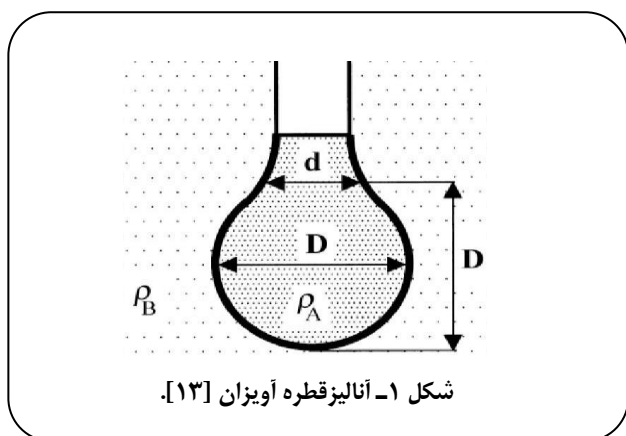
(۱) Shi P., et al

(۲) Jang S. S., et al

(۳) Dominguez H., et al

جدول ۱- ویژگی‌های ماده فعال سطحی سدیم دودسیل سولفات (SDS).

واحد	ویژگی‌ها	
-	NaC ₁₂ H ₂₅ SO ₄	فرمول مولکولی
g/mol	۲۸۸٫۳۷۲	وزن مولکولی
°C	۲۰٫۶	نقطه ذوب
°C	۱٫۰۱	دانسیته



شکل ۱- آنالیز قطره آویزان [۱۳].

حلال مورد استفاده در این پژوهش آب مقطر بود. برای این مطالعه، فناوری محاسبه (IFT) باید توانایی محاسبه در سامانه‌ی مایع - مایع در فشار و دمای بالا را داشته باشد. آنالیز شکل قطره تابعی از (γ) و پارامترهای دیگر که به راحتی قابل محاسبه است در معادله (۱) نشان داده شده است. برای محاسبه کشش بین سطحی با استفاده از این روش دو پارامتر D و d بر اساس شکل قطره همانند شکل ۱ مشخص می‌شود. پارامتر D قطر بزرگ‌ترین دایره سازنده قطره است در حالی که d قطر دایره ای است از قطره که به فاصله D از پایین‌ترین نقطه قرار دارد، گرین و همکاران^(۱) [۱۳].

$$\gamma = \Delta \rho g d_e \frac{1}{H} \quad (1)$$

که $\Delta \rho$ اختلاف چگالی، g شتاب جاذبه، $\frac{1}{H}$ ضریب تصحیح بر مبنای نسبت $\frac{ds}{de}$.

آنالیز پروفیل طولی قطره مایع غوطه ور در فاز سیال دوم در روش قطره آویزان، همواره به عنوان روش با دقت بالا و مناسب برای محاسبه کشش بین سطحی مایع - مایع در نظر گرفته می‌شود که نیازمند تصویر با کیفیت بالا می‌باشد. این آزمایش نیازمند دوربین با لنز بزرگ‌نمایی کم

در حضور مواد فعال سطحی به نتیجه‌های مفیدی در روند کاهش کشش بین سطحی رسیدند.

رضایی و همکاران [۱۲]، با استفاده از روش شبیه‌سازی مولکولی DPD، IFT سامانه‌های هیدروکربن-آب را بررسی کردند. هیدروکربن‌های مورد مطالعه آن‌ها از نوع آلکان‌های خطی، سیکلو آلکان‌ها و هیروکربن‌های آروماتیک بودند. پارامترهای تعامل DPD (aij)، به عنوان یک تابع دمایی (T) که به پارامتر حلالیت (δ) وابسته است بررسی و پارامتر حلالیت با استفاده از دینامیک مولکولی (MD) به دست آوردند. در این مطالعه مشخص شد که aij محاسبه شده بر اساس نیروهای یکسان بین اتم‌های مشابه، نتیجه‌های دقیق‌تری را ارائه می‌دهد. همچنین نتیجه‌های محاسبه‌های شبیه‌سازی DPD برای محاسبه IFT سامانه‌های هیدروکربن -آب با هزینه محاسبه‌های کم‌تر در مقایسه با داده‌های تجربی تطابق بیش‌تری دارد.

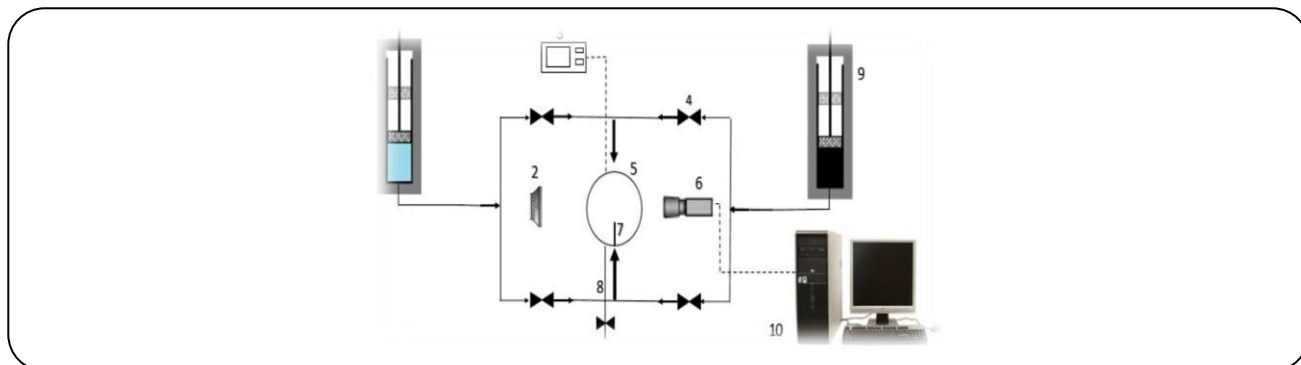
با اعمال شرایط ویژه از جمله تغییرهای دما و فشار، استفاده از غلظت‌های گوناگون ماده فعال سطحی، نوع ماده فعال سطحی مورد استفاده، یون تأثیرگذار موجود در آب و میزان شوری می‌تواند در کنار افزودن مواد فعال سطحی نقش به‌سزایی در روند کاهش کشش بین سطحی و ازدیاد برداشت داشته باشند. امروزه با کمک شبیه‌سازی مولکولی می‌توان بسادگی تأثیر انواع مواد گوناگون از جمله مواد فعال سطحی در روند ازدیاد برداشت نفت را مورد مطالعه قرار داد و شرایط خاص مورد نظر را اعمال و میزان اثربخشی پارامترهای گوناگون را مورد ارزیابی قرار داد که منجر به کاهش هزینه و صرفه جویی زمان می‌شود. در این پژوهش به بررسی تأثیر ماده فعال سطحی سدیم دودسیل سولفات در روند کاهش کشش بین سطحی بین آلکان‌ها و آب و تأثیر نسبت تعداد مولکول‌ها در روند کاهش کشش بین سطحی به صورت آزمایشگاهی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پرداخته می‌شود و با بررسی پارامترهای مهم مانند انرژی تشکیل بین سطحی (IFE)، ضخامت لایه آب و آلکان در کل سامانه و تعامل بین ماده فعال سطحی با فضای نفت و آب (RDF)، تأثیر ماده فعال سطحی (SDS) در روند کاهش کشش بین سطحی توسط شبیه‌سازی دینامیک مولکولی توسط نرم افزار (Materials Studio 6.0 Software) مورد بررسی قرار گرفت.

بخش تجربی

آنالیز قطره آویزان (Pendant Drop)

در این پژوهش از ماده فعال سطحی سدیم دودسیل سولفات (SDS) استفاده شد که ویژگی‌های آن در جدول ۱ آورده شده است.

(۱) Green D., et al



شکل ۲- شمایی از دستگاه اندازه گیری کشش بین سطحی: ۱- مخزن بالک ۲- لامپ ۳- کنترل دما و فشار ۴- شیر فشار بالا ۵- محفظه اصلی ۶- دوربین ۷- سوزن تزریق قطره ۸- تخلیه ۹- محفظه قطره ۱۰- سامانه برای دیدن قطره و گزارش کشش بین سطحی.

دو سوی فاز آب یک تک لایه سطحی متقارن قرار داشت که از ۱۶ مولکول ماده فعال سطحی (SDS) تشکیل شده است. این فازها در یک شبکه مربعی 4×4 مناسب روی محور xy سازمان یافته و زنجیره‌های هیدروکربن نیز عمود بر محور xy در کنار فاز ماده فعال سطحی قرار گرفته و از فاز آب انحراف داشتند. بر این اساس فاز دودکان به صورت دو ستون در دو سمت تک لایه متقارن ماده فعال سطحی قرار گرفته و ضخامتی حدود 15 \AA دارد که به صورت مایع می‌باشد.

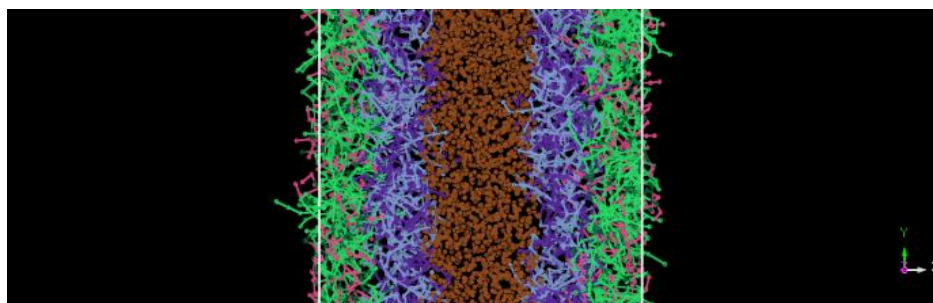
همان گونه که دیده می‌شود وقتی ماده فعال سطحی به ترکیب آب و دودکان افزوده شد، به صورت یک تک لایه بین مولکول‌های آب و دودکان قرار گرفت، از آنجایی که هدف این مطالعه بررسی تغییر تعداد نسبت‌های آب و دودکان است، پس از افزودن ماده فعال سطحی، سه نوع سامانه تعریف می‌شود: سامانه اول ۸۰۰ مولکول آب با ۱۲۰ مولکول دودکان و با عنوان (SDS_1) شناخته شد و در سامانه دوم ۴۰۰ مولکول آب با ۶۰ مولکول دودکان ولی با همان ۳۲ مولکول ماده فعال سطحی (SDS_2) ترکیب شده و با عنوان (SDS_2) معرفی شد. سامانه سوم ۸۰۰ مولکول آب با ۱۲۰ مولکول دودکان و ۱۶ مولکول ماده فعال سطحی (SDS_3) داشت و با عنوان (SDS_3) تعریف شد. در هر سامانه pcff به عنوان forcefield انتخاب شد. پس از کمینه کردن سامانه‌ها، دینامیک مولکولی در چهار مرحله روی این سامانه‌ها اعمال شد. نخست با استفاده از مجموعه NPT (همدمای، هم فشار) با زمان 10 ps و دما 550 K روی سامانه‌ها دینامیک انجام شد. در مرحله دوم با همان مجموعه NPT و زمان 10 ps ، دما به 298 K کاهش یافت. در مرحله سوم زمان کلی شبیه‌سازی به 200 PS تغییر یافت، در همان دمای 298 K و مجموعه NPT و در مرحله پایانی با تغییر مجموعه از NPT به NVT در همان دمای 298 K و زمان کلی 200 PS

برای ضبط شکل قطره می‌باشد. سپس محاسبه کشش سطحی به صورت بدون بعد، قطر آویزان با ثبت تصویر و استفاده از راه حل‌های عددی قابل محاسبه است در این پژوهش برای استفاده از این روش اندازه گیری کشش بین سطحی از سامانه آنالیز قطره آویزان استفاده شد. با استفاده از این دستگاه کشش بین سطحی در فشار و دمای مخزن اندازه گیری شد. شمایی دستگاه در شکل ۲ آورده شده است.

در آزمایش‌های تزریق، دو سیال یکی دارای محلول ماده فعال سطحی و آب مقطر با چگالی 1.415 ، و دیگری هپتان با چگالی 0.86 ، برای تزریق به مخزن بالک و مخزن قطره آماده شد. برای این منظور 0.2 g ماده فعال سطحی به مدت 20 دقیقه با دور 500 rpm درون 100 mL آب مقطر مخلوط شد و سپس چگالی محلول اندازه گیری شد. محلول آماده شده در مخزن سیال کل تزریق شد و سپس سوزن تزریق قطره را برای تزریق هپتان که در مخزن قطره قرار گرفته است از پایین مخزن سیال کل تنظیم شد. پس از تزریق قطره هپتان و با اعمال چگالی هر دو سیال در نرم افزار اندازه گیری کشش بین سطحی و با تنظیم دما و فشار کشش بین سطحی بین محلول آب و ماده فعال سطحی و قطره هپتان اندازه گیری شد. دوباره همین مرحله‌ها برای اندازه گیری کشش بین سطحی آب خالص و قطره هپتان برای دیدن تزریق ماده فعال سطحی و تأثیر آن در کاهش کشش بین سطحی اندازه گیری شد نتیجه‌های به دست آمده از این آزمایش‌ها در بخش نتیجه‌ها و بحث گزارش ارائه می‌شود.

بخش نظری

در این مطالعه نخست با استفاده از مدل Mesocite برای به دست آمدن ترکیب شبیه سازی شده دلخواه فضای ترکیب به سه فاز تقسیم شد. فاز میانی که ضخامتی حدود 30 \AA دارد، مربوط به آب مایع است.



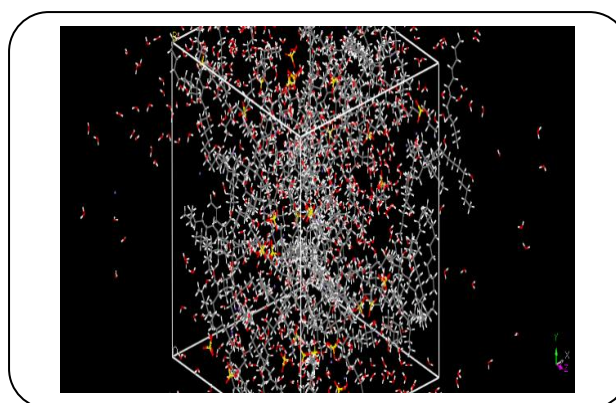
شکل ۳- شبیه سازی ماده فعال سطحی SDS با گروه آلکانی دودکان. (فاز وسط قهوه ای رنگ) مربوط به مولکول های آب، تک لایه های متقارن کنار فاز آب (آبی و بنفش رنگ) مربوط به مولکول های ماده فعال سطحی و دو لایه دندانه دار کنار ماده فعال سطحی (رنگ های سبز و صورتی) مربوط به لایه های ضخیم دودکان اند).

(آلکان) و آب به طور همزمان باعث کاهش کشش بین سطحی می شود. پژوهش ها نشان می دهد که سه عامل در کشش بین سطحی موثرند: ۱- انرژی تشکیل بین سطحی (IFE) ۲- ضخامت لایه آب و آلکان در کل سامانه و ۳- تعامل بین ماده فعال سطحی با فضای آب (RDF). در ادامه شبیه سازی دینامیک مولکولی به بررسی مکانیسم اثر سه فاکتور مذکور و تأثیر آن ها بر روی کشش بین سطحی پرداخته شد.

نتیجه ها و بحث

اندازه گیری کشش بین سطحی

برای اندازه گیری کشش بین سطحی لازم است که نخست کشش بین سطحی سامانه ای که تنها شامل مولکول های آب و آلکان می باشد، به روش تجربی اندازه گیری شود و سپس با افزودن ماده فعال سطحی به این سامانه مقدار کاهش کشش بین سطحی مشخص شود. نتیجه های تجربی کشش بین سطحی بین آب و هپتان با تعداد مولکول های (آب ۸۰۰ و دودکان ۱۲۰) بدون تزریق ماده فعال سطحی 50 mN/m است. همچنین کشش بین سطحی به دست آمده با استفاده از روش های آزمایشگاهی و شبیه سازی مولکولی برای سامانه با تزریق ماده فعال سطحی شامل تعداد مولکول های (آب ۸۰۰ و دودکان ۱۲۰ و ۳۲ ماده فعال سطحی) به ترتیب 7.1 mN/m و 5.11 mN/m می باشد که تطابق قابل قبولی را نشان می دهد. و این نشان دهنده توانایی مناسب شبیه سازی مولکولی در بررسی کشش بین سطحی آب و آلکان ها با استفاده از میدان نیروی ذکر شده می باشد. در ادامه به بررسی شبیه سازی دینامیک مولکولی کشش



شکل ۴- شمایی از سل شامل: مولکول های آب، دودکان و ماده فعال سطحی سدیم دودسیل سولفات (SDS) بعد از چهار مرحله دینامیک مولکولی.

دینامیک نهایی اعمال شد. با توجه به اینکه تغییرهای دما و فشار، روی نتیجه دینامیک مولکولی تأثیر دارد، در هر مرحله دما به وسیله روش ترموستات Andersen. بورن و همکاران^(۱) [۱۴] و فشار به وسیله برندنسن و همکاران^(۲) [۱۵] کنترل شد. برخوردهای غیرپیوندی نیز با استفاده از روش Charge Group گانسترن و همکاران^(۳) [۱۶] با فاصله برش 12.5 \AA Cut Off Distance= محاسبه و در هر مرحله مسیرها، در یک فاصله زمانی ۱ پیکو ثانیه انتخاب شد.

در این مطالعه، هدف بررسی رابطه بین ساختار مولکولی ماده فعال سطحی و قابلیت کاهش کشش بین سطحی سامانه دودکان- آب است. ساختار ماده فعال سطحی ها به گونه ای است که سر آب گریز آن ها درون فاز نفت و سر آبدوست آن ها توسط فاز مایع پوشانده می شود. در ساختار ماده فعال سطحی ها، کاهش سطح انرژی آزاد نفت

(۱) Buuren van A.R., et al

(۲) Berendesn H.J.C., et al

(۳) Gunsteren W.F. van., et al

جدول ۲- انرژی تشکیل بین سطحی (IFE).

سامانه	انرژی (Kcal mol ⁻¹)		
	IFE	نفت/آب	انرژی کل
SDS ₁	-۳۳,۹۶۳	-۱۸۴,۴۳۷	-۳۴۴,۴۷۲
SDS ₂	-۳۱,۹۰۴	-۱۶۹,۹۶۵	-۲۶۴,۱۱۶

انرژی سامانه دودکان-آب است. در واقع افزودن ماده فعال سطحی مقدار انرژی تشکیل بین سطحی (IFE) و مقدار انرژی مولکول ماده فعال سطحی به تنهایی در جدول ۲ ذکر شده است. مقدار (IFE) با استفاده از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$IFE = \frac{E_{total} - (n \times E_{surfactant, single} + E_{oil-water})}{n} \quad (2)$$

در این معادله E_{total} ، $E_{surfactant, single}$ و $E_{oil-water}$ به ترتیب نشان دهنده انرژی کل سامانه، انرژی مولکول ماده فعال سطحی به تنهایی و انرژی سامانه‌ی خالص آلکان-آب است و مقدار n تعداد مولکول‌های ماده فعال سطحی است که در این مطالعه ۳۲ مولکول می‌باشد. به‌طور کلی مقدار IFE منفی است. به این معنی که افزودن ماده فعال سطحی باعث کاهش انرژی سامانه می‌شود و سامانه‌ی پایدارتر خواهد بود. کاهش انرژی سامانه می‌تواند به تعامل بین مولکولی بین ماده فعال سطحی/دودکان و ماده فعال سطحی/آب مربوط باشد و بزرگ بودن IFE، قوی بودن برخوردهای بین ماده فعال سطحی-دودکان و ماده فعال سطحی-آب را مشخص می‌کند. بر اساس مکانیسم کارکرد ماده فعال سطحی که باعث کاهش کشش بین سطحی می‌شود، تعامل و قدرت برخوردهای بین مولکولی به معنی زیاد بودن قابلیت کاهش کشش بین سطحی است جانگ و همکاران^(۴) [۱۹]. در جدول ۲ مقدار مطلق IFE برای هر دو سامانه به ترتیب زیر است:

$$SDS_1 > SDS_2$$

که این نتیجه با کاهش قابلیت کشش بین سطحی به صورت تجربی مطابقت دارد.

از آنجایی که گروه ماده فعال سطحی SDS در هر دو سامانه یکسان است، مقدار انرژی ماده فعال سطحی به دست آمده به تنهایی مقدار انرژی ماده فعال سطحی در هر دو سامانه نشان می‌دهد که مقدار انرژی کلی و به تبع آن (IFE) تا حدود زیادی تحت تاثیر مقدار

بین سطحی آب و دودکان به عنوان یکی از اجزا مهم تشکیل دهنده نفت خام و اثر ماده فعال سطحی SDS روی کشش بین سطحی پرداخته شده است. کشش بین سطحی اندازه گیری شده در رابطه با سامانه آب-دودکان با تعداد مولکول‌های (آب ۸۰۰ و دودکان ۱۲۰)، مقدار ۵۴,۸۳ mN/m و در رابطه با سامانه آب-دودکان خالص با تعداد مولکول‌های (آب ۴۰۰ و دودکان ۶۰)، مقدار ۵۹,۰۶ mN/m است که با نتیجه تجربی گزارش شده ۵۲,۵۵ mN/m، زیر و همکاران^(۱) مطابقت دارد [۱۸]. در مرحله بعد با افزودن ماده فعال سطحی SDS به دو سامانه‌ی بالا به طور چشمگیری کشش بین سطحی آن‌ها کاهش می‌یابد و نتیجه‌های اندازه گیری شده به ترتیب ۷,۳۲ mN/m و ۸,۲۸ mN/m برای (SDS₁) و (SDS₂) است که با نتیجه‌های تجربی که به ترتیب ۶,۲۶ mN/m و ۱۲,۶۶ mN/m است، تطابق دارد.

می‌توان دید که کاهش قابلیت کشش بین سطحی برای این دو سامانه به صورت $SDS_1 < SDS_2$ است. بخاطر کار چسبندگی نفت خام بر روی سنگ که متناسب با کشش بین سطحی نفت-آب است روسن و همکاران^(۱) [۱۸]، با کاهش کشش بین سطحی چسبندگی افزایش می‌یابد.

شبیه سازی دینامیک مولکولی

با افزودن سورفکتانت به سامانه آب - نفت، مولکول‌های سورفکتانت به سمت یک‌دیگر حرکت می‌کنند و به صورت یک تک لایه در خود جمع می‌شوند و بین فازهای آب و نفت قرار می‌گیرند. با توجه به ساختار آمفوفیلیک در ماده فعال سطحی، زنجیره الکلی آب گریز آن وارد فاز نفت می‌شود و سر آبدوست آن در فاز آب غوطه‌ور می‌شود. این نوع از تجمع تک لایه ای، سطح انرژی آزاد فازهای نفت و آب را همزمان کاهش می‌دهد. پژوهش‌های فراوانی در این زمینه نشان می‌دهد که کشش بین سطحی با انرژی تشکیل بین سطحی (IFE)، ضخامت سطح مشترک و تعامل مولکول‌های ماده فعال سطحی با فازهای آب و نفت (RDF) رابطه بسیار نزدیکی دارد. در اینجا، شبیه سازی دینامیکی مولکولی با بررسی مکانیسم سه عامل فوق بر روی کشش بین سطحی مشخص می‌شود.

انرژی تشکیل بین سطحی (IFE)

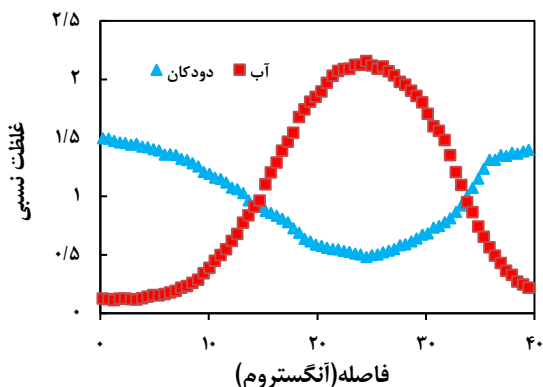
انرژی پایه سطوح میانی ماده فعال سطحی، نفت و آب^(۳) مهم‌ترین عامل مؤثر در کشش بین سطحی است. مقایسه انرژی پایه هر دو سامانه،

(۱) Zeppieri S., et al

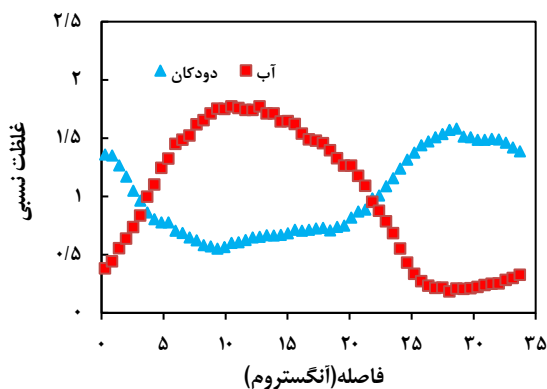
(۳) The energetic stability of the surfactant-mediated oil-water interface

(۲) Rosen J.M., et al

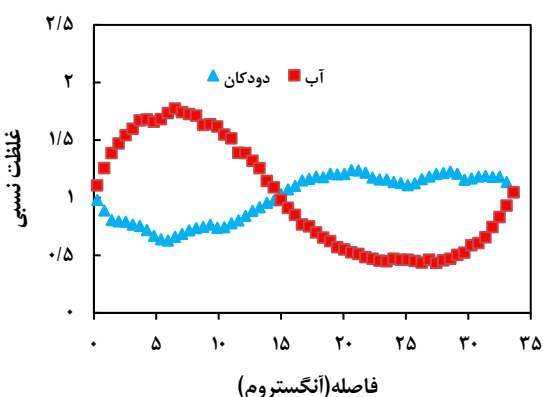
(۴) Jang S.S., et al



شکل ۵ - بررسی ضخامت سطح مشترک، پلانی از غلظت‌های نسبی بین ۸۰۰ مولکول آب و ۱۲۰ مولکول دودکان در حضور ۳۲ مولکول ماده فعال سطحی سدیم دودسیل سولفات (SDS₁).



شکل ۶ - بررسی ضخامت سطح مشترک، پلانی از غلظت‌های نسبی بین ۴۰۰ مولکول آب و ۶۰ مولکول دودکان در حضور ۳۲ مولکول ماده فعال سطحی سدیم دودسیل سولفات (SDS₂).



شکل ۷ - بررسی ضخامت سطح مشترک، پلانی از غلظت‌های نسبی بین ۸۰۰ مولکول آب و ۱۲۰ مولکول دودکان در حضور ۱۶ مولکول ماده فعال سطحی سدیم دودسیل سولفات (SDS₃).

به سامانه آب-آلکان باعث افزایش برخوردهای بین مولکولی و کاهش مقدار کشش بین سطحی می‌شود ولی طبق نتیجه‌های به‌دست آمده این کاهش کشش بین سطحی در سامانه‌ای که مولکول‌های آب و آلکان بیش‌تری دارد، بزرگ‌تر است و به‌عبارتی هرچه تعداد مولکول‌های دودکان-آب بیش‌تر باشد، مقدار IFE بیش‌تر کاهش می‌یابد، همان‌گونه که در نتیجه‌های تجربی نشان داده شد که هرچه تعداد مولکول‌های آب و دودکان سامانه بیش‌تر باشد، کاهش کشش بین سطحی آن بیش‌تر است.

بررسی ضخامت سطح مشترک

ضخامت سطح مشترک یکی دیگر از پارامترهای مهمی است که باعث ایجاد کشش بین سطحی می‌شود. شکل ۵ تا ۷ محاسبه غلظت نسبی بر حسب فاصله در طول محور Z به ترتیب برای سامانه‌های SDS₁ و SDS₂ را نشان می‌دهد. بر اساس معیار "۹۰-۹۰" پیشنهاد شده توسط گودارد جانگ و همکاران^(۱) [۱۹]، ضخامت تفاضلی بین سطح آب و نفت (t_{total}) به‌وسیله محاسبه فاصله بین موقعیت‌های "۹۰-۹۰" غلظت آب و آلکان مشخص می‌شود (t_{total} فاصله بین ۹۰ درصد غلظت آلکان و ۹۰ درصد غلظت آب است). بر اساس معیار "۱۰-۹۰"، ضخامت لایه نفت t_{oil} و ضخامت لایه آب t_{water} نیز مشخص می‌شود. فاصله بین ۹۰٪ غلظت آلکان و ۱۰٪ غلظت آن نشان دهنده t_{oil} و همچنین فاصله بین ۹۰٪ غلظت آب و ۱۰٪ غلظت آن نشان دهنده t_{water} است ریورا و همکاران^(۲) [۲۰، ۲۱].

محاسبه ضخامت‌های t_{total} ، t_{oil} و t_{water} برای هر سه سامانه SDS₁، SDS₂ و SDS₃ در جدول ۳ ذکر شده است. مقایسه ضخامت لایه‌های هر سه سامانه با سامانه‌های دیگر نیز امکان‌پذیر است. همان‌گونه که در جدول ۳ دیده می‌شود، نتیجه کلی برای t_{water} به‌صورت $t_{water} SDS_2 < t_{water} SDS_1 < t_{water} SDS_3$ و برای t_{oil} نیز به‌صورت $t_{oil} SDS_3 < t_{oil} SDS_2 < t_{oil} SDS_1$ است و به‌طور کلی نتیجه‌ها برای t_{water} و t_{oil} یکسان است و با هم تطابق دارند. در هر دو سامانه مقدار t_{oil} بیش‌تر از t_{water} است و به‌طور کلی نتیجه‌ها برای t_{total} نیز به‌صورت $t_{total} SDS_2 < t_{total} SDS_3 < t_{total} SDS_1$ می‌باشد.

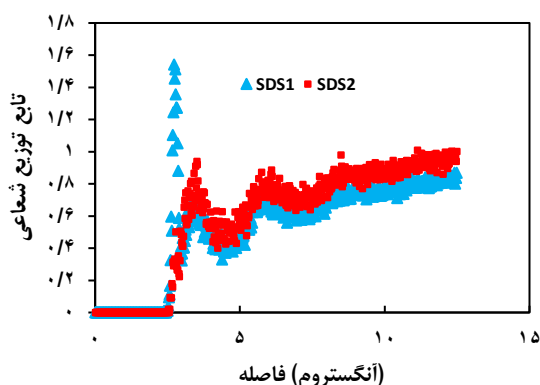
بررسی ضخامت لایه‌های سامانه چند نکته مهم را دربردارد: در هنگام افزودن ماده فعال سطحی می‌توان دید که ضخامت t_{oil} ، t_{water} و همچنین t_{total} ، t_{oil} و t_{water} همچنین بسیار افزایش می‌یابد.

(۱) Jang S.S., et al

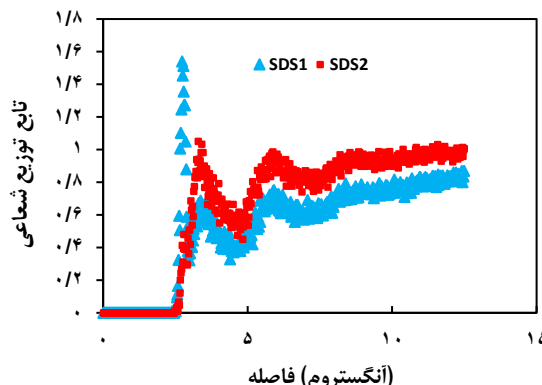
(۲) Rivera J.L., et al

جدول ۳- بررسی ضخامت سطح مشترک.

سامانه	ضخامت سطح مشترک (A°)		ضخامت کل
	ضخامت آب	ضخامت نفت	
SDS ₁	۴۲۱,۱۳	۵۵۱,۱۷	۹۳۷,۱۳
SDS ₂	۴۶۶,۱۲	۵۸۲,۱۵	۲۰۰,۱۰
SDS ₃	۹۶۲,۱۶	۱۷۸,۱۰	۳۰۸,۱۱
آب/دودکان (۸۰-۱۲۰)	۴۳۲,۱۳	۹۵,۱۵	۵۹۲,۱۲
آب/دودکان (۴۰-۶۰)	۶۷۴,۸	۹۲۷,۱۱	۰۴۸,۷



شکل ۹- مقایسه تابع توزیع شعاعی سامانه‌های SDS₁ و SDS₃ بین اکسیژن‌های ماده فعال سطحی (O_S) و اکسیژن‌های آب (O_W).



شکل ۸- مقایسه تابع توزیع شعاعی سامانه‌های SDS₁ و SDS₂ بین اکسیژن‌های ماده فعال سطحی (O_S) و اکسیژن‌های آب (O_W).

مرتبه کشش بین سطحی آن‌ها به صورت: SDS₃ < SDS₁ < SDS₂ است که با نتیجه‌های تجربی همخوانی دارد.

برخورد (تعامل) بین ماده فعال سطحی و آب

در بررسی ضخامت سطح مشترک می‌توان دید که تعامل بین سرآبدوست گروه ماده فعال سطحی و آب یک پارامتر حیاتی تعیین کننده در کاهش کشش بین سطحی است، در نتیجه برای محاسبه تعداد برخوردها و تعامل گروه‌های آبدوست ماده فعال سطحی و آب از تابع توزیع شعاعی (RDF) استفاده می‌شود. شکل‌های ۸ و ۹ نشان دهنده نمودار RDF بین اتم‌های اکسیژن متصل به اتم سولفور در مولکول ماده فعال سطحی SDS (O_S) و اتم‌های اکسیژن مولکول‌های آب (O_W) در هر سه سامانه است. در شکل ۸ دیده می‌شود که در هر دو سامانه مقدار پیک اول و پیک دوم با هم متفاوت است. مقدار پیک اول برای سامانه SDS₁ برابر ۱/۵۳۹ در فاصله ۲/۷۳ Å و برای سامانه SDS₂ برابر ۱/۰۵۰ در فاصله ۳/۲۹ Å است در حالی که مقدار پیک دوم برای

این تغییر را می‌توان این گونه توضیح داد که اضافه شدن ماده فعال سطحی به صورت تک لایه بین سطوح نفت و آب باعث جذب و نفوذ سرهای آب گریز و آبدوست آن به ترتیب بین فضاهای نفت و آب می‌شود. نتیجه مهم این که نفوذ نفت و آب در مجموعه ماده فعال سطحی باعث افزایش t_{oil}، t_{water} و همچنین باعث افزایش t_{total} می‌شود. نکته دوم: اگر سامانه آب-دودکان را خالص در نظر گرفته شود و t_{oil} و t_{water} و سرانجام t_{total} آن محاسبه شود به دست آمده کم‌تر از زمانی است که گروه ماده فعال سطحی وارد سامانه شود و ما بخواهیم t_{total} را برای کل سامانه محاسبه کنیم. بنابراین وقتی گروه ماده فعال سطحی به سامانه افزوده می‌شود ضخامت لایه‌های نفت، آب و t_{total} به صورت چشمگیری افزایش می‌یابند. به طور معمول بزرگ بودن ضخامت لایه‌های نفت و آب به معنی بزرگ بودن قابلیت آمیختن آن‌ها با همدیگر و کاهش مقدار کشش بین سطحی است در نتیجه می‌توان استنباط کرد وقتی که مرتبه ضخامت لایه‌ها برای هر سه سامانه به صورت: SDS₃ > SDS₁ > SDS₂ است

دودکان) و SDS_2 (ترکیب ماده فعال سطحی SDS با ۴۰۰ مولکول آب و ۶۰ مولکول دودکان) و SDS_3 (ترکیب ماده فعال سطحی SDS با ۸۰۰ مولکول آب و ۱۲۰ مولکول دودکان). نخست کمینه مقدار کشش بین سطحی برای هر سه سامانه با استفاده از آنالیز کشش بین سطحی قطره آویزان به صورت تجربی محاسبه شده و ترتیب کاهش قابلیت کشش بین سطحی به صورت $SDS_3 < SDS_1 < SDS_2$ می باشد. در مرحله بعد شبیه سازی دینامیک مولکولی (MD) انجام گرفت و اثر سه پارامتر انرژی تشکیل پیوند (IFE)، ضخامت سطح مشترک و برخورد بین مولکول های ماده فعال سطحی با فضای نفت و آب (RDF) بین سطوح ماده فعال سطحی و آب محاسبه شد. در بررسی پارامتر انرژی تشکیل پیوند (IFE) دیده شد با توجه به این که نسبت ماده فعال سطحی در هر دو سامانه یکسان است، انرژی تشکیل پیوند به شدت تحت تأثیر نسبت های مولکول های آب و دودکان قرار دارد و هرچه تعداد مولکول های آب و دودکان بیش تر باشد مقدار انرژی تشکیل پیوند (IFE) بیش تر و مقدار IFE بیش تر کاهش می یابد. در بررسی پارامتر ضخامت سطح مشترک نیز این نتیجه به دست آمد که هرچه نسبت تعداد مولکول های آب و دودکان بیش تر باشد، ضخامت سطح مشترک آب، آلکان و ضخامت کلی که نتیجه فاصله بین ۹۰ درصد غلظت آب و ۹۰ درصد غلظت دودکان است بیش تر می باشد. در بررسی پارامتر تعامل بین مولکول های ماده فعال سطحی با فاز آب (RDF) نیز مشخص شد که هرچه نسبت تعداد مولکول های آب و دودکان بیش تر باشد پیک اول که نشان دهنده پیوند هیدروژنی بین تم اکسیژن ماده فعال سطحی و اتم هیدروژن در آب است شدت بیش تری دارد و مقادیرهای بیش تری را به خود اختصاص می دهد. به طور کلی نتیجه های به دست آمده در بررسی هر سه پارامتر به صورت $SDS_3 > SDS_2 > SDS_1$ است که با نتیجه های تجربی تطابق خوبی دارد.

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۱۲/۲۲؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۴/۱۰

سامانه SDS_1 برابر ۰/۶۶۲ در فاصله 3.51 \AA و برای سامانه SDS_2 برابر ۰/۹۸۵ در فاصله 5.87 \AA است و برای SDS_3 مقدار پیک اول برابر ۰/۹۳۹ در فاصله 3.51 \AA است در حالی که مقدار پیک دوم برابر ۰/۸۲۲ در فاصله 5.97 \AA است. اولین پیک موجود نشان دهنده پیوند هیدروژنی بین اتم اکسیژن ماده فعال سطحی و اتم هیدروژن در آب است و قوی بودن این پیوند هیدروژنی باعث می شود که اولین پوسته هیدراته در اطراف اتم اکسیژن ماده فعال سطحی ایجاد شود. ساختار دومین پیک که شکل گیری آن ضعیف است، به الکتروستاتیک و اثر متقابل پیوند هیدروژنی نسبت داده می شود و به ترتیب از گروه های قطبی و اولین پوسته هیدراته شده با مولکول های آب به دست می آید. همان گونه که در شکل ۸ دیده می شود شدت پیک دوم در هر دو سامانه دارای اندازه تقریبی یکسانی است ولی شدت پیک اول آن ها چشمگیر است. از آنجایی که شدت پیک اول در هر دو سامانه خیلی بیش تر از پیک دوم بوده و شدت پیک اول در سامانه SDS_1 خیلی بیش تر از شدت پیک اول در سامانه SDS_2 است، مقایسه RDF هر دو سامانه نشان می دهد که مقدار RDF در سامانه SDS_1 بیش تر از مقدار RDF در سامانه SDS_2 است و مقدار RDF در سامانه SDS_1 بیش تر از مقدار RDF در سامانه SDS_3 است ($RDF_{SDS1} > RDF_{SDS2} > RDF_{SDS3}$). بزرگ بودن مقدار RDF به معنی قابلیت بیش تر آن سامانه برای کاهش کشش بین سطحی است، بنابراین طبق نتیجه های به دست آمده سامانه ای که تعداد مولکول های آب و دودکان بیش تری دارد، RDF آن بزرگ تر و کاهش کشش بین سطحی آن بیش تر است و این با نتیجه های تجربی همخوانی دارد.

نتیجه گیری

در این مطالعه، یک گروه آنیونی ماده فعال سطحی سدیم دودسیل سولفات (SDS) با ترکیب آلکان دودکان و آب در سه حالت با نسبت مولکول های متفاوت مورد بررسی قرار گرفت و در حالت دوم، هدف بررسی کاهش کشش بین سطحی در دو سامانه SDS_1 (ترکیب ماده فعال سطحی SDS با ۸۰۰ مولکول آب و ۱۲۰ مولکول

مراجع

- [1] Thomas S., Enhanced Oil Recovery - An Overview. Oil & Gas Science and Technology - Review. *IFP*, **63(1)**: 9-19 (2008).
- [۲] قجانوند، حسین؛ نور محمد، علیرضا؛ ازدیاد برداشت نفت از سنگ های کربناته به وسیله آشام خود به خودی محلول های ماده فعال سطحی، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، (۳) ۳۲: ۶۹ تا ۷۸ (۱۳۹۲).

- [۳] احصایی، ژاله؛ نبی پور، معین، ازدیاد برداشت نفت با به کارگیری ماده فعال سطحی، به منظور کاهش کشش بین سطحی و بهبود ترشوندگی میدان نفتی کرنج، پنجمین کنفرانس بین المللی نوآوری های اخیر در شیمی و مهندسی شیمی، تهران، دانشگاه علامه طباطبائی (۱۳۹۶).
- [۴] حیدری، پوریا؛ وفایی سفتی، محسن؛ تنگستانی، ابراهیم و کاظمی، حامد، تزریق همزمان شوراب رقیق به همراه ماده فعال سطحی به منظور ازدیاد برداشت، چهارمین همایش علمی مخازن هیدروکربوری و صنایع بالادستی علوم و صنایع وابسته، تهران، شرکت هم اندیشان انرژی کیمیا (۱۳۹۴).
- [۵] چشم گرم، هدایت و اسفندیاری، نادیا، مطالعه ی آزمایشگاهی تأثیر آلکالاین بر فرآیند سیلابزنی ماده فعال سطحی جهت ازدیاد برداشت از مخزن نفتی آسماری، دومین کنفرانس سراسری تحقیقات جدید در شیمی، مهندسی شیمی و نفت، شیراز (۱۳۹۵).
- [6] Xu J., Zhang Y., Chen H., Wang P., Xie Z., Yao Y., Yan Y., Zhang J., [Effect of surfactant Headgroups on the Oil/Water Interface: An Interfacial Tension Measurement and Simulation Study](#), *Journal of Molecular Structure*, **1052**: 50-56 (2013).
- [7] Shi P., Zhang H., Lin L., Song Ch., Chen Q., Li Z., [Molecular Dynamics Simulation of Four Typical Surfactants at Oil/Water Interface](#), *Journal of Dispersion Science and Technology*, **39(9)**: 1258-1265. (2018).
- [8] Jang S.S., *et al.*, [Molecular Dynamics Study of a Surfactant-Mediated Decane– Water Interface: Effect of Molecular Architecture of Alkyl Benzene Sulfonate](#), *The Journal of Physical Chemistry B*, **108(32)**: 12130-12140. (2004).
- [9] Dominguez H., [Computer Simulation Studies of Surfactant Monolayer Mixtures at the Water/Oil Interface: Charge Distribution Effects](#), *Journal of Colloid and Interface Science*, **274(2)**: 665-672 (2004).
- [10] Tirjoo A., Bayati B., Rezaei H., Rahmati M., [Molecular Dynamics Simulation of the Effect of Ions in Water on the Asphaltene Aggregation](#), *Journal of Molecular Liquids*, **277**: 40-48 (2019).
- [11] Tirjoo A., Bayati B., Rezaei H., Rahmati M., [Molecular Dynamics Simulations of Asphaltene Aggregation under Different Conditions](#), *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **177**: 392-402 (2019).
- [12] Rezaei H., Modarress H., [Dissipative Particle Dynamics \(DPD\) Study of Hydrocarbon–Water Interfacial Tension \(IFT\)](#), *Chemical Physics Letters*, **620**: 114-122 (2015).
- [13] Green D.W., Willhite G.P., “Enhanced Oil Recovery”, *SPE Text-Book Series* Vol 6. *Society of Petroleum Engineers, Richardson Texas. (1998)*.
- [14] Buuren van A.R., Berendesn H.J.C., [Molecular Dynamics Simulations of Carbohydrate-Based Surfactants in Surfactant/Water/Oil Systems](#), *Langmuir*, **10**: 1703-1713 (1994).
- [15] Berendesn H.J.C., Postma J.P.M., Gunsteren van W.F., DiNola A., Haak J.R., [Molecular Dynamics with Coupling to an External Bath](#), *J. Chem. Phys.*, **81**: 3684-3690 (1984).

- [16] Gunsteren W.F. van., Berendsen H.J.C., "GROMACS User Guide" (1986).
- [17] Zeppieri S., Rodriguez J., Ramos de A.L., [Interfacial Tension of Alkane + Water Systems](#), *J. Chem. Eng. Data*, **46**: 1086-1088 (2001).
- [18] Rosen J.M., Kunjappu J.T., "[Surfactants and Interfacial Phenomena](#)", John Wiley & Sons, Inc. Hoboken, New Jersey, pp.93. (2004).
- [19] Jang S.S., Lin S.T., Maiti P.K., Blanco M., Goddard W.A., Shuler P., Tang Y., [Molecular Dynamics Study of a Surfactant-Mediated Decane-Water Interface: Effect of Molecular Architecture of Alkyl Benzene Sulfonate](#), *J. Phys. Chem. B*, **108**: 12130-12140 (2004).
- [20] Rivera J.L., C., Cummings P.T., [Molecular Simulations of Liquid-Liquid Interfacial Properties: Water-N-Alkane and Water-Methanol-n-alkane Systems](#), *Phys. Rev. E*, **67**: 01 1603 (2003).
- [21] Rivera J.L., Predota M., Chialvo A.A., Cummings P.T., [Vapor-Liquid Equilibrium Simulations of the SCPDP Model of Water](#), *Chem. Phys. Lett.*, **357**: 189-194 (2002).