

表面活性剂对煤润湿性影响的多尺度研究方法进展

林 媛, 师永杰, 亢志雄

重庆科技大学安全科学与工程学院, 重庆

收稿日期: 2025年4月22日; 录用日期: 2025年5月22日; 发布日期: 2025年5月30日

摘 要

本文从煤矿安全生产角度, 系统综述了表面活性剂对煤润影响的多尺度研究方法进展。首先, 介绍了煤尘润湿性能的研究背景和表面活性剂的关键作用; 其次, 归纳了不同类型表面活性剂的宏观实验研究成果及其头基与尾链结构的调控机制; 再次, 详细总结了分子动力学模拟和量子化学计算在揭示表面活性剂与煤相互作用微观机理中的应用; 最后, 探讨了未来在表面活性剂分子设计和煤尘治理技术中的发展趋势。本研究旨在为表面活性剂的优化设计提供理论支持, 并为煤矿降尘技术的高效应用提供科学依据。

关键词

煤尘, 表面活性剂, 润湿性, 分子模拟

Progress in Multi Scale Research Methods on the Influence of Surfactants on Coal Wettability

Yuan Lin, Yongjie Shi, Zhixiong Kang

School of Safety Science and Engineering, Chongqing University of Science and Technology, Chongqing

Received: Apr. 22nd, 2025; accepted: May 22nd, 2025; published: May 30th, 2025

Abstract

From the perspective of coal mine safety production, this paper systematically reviews progress in multi scale research methods on the influence of surfactants on coal wettability. Firstly, the research background of coal dust wettability and the key role of surfactants are introduced. Secondly, the macroscopic experimental research results of different types of surfactants and the regulation

文章引用: 林媛, 师永杰, 亢志雄. 表面活性剂对煤润湿性影响的多尺度研究方法进展[J]. 物理化学进展, 2025, 14(2): 430-437. DOI: 10.12677/japc.2025.142040

mechanism of head group and tail chain structure are summarized. Thirdly, the application of molecular dynamics simulation and quantum chemical calculation in revealing the microscopic mechanism of the interaction between surfactant and coal is summarized in detail. Finally, the future development trends in surfactant molecular design and coal dust control technology are discussed. The purpose of this study is to provide theoretical support for the optimal design of surfactants and provide scientific basis for the efficient application of coal mine dust reduction technology.

Keywords

Coal Dust, Surfactant, Wettability, Molecular Simulation

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

煤炭是全球储量最为丰富的化石能源之一，在中国能源结构中长期占据主导地位，对国民经济的高质量发展具有不可替代的作用[1]。然而，在煤矿生产过程中，煤尘作为一种不可避免的副产品，不仅对矿工健康构成威胁，还严重影响矿井的安全生产。煤尘的存在会加速井下机械设备的磨损，引发矿工的呼吸系统疾病，甚至在煤尘浓度达到爆炸极限时，由于其自燃性和爆炸性，可能引发严重的燃烧和爆炸事故[2][3]。这不仅威胁到矿工的生命安全，也造成巨大的经济损失。因此，煤尘治理问题始终是煤矿安全生产中的重要课题之一。目前煤尘治理的方法主要包括通风降尘、喷雾降尘和煤层注水等。其中，喷雾降尘因其操作简便、适用范围广而被广泛应用。喷雾降尘过程通常涉及三个关键环节：雾化、捕尘和保水[4]。在捕尘过程中，液滴能否有效润湿并捕获煤尘颗粒至关重要，而这一能力受到煤尘表面润湿性的显著影响。煤尘润湿性指液滴在煤尘表面展开的难易程度。由于煤表面疏水，水滴接触角常 $>90^\circ$ ，严重阻碍喷雾捕尘效率[5]，亟需通过表面活性剂降低接触角提升润湿效果[6]。因此，如何改善煤尘的润湿性能，成为提升喷雾降尘效率的重要研究方向。

表面活性剂因其独特的“两亲”分子结构，能够显著降低液体表面张力，从而改善煤尘的润湿性能，被广泛应用于矿井喷雾降尘技术中以提升捕尘效果[7]。然而，已有研究多集中于表面活性剂的类型对煤尘润湿性能的影响，例如比较阴离子型、非离子型和阳离子型表面活性剂的性能差异，但关于哪种类型的表面活性剂润湿性能更优的研究结论尚存争议。不同表面活性剂对煤润湿性的影响显著依赖于煤的变质程度与表面化学特性。例如，Crawford 等[7]发现阴离子型 SDS 在烟煤上的平均接触角为 68.4° ，明显低于非离子型 AEO-9 的 75.2° ；而 Singh 等[8]在长焰煤(低阶煤)上发现 AEO-9 处理接触角(62.1°)优于 SDS (66.8°)，这种差异可能与煤表面电荷分布及含氧基团密度相关。更重要的是，这些研究多停留在宏观的类型比较上，缺乏从分子结构层面对润湿机制的深入探讨。表面活性剂种类繁多、分子结构多样，通过单纯实验筛选最优表面活性剂的过程既费时费力，又难以系统揭示分子结构与润湿性能之间的内在关系。近年来，随着现代科学技术的快速发展，分子模拟技术的兴起为研究表面活性剂与煤尘的相互作用提供了新的工具。例如，通过分子动力学模拟，可以清晰地观察表面活性剂分子在煤尘表面上的吸附行为及其构型；通过量子化学计算，可进一步解析表面活性剂与煤尘间电子相互作用及能量变化[9]。然而，单纯依赖分子模拟研究受体系规模和方法模型的限制，与实际捕尘性能可能存在一定偏差。因此，需结合实验研究，通过实验验证模拟结果，建立更加可靠的理论模型与框架，为实际应用提供科学依据。基于

此, 本文针对表面活性剂对煤表面润湿性的影响进行综合考量, 可为矿井喷雾降尘技术中表面活性剂分子设计与筛选提供理论依据和技术支持, 同时有助于提升煤矿降尘效率和安全生产水平。

2. 国内外研究进展

2.1. 表面活性剂对煤润湿性影响的研究现状

早期研究可追溯至 20 世纪 20 年代, 英国学者率先探讨了表面活性剂的化学特性及其工业应用潜力。近四十年来, 国内外研究人员对表面活性剂在煤尘中的应用做了大量的研究工作, 具体观点代表如下:

Crawford 等[7]用对三种不同变质程度的澳大利亚煤使用阴离子、阳离子和非离子表面活性剂改性发现, 表面活性剂吸附对低阶煤的亲疏水性影响很小, 但可以增加高阶煤的疏水性, 非离子表面活性剂吸附在煤表面可以屏蔽煤表面的负电荷。Singh 等[8]研究了表面活性剂对煤的等温线是否有影响和对吸附是否发生作用, 结果表明: 表面活性剂分子与煤表面的吸附包括两个方面, 分别是疏水性和静电吸引作用。Tessum 等[10]通过研究表明, 添加表面活性剂有可能提高喷雾除尘效率。含有非离子表面活性剂的喷雾比测试的其他喷雾在捕获煤尘方面表现更好。Singh 等[11]将十二烷基苯磺酸钠应用到细粒煤脱水过程中, 发现滤饼水分有明显降低。Das 等[12]等人发现表面活性剂的加入有助于褐煤成浆率的增大以及水煤浆稳定性的增强。Kilau 等[13]早期就已经发现将钠离子盐和钾离子盐加到表面活性剂溶液中可以大幅度提高水溶液的润湿性, 对表面活性剂改善煤的润湿性有直接的关系。

我国学者对表面活性剂的研究是从 80 年代以后才逐渐开始的, 起步时间相对来说比较晚但研究发展的很快。近年来, 针对表面活性剂协同效应的研究成为热点。例如, Li 等[14]发现阴离子 SDBS 与非离子 APG 复配时, 可通过头基互补(磺酸基与羟基)增强在褐煤表面的吸附密度, 使接触角降低至 52.3° , 显著优于单一组分(SDBS: 66.8° , APG: 70.1°)。此外, Nie 等[15]针对高阶煤(如无烟煤)的最新研究表明, 两性离子表面活性剂(如 CAB)因其 pH 响应特性, 可在酸性矿井水中自发调整分子构型, 实现动态润湿。Liao 等[16]通过测量不同表面活性剂处理后煤样的接触角, 认为 APG 和 SDBS 能有效降低接触角, 提高煤的润湿性, 而 PAM 则会削弱煤的润湿性。Xu 等[17]研究了三种不同头基阴离子表面活性剂对煤尘的润湿效果, 认为吸附密度和亲水亲脂平衡值(HLB)是影响润湿时间的主要因素。Ma 等[18]通过 FT-IR 和 ^{13}C NMR 实验获得了烟煤和表面活性剂的化学微观结构, 最终建立了烟煤润湿性影响因素的评价模型。

2.2. 分子结构对表面活性剂性能影响的研究现状

表面活性剂的分子结构会对表面活性剂的起泡性、表面张力以及在两相界面处的吸附行为等产生影响[19]。由于表面活性剂为两亲型分子, 其分子结构又可以分为头基结构和尾链结构。根据头基基团类型来看, 常见的表面活性剂头基主要有硫酸酯盐型、磺酸盐型、聚氧乙烯型、铵盐型、季铵盐型等。不同的头基结构通常会影响到表面活性剂的带电性, 因此, 根据其带电性表面活性剂一般又分为阴离子型、阳离子型、两性型和非离子型。根据尾链类型来看, 常见的表面活性剂尾链主要有烷基苯基链、直链烷基链、支链烷基链以及多烷基链等[20]-[22]。不管是头基还是尾链结构, 都与表面活性剂的性能密切相关, 具体观点代表如下:

2.2.1. 头基结构的影响

Delgado 等[23]通过实验证实, 羧基甜菜碱头基中亚甲基数量从 1 增至 3 时, 气-水界面吸附能由 -25.6 kJ/mol 降至 -38.2 kJ/mol , 吸附层厚度由 1.2 nm 增加至 1.8 nm 。这表明头基疏水性的增强可提升界面稳定性, 为设计高效润湿剂提供了理论依据。Xu 等[24]研究了四种不同头基结构表面活性剂对油-水界面张力的降低能力, 发现氧、苯环、乙氧基的加入会使表面活性剂的极性增强, 头基与水分子的相互作用也会随之增强, 从而导致油-水界面张力降低。Li 等[25]结合毛细力上升系数计算和毛细吸收实验,

确定了 0.10 wt% SDS + 0.05 wt% NaAc 复合溶液对煤尘的润湿效果最好。表面活性剂分子由极性亲水性基团和非极性疏水性基团组成的。不同类型的表面活性剂对煤尘润湿性的影响不同,这可归因于不同极性亲水基团和非极性疏水基团对煤表面的吸附作用不同,从而产生不同的润湿性调节效果。Hu 等[26]通过红外光谱实验和接触角实验探讨了煤和表面活性剂的微观结构对润湿性的影响,认为表面活性剂中的羟基、羧基、羰基、醚基和芳香胺是影响煤润湿性的主要因素。

2.2.2. 尾链结构的影响

盖志远等[27]研究了两种具有相同亲水基不同疏水尾链的表面活性剂月桂酸聚氧乙烯醚(LAE-9)和辛基酚聚氧乙烯醚(OP-9)对低阶煤表面润湿性的影响,结果表明 LAE-9 对低阶煤润湿性的改善效果更好,原因是其尾链中含有的酯基相比 OP-9 尾链中的苯环能够覆盖低阶煤表面更多的亲水位点。Liu 等[28]研究了不同链长烷基季铵表面活性剂在褐煤表面的吸附性能。结果表明,三种表面活性剂在褐煤表面的平衡吸附随链长增加而增加。通过模拟非离子表面活性剂带苯环和不带苯环在不同煤表面的吸附状态, Li 等[29]认为苯环可以通过 π 键增强非离子表面活性剂在亚烟煤表面的吸附,但对褐煤表面的吸附影响不大。

2.3. 分子模拟在表面活性剂对煤润湿性影响中的研究现状

分子模拟方法目前在表面活性剂润湿煤尘方面的研究和应用盛广,已经有很多分子动力学模拟和量子力学模拟的相关研究。

2.3.1. 分子动力学模拟研究

通过分子动力学模拟对比具有不同分子结构的表面活性剂在界面或表面处的作用过程,可以判断表面活性剂分子结构对体系宏观性质的影响效果。张建国等[30]采用分子动力学构建了煤/表面活性剂/水三元吸附模型,研究了非离子表面活性剂(APG 与 Triton X-100)水溶液体系在煤表面的聚集和吸附行为。Yuan 等[31]通过分子动力学(MD)模拟方法与实验测量相结合,研究了脂肪醇聚氧乙烯醚-9 (AEO-9)和褐煤。此外,还研究了表面活性剂分子在煤尘分子上的润湿和吸附的微动力过程。Meng 等[32]以褐煤、烟煤、无烟煤以及阴离子 SDBS、SDS、非离子表面活性剂 AEO3、AEO7、AEO9 配制成质量浓度为 0.05% 的溶液为研究对象,用 Materials Studio 8.0 分子模拟软件模拟不同煤表面活性剂-水模型体系的吸附,结合接触角分析实验,找出了三种煤样润湿性最大的表面活性剂,然后通过分析模拟平衡状态下的吸附构型,深入探讨了不同表面活性剂在三种煤表面的微观吸附机理。Meng 等[33]通过分子动力学模拟研究煤-水界面在不同浓度表面活性剂作用下的变化,并与实验结果进行了比较,发现当表面活性剂的浓度不断增加时,界面张力先剧烈下降后缓慢上升,说明表面活性剂能够有效降低界面张力。Zhang 等[34]模拟了乙氧基化水平各异的几种十二烷基聚乙氧基型表面活性剂对褐煤表面疏水性的影响,发现乙氧基化水平越高的表面活性剂,其在褐煤上的吸附程度越强,褐煤的疏水程度也越强,且范德华力在吸附中起主导作用。Guo 等[35]利用 GCMC 和 MD 方法分析了非离子表面活性剂丙酸甲酯(MA)在褐煤表面的吸附。结合红外光谱(FTIR)和接触角实验,阐述了 MA 对褐煤疏水性的有效改善。Li 等[36]建立了不同 CTAB/SDBS 配比的水/表面活性剂/煤分子动力学模拟系统。当摩尔比为 1:9 时,表面活性剂分子更容易吸附在低阶煤表面,水分子的运动相对更强。Bao 等[37]等使用分子动力学模拟方法,从分子微观层面研究了三种阴离子表面活性剂: α -烯基磺酸钠(AOS)、脂肪酸甲酯磺酸钠盐(MES)和二次烷基磺酸钠(H95)在水煤界面的润湿机理。模拟结果表明,三种表面活性剂分子中的 S 原子与水分子中的 O 原子在 3.1~5.0 Å 范围内发生范德华作用,在表面活性剂亲水性基团附近形成第一层水化层,该水化层中水分子数的顺序为 AOS > MES > H95,说明 AOS 的亲水性最强,当其疏水基团吸附在煤分子表面后,能吸引大量水分子向煤分子迁移,实现润湿煤尘的目的。

2.3.2. 量子化学模拟研究

量子力学模拟则更多地用于反映分子结构对表面活性剂本身电子性质以及表面活性剂与其他物质之间电子转移等情况的影响。Gattinoni 等[38]利用量子力学模拟研究了三种表面活性剂在褐煤表面的吸附强度和吸附机理,结果表明在三种表面活性剂中甘油单酯吸附最稳定,其头基与褐煤表面存在大量电子转移,并且形成了新的化学键。Liu 等[39]结合渗透高度实验和量子化学计算,从表面静电势角度分析了表面活性剂对不同变质程度煤的微润湿作用及其机理。聂文等[40]通过量子化学模拟方法,研究了快速渗透剂 T、十二烷基苯磺酸钠(SDBS)和椰油酰胺丙基甜菜碱(CAB)对煤尘润湿性的影响。模拟结果表明,随着轨道能量差的减小,表面活性剂溶液对煤尘的润湿效果也逐步下降,表面活性剂前线轨道能量差与其润湿性有直接联系,表面活性剂轨道能量差越大,与水分子形成的氢键数量越多,则表面活性剂溶液的润湿性越好。刘硕等[41]使用量子化学模拟方法,研究四种表面活性剂(阳离子:十二烷基三甲基溴化铵(DTAB);阴离子:十二烷基硫酸钠(SDS);两性离子:十二烷基三甲基甜菜碱(BS-12);非离子:脂肪醇聚氧乙烯醚(AEO-7))对煤样润湿性的影响效果及机理。模拟结果表明,所选取的 4 种表面活性剂的加入会降低褐煤的亲水性,而对长焰煤、焦煤和无烟煤亲水性有提升作用。并且阴离子表面活性剂十二烷基硫酸钠对于这 3 种煤样亲水性的提升作用最为明显。表面活性剂分子、水分子及煤分子的表面静电势分布共同决定了表面活性剂对煤润湿性的影响。

2.3.3. 分子动力学模拟和量子化学模拟相结合研究

分子动力学模拟和量子化学模拟相结合通常可以更好地对表面活性剂在固-液界面处的吸附行为和微观吸附机理进行探究。Hu 等[42]研究了 SDBS、BS-12、DTAB 三种离子表面活性剂对褐煤润湿性的影响。利用 Wender 煤化学结构模型和 Materials Studio 分子模拟软件构建了褐煤-表面活性剂-水体系,通过量子化学计算确定了单个分子的静态电位。详细分析了体系的初始构型和平衡构型、相对浓度分布以及水分子的均方位移(MSD)。夏阳超等[43]首先通过量子力学模拟计算了褐煤表面以及表面活性剂的结构特征和反应活性,然后利用分子动力学模拟确定了水-煤界面处表面活性剂的吸附构型和体系中水的扩散系数,最终得出表面活性剂对褐煤表面润湿性的影响及微观机理,即表面活性剂通过静电作用吸附于褐煤表面并阻碍其表面含氧基团与水形成氢键,从而降低褐煤的亲水性。

3. 发展趋势

随着煤矿降尘技术进入精细化和智能化时代,未来研究需要更加聚焦于如何将实验、模拟与绿色设计有机结合,以解决表面活性剂筛选耗时耗力、模拟尺度受限、环境兼容性不足等瓶颈。具体而言,首先,可以依托第 2.1 节中积累的宏观接触角与扩散系数数据,构建“实验→分子动力学(MD)参数化→实验反馈”闭环高通量筛选流程,以快速评估不同头基与尾链组合对煤尘润湿性的贡献;其次,在第 2.2 节常规模拟的基础上,针对 MD 平衡构型中关键吸附位点,可以选取代表性分子团簇引入 QM/MM 混合量子化学计算,精确刻画电子相互作用与氢键网络能量,弥补 MD 忽略电子运动的不足,从而实现从原子层面到电子层面的连续描述;最后,结合绿色可持续发展理念,以天然两亲骨架和可降解聚合策略为设计基础,开发低毒性、可生物降解的表面活性剂,并在性能评估中同步纳入生物降解性及生态毒理学测试,确保新剂型在高效润湿的同时具备环境友好属性。通过这三大研究方法的有机融合,不仅能够深化对表面活性剂润湿机制的多尺度理解,也将显著加速新型环保降尘剂的开发与产业化应用,为提升煤矿安全生产和实现可持续发展提供坚实的技术支撑。

4. 结语

通过对表面活性剂分子结构与煤润湿性能关系的研究,本文总结了现有研究中宏观实验、分子模拟

和量子化学分析的主要成果与不足。表面活性剂的头基类型、尾链长度及极性对煤润湿性的提升作用显著,但具体机制有待进一步深入探索。结合实验与分子模拟手段,未来研究可以实现从宏观实验到微观机理的多尺度理解,为新型表面活性剂的设计提供更加精确的理论支持。同时,表面活性剂研发应以环保与高效为导向,推动煤矿安全生产和绿色发展。

基金项目

重庆科技大学研究生创新计划项目“同尾链异头基表面活性剂对烟煤表面润湿性影响机理”(YKJCX2420703)。

参考文献

- [1] 周刚,尹文婧,冯博.综采工作面移架尘源粉尘-雾滴场分布特征模拟分析与工程应用[J].煤炭学报,2018,43(12):3425-3435.
- [2] Yuan, L., *et al.* (2020) Scientific Conception of Coal Mine Dust Control and Occupational Safety. *Journal of China Coal Society*, **45**, 1-7.
- [3] Li, D.W., Sui, J.J., Liu, G.Q. and Zhao, Z. (2019) Technical Status and Development Direction of Coal Mine Dust Hazard Prevention and Control Technology in China. *Mining Safety & Environmental Protection*, **46**, 1-7, 13.
- [4] Chen, Y., Xu, G., Huang, J., Eksteen, J., Liu, X. and Zhao, Z. (2019) Characterization of Coal Particles Wettability in Surfactant Solution by Using Four Laboratory Static Tests. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, **567**, 304-312. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2019.01.068>
- [5] Xu, G., Chen, Y., Eksteen, J. and Xu, J. (2018) Surfactant-Aided Coal Dust Suppression: A Review of Evaluation Methods and Influencing Factors. *Science of the Total Environment*, **639**, 1060-1076. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.05.182>
- [6] Guanhua, N., Qian, S., Meng, X., Hui, W., Yuhang, X., Weimin, C., *et al.* (2019) Effect of NaCl-SDS Compound Solution on the Wettability and Functional Groups of Coal. *Fuel*, **257**, Article ID: 116077. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116077>
- [7] Crawford, R.J. and Mainwaring, D.E. (2001) The Influence of Surfactant Adsorption on the Surface Characterisation of Australian Coals. *Fuel*, **80**, 313-320. [https://doi.org/10.1016/s0016-2361\(00\)00110-1](https://doi.org/10.1016/s0016-2361(00)00110-1)
- [8] Singh, B.P. (1999) The Role of Surfactant Adsorption in the Improved Dewatering of Fine Coal. *Fuel*, **78**, 501-506. [https://doi.org/10.1016/s0016-2361\(98\)00169-0](https://doi.org/10.1016/s0016-2361(98)00169-0)
- [9] Meng, J., Wang, L., Wang, J., Lyu, C., Zhang, S. and Nie, B. (2024) Molecular Mechanism of Influence of Alkyl Chain Length in Ionic Surfactant on the Wettability of Low Rank Coal. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, **680**, Article ID: 132661. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2023.132661>
- [10] Tessum, M. (2015) Effects of Spray Surfactant and Particle Charge on Respirable Dust Control. Ph.D. Thesis, University of Minnesota.
- [11] Singh, B.P. (1997) The Influence of Surface Phenomena on the Dewatering of Fine Clean Coal. *Filtration & Separation*, **34**, 159-163. [https://doi.org/10.1016/s0015-1882\(97\)84807-0](https://doi.org/10.1016/s0015-1882(97)84807-0)
- [12] Das, D., Dash, U., Meher, J. and Misra, P.K. (2013) Improving Stability of Concentrated Coal-Water Slurry Using Mixture of a Natural and Synthetic Surfactants. *Fuel Processing Technology*, **113**, 41-51. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2013.02.021>
- [13] Kilau, H.W. and Pahlman, J.E. (1987) Coal Wetting Ability of Surfactant Solutions and the Effect of Multivalent Anion Additions. *Colloids and Surfaces*, **26**, 217-242. [https://doi.org/10.1016/0166-6622\(87\)80118-x](https://doi.org/10.1016/0166-6622(87)80118-x)
- [14] Li, W., Zhang, Y., Wang, H., *et al.* (2023) Synergistic Effects of Anionic-Nonionic Surfactant Mixtures on Lignite Wettability: Enhanced Adsorption and Reduced Contact Angle. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, **667**, Article ID: 130415.
- [15] Nie, W., Niu, W., Bao, Q., *et al.* (2024) pH-Responsive Zwitterionic Surfactants for Dynamic Wetting Control in Acidic Coal Mine Environments. *Journal of Molecular Liquids*, **395**, Article ID: 123890.
- [16] Liao, X., Wang, B., Wang, L., Zhu, J., Chu, P., Zhu, Z., *et al.* (2021) Experimental Study on the Wettability of Coal with Different Metamorphism Treated by Surfactants for Coal Dust Control. *ACS Omega*, **6**, 21925-21938. <https://doi.org/10.1021/acsomega.1c02205>
- [17] Xu, C., Wang, D., Wang, H., Ma, L., Zhu, X., Zhu, Y., *et al.* (2019) Experimental Investigation of Coal Dust Wetting Ability of Anionic Surfactants with Different Structures. *Process Safety and Environmental Protection*, **121**, 69-76.

- <https://doi.org/10.1016/j.psep.2018.10.010>
- [18] Ma, Y., Wang, Y. and Zhang, Q. (2020) Experimental Study for Influence of Surfactants Chemical Microstructures on Wetting Effect about Coal Dust in Tongchuan Mining Area. *Journal of Chemistry*, **2020**, Article ID: 4176186. <https://doi.org/10.1155/2020/4176186>
- [19] Beneventi, D., Carre, B. and Gandini, A. (2001) Role of Surfactant Structure on Surface and Foaming Properties. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, **189**, 65-73. [https://doi.org/10.1016/s0927-7757\(01\)00602-1](https://doi.org/10.1016/s0927-7757(01)00602-1)
- [20] 唐胜男, 张安琪, 等. 绿色表面活性剂分类综述[J]. 中国化妆品, 2023(4): 104-108.
- [21] 表面活性剂、胶体与界面化学基础[J]. 分析化学, 2013(3): 405.
- [22] Rosen, M.J. and Kunjappu, J.T. (2012) *Surfactants and Interfacial Phenomena*. Wiley. <https://doi.org/10.1002/9781118228920>
- [23] Delgado, C., Merchán, M.D., Velázquez, M.M. and Anaya, J. (2006) Effect of Surfactant Structure on the Adsorption of Carboxybates at the Air-Water Interface. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, **280**, 17-22. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2005.12.058>
- [24] Xu, J., Zhang, Y., Chen, H., Wang, P., Xie, Z., Yao, Y., *et al.* (2013) Effect of Surfactant Headgroups on the Oil/Water Interface: An Interfacial Tension Measurement and Simulation Study. *Journal of Molecular Structure*, **1052**, 50-56. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2013.07.049>
- [25] Li, J., Zhou, F. and Liu, H. (2015) The Selection and Application of a Compound Wetting Agent to the Coal Seam Water Infusion for Dust Control. *International Journal of Coal Preparation and Utilization*, **36**, 192-206. <https://doi.org/10.1080/19392699.2015.1088529>
- [26] Hu, Y., Zhang, Q., Zhou, G., Wang, H., Bai, Y. and Liu, Y. (2021) Influence Mechanism of Surfactants on Wettability of Coal with Different Metamorphic Degrees Based on Infrared Spectrum Experiments. *ACS Omega*, **6**, 22248-22258. <https://doi.org/10.1021/acsomega.1c02954>
- [27] 盖志远, 张雷, 郝孟, 等. 聚氧乙烯醚型表面活性剂疏水链结构对低阶煤表面润湿性及可浮性的影响[J]. 煤炭转化, 2021, 44(4): 56-63.
- [28] Liu, Y. and Liu, S. (2017) Wettability Modification of Lignite by Adsorption of Alkyltrimethylammonium Bromides with Different Alkyl Chain Length. *Drying Technology*, **35**, 1619-1628. <https://doi.org/10.1080/07373937.2016.1265980>
- [29] Li, B., Guo, J., Liu, S., Albijanic, B., Zhang, L. and Sun, X. (2020) Molecular Insight into the Mechanism of Benzene Ring in Nonionic Surfactants on Low-Rank Coal Floatability. *Journal of Molecular Liquids*, **302**, Article ID: 112563. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.112563>
- [30] 张建国, 刘依婷, 王满, 等. 基于分子动力学模拟的非离子表面活性剂对煤润湿性影响机制[J]. 工程科学与技术, 2022, 54(5): 191-202.
- [31] Yuan, M., Nie, W., Zhou, W., Yan, J., Bao, Q., Guo, C., *et al.* (2020) Determining the Effect of the Non-Ionic Surfactant AEO9 on Lignite Adsorption and Wetting via Molecular Dynamics (MD) Simulation and Experiment Comparisons. *Fuel*, **278**, Article ID: 118339. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.118339>
- [32] Meng, J., Wang, L., Zhang, S., Lyu, Y. and Xia, J. (2021) Effect of Anionic/Nonionic Surfactants on the Wettability of Coal Surface. *Chemical Physics Letters*, **785**, Article ID: 139130. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2021.139130>
- [33] Meng, J., Yin, F., Li, S., *et al.* (2019) Effect of Different Concentrations of Surfactant on the Wettability of Coal by Molecular Dynamics Simulation. *International Journal of Mining Science and Technology*, **29**, 577-584.
- [34] Zhang, L., Li, B., Xia, Y. and Liu, S. (2017) Wettability Modification of Wender Lignite by Adsorption of Dodecyl Poly Ethoxylated Surfactants with Different Degree of Ethoxylation: A Molecular Dynamics Simulation Study. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, **76**, 106-117. <https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2017.06.028>
- [35] Guo, X., He, Y., Wang, J. and Zhou, R. (2022) Microscopic Adsorption Properties of Methyl Acrylate on Lignite Surface: Experiment and Molecular Simulation Study. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, **641**, Article ID: 128468. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2022.128468>
- [36] Li, W., Wang, H., Li, X., *et al.* (2021) Effect of Mixed Cationic/Anionic Surfactants on the Low-Rank Coal Wettability by an Experimental and Molecular Dynamics Simulation. *Fuel*, **289**, Article ID: 119886.
- [37] Bao, Q., Nie, W., Niu, W., Mwabaima, I.F., Tian, Q. and Li, R. (2023) Molecular Simulation and Wetting Study on the Mechanism and Capability of Hydrophilic Surfactants Used as Spray Dust Suppressants for Dust Reduction in Coal Mines. *Sustainable Chemistry and Pharmacy*, **36**, Article ID: 101253. <https://doi.org/10.1016/j.scp.2023.101253>
- [38] Gattinoni, C., Ewen, J.P. and Dini, D. (2018) Adsorption of Surfactants on α -Fe₂O₃(0001): A Density Functional Theory Study. *The Journal of Physical Chemistry C*, **122**, 20817-20826. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b05899>
- [39] Liu, H., Ge, S., Sun, L., Liu, S., Chen, X., Nian, J., *et al.* (2024) Study on the Effect of Spatial Adsorption Orientation

-
- on the Preferential Selection Mechanism of Dust Suppression Surfactants. *Journal of Molecular Liquids*, **414**, Article ID: 126134. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2024.126134>
- [40] 聂文, 牛文进, 鲍秋, 等. 基于 Dmol3 模块的不同表面活性剂对煤尘润湿性的影响[J]. 煤炭学报, 2023, 48(3): 1255-1266.
- [41] 刘硕, 葛少成, 王俊峰, 等. 基于量子化学分析表面活性剂对不同煤种润湿机理的影响[J]. 中国安全生产科学技术, 2021, 17(11): 105-111.
- [42] Jin, H., Zhang, Y., Dong, H., Zhang, Y., Sun, Y., Shi, J., *et al.* (2022) Molecular Dynamics Simulations and Experimental Study of the Effects of an Ionic Surfactant on the Wettability of Low-Rank Coal. *Fuel*, **320**, Article ID: 123951. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.123951>
- [43] 夏阳超. 褐煤表面吸水机理及润湿性调控的分子模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 太原: 太原理工大学, 2017.