

# C<sub>12</sub>H<sub>25</sub>-(HG) 亲水基团对无烟煤润湿影响的 试验和分子模拟

张江石<sup>1,2</sup>, 贾宏福<sup>1</sup>, 任晓锋<sup>3</sup>, 王亚南<sup>1</sup>, 张 琪<sup>1</sup>, 佟林全<sup>4</sup>, 王彦辉<sup>1</sup>

(1. 中国矿业大学(北京) 应急管理与安全工程学院, 北京 100083; 2. 中国矿业大学(北京) 煤炭精细勘探与智能开发全国重点实验室, 北京 100083; 3. 清华大学 安全科学学院, 北京 100084; 4. 国家卫生健康委粉尘危害工程防护重点实验室, 北京 102308)

**摘要:**表面活性剂被广泛应用于水基降尘技术, 其润湿煤尘的主控因子为亲水基团(HG)。为明确表面活性剂中HG对煤尘润湿性的影响, 通过宏观润湿性能测试、量子化学计算(DFT), 并结合分子模拟, 探究了十二烷基型表面活性剂(C<sub>12</sub>H<sub>25</sub>-[HG])常见亲水基团(SO<sub>4</sub><sup>-</sup>、PO<sub>4</sub>H、OH、COO<sup>-</sup>) 在无烟煤表面润湿差异及固-液界面调控机制。结果表明: 亲水基团对无烟煤的润湿效果排序为: SO<sub>4</sub><sup>-</sup> > COO<sup>-</sup> > PO<sub>4</sub>H > OH; HG吸附至无烟煤表面, 相对增加了疏水位点C—O质量分数, 易形成氢键, 有助于改善无烟煤润湿性; 无烟煤中大部分正负电势区域都小于水分子之间的正负电势极值是无烟煤润湿性差的内在原因, HG与水分子的极值差(ΔESP)与接触角呈线性负相关, 可作为评价表面活性剂润湿性能的参考指标; 表面活性剂溶液-煤微观润湿界面中, 根据径向分布函数(RDF)判断含不同HG的表面活性剂在无烟煤界面的吸附能力依次为: SO<sub>4</sub><sup>-</sup> > COO<sup>-</sup> > OH > PO<sub>4</sub>H; 相比于其他亲水基团, HG(SO<sub>4</sub><sup>-</sup>), 煤与水的相互作用能最大, 氢键数目最多, 水分子扩散系数提高了46.3%, 吸附量增加了27.43%; HG一方面与水分子具有较强的相互作用, 易形成强氢键, 另一方面其吸附于煤-水界面, 增强了水分子向煤表面的扩散系数, 导致水分子吸附量增大, 进而强化了煤尘润湿性; 筛选或设计降尘剂时, 可考虑引入强极性HG(SO<sub>4</sub><sup>-</sup>)以提高无烟煤润湿效率。研究结果为矿井粉尘治理中表面活性剂的应用提供理论依据和参考。

**关键词:**无烟煤; 润湿性; 表面活性剂; 亲水基团; 分子模拟

中图分类号: TD849.2 文献标志码: A 文章编号: 0253-9993(2025)04-2175-13

## Effect of C<sub>12</sub>H<sub>25</sub>-(HG) hydrophilic group on the wetting of anthracite: Experimental and molecular simulation

ZHANG Jiangshi<sup>1,2</sup>, JIA Hongfu<sup>1</sup>, REN Xiaofeng<sup>3</sup>, WANG Yanan<sup>1</sup>, ZHANG Qi<sup>1</sup>, TONG Linquan<sup>4</sup>, WANG Yanhui<sup>1</sup>

(1. School of Emergency Management and Safety Engineering, China University of Mining & Technology-Beijing, Beijing 100083, China; 2. State Key Laboratory for Fine Exploration and Intelligent Development of Coal Resources, China University of Mining & Technology-Beijing, Beijing 100083, China; 3. School of Safety Science, Tsinghua University, Beijing 100084, China; 4. NHC Key Laboratory for Engineering Control of Dust Hazard, Beijing 102308, China)

**Abstract:** Surfactants are widely used in water-based dust suppression technology, with the main controlling factor for wetting coal dust being hydrophilic groups (HG). To clarify the impact of HG in surfactants on the wettability of coal dust, macroscopic wettability performance tests, quantum chemical calculations (DFT), and molecular simulations were used to

收稿日期: 2024-05-28 策划编辑: 王晓珍 责任编辑: 陈思成 DOI: 10.13225/j.cnki.jccs.2023.0590

基金项目: 国家卫健委粉尘危害工程防护重点实验室资助项目 (KLECDH20220101)

作者简介: 张江石 (1973—), 男, 河南三门峡人, 教授, 博士生导师, 博士。E-mail: zjsh0426@163.com

通讯作者: 贾宏福 (1995—), 男, 山西朔州人, 博士研究生。E-mail: hongfuj001@126.com

引用格式: 张江石, 贾宏福, 任晓锋, 等. C<sub>12</sub>H<sub>25</sub>-(HG) 亲水基团对无烟煤润湿影响的试验和分子模拟[J]. 煤炭学报, 2025, 50(4): 2175-2187.

ZHANG Jiangshi, JIA Hongfu, REN Xiaofeng, et al. Effect of C<sub>12</sub>H<sub>25</sub>-(HG) hydrophilic group on the wetting of anthracite: Experimental and molecular simulation[J]. Journal of China Coal Society, 2025, 50(4): 2175-2187.



移动阅读

investigate the wettability differences and solid-liquid interface regulation mechanisms of common hydrophilic groups ( $\text{SO}_4^-$ ,  $\text{PO}_4\text{H}$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{COO}^-$ ) in dodecyl surfactants ( $\text{C}_{12}\text{H}_{25}$ -[HG]) on anthracite surfaces. The results show that the wettability effect of hydrophilic groups on anthracite is ranked as follows:  $\text{SO}_4^- > \text{COO}^- > \text{PO}_4\text{H} > \text{OH}$ ; The adsorption of HG on the anthracite surface relatively increases the content of hydrophobic sites (C—O), which easily forms hydrogen bonds and helps improve the wettability of anthracite. The intrinsic reason for the poor wettability of anthracite is that most of the positive and negative potential regions in anthracite are smaller than the positive and negative potential extremes between water molecules. The difference in extreme values between HG and water molecules ( $\Delta ESP$ ) is linearly negatively correlated with the contact angle, which can serve as a reference index for evaluating the wettability performance of surfactants. In the micro-wetting interface of the surfactant solution-coal, the adsorption capacity of surfactants containing different HGs on the anthracite interface, as judged by the radial distribution function (RDF), is in the order:  $\text{SO}_4^- > \text{COO}^- > \text{OH} > \text{PO}_4\text{H}$ . Compared to other hydrophilic groups, HG ( $\text{SO}_4^-$ ) has the greatest interaction energy between coal and water, the highest number of hydrogen bonds, an increase in the diffusion coefficient of water molecules by 46.3%, and an adsorption increase of 27.43%. HG not only has a strong interaction with water molecules, easily forming strong hydrogen bonds, but also, when adsorbed at the coal-water interface, enhances the diffusion coefficient of water molecules towards the coal surface, leading to an increase in water molecule adsorption, thereby enhancing the wettability of coal dust. When selecting or designing dust suppressants, introducing strongly polar HG ( $\text{SO}_4^-$ ) can be considered to improve the wettability of anthracite. The research results provide theoretical basis and reference for the application of surfactants in mine dust control.

**Key words:** anthracite; wettability; surfactant; hydrophilic group; molecular simulation

## 0 引 言

水基降尘技术是矿井粉尘治理领域的基础<sup>[1-3]</sup>。随着煤的变质程度增加,亲水基团减少,芳香苯环疏水结构增加,致使纯水润湿煤尘困难<sup>[4]</sup>,严重制约煤层注水、喷雾降尘等治理技术现场应用的效果。在纯水中加入表面活性剂,能够改善煤-水界面的润湿性<sup>[5-7]</sup>。因此,探究表面活性剂与煤的润湿机制对提升粉尘治理效果具有重要意义。在宏观润湿测试方面,目前通常采用宏观试验(如:接触角、表面张力、沉降和喷雾降尘试验等)去表征表面活性剂增强煤尘润湿的性能。韩方伟等<sup>[8]</sup>考虑喷雾水滴具有动能的情况,提出动态润湿指标:无量纲润湿长度和润湿面积,丰富了喷雾润湿煤尘的评价指标。关于表面活性剂增效煤尘润湿影响机理方面,主要聚焦于煤表面亲疏水官能团、煤组分及表面活性剂结构等。程卫民等<sup>[9]</sup>、周刚等<sup>[10]</sup>研究发现煤的疏水结构主要是芳香碳和脂肪碳,羧基、酚或醚等含氧结构有利于煤尘润湿。林清侠等<sup>[11]</sup>利用<sup>13</sup>C-NMR和FTIR试验,对煤和表面活性剂结构参数进行拟合,建立了接触角与煤微观分子结构的定量关系方程,证明煤尘润湿性主要由煤和表面活性剂的微观结构及理化性质决定。分子模拟和量子化学计算方法逐步成为从微观分子和电子层面认识表面活性剂与煤尘界面润湿的规律的重要手段。JI等<sup>[12]</sup>、CHEN等<sup>[13]</sup>构建了水-咪唑型离子表面活性剂-褐煤

界面模型,通过分析煤-水界面中氢键数、界面厚度等微观参数,揭示了界面各组分间的相互作用。聂文等<sup>[14]</sup>基于分子静电势和前线轨道理论,分析了煤和表面活性剂分子的润湿作用位点及难易程度。已有研究更多聚焦于低变质程度煤润湿特性,而无烟煤作为变质程度最高的煤种,预测全国储量占10%,2023年预计产量为6.57亿t/a<sup>[15]</sup>,因此针对无烟煤润湿性的研究具有重要意义。不论是单一型,还是复配型、接枝共聚型表面活性剂<sup>[16-19]</sup>,都含有基础亲水基团(HG)调控煤尘润湿性。然而关于HG对煤-水界面润湿差异及调控机制鲜有报道。十二烷基型表面活性剂( $\text{C}_{12}\text{H}_{25}$ -[HG])是喷雾降尘中常用的表面活性剂,因此明确该类表面活性剂中不同HG的润湿差异对筛选和应用降尘剂具有重要的科学意义和实用价值。

基于此,笔者通过宏观润湿性能测试、量子化学计算(DFT),并结合分子模拟,探究了十二烷基型表面活性剂( $\text{C}_{12}\text{H}_{25}$ -[HG])常见亲水基团( $\text{SO}_4^-$ 、 $\text{PO}_4\text{H}$ 、 $\text{OH}$ 、 $\text{COO}^-$ )在无烟煤表面润湿差异及固-液界面调控机制。宏观层面,通过接触角和沉降测试,评价含不同HG的表面活性剂润湿性能;利用XPS试验表征了HG对无烟煤表面元素质量分数的影响,得到吸附能力最佳的亲水基团。微观层面,首先基于密度泛函理论,分析了无烟煤、水、表面活性剂分子表面静电势分布特征,并将量子化学计算结果与接触角关联;其次基于表面活性剂溶液-煤微观界面模型,分析体系

中各组间相互作用能、水分子扩散系数、径向分布函数等微观特征参数;最后提取界面润湿界面模型,分析含表面活性剂的煤体系吸附水分子量,验证HG对润湿调控作用,并揭示亲水基团在固-液界面润湿调控机理。研究结果为高效筛选应用于矿井粉尘治理的表面活性剂提供理论依据和应用参考。

## 1 试验材料和润湿测试

### 1.1 煤样选取与制备

试验选用山西晋城南阳煤矿3采区掘进工作面新鲜无烟煤。首先将煤样用破碎机粉碎,筛取0.074~0.2 mm,进行工业分析和镜质组反射率测试,测试结果见表1。随后筛取0.053~0.075 mm粒径煤粉,将煤样进行HCl—HF—HCl酸洗脱矿物质处理,并在过量蒸馏水中洗涤直至滤液pH值呈中性,随后在恒温60℃干燥箱烘干8 h,并在马弗炉中干燥12 h,密封保存作为试验煤样。

表1 煤样工业分析与镜质组反射率测试结果

Table 1 Results of industrial analysis and vitrinite reflectance test of coal samples

编号	工业分析			R <sub>o,max</sub> /%	孔隙率φ/%
	M <sub>ad</sub> /%	A <sub>ad</sub> /%	V <sub>daf</sub> /%		
NY	2.18	17.97	6.56	3.10	8.92

### 1.2 表面活性剂试剂选取与溶液制备

不同表面活性剂的分子结构,会导致其作用于煤

尘表面的固-液界面构型出现差异,按照其分子结构可以将其分为亲水头基(HG)和疏水尾链(R)2部分<sup>[20]</sup>。常见的表面活性剂亲水基团主要有硫酸基、羧酸基、磺酸基、磷酸酯基、季铵盐基、羟基等,根据表面活性剂带电性不同将其分为阴离子型、阳离子型、两性型和非离子型表面活性剂。已有研究表明,阳离子活性剂对煤尘的润湿能力较差,其在煤表面的接触角大于其他类型活性剂<sup>[21-23]</sup>,此外部分阳离子活性剂应用于压裂液、矿物浮选等工程现场,其主要发挥疏水作用<sup>[24-25]</sup>,高质量浓度下才表现为亲水性,其作为润湿剂成本高且效果差。因此,笔者选择4种相同疏水尾链条件下,含不同基础亲水基团的活性剂,具体试剂选择见表2。

笔者分别制备了不同质量浓度表面活性剂溶液,分别为:0.005%、0.05%、0.1%、0.2%、0.3%、0.4%、0.5%。为减少称重带来的误差,保证配制溶液质量浓度的准确性,采用稀释法首先制备0.5%溶液,随后逐步稀释至目标质量浓度。具体配制步骤如下:①采用精密天平称取5 g表面活性剂;②在含表面活性剂的烧杯中加入700 mL纯水,并用玻璃棒进行搅拌至溶解;③将溶解好的溶液转移到1 000 mL的容量瓶中,确保将烧杯中的溶液完全转移。然后加入纯水至容量瓶的刻度线,使溶液总体积达到1 000 mL,充分摇匀,此时溶液的质量浓度为0.5%;④量取200 mL 0.5%溶液至烧杯并加入800 mL纯水,搅拌后转移至1 000 mL容量瓶,得到0.1%溶液;⑤采用③、④的操作方法,逐步得到低质量浓度表面活性剂溶液。

表2 表面活性剂类型及结构式

Table 2 Type of surfactant and structural type

试剂类型	试剂名称	简称	亲水基团	分子结构式(R:C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> )
阴离子	十二烷基硫酸铵	ALSA	硫酸基	
非离子	十二烷基磷酸酯	MNDP	磷酸酯基	
非离子	十二烷基葡萄糖苷	APG-12	羟基	
两性	十二烷基二甲基甜菜碱	BS-12	羧酸基	

### 1.3 润湿性能测试

采用KINO SL200KS型接触角测量仪,测试在含不同亲水基团的表面活性剂溶液在NY无烟煤表面的铺展润湿特性,如图1所示。测试前,将1.1节制备的试验煤样,称取0.5 g样品放入模具,用台式压片机

在20 MPa下压制5 min,将煤粉压成饼状。然后测量了它们与表面活性剂溶液和纯水的接触角,接触角结果是每组重复测试3次的均值。

采用《矿用降尘剂性能测定方法》(MT/T506-1996)测定表面活性剂对粉尘的润湿性能。考虑到煤

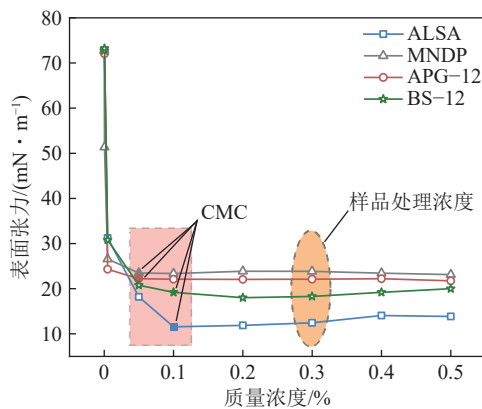


图1 表面活性剂 CMC 测试结果

Fig.1 The surfactant CMC test results

粉与溶液的接触面积和冲击力会影响沉降测试准确度。因此在煤粉与溶液接触前,将 0.5 g 煤粉均匀倒在圆形定性滤纸上,随后将滤纸放在圆形铁环上进行沉降测试,记录煤粉完全浸入溶液中所需润湿时间。注意当定性滤纸开始沉降的时间即为煤粉接触溶液的起始时间。

#### 1.4 XPS 测试

煤表面亲水官能团(羟基、羧基、醚、酮、醛、含氮基团等)对润湿性的调控具有重要作用<sup>[26]</sup>。无烟煤中芳环结构缩聚程度较高,脂肪结构侧链短且分支度小,氮、氧元素较少,故亲水性差。通过分析无烟煤吸附表面活性剂后,表面元素和 C 结构质量分数的影响,得到吸附能力最佳的亲水基团。试验步骤为:①将煤样分别用上述 4 种质量浓度为 0.3% 的表面活性剂溶液和纯水浸泡,并用磁力搅拌器磁力充分混合 12 h,转速设置为 2 000 r;②将其在离心机中处理,将得到底物在滤纸上用去离子水冲洗,去除样品多余表面活性剂;③在烘箱中烘干 12 h,并在马弗炉中冷却待测;④最后采用 Thermo Fisher Scientific 公司 XPS 光谱仪分析含不同亲水官能团表面活性剂处理后的无烟煤表面 C、O、N 元素和 C 结构变化。样品选用了 400  $\mu\text{m}$  的束斑,全谱扫描的能量范围为 160 eV,扫描步长为 1 eV。随后,使用 Avantage 软件对测试结果进行 C 1s 峰的拟合处理。

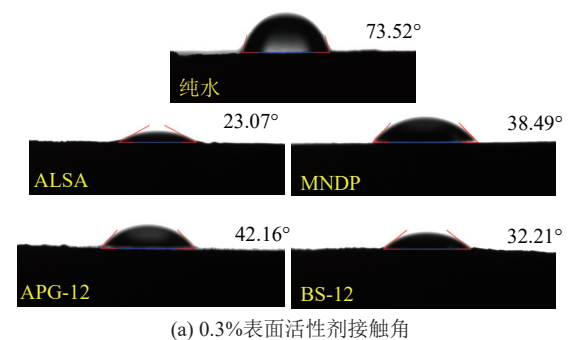
## 2 试验结果与分析

### 2.1 润湿性能测试结果

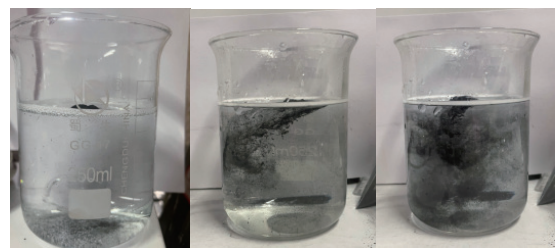
临界胶束浓度(CMC)是评价表面活性剂性质的重要指标,当表面活性质量浓度 < CMC 时:表面活性剂分子主要存在于溶液的气-水界面上,随着质量浓度增大表面张力逐渐降低。当  $\geq$  CMC 时:表面活性剂分子不仅会继续聚集在界面上,还会在溶液中形成

胶束,当增加溶液质量浓度后表面张力基本不在变化。在前期研究中上述表面活性剂表面张力测试结果如图 1 所示。表面活性剂 ALSA、和 BS-12 的 CMC 为 0.1%,表面活性剂 MNDP 和 APG-12 的 CMC 为 0.05%。故为排除表面活性剂质量浓度对润湿性的影响,因此在接触角、沉降试验测试中选取溶液质量浓度为 0.3%(> CMC)。

表面活性剂在无烟煤表面接触角测试结果如图 2 所示,相对于纯水,不同 HG 润湿性能排序为: ALSA > BS-12 > MNDP > APG-12,其中含  $\text{SO}_4^-$  基团的 ALSA 接触角降低了 68.62%。



(a) 0.3% 表面活性剂接触角



(b) 无烟煤沉降过程

图 2 0.3% 表面活性剂接触角和煤尘沉降过程

Fig.2 0.3% Surfactant contact angle and coal dust deposition process

接触角结果和沉降时间与质量浓度的关系如图 3 所示,ALSA 和 MNDP 的接触角在 0.1% 后基本保持稳定不变,APG-12 和 BS-12 的接触角在 0.3% 后基本维持稳定。但当各表面活性剂接触角稳定后,随着质量浓度增大,无烟煤沉降时间仍然减小,其中 ALSA 和 MNDP 最为明显,沉降时间分别降低 50.27%、51.42%。这是由于随着表面活性剂质量浓度增大,更多的表面活性剂吸附于煤表面,煤尘沉降时间进一步减小,当表面活性剂在煤-水界面吸附饱和后,沉降时间保持不变。因此,单纯通过接触角不能全面表征表面活性剂的润湿性能,需考虑表面活性剂在煤-水界面的构型和吸附能力等因素。

### 2.2 XPS 测试结果

各样品 XPS 测试能谱图如图 4 所示。无烟煤表面 C、N、O 元素的质量分数,见表 3,其中忽略微量元

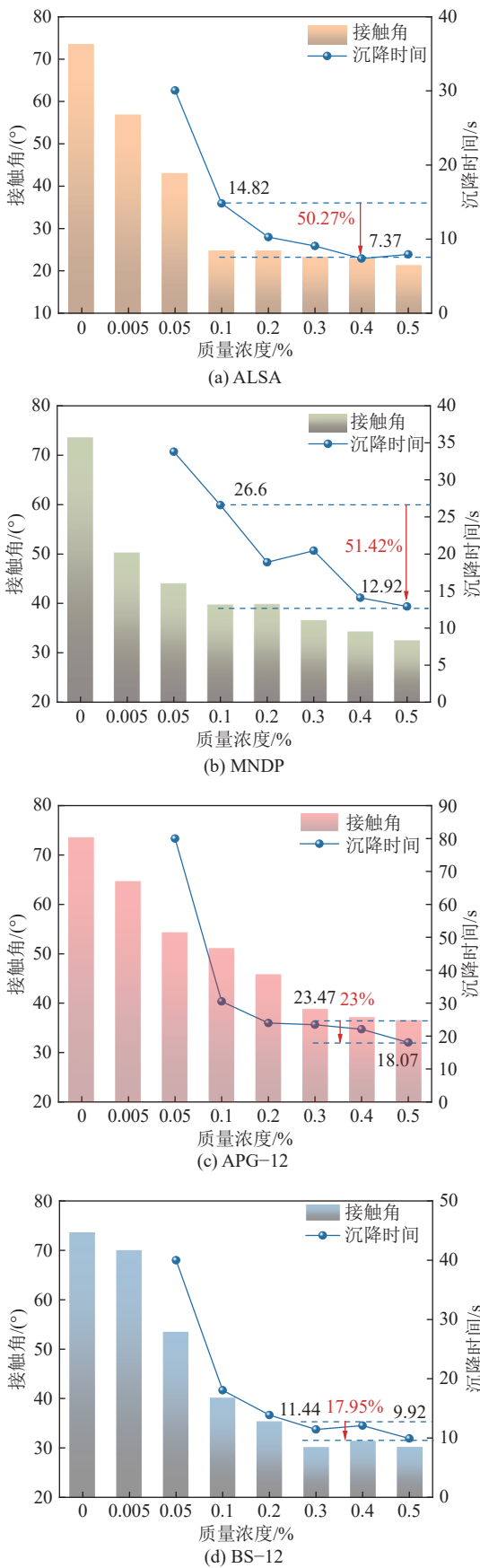


图 3 表面活性剂接触角和煤尘沉降时间与质量浓度的关系  
Fig.3 Relationship between surfactant contact angle and coal dust settling time with concentration

素的影响,将数据进行归一化处理。以纯水处理煤样作为对照组,整体上经表面活性剂处理无烟煤 C 元素质量分数降低,N 元素质量分数基本不变,氧元质量分数素增加。O/C 元素质量分数比依次为: ALSA > APG-12 > BS-12 > MNDP。其中,ALSA 处理无烟煤后,O/C 元素质量分数增加最大,为 5.98%。

表 3 无烟煤表面元素占比

Table 3 Proportion of elements on anthracite surface

元素质量分数/%	纯水	ALSA	MNDP	APG-12	BS-12
C	91.05	86.75	91.13	89.17	90.32
N	1.54	1.22	1.20	1.18	1.53
O	7.41	12.20	7.69	8.49	8.15
O/C	8.14	14.12	8.44	9.52	9.02

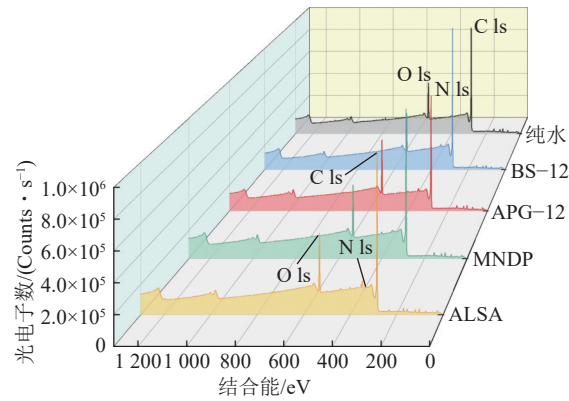


图 4 各样品 XPS 能谱图

Fig.4 XPS energy spectrum of each sample

经过表面活性剂处理后,无烟煤表面 C 1s 拟合结果如图 5 所示。将 C—C—O—C=O 单峰进行积分,纯水和表面活性剂处理后无烟煤表面 C 结构质量分数百分比如图 6 所示。结果表明:经过清水处理的无烟煤中,C—C 质量分数占 83.55%,C—O 占 10.94%,C=O 仅占 5.51%,无烟煤芳香化结构占主体。经过 4 种表面活性剂处理后,煤样中 C—C 质量分数减少,C—O 质量分数增多,C=O 质量分数波动不大。导致煤样表面 C—O 质量分数变化的主要原因为表面活性剂在无烟煤表面的吸附能力。表面活性剂以 HG 朝外,R 靠近煤的吸附构型在无烟煤表面进行吸附。表面活性剂的 HG 变相取代了无烟煤表面的疏水芳香烃,由于 HG 含有大量 O,增加了无烟煤疏水位点上 C—O 质量分数。因此,亲水基团在煤表面的吸附能力也会影响对无烟煤疏水性改善的程度。4 种表面活性剂处理后的煤样中 C—O 含量变化由大到小顺序为: ALSA > APG-12 > BS-12 > MNDP。表面活性剂筛选或设计过程中,可考虑引入 HG(SO<sub>4</sub><sup>-</sup>),能够有效增

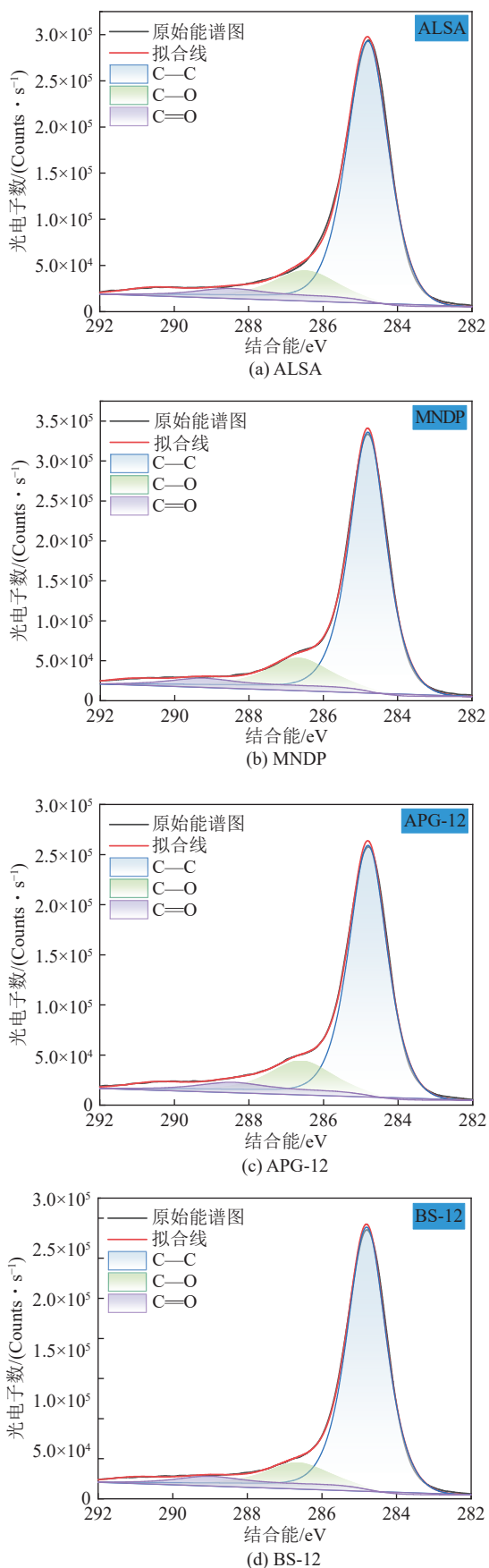


图 5 无烟煤表面元素 C 1s 拟合结果

Fig.5 The fitting results of the C 1s element on the surface of anthracite coal

加无烟煤疏水位点的 C—O 含量,易形成氢键,进而提高润湿效果。接触角和沉降试验也验证了含 SO<sub>4</sub> 亲水基团的优势。

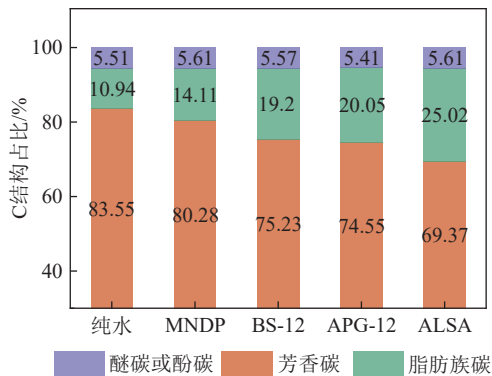


图 6 C 结构质量分数占比

Fig.6 C structure content percentage

### 3 表面活性剂亲水基团对无烟煤润湿性模拟

#### 3.1 表面活性剂和无烟煤静电势与润湿性相关性分析

基于量子化学密度泛函理论 (DFT), ESP 分析对预测分子间相互作用的位点具有重要作用。将 ChemDraw 软件绘制的分子结构导入 GaussView 软件中,选择结构优化任务对 5 种表面活性剂、无烟煤分子和水分子进行结构优化,在方法中选择 Ground State/DFT,在保证计算精度下选择杂化泛函和基组为 B3LYP/6-311G(d)。通过循环求解 Kohn-Sham 方程得到轨道与电子密度自洽收敛。结构优化后得到分子能量最低构型即稳定构型,为 ESP 计算作铺垫。随后计算各分子单点能,基组选择与结构优化过程一致,计算得到包含 ESP 分布数据的 fch 文件,将计算结果经过 Multiwfn 波函数分析程序和 VMD 软件可视化处理。最终得到无烟煤分子和水分子表面静电势分布和极值点 (图 7)。图中蓝色表示负电势位置,红色表示正电势位置,静电势极值点反应了分子间相互作用的位点。无烟煤静电势分布在 -45~51 kcal/mol 之间,负电势位置主要集中在芳香苯环、羰基和脂肪烷基链中的羟基,负电势极值为 -43.76 kcal/mol,正电势位置主要集中于烷基链和吡啶型 N 附近,正电势极值为 +50.72 kcal/mol。除部分极值点区域,无烟煤中大部分正负电势区域都小于水分子之间的正负电势极值 (+42.89 kcal/mol, -41.98 kcal/mol),导致无烟煤分子与水分子的相互作用较弱,这是无烟煤润湿性差的内在原因。

图 8 为表面活性剂的静电势分布和极值点。结果表明:所有表面活性剂的静电势极值点均分布在亲

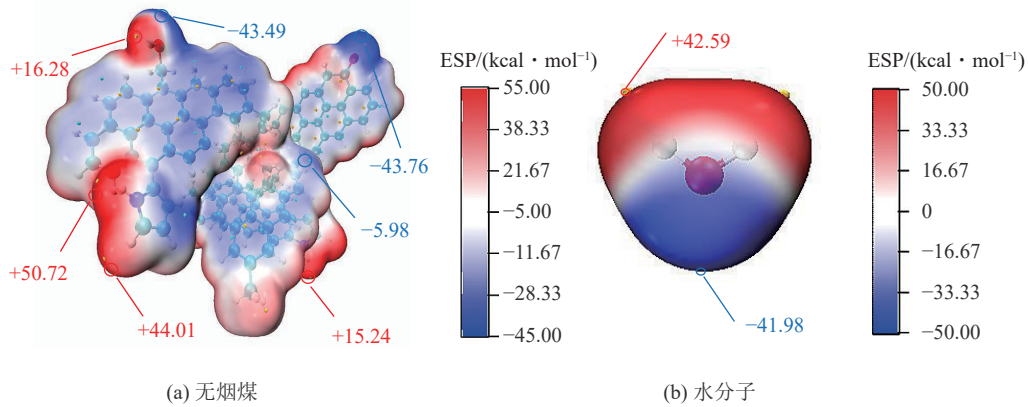


图 7 无烟煤和水静电势分布及极值点

Fig.7 Distribution and extreme value of electrostatic potential of anthracite and water

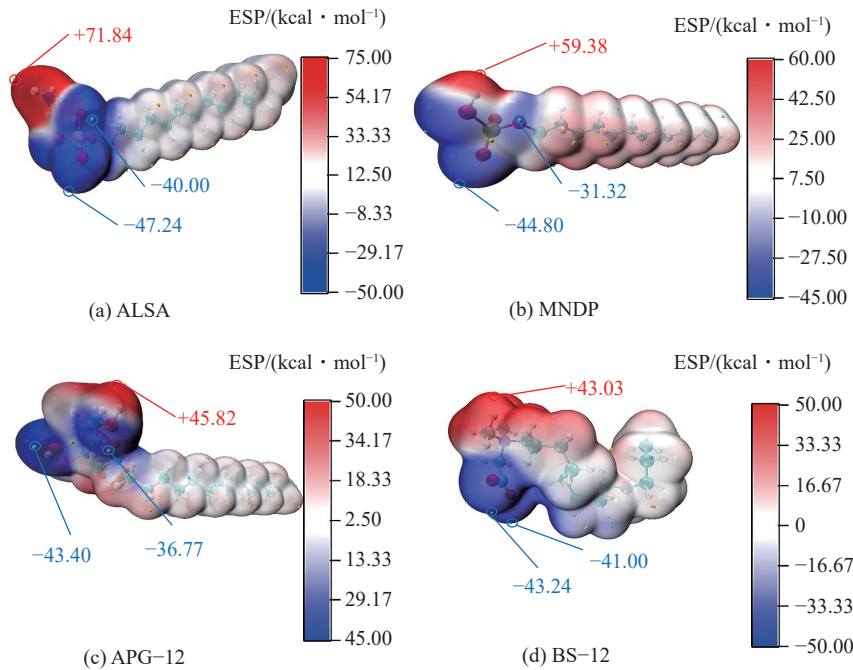


图 8 表面活性剂静电势分布及极值点

Fig.8 The distribution and extreme value of surfactant potential

水基团附近, 烷基尾链 (R) 基本呈电中性, 亲水基团决定表面活性剂的静电势分布, 同时也是发生静电相互作用的位点。进一步地, 将表面活性亲水基团中的 O、N 原子附近的静电势极值点与水分子的极值点作差, 定义为  $\Delta ESP_1$ , 将水分子的  $\Delta ESP_2$  为水分子中的 O 原子与另一个水分子 H 原子附近的静电势极值差, 定义为  $\Delta ESP_2$ , 见表 4。结果表明: 亲水基团附近的静电势极值与水分子的极值差 ( $\Delta ESP_1$ ) 明显大于水分子之间的极值差 ( $\Delta ESP_2$ ), 其中  $\Delta ESP_1(\text{SO}_4^--\text{H})$  最大。亲水基团对水的静电相互作用要强于水分子之间, 正是由于  $\Delta ESP$  的差异, 表面活性剂加入纯水体系后, 减少了纯水体系中水分子间形成的缔合氢键, 使体系中水分子更加分散, 表面张力降低, 更容易在煤表面铺展, 这也是表面活性剂提高无烟煤润湿的原因。剖析表面

活性剂结构静电势, 揭示各自所含 HG 与水分子的相互作用强弱差异, 证明表面活性剂选择过程中, HG 是润湿性能考察的关键。

表 4 亲水基团和水的静电势极值差 ( $\Delta ESP$ )

Table 4 electrostatic potential extremum difference between hydrophilic groups and water( $\Delta ESP$ )

$\Delta ESP$	$\Delta ESP_2$		$\Delta ESP_1$		
	$\text{O}_{\text{水}1}-\text{H}_{\text{水}2}$	$\text{O}_{\text{SO}_4}-\text{H}_{\text{水}}$	$\text{O}_{\text{PO}_4\text{H}}-\text{H}_{\text{水}}$	$\text{O}_{\text{OH}}-\text{H}_{\text{水}}$	$\text{O}_{\text{COO}}-\text{H}_{\text{水}}$
kcal/mol	84.57	89.83	87.39	85.99	87.83

将 HG 与水分子的  $\Delta ESP$  与接触角测试结果进行相关性分析, 如图 9 所示。结果表明:  $\Delta ESP$  与接触角呈线性负相关, 即表面活性剂亲水基团的极性越大,

与水分子的相互作用越强,对提升煤尘的润湿性能越好, $\Delta ESP$ 可作为评价表面活性剂润湿性能的参考指标。

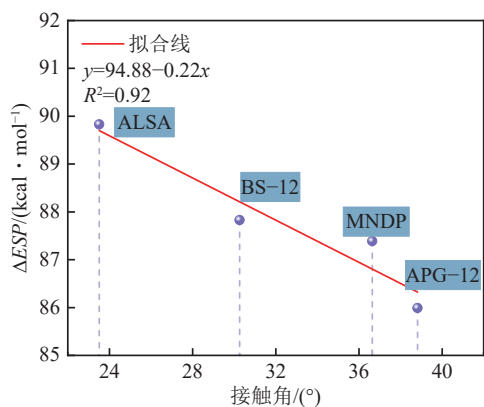


图9  $\Delta ESP$ 与接触角相关性分析

Fig.9 Correlation analysis between  $\Delta ESP$  and contact angle

### 3.2 亲水基团对无烟煤润湿特性分子动力学模拟

#### 3.2.1 表面活性剂溶液-无烟煤体系构建

利用 Materials Studio 8.0 软件,构建了表面活性剂溶液-无烟煤体系模型。具体构建过程为:首先,利用 Amorphous Cell 模块构建包含 5 个表面活性剂和 1 000

个水分子的表面活性剂溶液盒子,并在 Forcite 模块 Geometry Optimization 任务 NVT 系综下结构优化,优化后如图 10c 所示;其次,采用前人构建的无烟煤平均结构单元分子模型(图 10d)<sup>[27]</sup>,平均分子式为  $C_{30}H_{22}O_{0.5}$ ,构建含 20 个无烟煤分子的盒子;最后将构建的表面活性剂溶液盒子和优化后的煤盒子通过 Build layer 工具构建表面活性剂溶液/纯水-无烟煤体系(图 10f),考虑周期性边界的影响,设置 5 nm 真空层。按照上述步骤可分别构建 4 个表面活性剂溶液-无烟煤体系。为了让构建的无烟煤更符合真实煤样,在 Forcite 模块中对煤盒子如下优化:①在 Geometry Optimization 任务 NVT 系综下,优化 5 000 步;②在 Anneal 任务 NVT 和 NPT 系综下各循环退火 5 圈,温度范围为 300~500 K;③在 Dynamic 任务 NVT 系综下进行动力学弛豫,其中温度设置为 298 K,步长为 1 fs,总模拟时长为 200 ps。煤盒子模型优化后(图 10e)芳环缩聚程度高,含有少量羟基、吡啶型 N 结构,反映了无烟煤的特征。并利用 Connolly 表面计算工具分析了优化后的煤盒子孔隙率,为 9.24%,与工业分析测试结果接近,保证模型的可靠性。

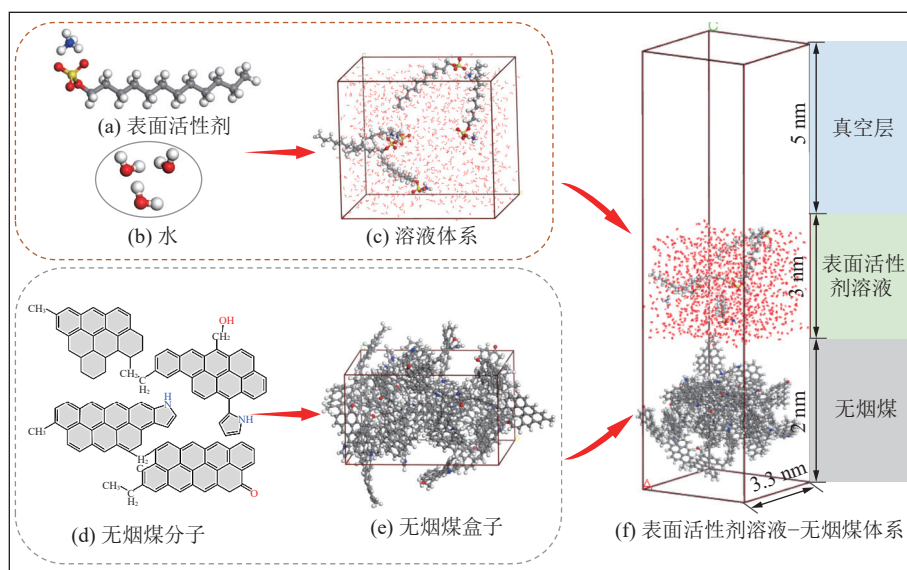


图 10 表面活性剂溶液-无烟煤界面模型构建

Fig.10 Construction of Surfactant solution-anthracite interface model

#### 3.2.2 体系动力学平衡构型

将构建的体系模型利用 Forcite 模块中的 Dynamic 任务,在 COMPASS II 力场下进行动力学仿真模拟。其中系综选择 NVT 系综,温度设置为 298 K,控制选择 Nose 控温器。静电相互作用计算方法采用 Ewald,范德华相互作用采用 Atom based,模拟的总时间为 1 ns,时间步长为 1 fs。表面活性剂-无烟煤体系界面

分子动力学模拟平衡构型如图 11 所示。所有平衡构型中水分子均向煤表面铺展,表面活性剂分别处于气-液界面和固-液界面。在气-液界面,表面活性剂的 R 端朝向气界面, HG 端朝向水界面;在煤-水界面,表面活性剂的 R 端朝向无烟煤表面, HG 端朝向水界面,但其吸附到煤表面的数量不同,表明无烟煤对含不同亲水基团的表面活性剂的吸附能力有差异。

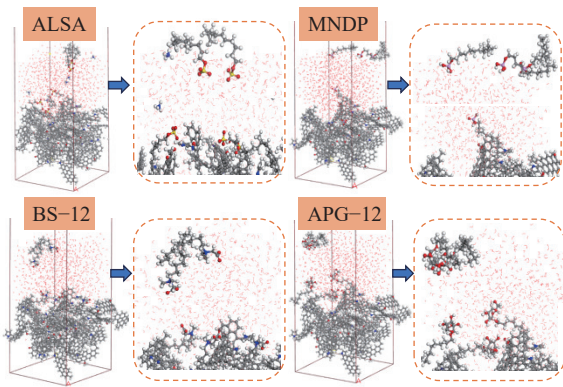


图 11 表面活性剂-无烟煤体系分子动力学模拟平衡构型

Fig.11 The equilibrium configuration of surfactant-anthracite  
Molecular dynamics is simulated

### 3.2.3 界面相互作用

为揭示 HG 对无烟煤的润湿调控机制,分析了界面体系中煤与水的相互作用。相互作用能越大,代表分子间吸附后放出的热量越多,体系构型稳定性越好,越有利于润湿<sup>[28]</sup>。体系中煤与水的总相互作用能  $E_{\text{int}}$  可由式 (1) 计算:

$$E_{\text{int}} = \frac{E_{\text{T}} - E_{\text{W}} - E_{\text{CF}} - E_{\text{C}} - E_{\text{FW}} + E_{\text{F}}}{2} \quad (1)$$

式中:  $E_{\text{T}}$  表示界面体系的总能量, J;  $E_{\text{C}}$  表示无烟煤的能量, J;  $E_{\text{W}}$  表示体系中水分子的能量, J;  $E_{\text{F}}$  表示表面活性剂的能量, J;  $E_{\text{CF}}$  表示煤和表面活性剂的能量总和, J;  $E_{\text{FW}}$  表示表面活性剂和水的能量总和, J; 静电相互作用和范德华相互作用计算公式与式 (1) 类似,代入对应的值即可。

体系中煤与水的相互作用能统计见表 5。可以发现模拟体系中煤和水之间相互作用能量均为负值,表明煤吸附水润湿煤是自发吸附的过程。表面活性剂的体系总相互作用能明显大于纯水体系,体系中引入硫酸基、羧酸基后,明显增强了煤与水的相互作用,有利于提高无烟煤润湿性。总相互作用能从大到小依次为:  $\text{SO}_4^- > \text{COO}^- > \text{PO}_4\text{H} > \text{OH}$ , 其中静电相互作用差异较为明显,这可能是 HG 附近静电势强弱存在差异,导致与无烟煤表面的发生静电相互作用大小不同。

表 5 无烟煤与水的相互作用

Table 5 Interaction between anthracite and water

体系	总相互作用能/ (kcal · mol <sup>-1</sup> )	静电相互作用/ (kcal · mol <sup>-1</sup> )	范德华相互作用/ (kcal · mol <sup>-1</sup> )
水	-309.73	-49.81	-257.92
ALSA	-344.27	-176.28	-159.24
MNDP	-332.06	-165.96	-157.52
APG-12	-325.55	-168.00	-149.56
BS-12	-335.53	-173.80	-153.03

界面中氢键也是水对无烟煤润湿不可忽视的相互作用。氢键个数越多,对煤润湿性越好;氢键键角和键长也表征着氢键的强弱。为此统计了 4 个体系中煤与水形成的氢键数量、氢键键长和键角,如图 12 所示。结果表明:含 ALSA 体系中,氢键个数最多、键角最大;而含 APG-12 体系中由于其亲水基团所含氧原子最多故形成的氢键个数次之。在体系中加入表面活性剂后,一方面 HG 可与水分子形成氢键,另一方面由于 HG 对水分子的吸引,导致更多的水分子靠近无烟煤,有利于煤与水形成氢键。

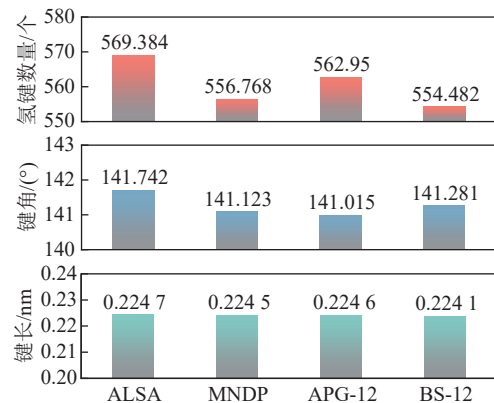


图 12 氢键分析结果

Fig.12 Results of hydrogen bond analysis

### 3.2.4 径向分布函数分析

为进一步探究亲水基团对水和无烟煤润湿的差异,分析了以亲水基团原子为中心,距中心原子不同距离下水分子中氧原子的空间概率分布,用径向分布函数来表示,见式 (2)。 $g(r)$  可表征原子间的相互作用强度和聚集有序度<sup>[29]</sup>。

$$g(r) = \frac{1}{4\pi\rho_B r^2} \frac{dN_{A-B}}{dr} \quad (2)$$

式中:  $\rho_B$  表示 B 粒子的密度;  $r$  表示粒子 B 到 A 的距离,截断半径取 1 nm;  $dN_{A-B}$  表示以 A 粒子为中心粒子,粒子 A 从  $r$  到  $r+dr$  范围内粒子 B 的平均数量。

同时,为进一步表征亲水基团与水分子的相互作用强度,结合式 (2)—式 (3) 计算亲水原子与水中氧原子的配位数 ( $C_N$ )。

$$C_N(r) = \int \frac{g(r)N_B 4\pi r^2 dr}{V} \quad (3)$$

式中:  $N_B$  表示 A 原子周围 B 原子总数;  $V$  表示周期性体系模型的体系,  $10^{-3} \text{ nm}^3$ 。

亲水基团 ( $\text{SO}_4^-$ 、 $\text{COO}^-$ 、 $\text{PO}_4\text{H}$ 、 $\text{OH}$ ) 与水中氧原子 ( $\text{O}_w$ ) 的径向分布函数和配位数如图 13 所示。整体上, HG 与  $\text{O}_w$  存在 2 个峰。其中各体系第 1 个峰均在 0.24~0.27 nm 范围内,说明 HG 中的 O 原子与  $\text{O}_w$

形成氢键,  $O \cdots O-H$ 。峰的高度表征了亲水基团与  $O_w$  的分布密度, 显然  $SO_4^-$  和  $COO^-$  与  $O_w$  相互作用较强, 对润湿有较好的促进作用。另外第 2 个峰的位置均在  $0.4 \sim 0.5$  nm 范围, 这是 HG 与的范德华相互作用。 $C_N$  越大表明亲水结构周围水分子存在的数目越多, 其中  $SO_4^-$  最大,  $COO^-$  次之。

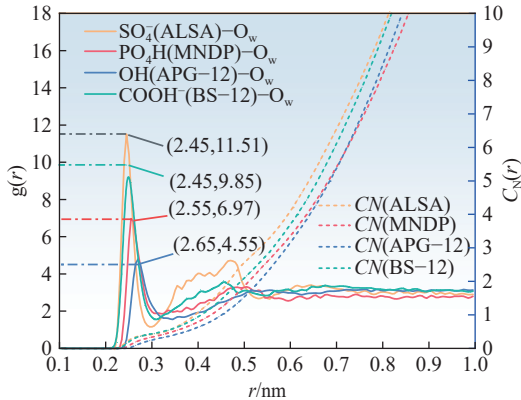


图 13 HG 与  $O_w$  的径向分布函数和配位数  
Fig.13 The  $g(r)$  and  $C_N$  of the HG with  $O_w$

疏水链 (R) 与无烟煤的碳原子之间的径向分布函数越大表明表面活性剂 R 端更易吸附到煤表面, 进而 HG 端朝向水, 更有利于水润湿煤表面。由图 14 可知, 第 1 个峰的位置在  $0.3 \sim 0.5$  nm 的范围内, 说明煤对表面活性剂的吸附主要依靠范德华力和静电相互作用。根据 RDF 峰值可以判断表面活性剂在煤表面的吸附能力依次为  $ALSA > BS-12 > APG-12 > MNDP$ 。因此, 表明活性剂对提高无烟煤的润湿效果不仅受到 HG 与水的相互作用的影响, 而且表面活性剂在无烟煤的吸附能力也是重要影响因素。

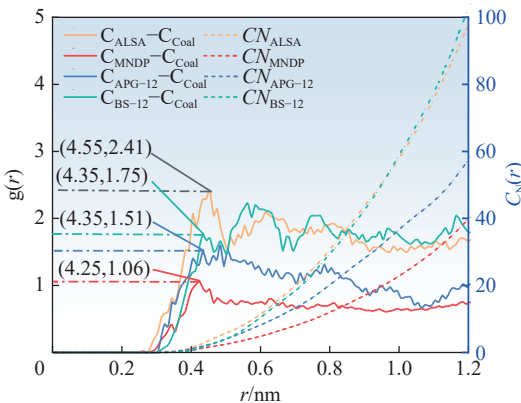


图 14 疏水链与无烟煤之间的  $g(r)$  及  $C_N$

Fig.14 The  $g(r)$  and  $C_N$  between the hydrophobic chain and anthracite coal

### 3.2.5 扩散系数分析

为分析 HG 吸附煤表面后对水分子向煤表面扩散能力的影响。水分子向煤表面扩散的扩散系数 ( $D$ )

可用式 (4)—式 (5) 计算<sup>[30]</sup>:

$$M_{SD} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [r_i(t) - r_i(0)]^2 \quad (4)$$

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \left( \frac{M_{SD}}{6t} \right) = \frac{1}{6} K_M \quad (5)$$

式中:  $M_{SD}$  表示均方位移;  $N$  表示扩散分子总数;  $r(t)$  和  $r(0)$  分别是时间  $t$  在  $t=0$  时刻第  $i$  个分子的位置向量;  $K_M$  表示  $M_{SD}$  曲线的斜率。

$D$  越大表明水分子向煤表面的迁移率越大, 促使无烟煤与水形成更多氢键, 增加对煤的润湿效果。 $M_{SD}$  随扩散时间的变化如图 15 所示。水分子的  $D$  值见表 6。结果表明: 以水-煤体系作为对照, 在体系中引入不同亲水基团后, 表明活性剂溶液-无烟煤体系  $M_{SD}$  斜率均大于纯水-无烟煤体系, 相对于纯水, 表面活性剂溶液均有提高水分子向煤迁移的效果。水分子向无烟煤表面扩散的能力依次为:  $ALSA (SO_4^-) > BS-12 (COO^-) > MNDP (PO_4H) > APG-12 (OH)$ , 模拟结果与接触角结果一致。界面中引入  $HG(SO_4^-)$ ,  $D$  增加了 46.31%。结合 3.1 节表面活性剂静电势分布, 在煤-水界面中引入较强极性的 HG, 其不但可与水分子和煤分子有较强静电相互作用, 而且吸引更多的水分子迁移到煤表面 ( $D$  增大), 导致煤与水的相互作用增强, 氢键数目增多, 润湿效果增强。

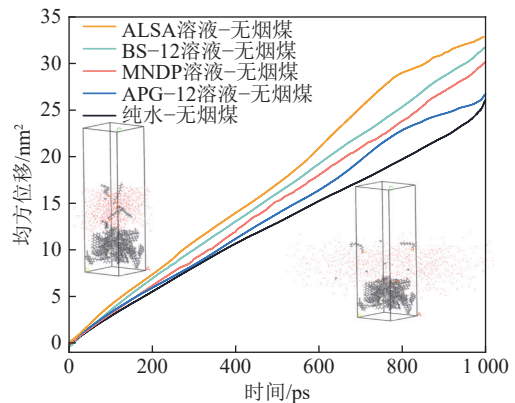


图 15  $M_{SD}$  结果

Fig.15 Results of the  $M_{SD}$

表 6 扩散系数

Table 6 Diffusion coefficient

类型	水	$SO_4^-$	$COO^-$	$PO_4H$	OH
$D/(10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	3.93	5.75	5.12	5.00	4.48

### 3.3 亲水基团对无烟煤吸水能力蒙特卡罗吸附模拟

由前节可知, HG 对无烟煤的润湿调控具有重要影响, 为量化含不同 HG 的无烟煤体系对水分子的吸

附量。将 3.2.2 节中 4 个体系中吸附于无烟煤表面的表面活性剂和煤提取出来,如图 16 所示。随后采用蒙特卡罗方法,在 Sorption 模块 Fix pressure 任务下进行等温吸附模拟,其中力场选用 COMPASS II,压力为 101 kPa,温度为 298 K,平衡步数为 100 000,生产步数为 100 000。静电作用采用 Ewald&Group 法,范德华作用采用 Atom based 法。

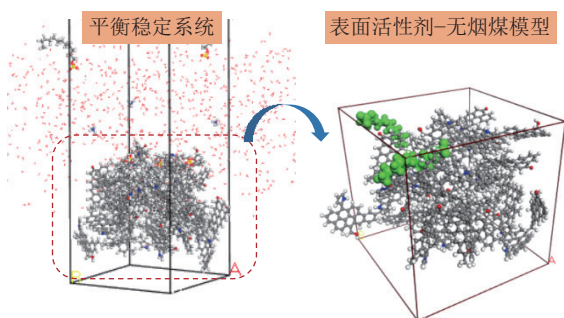


图 16 蒙特卡罗吸附模拟

Fig.16 Monte Carlo simulation of adsorption

水在含 4 种表面活性剂构型下的吸附量和等温吸附热如图 17 所示。结果表明:表面活性剂体系中吸附量和吸附热均大于纯水体系,相对于纯水体系,ALSA、BS-12、MNSP、APG-12 吸附量分别提高了 27.43%、21.83%、14.27%、7.72%。含表面活性剂体系,无烟煤吸附过程中产生的吸附热最大为 10.49 kcal/mol,均不超过 10.5 kcal/mol,说明该过程为物理吸附。因此具有强极性 HG(SO<sub>4</sub>) 可有效提高无烟煤对水分子的吸附量。

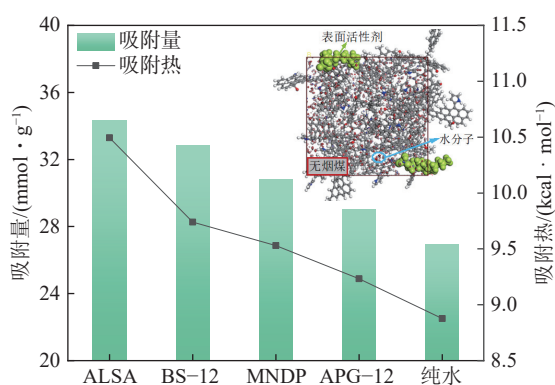


图 17 各体系无烟煤等温吸水量

Fig.17 Isothermal water absorption of anthracite in each system

综上所述,从表面活性剂自身结构出发,通过量子化学计算得到表面活、无烟煤和水分子的静电势分布及局部极值,初步从表面活性剂结构揭示 HG 与水分子的相互作用强弱差异,证明了表面活性剂选择过程中, HG 是润湿性能考察的关键。从无烟煤-溶液界面体系出发,进一步通过分子模拟揭示了各体系中亲

水基团与水和无烟煤之间的相互作用强度,并从  $g(r)$ 、 $D$ 、吸附量和吸附热等方面揭示亲水基团润湿无烟煤的调控机制。如图 18 所示,强极性 HG(SO<sub>4</sub>) 引入润湿界面后, SO<sub>4</sub><sup>-</sup> 可与水形成较强氢键 (3.2.4 节 RDF 结果),同时由于静电相互作用表面活性剂更容易吸附到无烟煤表面,进而溶液中的水分子由于亲水基团的吸引,向无烟煤表面的扩散能力增大 (即  $D$  增大,见 3.2.5 节)。

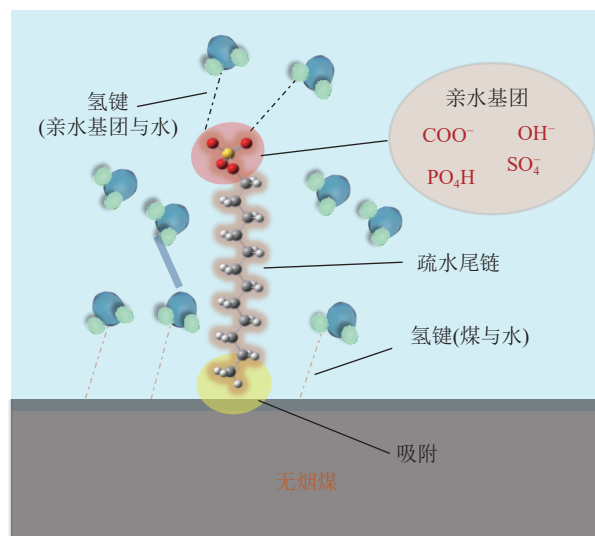


图 18 亲水基团润湿调控机制

Fig.18 Control mechanism of hydrophilic group wetting

宏观上,表面活性剂吸附于无烟煤表面疏水位点,疏水芳香碳 C—C 质量分数减少,亲水脂肪族 C—O 增加,宏观上改造了无烟煤表面的亲疏水性。微观上具有强极性 HG 的表面活性剂如: ALSA(SO<sub>4</sub>),一方面自身与水分子具有较强的相互作用,易形成强氢键,另一方面易吸附于无烟煤表面,使更多的水分子迁移向煤表面形成氢键,水分子的  $D$  和吸附量增大,最终增强无烟煤润湿效果。

## 4 结 论

1) HG 对无烟煤的润湿效果排序为: SO<sub>4</sub><sup>-</sup> > COO<sup>-</sup> > PO<sub>4</sub>H > OH; HG 吸附到无烟煤表面,相对增加了疏水位点 C—O 质量分数,易形成氢键,有助于改善无烟煤润湿性。

2) 无烟煤中大部分正负电势区域都小于水分子之间的正负电势极值是无烟煤润湿性差的内在原因;  $\Delta ESP$  可作为评价表面活性剂润湿性能的参考指标。

3) 在表面活性剂溶液-煤微观润湿界面,含 HG(SO<sub>4</sub>) 体系,煤与水的相互作用能最大,氢键数目最多,水分子扩散系数提高了 46.3%,吸附量增加 27.43%。

4) HG 一方面与水分子具有较强的相互作用,形成强氢键,另一方面其吸附于煤-水界面,增强了水分子向煤表面的扩散系数,导致水分子吸附量增大,进而强化了煤尘润湿性。筛选或设计降尘剂时,可考虑引入强极性 HG(SO<sub>4</sub><sup>-</sup>) 以提高无烟煤润湿效率。

#### 参考文献(References):

- [1] 张天, 穆新升, 葛少成, 等. 超音速同轴气动雾化降尘技术[J]. 煤炭学报, 2024, 49(7): 3118–3128.  
ZHANG Tian, MU Xinsheng, GE Shaocheng, et al. Supersonic coaxial pneumatic atomization dust reduction technology[J]. Journal of China Coal Society, 2024, 49(7): 3118–3128.
- [2] 秦波涛, 周刚, 周群, 等. 煤矿综采工作面活性磁化水喷雾降尘技术体系与应用[J]. 煤炭学报, 2021, 46(12): 3891–3901.  
QIN Botao, ZHOU Gang, ZHOU Qun, et al. Dust removal system and application of the surfactant-magnetized water spray in the fully mechanized mining face of coal mines[J]. Journal of China Coal Society, 2021, 46(12): 3891–3901.
- [3] 王和堂, 王辉, 谭江龙, 等. 液态 CO<sub>2</sub>-水循环作用下煤体的物理改性规律及增润减尘效应[J]. 煤炭学报, 2024, 49(3): 1463–1474.  
WANG Hetang, WANG Hui, TAN Jianglong, et al. Physical modification law and dust reduction effect of liquid CO<sub>2</sub>-water circulation on coal[J]. Journal of China Coal Society, 2024, 49(3): 1463–1474.
- [4] 周刚, 程卫民, 徐翠翠, 等. 不同变质程度煤尘润湿性差异的<sup>13</sup>C-NMR 特征解析[J]. 煤炭学报, 2015, 40(12): 2849–2855.  
ZHOU Gang, CHENG Weimin, XU Cuicui, et al. Characteristic analysis of <sup>13</sup>C-NMR for the wettability difference of coal dust with diverse degrees of metamorphism[J]. Journal of China Coal Society, 2015, 40(12): 2849–2855.
- [5] 王成勇, 邢耀文, 夏阳超, 等. 离子型表面活性剂对低阶煤润湿性的调控机制[J]. 煤炭学报, 2022, 47(8): 3101–3107.  
WANG Chengyong, XING Yaowen, XIA Yangchao, et al. Regulation mechanism of ionic surfactant on the wettability of low rank coal[J]. Journal of China Coal Society, 2022, 47(8): 3101–3107.
- [6] WANG H, XIE J N, XIE J, et al. Effect of critical micelle concentration of imidazole ionic liquids in aqueous solutions on the wettability of anthracite[J]. Energy, 2022, 239: 122088.
- [7] 杜常博, 程传旺, 易富, 等. 复配表面活性剂对烟煤润湿性影响及微观机理研究[J]. 煤炭科学技术, 2024, 52(11): 346–355.  
DU Changbo, CHENG Chuanwang, YI Fu, et al. Study on the effect of compound surfactant on the wettability of bituminous coal and its micro-mechanism[J]. Coal Science and Technology, 2024, 52(11): 346–355.
- [8] 韩方伟, 彭莹莹, 张金宜, 等. 抑尘液滴对煤表面动态润湿特征模拟评估方法研究[J]. 煤炭学报, 2024, 49(4): 1931–1940.  
HAN Fangwei, PENG Yingying, ZHANG Jinyi, et al. Research on the simulation and evaluation method of dynamic wetting characteristics of dust suppression droplets on coal surface[J]. Journal of China Coal Society, 2024, 49(4): 1931–1940.
- [9] 程卫民, 薛娇, 周刚, 等. 基于红外光谱的煤尘润湿性[J]. 煤炭学报, 2014, 39(11): 2256–2262.  
CHENG Weimin, XUE Jiao, ZHOU Gang, et al. Study of coal dust wettability based on FTIR[J]. Journal of China Coal Society, 2014, 39(11): 2256–2262.
- [10] 周刚, 程卫民, 徐翠翠, 等. 不同变质程度煤尘润湿性差异的<sup>13</sup>C-NMR 特征解析[J]. 煤炭学报, 2015, 40(12): 2849–2855.  
ZHOU Gang, CHENG Weimin, XU Cuicui, et al. Characteristic analysis of <sup>13</sup>C-NMR for the wettability difference of coal dust with diverse degrees of metamorphism[J]. Journal of China Coal Society, 2015, 40(12): 2849–2855.
- [11] 林清侠, 汪澍, 金龙哲, 等. 基于<sup>13</sup>C-NMR 和 FTIR 的煤尘润湿性定量表征[J]. 工程科学学报, 2022, 44(11): 1844–1851.  
LIN Qingxia, WANG Shu, JIN Longzhe, et al. Quantitative characterization of coal dust wettability based on <sup>13</sup>C-NMR and FTIR[J]. Chinese Journal of Engineering, 2022, 44(11): 1844–1851.
- [12] JI B, JIANG B Y, YUAN L, et al. Effect of side chain functional groups of ionic liquids on improving wettability of coal: Simulation and experimental discussion[J]. Energy, 2023, 285: 129453.
- [13] CHEN X, GAO J H, DENG C B, et al. Characterization of the wetting properties of ionic liquids on lignite surfaces: Molecular dynamics simulations[J]. Journal of Molecular Liquids, 2023, 389: 122886.
- [14] 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.  
NIE Wen, NIU Wenjin, BAO Qiu, et al. Effect of different surfactants on the wettability of coal dust based on Dmol3 module[J]. Journal of China Coal Society, 2023, 48(3): 1255–1266.
- [15] 冯雨, 杨玲, 杨小敏. 2024 年我国无烟煤市场发展展望[J]. 中国煤炭, 2024, 50(4): 27–35.  
FENG Yu, YANG Ling, YANG Xiaomin. Development and outlook of China's anthracite coal market in 2024[J]. China Coal, 2024, 50(4): 27–35.
- [16] MENG J Q, WANG L J, LYU C H, 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.
- [17] 唐明云, 金靖艳, 江丙友, 等. 不同类型表面活性剂对烟煤润湿性能影响的分子模拟及实验[J]. 煤炭学报, 2024, 49(7): 2986–2996.  
TANG Mingyun, JIN Jingyan, JIANG Bingyou, et al. Molecular simulations and experiments on the effect of different types of surfactants on the wetting properties of bituminous coal[J]. Journal of China Coal Society, 2024, 49(7): 2986–2996.
- [18] WANG X N, YUAN S J, LI X, et al. Synergistic effect of surfactant compounding on improving dust suppression in a coal mine in Erdos, China[J]. Powder Technology, 2019, 344: 561–569.
- [19] ZHOU G, WANG C M, LIU R L, et al. Synthesis and characterization of water injection fracturing fluid for wetting and softening coal seam[J]. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 2022, 150: 105024.
- [20] XU C H, WANG D M, WANG H T, et al. Experimental investigation of coal dust wetting ability of anionic surfactants with different

- structures[J]. *Process Safety and Environmental Protection*, 2019, 121: 69–76.
- [21] ZHAO Z D, CHANG P, XU G, et al. Comparison of the coal dust suppression performance of surfactants using static test and dynamic test[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2021, 328: 129633.
- [22] CHANG P, CHEN Y P, XU G, et al. Numerical study of coal dust behaviors and experimental investigation on coal dust suppression efficiency of surfactant solution by using wind tunnel tests[J]. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 2021, 43(17): 2173–2188.
- [23] NI G H, LI Z, XIE H C. The mechanism and relief method of the coal seam water blocking effect (WBE) based on the surfactants[J]. *Powder Technology*, 2018, 323: 60–68.
- [24] YANG M M, LU Y Y, GE Z L, et al. Viscoelastic surfactant fracturing fluids for use in coal seams: Effects of surfactant composition and formulation[J]. *Chemical Engineering Science*, 2020, 215: 115370.
- [25] ZHAO D, LIU X Q. Effect of ionic surfactants on flotation of low-rank coal: A DFT calculation and MD simulation study[J]. *Molecular Physics*, 2022, 120(24): e2140719.
- [26] JIANG B Y, ZHOU Y, JI B, et al. Investigation on the effect of functional groups on the wettability of coal dust: Experiments and theoretical validation[J]. *Fuel*, 2023, 351: 128987.
- [27] 魏帅, 严国超, 张志强, 等. 晋城无烟煤的分子结构特征分析[J]. *煤炭学报*, 2018, 43(2): 555–562.
- WEI Shuai, YAN Guochao, ZHANG Zhiqiang, et al. Molecular structure analysis of Jincheng anthracite coal[J]. *Journal of China Coal Society*, 2018, 43(2): 555–562.
- [28] LIAO B, WANG J T, LI M C, et al. Microscopic molecular and experimental insights into multi-stage inhibition mechanisms of alkylated hydrate inhibitor[J]. *Energy*, 2023, 279: 128045.
- [29] AHMADI M, HOU Q F, WANG Y 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.
- [30] BAI X Y, YAN G C, KONG S Q, et al. Study on the mechanism of the influence of surfactant alkyl chain length on the wettability of anthracite dust based on EDLVO theory and inverse gas chromatography[J]. *Fuel*, 2023, 353: 129187.