

SDBS 对焦煤润湿性能的试验与 分子动力学模拟

何瑾瑶¹, 崔燕¹, 杜雨雪¹, 王鹏飞^{1,2*}

(1. 湖南科技大学 资源环境与安全工程学院, 湖南 湘潭 411201;

2. 湖南科技大学 南方煤矿瓦斯与顶板灾害治理安全生产实验室, 湖南 湘潭 411201)

摘要: 为了分析十二烷基苯磺酸钠 (Sodium Dodecyl Benzene Sulfonate, SDBS) 对焦煤的润湿性能及其作用机理, 以淮南焦煤为研究对象, 首先, 通过接触角、反渗透试验测定清水和质量分数分别为 0.005%、0.050%、0.500% 的 SDBS 溶液的润湿特性; 然后, 利用 Materials Studio 分子模拟软件建立水-煤和水-表面活性剂-煤模型, 对 SDBS 在煤表面的润湿过程进行研究。结果表明: SDBS 溶液能明显改善清水的润湿性能, 0.500% 的 SDBS 溶液的接触角最小, 为 16.52°, 吸湿量最大, 为 261 mg, 润湿效果最明显; SDBS 分子的疏水尾链吸附煤表面、亲水头基朝向水中的吸附构型能降低水和煤的界面张力; 加入表面活性剂 SDBS 后, 分子间非键作用能降低, 且 SDBS 质量分数越大, 分子间吸附作用越强; 随着 SDBS 质量分数的增加, SDBS 与煤接触面更大, 烷基链空间分布范围更广, 水分子的均方位移 (Mean Squared Displacement, MSD) 与扩散系数增大, 使煤的润湿效果更强。

关键词: SDBS; 煤润湿性; 分子动力学; 吸附特性; MSD

中图分类号: X964

文献标志码: A

文章编号: 1672-9102(2025)02-0020-09

Experimental and Molecular Dynamics Simulation Studies on the Wetting Properties of SDBS on Coking Coal

HE Jinyao¹, CUI Yan¹, DU Yuxue¹, WANG Pengfei^{1,2}

(1. School of Resources, Environment and Safety Engineering, Hunan University of Science and Technology, Xiangtan 411201, China;

2. Work Safety Key Lab on Prevention and Control of Gas and Roof Disasters for Southern Coal Mines,

Hunan University of Science and Technology, Xiangtan 411201, China)

Abstract: In order to further analyze the wetting performance and its mechanism of sodium dodecyl benzene sulfonate (SDBS) on coking coal, the wetting characteristics of clear water, 0.005%, 0.050% and 0.500% SDBS solutions are determined by contact angle and reverse osmosis tests with Huainan coking coal, and then use Materials Studio molecular simulation software to establish the water-coal and water-surfactant-coal models to investigate the wetting process of SDBS on the coal surface. The results show that SDBS solution can significantly improve the wetting property of clear water, and the contact angle of 0.500% SDBS solution is the smallest at 16.52°, and the amount of moisture absorption is the largest, 261 mg, with the most obvious wetting effect. The simulation results show that the adsorption configuration of the hydrophobic tail chain adsorption of SDBS molecules on the surface of coal, and the hydrophilic headgroups towards the water can reduce the interface tension between water and coal. The addition of surfactant SDBS has decreased the intermolecular non-bonding energy. The larger the mass fraction of SDBS, the stronger the intermolecular adsorption. With the increase of SDBS mass fraction, the contact surface between SDBS and coal is larger, the spatial distribution range of alkyl

chains is wider, and the mean square displacement (MSD) and diffusion coefficient of water molecules increase, so that the wetting effect of coal is stronger.

Keywords: SDBS; wetting property of coal; molecular dynamics; adsorption properties; MSD

煤炭是世界上最重要的基础能源之一,根据 2022 年统计数据显示,中国作为全球范围内煤炭开采量居首位的国家,其年度原煤开采总量已攀升至 45.6 亿 t,占全球煤炭产量的 51.8%^[1].与高产能、高产量相伴的还有严重的煤尘问题.煤尘是引起煤矿工人尘肺病的重要危害因素,尘肺病是我国法定职业病之一,作为一种慢性职业病,煤矿工人一旦罹患就难以康复.自 2010 年起的流行病学监测数据显示,我国职业健康领域呈现显著特征:年度新发尘肺病例报告数量持续高于 2 万例阈值.该病种在职业性疾病谱系中持续占据主导地位,其病例构成比连续 13 年维持在 88%~92%,始终占据同期职业性疾病新发病例总数的首要位置,给国家和患者造成了巨大的经济负担和健康损失^[2-3].煤尘爆炸是矿井下重大灾害之一,会造成巨大的财产损失和人员伤亡.因此,必须采取有效的粉尘治理技术来保护煤矿工人的健康,降低矿井下事故发生概率,提高煤矿工程安全性.

在各种抑尘技术中,喷雾降尘技术因其成本低、实施简单的特性而被广泛应用.但由于煤的疏水性以及水的高表面张力使得煤尘不易被水润湿,因此,当使用清水做喷雾时,其润湿能力和抑尘效率相对较低,而表面活性剂的添加可有效降低水的表面张力,提高润湿效果^[4].XU 等^[5]通过计算亲水-亲脂平衡(HLB 值)评估了不同阴离子表面活性剂对无烟煤的润湿能力,发现表面活性剂分子与煤尘之间的疏水相互作用和静电斥力影响着表面活性剂在煤尘表面的吸附密度,从而决定其润湿能力;WANG 等^[6]采用泡沫扫描仪和煤尘润湿法测试了烷基聚葡萄糖苷和脂肪醇醚硫酸盐对十二烷基苯磺酸钠矿用防尘剂发泡和润湿性能的影响;LIU 等^[7]通过反自吸、表面张力和接触角试验,研究了不同离子液体和表面活性剂复合溶液的润湿性;ZHOU 等^[8]研究了 4 种不同的表面活性剂与煤的接触角,结果表明阴离子表面活性剂的接触角最小,润湿能力最好.

以上研究都基于试验方法从宏观现象上分析试验结果,而无法在分子的微观层面上进行深入分析和解释.分子动力学(Molecular Dynamics, MD)模拟基于经典力学原理,通过数值求解粒子运动方程,结合统计力学建立微观运动与宏观热力学性质的关联,依靠牛顿力学来模拟分子系统的运动^[9].张政等^[10]研究了十二烷基苯磺酸钠(Sodium Dodecyl Benzene Sulfonate, SDBS)对煤基材料表面润湿特性的调控机制,研究表明,当表面活性剂吸附层在煤表面形成后,其亲水基团显著增强了固-液界面的相互作用,可实现煤基材料表面润湿性与渗透性的协同提升;李树刚等^[11]通过计算机模拟分析表面活性剂 SDBS 对煤表面润湿特性的作用机制,研究发现,当 SDBS 分子吸附在煤表面后,其亲水性增强.通过追踪水分子运动轨迹发现,大量水分子在活性剂头部区域聚集形成稳定结构,这种定向吸附现象有效促进了水膜在煤表面的扩展与渗透,从而显著改善润湿效果;ZHANG 等^[12]通过低场核磁共振实验和 MD 模拟,探讨了煤尘的润湿机理和微润湿动态行为特征;BAI 等^[13]通过实验和分子动力学模拟探讨了表面活性剂十二烷基苯磺酸钠(SDBS)和十八烷基三甲基氯化铵在无烟煤表面的吸附特性.

不同煤种选择浓度适当的表面活性剂,可以增强煤的润湿性、提高除尘效率.上述研究表明,表面活性剂在煤表面的吸附特性对煤的润湿性有很大影响,然而关于其在焦煤表面的微观吸附特性研究却较少.因此,本文通过接触角试验、反渗透试验研究阴离子表面活性剂十二烷基苯磺酸钠(SDBS)对焦煤润湿性的影响,并利用分子动力学方法研究其在焦煤表面的吸附特性,为表面活性剂提高焦煤润湿性提供进一步的理论依据.

1 试验研究

1.1 试验材料

焦煤作为烟煤类资源中变质程度较高的典型代表,其固定碳含量为 80%~85%,同时挥发组分释放量处于中等区间,在热加工过程中展现出优异的胶结特性.试验选取煤为淮南焦煤,将煤样置于颚式破碎机

中进行粉碎处理,持续时间为 2 min,随后将煤粉过 0.1 mm 筛网对破碎产物实施粒度分级,得到试验所需煤尘样品,并将其放入密封袋中保存^[14].综合国内外研究,选取十二烷基苯磺酸钠阴离子表面活性剂,用清水配制质量分数分别为 0.500%、0.050%、0.005% 的 3 组溶液,编号依次为 1~3,清水作为对照组,编号为 0.

1.2 试验方案

1.2.1 接触角试验

用电子天平称取 0.3 g 煤样,在 10 MPa 恒定压力条件下保持 2 min 完成压缩过程,最终制备获得直径 12 mm、厚度 2 mm 的圆柱形标准试样.使用 CA100B 接触角测量仪(图 1(a))分别测量每组溶液与煤片的接触角.为保证试验准确性,减少其他因素干扰,每组测 3 次,取 3 组数据的平均值.

1.2.2 反渗透试验

选择 4 支相同规格的玻璃管,用滤纸与皮筋扎紧玻璃管一端,使煤粉不泄露.试验时每支玻璃管称取 3 g 煤粉加入其中并称重,将配制好的 3 组 SDBS 溶液和清水分别倒入烧杯中,将玻璃管固定在反渗透试验装置(图 1(b))上,封有滤纸的一端放入烧杯中,至溶液刚好没过纸面.静置 10 min 后,将玻璃管取下称重,计算出吸收溶液的质量.

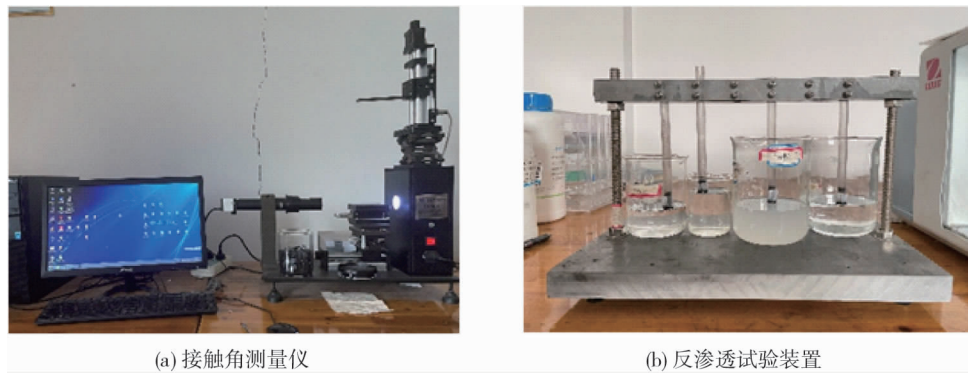


图 1 试验设备

1.3 试验结果及分析

1.3.1 接触角

通过接触角试验测量得到焦煤试样与清水及不同质量分数的 SDBS 溶液的接触角,如图 2 所示.表 1 为 4 种溶液与煤片接触角的测试结果.由图 2 及表 1 可知:清水与煤的接触角最大,明显大于添加了 SDBS 的溶液,接触角随 SDBS 质量分数的增加而减小,质量分数为 0.500% 的 SDBS 溶液接触角最小,润湿性最好.

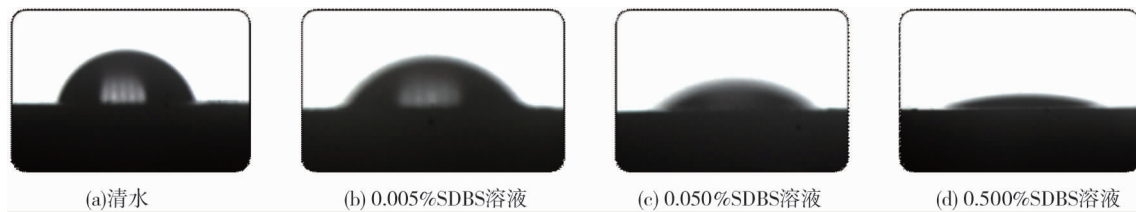


图 2 4 种溶液与煤片接触角

表 1 4 种溶液的接触角测试结果

溶液	接触角/(°)			平均接触角/(°)
	NO.1	NO.2	NO.3	
水	72.77	69.61	74.77	72.38
0.005% SDBS	57.32	53.29	55.58	55.40
0.050% SDBS	40.97	38.10	33.52	37.53
0.500% SDBS	14.90	14.04	20.63	16.52

接触角测量仪在点击“开始测试”后会连续测量 5 s 内 10 个不同时刻的接触角大小,通过数据比较不同溶液接触角的动态变化.表 2 为不同溶液接触煤片 5 s 后的初始接触角与最终接触角数据,并根据初始接触角与最终接触角计算溶液扩散速率及接触角减小率.由表 2 可知,4 种溶液扩散速率排序为 0.050% SDBS 溶液>0.005% SDBS 溶液>0.500% SDBS 溶液>清水,接触角减小率排序为 0.050% SDBS 溶液>0.500% SDBS 溶液>0.005% SDBS 溶液>清水.以上分析表明,在不同的评价标准下,4 种溶液的润湿性和扩散速率及其减小率略有差异,0.500% SDBS 溶液瞬间润湿性最好,0.050% 溶液的扩散速率最快,减小率最高.

表 2 不同溶液接触角的动态变化

溶液	初始接触角/(°)	最终接触角/(°)	扩散速率/(°/s)	减小率
清水	72.38	71.62	0.15	0.5%
0.005% SDBS	55.40	54.35	0.21	1.9%
0.050% SDBS	37.53	35.43	0.42	5.6%
0.500% SDBS	16.52	15.66	0.17	5.2%

1.3.2 反渗透

反渗透试验得到的质量差可以反映煤样的吸湿量,吸湿量越高,溶液的润湿性能越好.对 4 种溶液进行反渗透试验,结果如图 3 所示.

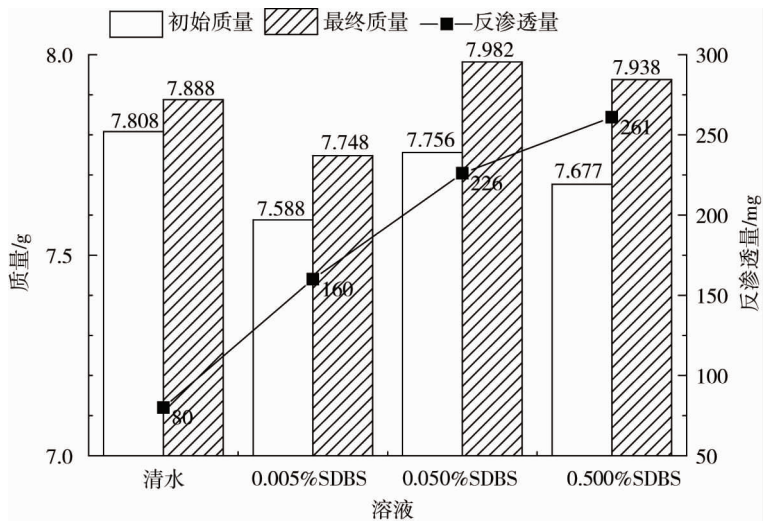


图 3 反渗透试验结果

由图 3 可知:4 种溶液中,0.500% SDBS 润湿性最好,清水最差.SDBS 的添加增加了煤样的吸湿量,并且随着 SDBS 质量分数的增加,煤样的吸湿量也在增加.从吸湿量看,0.500% SDBS 组煤样吸湿量最大,为 261 mg,清水组煤样吸湿量最小,仅 80 mg.分析吸湿量增加率可以得出,清水组至 0.005% SDBS 溶液组的吸湿量增加率最高,为 100%,继续增大表面活性剂浓度,其吸湿量增加率反而逐渐减小,0.050% SDBS 溶液组至 0.500% SDBS 溶液组的吸湿量增加率减小到 15.5%,这是因为表面活性剂分子的吸附在溶液表面逐渐饱和,使部分表面活性剂分子无法接触到水,无法发挥作用.

2 分子动力学模拟

2.1 建模及参数设置

分子动力学模拟可以从分子层面验证表面活性剂对煤的润湿性能及其机理.本研究选用阴离子表面活性剂 SDBS,其结构模型如图 4(a)所示.本研究采用 Wiser 化学结构模型^[15](图 4(b)),该模型经试验验证可准确表征碳含量为 82%~83%的煤基材料分子构型特征.其优势在于能够系统阐释煤的液化反应机理及其他相关化学行为的内在关联性.

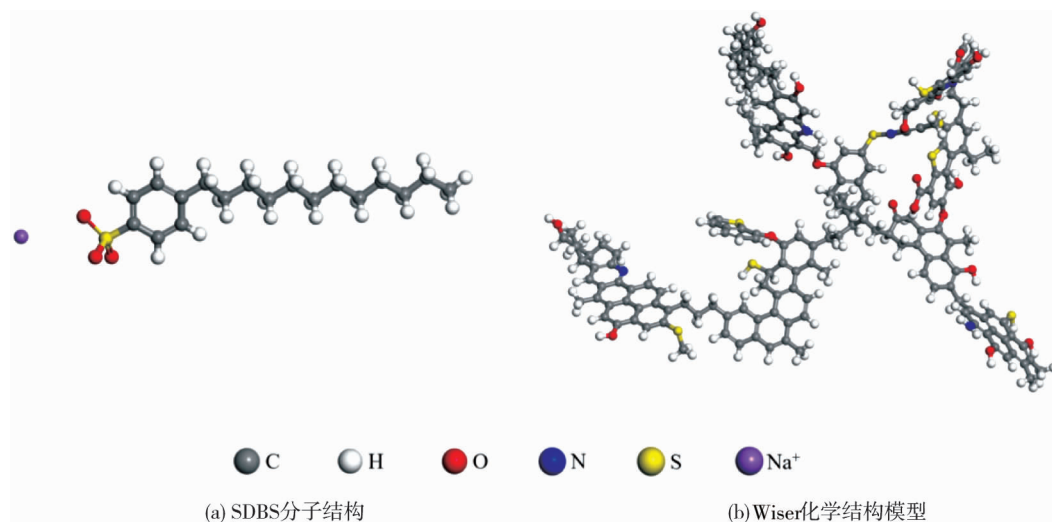


图4 分子结构模型

分子动力学模拟使用的软件是 Materials Studio, 所有过程皆采用 COMPASS II 力场. 选择 Forcite 模块对煤分子模型与 SDBS 分子模型进行几何优化, 优化后利用 Amorphous Cell 模块构建晶胞, 每个晶胞输出 10 帧, 在轨迹文件中选择能量最低的 1 帧模型进行 Build Layer 操作, 构建水-煤系统和 SDBS 分子数分别为 1, 5, 20 的水-表面活性剂-煤系统, 依次记为系统 I、系统 II、系统 III 及系统 IV, 各模拟体系顶部均设置厚度为 50 Å (1 Å = 0.1 nm) 的真空隔离层以消除周期性边界效应, 具体空间排布如图 5 所示. 在 Forcite 计算模块中选用几何构型优化工具, 采用分步优化策略: 首先采用最速下降法 (steepest descent) 实现初步结构弛豫, 随后切换至共轭梯度法 (conjugate gradient) 进行精细能量最小化. 通过退火处理程序对优化后体系实施温度循环调控, 消除局部能量势垒, 最终获得热力学稳定的最优构型作为分子动力学模拟的初始模型.

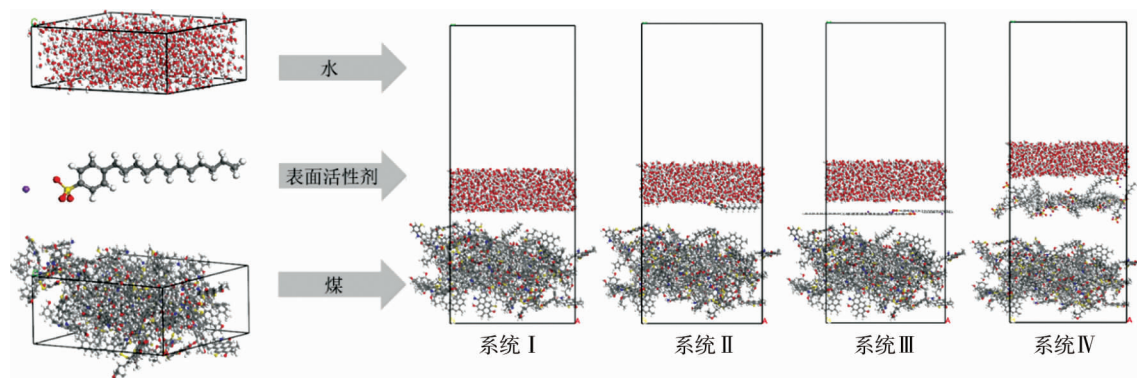


图5 体系模型

分子动力学模拟使用 Forcite 模块中的 Dynamics 功能, 为了提高模拟效率, 对煤分子模型下半部分约 2/3 的原子进行约束, ZHANG 等^[16]认为此操作对模拟结果没有影响. 在 NVT 系统中, 选择 Nose 温控器, 温度设置为 298 K, 进行 300 ps 的分子动力学计算, 时间步长设置为 1 fs^[17].

2.2 分子动力学模拟结果分析

2.2.1 系统吸附构型

图 6 为水-表面活性剂-煤系统的平衡构象, 标记 SDBS 分子, 然后将水分子和煤分子全部隐藏. 由图 6 可知: 表面活性剂分子由最初的无序状态, 经过 MD 模拟计算后, 在静电势和范德瓦耳斯力的作用下疏水尾链被吸附在煤表面, 亲水基团插入固液界面的水相中, 以疏水基代替表面上的水分子, 疏水基间的相互作用较弱, 所构成的表面张力较低. 这样的构型既有利于降低水的表面张力, 也有利于降低固液界面的张力, 以此提升表面活性剂溶液的润湿性.

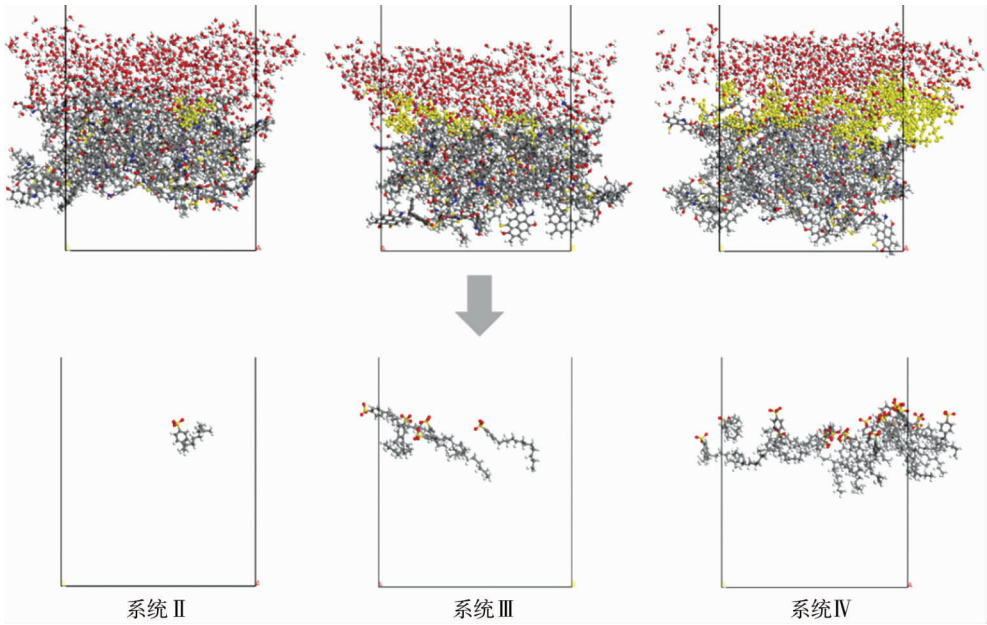


图 6 系统 II 至系统 IV 的最终吸附构型

2.2.2 非键作用能

润湿特性调控机制研究表明,表面活性剂 SDBS 在煤基材料表面形成吸附层能显著改变固-液界面非键合相互作用能.该能量参数表征分子间范德瓦耳斯力和氢键等非共价作用强度,热力学计算显示负值状态表明界面存在相互吸引作用.通过对比改性前后的非键作用能变化,可定量解析表面活性剂分子在煤-水界面的定向排布对润湿性能的增强机制.

对模拟后的模型进行能量分析,结果如表 3 所示, E_{int} 为非键作用能, E_{van} 为范德瓦耳斯力作用能, E_{ele} 为静电作用能.系统 I 至系统 IV 的非键作用能绝对值依次变大,当 SDBS 分子吸附于煤基材料表面后,其极性官能团通过氢键网络显著增强煤-水界面亲和力,且 SDBS 的浓度越高,润湿性越强.计算系统中 E_{ele} 在 E_{int} 中的占比,系统 I 为 85.39%,系统 II 为 86.92%,系统 III 为 86.87%,系统 IV 为 89.04%,水-表面活性剂-煤系统的 E_{ele} 占比更大.分子作用机理研究表明,十二烷基苯磺酸钠(SDBS)中磺酸基团与极性水分子间的离子-偶极相互作用是界面吸附过程的主要驱动力.

表 3 系统能量

系统	$E_{\text{int}}/(\text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1})$	$E_{\text{van}}/(\text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1})$	$E_{\text{ele}}/(\text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1})$
I	-10 598.289	2 178.322	-12 734.241
II	-11 513.391	2 030.506	-13 496.301
III	-12 154.423	2 154.045	-14 258.351
IV	-14 931.249	2 089.637	-16 969.029

注:1 kcal≈4.18 kJ.

2.2.3 相对浓度分布

通过对不同体系沿 Z 轴方向的密度梯度分布进行定量解析发现,特定空间位置出现的浓度极值点对应分子富集区域.这种空间异质性分布特征为阐释界面分子定向排布规律提供了关键证据.观察各体系在 Z 轴上的相对浓度分布,可以说明表面活性剂对水和煤的作用,分析不同质量分数 SDBS 对煤润湿性的影响.系统 I 至系统 IV 的相对浓度分布如图 7 所示.

由图 7 可知,分子动力学轨迹分析揭示煤基材料的空间分布特征呈现高度稳定性,其位置分布在 0~42 Å 处.系统 II 至系统 IV 中 SDBS 分布在 30~37 Å,23~41 Å,21~46 Å 处,随着表面活性剂浓度水平提升,SDBS 分子在固-液界面的定向排列呈现规律性变化,接触面积逐渐增加,分布范围也更广.分子构型分析显示,两亲分子的磺化芳香基团呈现显著的水相取向,而碳氢链段则通过疏水效应锚定于煤基体表面.这

种两亲分子结构的取向特性直接决定了界面润湿行为的调控机制——极性基团增强水分子捕获能力,非极性基团优化界面相容性,二者的协同作用构成润湿性能提升的结构基础.从图 7 中苯环与烷基链的分布可以看出,苯环的分布更靠近水分子,烷基链的分布更靠近煤分子,与图 6 中吸附构型一致.系统 II 至系统 IV 中烷基链的分布范围依次为 30~36 Å, 24~39 Å, 23~42 Å, 苯环的分布范围依次为 33~35 Å, 32~38 Å, 33~40 Å, 随着表面活性剂浓度梯度提升,烷基链结构呈现显著的空间扩展趋势,而芳香环系统则保持稳定的空间分布特征.这种差异化的构型演变规律表明,疏水链段在界面区域的动态排布行为是 SDBS 调控煤基材料润湿性能的关键机制.

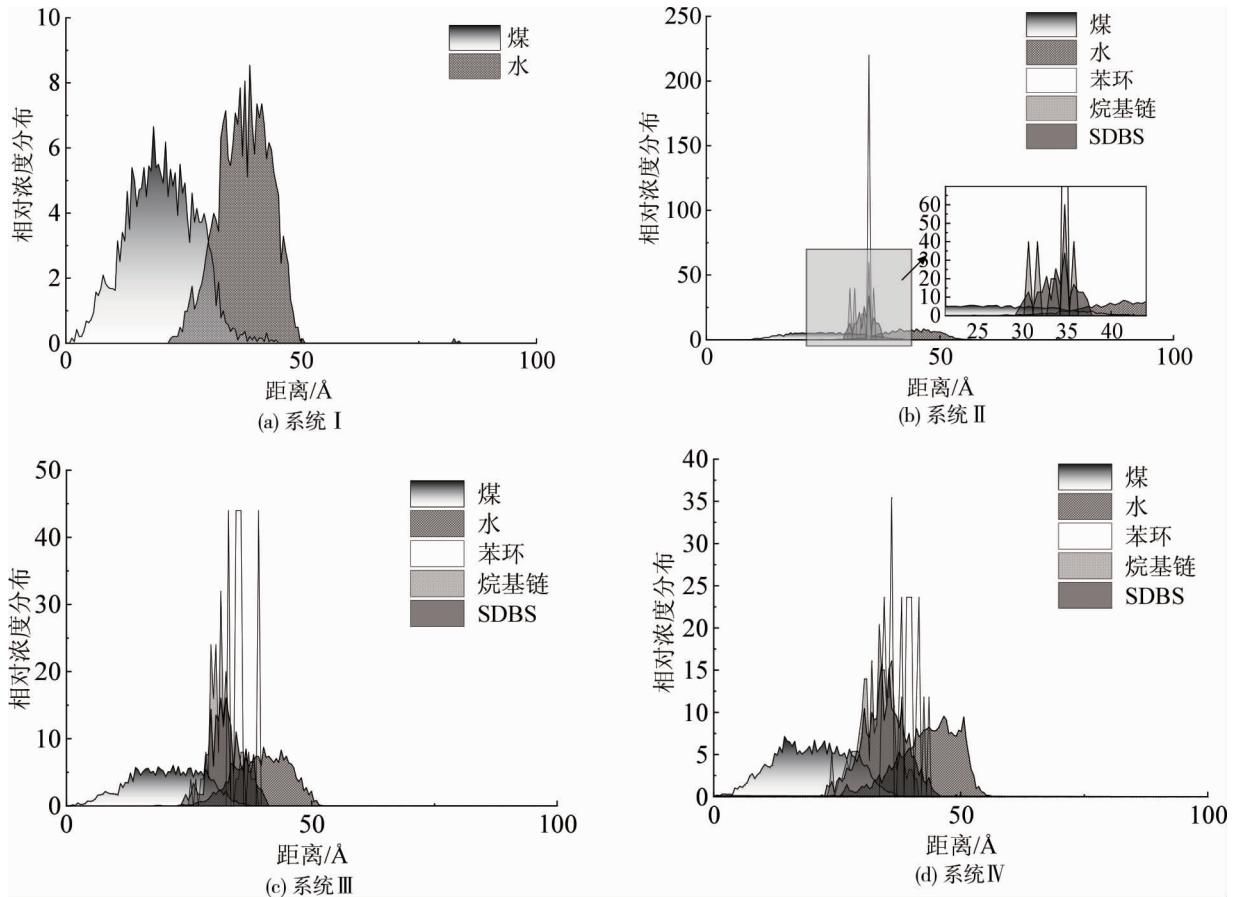


图 7 相对浓度分布

2.2.4 水分子的均方位移

基于分子动力学研究方法,表面活性剂浓度梯度引起的界面吸附构型改变显著调控界面水分子的动态特性.采用均方位移(MSD)分析并结合扩散系数(D)计算方法,定量表征界面区域水分子的迁移特性.计算公式如下^[18]:

$$\text{MSD} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)]^2; \quad (1)$$

$$D = \frac{1}{6N} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N [\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)]^2; \quad (2)$$

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{\text{MSD}}{6t} \right) = \frac{1}{6} K_M. \quad (3)$$

式中: N 为扩散分子的数量; $\mathbf{r}_i(t)$ 和 $\mathbf{r}_i(0)$ 分别为分子在时间 t 和 $t=0$ 的位置矢量; K_M 为MSD的曲线斜率,即扩散系数为MSD曲线斜率的1/6.

分子动力学轨迹分析表明,表面活性剂SDBS的界面修饰作用显著改变了水分子的迁移特性.MSD曲线呈现的陡化趋势证实,表面活性剂分子通过重构固-液界面相互作用网络,有效增强了水分子的定向迁

移能力.随着浓度梯度的提升,界面区域表面活性剂分子的空间排布密度与水分子运动活跃度呈显著正相关,这种动态耦合效应从分子尺度揭示了润湿性能的调控规律.

图 8 为各系统中水分子的均方位移.其均方位移曲线斜率越大,表明水分子偏移越多.由图 8 可知:添加了表面活性剂的系统中,其 MSD 的曲线斜率大于未添加的系统,且随着表面活性剂浓度增高,斜率增大,这表明表面活性剂的添加增加了煤与水之间的相互作用,使水分子的运动更剧烈.

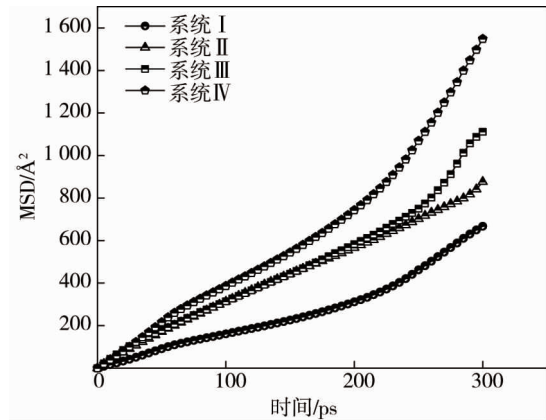


图 8 水分子的 MSD

根据式(3)计算的不同系统中水分子扩散系数见表 4,随着 SDBS 质量分数增加,水分子扩散系数由 2.53×10^{-5} 增大至 5.68×10^{-5} ,与吸附能分析结果一致.

表 4 各系统水分子扩散系数

系统	I	II	III	IV
扩散系数	2.53×10^{-5}	4.33×10^{-5}	4.73×10^{-5}	5.68×10^{-5}

3 结论

- 1)SDBS 溶液的接触角相比清水显著减小,随着 SDBS 溶液质量分数的增加,接触角减小.SDBS 的添加可以改善煤的吸湿量,质量分数越大,吸湿量越大.
- 2)添加表面活性剂 SDBS,其疏水尾链被吸附在煤表面,亲水基团插入固液界面的水相中,降低了固液界面的表面张力,分子间非键作用能降低,煤与水分子的吸附作用更强,更有利于润湿.
- 3)随着 SDBS 质量分数的增加,SDBS 与煤接触面更大,烷基链空间分布范围更广,使得水分子 MSD 与扩散系数增大,煤的润湿效果更强.
- 4)试验结合模拟的手段揭示了 SDBS 润湿煤的机理,为检验表面活性剂润湿煤性能及表面活性剂最适浓度选择提供了依据.

参考文献:

[1] 中国煤炭工业协会.中国煤炭工业协会发布《2022 煤炭行业发展年度报告》[EB/OL].(2023-03-28)[2023-08-24].
<https://www.sgpjbg.com/baogao/120123.html?plan360=AO-08-nengyuankuangchan&unit=09-meitan&qhclickid=16eface2ab084fa8>.

[2] 张墨慧,黄磊,石璐,等.中国人群尘肺病疾病负担的系统评价[J].中国循证医学杂志,2021,21(3):276-283.

[3] 金龙哲.我国作业场所粉尘职业危害现状与对策分析[J].安全,2020,41(1):1-6.

[4] 苟尚旭,刘荣华,王鹏飞,等.表面活性剂对煤的润湿性影响[J].矿业工程研究,2016,31(4):24-27.

[5] 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.

- [6] WANG Q G, WANG D M, WANG H T, et al. Influence of alkyl polyglucoside and fatty alcohol ether sulfate on the foaming and wetting properties of sodium dodecyl benzene sulfonate for mine dust control[J]. Powder Technology, 2019, 345: 91–98.
- [7] LIU Z, ZHU M, YANG H, et al. Study on the influence of new compound reagents on the functional groups and wettability of coal[J]. Fuel, 2021, 302: 121113.
- [8] ZHOU G, QIU H, ZHANG Q, et al. Experimental investigation of coal dust wettability based on surface contact angle[J]. Journal of Chemistry, 2016:9452303.
- [9] 刘吉,胡槐生,杨双维,等.纳米颗粒添加对熔融盐传热特性的影响[J].安徽电气工程职业技术学院学报,2021,26(3): 58–67.
- [10] 张政,葛少成,孙丽英,等.SDS 对烟煤润湿性能和机理的分子模拟研究[J].中国安全生产科学技术,2023,19(4): 86–92.
- [11] 李树刚,郭豆豆,白杨,等.不同质量分数 SDBS 对煤体润湿性影响的分子模拟[J].中国安全科学学报,2020,30(3): 21–27.
- [12] ZHANG Q T, ZHOU G, HU Y Y, et al. Microwetting dynamic behavior and mechanism for coal dust based on low field NMR method: a case study[J]. Fuel, 2021, 297: 120702.
- [13] BAI X Y, YAN G C, CHEN X L, et al. Adsorption characteristics of ionic surfactants on anthracite surface: a combined experimental and modeling study[J]. Molecules, 2022, 27(16): 5314.
- [14] 王新喆,王鹏飞,江玖鸿,等.液体抑尘剂抑制焦煤粉尘性能评价[J].矿业工程研究,2022,37(3):13–19.
- [15] 何选明.煤化学[M].2 版.北京:冶金工业出版社,2010.
- [16] ZHANG Z Q, WANG C L, YAN K F. Adsorption of collectors on model surface of Wiser bituminous coal: a molecular dynamics simulation study[J]. Minerals Engineering, 2015, 79: 31–39.
- [17] GAN J, WANG D M, XIAO Z M, et al. Experimental and molecular dynamics investigations of the effects of ionic surfactants on the wettability of low-rank coal[J]. Energy, 2023, 271: 127012.
- [18] ZOLGHADR A R, GHATEE M H, ZOLGHADR A. Adsorption and orientation of ionic liquids and ionic surfactants at the heptane /water interface[J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2014, 118: 19889–19903.