

# Application of Molecular Dynamics Simulations in Teaching of Surfactant Solutions

Qian Liu Di Liu Feicheng Lai Liyan Wang Yongjun Sun

School of Chemical and Environmental Engineering, China University of Mining and Technology (Beijing), Beijing, 100083, China

## Abstract

Surfactants are widely used in various fields such as detergents, cosmetics, tertiary oil recovery, and wastewater treatment. Their teaching is crucial for cultivating professionals in chemical engineering, mineral processing engineering, environmental engineering, and other fields. Introducing molecular dynamics simulation into the teaching process can more intuitively demonstrate the molecular structure of surfactants, helping students to clearly understand their chemical composition and structure. At the same time, it can dynamically demonstrate the aggregation behavior of surfactants in solution and their adsorption behavior at gas liquid (oil/water) interfaces. Students can observe changes in simulation results by adjusting parameters, stimulate learning interest, and cultivate innovative thinking; Simulation experiments can also be combined with practical applications, and through the analysis of practical application cases, students can better understand the mechanism and application value of surfactants in different fields. Molecular dynamics simulation has important application value in surfactant teaching, which can effectively improve teaching quality and cultivate students' comprehensive abilities.

## Keywords

surfactants; teaching; molecular dynamics simulations; aggregation behavior; interface properties

## 分子动力学模拟在表面活性剂溶液教学中的应用

刘骞 刘迪 来飞成 王立艳 孙永军

中国矿业大学(北京)化学与环境工程学院, 中国·北京 100083

## 摘要

表面活性剂在洗涤剂、化妆品、三次采油、污水处理等众多领域有着广泛应用,其教学对于培养化学化工、矿物加工工程、环境工程等专业人才至关重要。将分子动力学模拟引入到教学过程中,能够更直观地展示表面活性剂的分子结构,帮助学生清晰理解其化学组成和结构。同时,可动态演示表面活性剂在溶液中的聚集行为及其在气、液(油/水)界面的吸附行为。学生可通过调整参数观察模拟结果变化,激发学习兴趣,培养创新思维;还可将模拟实验与实际应用相结合,通过实际应用案例分析,让学生更好地理解表面活性剂在不同领域的作用机制和应用价值。分子动力学模拟在表面活性剂教学中具有重要应用价值,可有效提高教学质量,培养学生的综合能力。

## 关键词

表面活性剂; 教学; 分子动力学模拟; 聚集行为; 界面性质

## 1 引言

表面活性剂涉及有机化学、物理化学等多个化学分支的知识,学生通过学习其化学结构、性质及作用机制,能深化对表面化学基本原理的理解。在实际应用方面,表面活性

剂教学的意义更为显著。在工业领域,表面活性剂广泛应用于洗涤剂、化妆品、三次采油、污水处理等行业。通过课堂教学内容,学生可以明白表面活性剂在这些工业过程中是如何发挥作用的,如在洗涤剂中降低表面张力以去除污垢,在化妆品中起到乳化、分散等作用。这不仅为学生未来从事相关行业提供了专业知识,也培养了他们解决实际工业问题的能力。而对表面活性剂性质和应用的深入探讨,能激发学生思考如何改进现有表面活性剂或开发新型产品,从而培养创新意识。

然而,目前理论教学的过程中,由于表面活性剂性质的概念较为抽象,学生理解其复杂的化学结构和作用机制存在困难。例如,表面活性剂降低表面张力的原理涉及分子间

**【基金项目】**中国矿业大学(北京)本科教育教学改革与研究项目(项目编号: J230302, J220310); 中国矿业大学(北京)大学生创新训练项目资助; 中央高校基本科研业务费专项资金资助(项目编号: 202403059)。

**【作者简介】**刘骞,女,博士,讲师,从事胶体与化学、分子动力学模拟研究。

相互作用,学生难以直观感受,增加了学习难度。教学方法上,传统的单一讲授模式占主导,学生被动接受知识,缺乏主动思考和探索的积极性。同时,教学内容与实际应用的联系不够紧密,学生难以将所学知识应用到实际场景中,降低了学习的动力和兴趣。实验教学也有挑战。一方面,部分表面活性剂可能存在一定危险性,实验操作的安全保障需高度重视,这在一定程度上限制了实验的开展。另一方面,实验设备和材料的成本较高,学校可能无法提供充足的资源,导致学生实践机会减少。而且,实验结果易受多种因素影响,如温度、浓度等,结果的不确定性可能使学生产生困惑。

分子动力学模拟为表面活性剂教学提供了一种直观、生动、深入的教学手段。它将抽象的理论知识转化为可视化的图像和动态过程,激发学生的学习兴趣,提高教学效果,有助于学生更好地掌握表面活性剂的性质、行为和应用。因此,我们结合科研项目,将分子动力学模拟引用到表面活性剂教学过程中,主要包括以下几个方面。

## 2 在表面活性剂溶液聚集行为教学中的应用

采用 GROMACS、Materials Studio 等分子动力学模拟软件能直观呈现表面活性剂的微观世界<sup>[1]</sup>。通过软件模拟和展示,学生可以清晰地看到表面活性剂分子的结构,包括亲水基团和疏水基团的形态及相互位置。例如,选取常见的阳离子表面活性剂十六烷基三甲基溴化铵(CTAB)进行模拟教学。在模拟十六烷基三甲基溴化铵分子时,学生能直观地观察到氨基亲水基团和长链烷基疏水基团,这有助于他们理解表面活性剂分子结构与性质的关系。

采用分子动力学模拟方法演示了在高温 80℃ 和强酸 (pH=0) 环境下十六烷基溴化铵的聚集结构<sup>[2]</sup>。在模拟中,可以清晰地展示随着表面活性剂浓度的增加,CTAB 分子逐渐聚集形成胶束的过程。学生可以观察到疏水的烷基链相互靠拢形成胶束内核,而亲水的硫酸根基团朝向水相,稳定胶束结构。分子动力学模拟还可以动态展示表面活性剂在溶液中的行为。通过调整模拟参数,如温度、浓度等,可以观察到胶束的大小、形状以及稳定性的变化。例如,在较高温度下,胶束可能会变得更加松散,而在较低温度下,胶束更加紧密。体系中加入水杨酸时,随着模拟的进行,部分水杨酸分子逐渐增溶进入了胶束疏水内核区域。而预组装的棒状胶束在模拟初期就显示出剧烈的波动,并且很快发生断裂。棒状胶束断裂之后形成稳定的球形胶束并且在随后的模拟时间内保持稳定。通过这种直观展示,学生可以更好地理解表面活性剂在溶液中的聚集行为以及影响因素。学生可以看到随着时间的推移,分子如何逐渐聚集,胶束的大小、形状如何变化。这种动态过程的展示,使学生对表面活性剂的聚集行为有更深入的理解,而不仅仅是停留在抽象的概念上。通过这个案例,学生可以了解到混合表面活性剂体系在实际应用中的优势,如提高洗涤效果、增强乳化稳定性等。

## 3 在表面活性剂溶液界面行为教学中的应用

在教学中,分子动力学模拟可以帮助学生理解表面活性剂与界面的相互作用,学生能够观察到表面活性剂分子如何在界面处排列,以及这种排列如何降低界面张力。另外,还可以模拟表面活性剂在固体表面的润湿过程,如水在涂有表面活性剂的玻璃表面的铺展情况。学生可以观察到表面活性剂如何改变固体表面的亲水性或疏水性,从而影响润湿性能。可以通过调整表面活性剂的浓度、结构以及固体表面的性质,观察润湿角的变化。

例如,在课堂教学过程中演示在 CTAB 作用下十二烷基硅表面剥离的模拟过程<sup>[3]</sup>。学生可以观察到在模拟初期,表面活性剂分子从水相中吸附到油水界面上,体系总能量缓慢地降低。由于表面活性剂烷基链的扰动,烷烃油层逐渐被破坏,油层和硅表面之间逐步形成“水通道”,在氢键的作用下,“水通道”逐渐扩张。另外,有少数的 CTAB 分子可以通过“水通道”向二氧化硅表面移动。通过带正电荷的 CTA<sup>+</sup> 头基和二氧化硅负电 O 基团的相互吸引作用吸附到二氧化硅表面上,从而降低了界面能。最终,表面活性剂分子的加入加速了油滴从固体表面上的剥离。在最后的阶段,油滴和固体界面的接触线变得极小以至于下垂的油滴形状变得很不稳定,最终由于浮力的作用,油滴最终从表面上脱离。此时的二氧化硅表面变为完全亲水的,油滴增溶到表面活性剂的胶束中,体系达到平衡状态。这个案例可以帮助学生理解表面活性剂在涂料、油墨、防水剂等领域的应用原理。

## 4 在表面活性剂的动力学行为教学过程中的应用

利用分子动力学模拟研究表面活性剂分子在溶液中的扩散行为<sup>[4]</sup>。可以计算不同类型表面活性剂的扩散系数,并与理论模型进行对比。学生可以观察到表面活性剂分子在溶液中的随机运动轨迹,以及温度、浓度等因素对扩散速度的影响。例如,在较高温度下,分子的运动速度加快,扩散系数增大。通过这个案例,学生可以深入理解表面活性剂的动力学性质,以及扩散在表面活性剂传输和反应过程中的作用。模拟表面活性剂胶束在特定条件下的解体与重组过程,例如在加入电解质或改变温度时。学生可以观察到胶束结构的变化以及表面活性剂分子的重新排列。可以帮助学生了解表面活性剂体系的动态平衡以及外界因素对其稳定性的影响,为表面活性剂在实际应用中的性能调控提供理论基础。分子动力学模拟可以为表面活性剂教学提供生动、直观的教学资源,帮助学生更好地理解表面活性剂的性质、行为和应用。

## 5 结合前沿研究,介绍当前表面活性剂分子动力学模拟研究的现状

表面活性剂在工业生产有着广泛的应用,如洗涤剂、

化妆品、三次采油、粉尘抑制等行业。表面活性剂教学,学生可以了解到表面活性剂在这些领域中的具体应用和作用机制,为他们未来从事相关行业的工作打下基础。因此,在教学过程中,结合前沿研究介绍了表面活性剂分子动力学模拟在不同领域的应用。

### 5.1 在减阻领域的应用

减阻用表面活性剂在管道流体中加入少量即可使流动阻力大大降低从而节约能源。课堂教学过程中不仅对表面活性剂溶液流变性、湍流减阻、减阻与传热的相关性方面的动力学模拟研究进行了概括介绍,还简单介绍了表面活性剂粗粒化分子动力学模拟方面的部分成果。通过粗粒化分子动力学模拟方法,可以合理揭示表面活性剂胶束的结构与流变性的对应关系,对胶束的断裂与再连接能力进行多维度的评价<sup>[5]</sup>。

### 5.2 在三次采油中的应用

分子动力学模拟在三次采油领域具有重要意义,可在微观尺度上解释相关实验现象和过程机制<sup>[6,7]</sup>。运用分子动力学(MD)模拟方法研究表面活性剂驱油已成为热点。通过MD模拟可分析原子位置随时间变化的规律,研究表面活性剂分子的微观行为以及界面处表面活性剂的运动及聚集状态,探究其性能和微观驱油机理。MD模拟表面活性剂驱油的微观机理,包括降低油水界面张力,改变表面润湿性,增加界面电荷及乳化作用等;对表面活性剂的现场应用具有一定指导意义。分子动力学还可以从微观尺度解释表面活性剂的耐盐能力由极性头周围水化层的性质决定;表面活性剂亲水基与水分子结合能力、疏水基与油相间相互作用对泡沫稳定性的影响;固体表面润湿反转的分子动力学模拟;稠油制粘机制,以及不同类型表面活性剂的降黏机制的模拟。

### 5.3 在矿井喷雾降尘中的应用

利用分子动力学模型的方法可以对表面活性剂在矿井喷雾除尘中雾化、捕尘和保水等环节的微观作用机理进行研究。例如,研究不同表面活性剂对煤表面润湿性的影响<sup>[8,9]</sup>,通过模拟可以观察到抑尘剂分子与水分子在粉尘颗粒表面的吸附和相互作用过程,提供实验难以直接观测到的信息,如分子的扩散、吸附、构象变化等,从分子层面揭示抑尘机制<sup>[10]</sup>,可作为教学中的实际应用案例进行讲解。

分子动力学模拟使理论联系实际,获得实验难以控制和难以观察到的微观信息,对实验起到指导和补充作用。为实际应用过程中表面活性剂的选择和设计起先导性研究论证作用,探明可行性,构建分子结构和界面性能之间的定量关系、为表面活性剂的设计、筛选和生产提供了理论依据,为针对性设计与合成新型表面活性剂提供指导。

## 6 结论

分子动力学模拟在表面活性剂溶液教学中具有显著的应用价值。通过模拟,学生能够直观地观察到表面活性剂分子在溶液中的动态行为,如分子的运动、聚集形成胶束的过程等。这种教学方法有助于学生深入理解表面活性剂溶液的微观结构和性质。学生可以清晰地看到表面活性剂浓度对胶束形成的影响,以及胶束的结构和性质随环境条件的变化。分子动力学模拟还能激发学生的学习兴趣 and 主动性,培养他们的科学思维 and 创新能力。与传统教学方法相比,它为学生提供了一种更直观、更深入的学习方式,使抽象的理论知识变得更加具体和形象。此外,模拟教学还可以与实验教学相结合,帮助学生更好地理解实验现象背后的微观机制,提高学生综合运用知识的能力。总之,分子动力学模拟为表面活性剂溶液教学带来了新的机遇和活力,对提高教学质量和培养高素质人才具有重要意义。

### 参考文献

- [1] 姚远,成萌,张剑.分子动力学模拟在表面活性剂界面行为研究中的应用[J].化学通报(印刷版),2024,87(10):1169-1180.
- [2] 王悦,孟祥狄,牟斌,等.分子动力学模拟温度对CTAB<sub>SA</sub>胶束结构的影响[J].聊城大学学报(自然科学版),2018,31(4):99-103.
- [3] Liu Q, Yuan S, Yan H, et al. Mechanism of Oil Detachment from a Silica Surface in Aqueous Surfactant Solutions: Molecular Dynamics Simulations[J]. Journal of Physical Chemistry B, 2012, 116(9):2867-2875.
- [4] Yan H, Yuan S. Molecular Dynamics Simulation of the Oil Detachment Process within Silica Nanopores[J]. Journal of Physical Chemistry C, 2016, 120(5).
- [5] 魏进家,刘飞,刘冬洁.减阻用表面活性剂溶液分子动力学模拟研究进展[J].力学学报,2019,51(4):971-990.
- [6] Zhang H, Yuan S. Application of molecular dynamics simulation in enhanced oil recovery[J]. Scientia Sinica Chimica, 2021.
- [7] 刘峰,韩春硕,郁林军,等.分子动力学模拟表面活性剂驱油的研究进展与展望[J].油气地质与采收率,2024,31(3):78-87.
- [8] Yuan M, Nie W, Zhou W, et al. Determining the effect of the non-ionic surfactant AEO9 on lignite adsorption and wetting via molecular dynamics (MD) simulation and experiment comparisons[J]. Fuel, 2020, 278:118339.
- [9] Jin H, Zhang Y, Dong H, et al. Molecular Dynamics Simulations and Experimental Study of the Effects of an Ionic Surfactant on the Wettability of Low-Rank Coal[J]. Social Science Electronic Publishing[2024-11-27].
- [10] 刘硕.矿井喷雾降尘表面活性剂作用机理的分子模拟研究[D].太原:太原理工大学,2012.