

浮选药剂性能判据应用进展

刘文刚^{1,2}, 丁盛院², 赵亮³, 郑永兴¹, 刘文宝²

1. 省部共建复杂有色金属资源清洁利用国家重点实验室, 云南 昆明 650093;
2. 东北大学 资源与土木工程学院, 辽宁 沈阳 110819;
3. 辽宁工程技术大学 矿业学院, 辽宁 阜新 123000

中图分类号: TD91; TD923^{·1} 文献标识码: A 文章编号: 1001-0076(2023)03-0017-05
DOI: 10.13779/j.cnki.issn1001-0076.2023.03.002

摘要 随着药剂性质研究理论和方法的不断进步, 浮选药剂构效关系也从定性分析逐步转变至定量研究阶段。定量研究的关键是确定一些可预先判断药剂分选性能的原理或准则, 即浮选药剂性能判据。介绍了目前常见的浮选药剂性能判据及其优缺点, 以期高效浮选药剂的研发提供依据。性能判据按大类可分为药剂性质判据、基团或键合原子性质判据以及结合能判据等。这些判据多关注药剂与矿物表面的作用过程, 导致其在使用过程中多起到筛选作用。为开发新型高效的浮选药剂, 需要依托浮选药剂与矿物作用强弱的表征理论和方法, 有针对性地选取浮选药剂性质参数, 建立性质参数与作用强弱的相关关系, 从而形成新的、更高效的药剂性能判据。

关键词 浮选药剂; 性能判据; 药剂性质; 基团或键合原子性能; 结合能; 应用进展

高效浮选药剂的设计一直是国内外学者关注的重点。按照时间划分, 浮选药剂设计大致可分为三个阶段: (1) 初级阶段为经验筛选阶段。在此过程中, 研究者借鉴分析化学相关知识, 将部分有机试剂引入浮选过程, 筛选出可用于选别的试剂。(2) 第二阶段, 研究者侧重药剂理化性质的研究, 通过探究药剂理化性能参数与其浮选性能的相关关系, 明确药剂选择的依据, 并据此提出了一些进行浮选药剂结构设计和筛选的原则与方法, 用于预测药剂浮选性能的强弱, 如“化学反应假说”、“溶度积假说”^[1]、XAF 原理^[2]、配合物稳定常数^[3]和电化学原理^[4]等。随着浮选药剂作用机理研究的深入, 药剂基团或键合原子性质与浮选性能的相关关系也逐渐成为研究的重点。基于此, 研究者形成了基团电负性原理^[5]、同分异构原理^[6]、分子轨道法^[7]等浮选药剂设计方法。但这些方法仅仅能解释特定条件、特定体系下的现象, 缺乏普适性和准确性^[8]。(3) 近年来, 随着量子化学和计算化学的快速发展, 借助计算模拟技术开展药剂分子结构设计的相关研究逐渐增多, 计算模拟方法的可靠性也逐渐被证实^[9]。由此形成了浮选药剂设计的第三个阶段, 即运用计算机模拟法直观地进行药剂分子结构设计, 并且

从微观层面模拟药剂与矿物表面的吸附过程^[10]。在此过程中, 人们通过计算药剂与矿物表面作用的能量变化^[11-12]来获得两者的作用结合能, 用于表征药剂与矿物作用能力的强弱。与前两个阶段相比, 计算机模拟法可以更直观地进行药剂分子结构设计, 并且从微观层面模拟药剂与矿物表面的吸附过程。

近年来, 随着药剂性质研究理论和方法的不断进步, 浮选药剂结构与性能关系也从定性分析逐步转变为定量研究。定量研究的关键是确定一些可预先判断药剂分选性能的原理或准则, 即浮选药剂性能判据。目前常见的判据按大类可分为药剂性质判据、基团或键合原子性质判据以及结合能判据等。

1 药剂性质判据

药剂性质判据以实际检测结果为判定准则, 包含了药剂与金属离子配合物稳定常数、表面活性剂临界胶束浓度(CMC)和亲水-亲油平衡值(HLB)等。

配合物稳定常数用以表征药剂与金属离子形成配合物的稳定性。基于此, Marabini^[13]提出使用配合物稳定常数作为判据, 用以筛选新型螯合浮选捕收剂。虽然配合物稳定常数作为判据有成功设计药剂的案

收稿日期: 2023-08-11

基金项目: 省部共建复杂有色金属资源清洁利用国家重点实验开放基金(CNMRCUKF2201)

作者简介: 刘文刚(1981—), 男, 山东潍坊人, 教授、博士生导师, 主要从事新型浮选药剂开发及含镁非金属高效利用方面相关研究, E-mail: liuwengang@mail.neu.edu.cn。

例,但矿物表面金属离子所处化学状态有别于游离金属离子。此外,配合物稳定常数为实际测量结果,但在药剂设计过程中不可能测试所有药剂的配合物稳定常数,因此该方法在实际使用过程中具有很大的局限性。

表面活性剂分子在溶剂中缔合形成胶束的最低浓度即为临界胶束浓度(CMC)^[14]。CMC数值的大小可用来表征药剂的亲疏水性。其数值越小,药剂的疏水性越大^[15]。亲水-亲油平衡值(HLB)是评价药剂乳化的重要指标^[16]。HLB数值越大,则药剂亲水性越强,分散性越好。以上参数均为表面活性剂重要的功能性指标,且二者存在一定线性关系。因此,在浮选药剂设计过程中,可根据CMC或HLB数值大小,判定药剂类型、预测药剂捕收能力以及确定药剂中极性基团和非极性基团的比例关系。王淀佐院士根据HLB数值大小对浮选药剂的用途进行了量化分类^[15],结果表明,当HLB为1~4之间时,药剂可作为氧化矿捕收剂;HLB为4~7时,药剂可用作硫化矿捕收剂;当HLB为5~7时,药剂可作为起泡剂;当HLB>8以后,药剂则可作为抑制剂。

2 基团或键合原子性质判据

随着药剂作用机理研究的不断深入,研究者对药剂研究的重点逐渐转为药剂内各组成基团和原子的微观特性。同时,根据药剂分子内基团的功能属性,将其分为非极性基团和极性基团。非极性基团以烃基为主,主要起疏水作用。而极性基团又可分为亲水基和亲固基,其中,亲固基除亲水作用外,也完成了对矿物表面的吸附,是现阶段浮选药剂研究的重点。而浮选药剂分子中基团电负性与物理化学性质及其性能密切相关,所以可以通过基团电负性来判断浮选药剂性能^[17]。

2.1 基团电负性原理

电负性是原子吸引电子能力的标度^[18],电负性越大,原子吸引电子能力越强。原子电负性不是单一固定值,在不同化合物中,原子电负性通常不同。药剂分子中键合原子吸引电子能力强弱需使用基团电负性进行表征^[15]。浮选过程中,药剂与矿物表面产生吸附作用,发生电子偏移。研究者认为,药剂分子基团电负性大小可表征电子偏移强弱,从而预测药剂对矿物的作用能力。

陈建华^[9]提出了浮选有机药剂分子亲固基计算公式,对于硫化矿药剂的亲固基团的电负性值要小3.5,且电负性越小,其与矿物表面作用越强;对于氧化矿药剂的亲固基团的电负性值要大于3.5,且电负性越大,其与矿物表面作用越强。

刘文刚^[19]采用王淀佐院士提出的基团电负性公

式^[20]对N-十二烷基-1,3-丙二胺、N-十二烷基乙二胺和十二胺的基团电负性进行了计算,研究结果表明,二元胺的电负性为3.94,十二胺的电负性为3.75,均大于3.5,三种药剂均可作为氧化矿物捕收剂;同时,二元胺电负性更强,依据基团电负性原理,其对氧化矿的捕收能力强于十二胺,这与单矿物浮选试验结果相一致。

2.2 量子化学参数

量子化学计算可以从电子层面分析药剂与矿物的理化性质、药剂与矿物作用的本质、药剂结构与性能之间的关系,来判定各种浮选药剂在不同矿物表面的作用形式和强度,以预测新型捕收剂对目的矿物的选择性和捕收能力,节省实验成本和时间。随着量子化学计算技术的发展,使得分子许多微观性质,如电子轨道组成、偶极矩、电子密度、能量、态密度等都可以计算得出。

刘广义^[21]采用量子化学的从头计算方法,研究了N接取代基对硫化铜矿硫氨酯捕收剂选择性的影响,通过计算捕收剂的前线轨道能量、前线轨道组成,原子电荷分布等性质,算得捕收剂得电子能力。计算结果可知N接取代基团的给电子能力强弱顺序为:乙基>烯丙基>乙氧羰基。

曹飞^[22]探寻捕收剂的前线轨道性质与其浮选性能之间的相关性,预测了硫化矿硫胺酯类捕收剂的选择性,通过理论预测筛选出了选择性最佳捕收剂,并通过浮选试验对预测结果进行了验证。钟宏^[23]为消除黄药的刺激性臭味,根据气味分子的结构理论,向黄药分子中引入酰氨基团,设计了两种新型黄药,即N-乙酰氨基乙基钾黄药和N-苯甲酰氨基乙基钾黄药。通过密度泛函理论计算了新型黄药与传统黄药量化参数的差异,研究结果表明,新型黄药的HOMO值大小相近,且弱于乙基钠黄药HOMO值,表明新型药剂的捕收能力弱于传统黄药,与单矿物浮选试验结果相符。为阐释烷基取代基对黄药化学反应活性的影响,研究者^[24]分别计算了黄药及其衍生物的电子化学势、亲电指数、电偶极矩和化学硬度等,计算结果显示,戊基黄药的电子化学势、亲电指数和HOMO值最大,异丁基黄药次之,乙基黄药最小,浮选试验对性能的分析与理论分析一致。但运用量子化学参数对药剂浮选性能进行预测时,预测结果与实际浮选效果有时存在差异。

2.3 定量构效关系

由于单一参数对于药剂浮选性能判定存在不足,国内外研究者逐渐开展了药剂结构与性能的定量构效关系研究,即以药剂分子结构参数作为自变量、药剂浮选性能作为因变量,通过数理统计方法建立两者

之间的定量关系方程^[25]。Hansch^[26]在结构-活性相关关系(SAR)研究的基础上,引入定量计算部分,建立了定量结构-活性关系(QSAR)模型,至此构效关系研究进入定量表征时代。在浮选药剂设计方面,我国对药剂结构与其浮选性能间的定量构效关系研究起步较早。王淀佐院士介绍了浮选剂结构-活性定量关系的建立方法^[27],将浮选药剂结构参数按照特性分为三大类,价键因素、疏水/亲水因素和立体因素,分别建立了三类结构特性参数与药剂性能的定量构效关系方程。

目前药剂结构-性质定量构型关系研究过程中亟待解决的问题是如何既保障拟合方程的有效性,又降低方程建立的难度。对当药剂结构的考察对象进行限定,可以提前排除与考察对象关联性不强的参数,降低方程建立所需样本数量^[28]。含有酯基、双极性基团和不对称分子结构的季铵盐具有良好的选择性。胡岳华^[29]采用QSAR方法研究了20种季铵盐结构与水铝石和高岭石浮选选择性之间的相关关系,建立预测模型,筛选了三种新型高选择性的季铵盐类捕收剂,浮选试验与预测结果相一致。谭鑫^[30]利用QSAR方法分别研究羟肟酸以及有机膦酸类捕收剂对钨锡矿物与萤石的分离选择性,并使用该方法设计合成了三种新型的二酰亚胺羟肟酸捕收剂,理论计算与试验结果基本相符。但是定量构效关系模型建立也存在许多亟待解决的难题,如数据收集方面,需要大量准确可靠的实验数据进行支撑;描述符选取方面,要求药剂描述符间应具有代表性和独立性,避免相互干扰;模型建立方面,存在诸多线性或非线性建模方法,需要根据样本特性进行建模方法的选取^[31]。

3 结合能判据

利用计算机模拟技术来模拟药剂与矿物表面作用过程,再通过量子化学或分子动力学计算,可获得作用前后体系的能量。结合能等于作用后体系能量与作用前体系能量之差,可描述药剂与矿物吸附作用的强弱。结合能数值越负,说明矿物对的药剂吸附作用越强。

Swagat^[32]计算了酯胺、醚胺和脂肪胺捕收剂与石英表面作用的结合能,结果表明,酯胺与石英的结合能最大、醚胺次之、脂肪胺最小,预测结果与实际浮选试验结果一致^[33]。虽然结合能可以表征药剂与矿物表面作用的强弱,但浮选是一种湿法分选过程,水分子会影响药剂与矿物间的相互作用。利用结合能表征捕收剂与矿物作用强弱时,需要考虑水分子对体系结合能的影响。但对于基于密度泛函理论计算方法,溶液环境下药剂与矿物表面作用模型难以构建,影响模拟结果的有效性。

分子动力学模拟是以经典力学方程描述体系状

态的方法。应用时,系统内各原子运动轨迹通过牛顿经典力学方程计算求得,而各热力学参数则通过统计热力学计算求得^[34]。与量子化学模拟方法相比,分子动力学模拟方法具有求解过程简单、计算量小等特点。经典分子动力学模拟可以通过定向吸附预测浮选药剂分子结构,并通过吸附构型研究不同药剂在矿物表面的吸附差异有效筛选浮选性能好的单一浮选药剂和具有协同作用的组合浮选药剂^[35]。郭丽娜^[36]研究了十二胺盐酸盐(DAH)和十二胺聚氧乙烯醚(AC1201)对煤系高岭石的浮选和作用机理。当药剂浓度为750 g/t时,AC1201可较好地浮选高岭石。还构建DAH和AC1201单分子在高岭石(001)面的最优吸附构型,计算结果表明十二胺聚氧乙烯醚与高岭石的作用距离小于十二胺盐酸盐与高岭石的作用距离,并且十二胺聚氧乙烯醚具有较大的作用面积和较低的吸附能,理论计算对药剂性能的推测与试验结果反应的药剂性能一致。Albjanic^[24]等人通过分子动力学模拟方法,研究了非离子型捕收剂分子极性对其捕收性能的影响,由结合能和偶极矩可知,分子极性越大,非离子型捕收对高岭石的结合能越大,其捕收能力越强。除了可以模拟真空环境,分子动力学模拟方法还可以模拟溶液环境下药剂与矿物表面作用过程。但经典分子动力学模拟忽略了电子极化效应无法用来研究原子之间电荷转移以及成断键相关信息,而且由于过分依赖力场,分子力场的局限性使得力场参数无法直接应用于不同浮选体系^[35]。

4 结论

综上所述,以药剂性质、基团或键合原子性质以及结合能为判据来进行浮选药剂性能的判断各有其优缺点。而以药剂本身性质参数作为判据开展药剂性能的初步判断,优势在于可以根据性质参数直接对药剂分子结构进行筛选优化,但忽略了矿物性质对药剂性能的影响,使得这类判据进行浮选药剂设计时具有较大局限性。由药剂与矿物作用前后体系状态变化值作为判据,如配合物稳定常数判据和结合能判据,优势在于应用范围广、预测准确度高,适用于不同药剂作用能力的判断。而目前传统浮选药剂对当前工艺要求的适应性逐渐变差,亟需开展高效浮选药剂研发,以提高矿产资源综合利用效率。虽然浮选药剂分子结构设计方法众多,但现有方法多以药剂结构与其性能之间的定性表征为主,而已有的定量设计方法则存在适用性、科学性和准确性不足等问题,造成浮选药剂设计方法缺乏针对性和实用性。因此有针对性的选取浮选药剂性质表征参数,形成新的、更高效的浮选药剂性能判据,对丰富浮选药剂分子结构设计理论,开发高效的浮选药剂具有重要意义。

参考文献:

- [1] 王淀佐, 邱冠周, 胡岳华. 资源加工学[M]. 北京: 科学出版社, 2005.
WANG D Z, QIU G Z, HU Y H. Science of resource processing[M]. Beijing: Science Press, 2005.
- [2] ГЛЕМБОЦКИЙ А В, 韩树山. 已知性质的浮选药剂的寻找与《设计》[J]. 国外金属矿选矿, 1973(10): 42-44.
ГЛЕМБОЦКИЙ А В, HAN S S. Search and design of flotation reagents with known properties[J]. Beneficiation of metal ore abroad, 1973(10): 42-44.
- [3] 王淀佐. 选矿与冶金药剂分子设计[M]. 长沙: 中南工业大学出版社, 1996.
WANG D Z. Molecular Design of reagent in Mineral Processing and Metallurgy [M]. Changsha: Central South University of Technology Press, 1996.
- [4] 朱玉霜. 浮选药剂的化学原理[M]. 长沙: 中南工业大学出版社, 1996.
ZHU Y S. Chemical principle of flotation reagent [M]. Changsha: Central South University of Technology Press, 1996.
- [5] 陈建华, 冯其明, 卢毅屏. 浮选药剂亲固基团的设计[J]. 有色金属, 1999, 51(2): 19-23.
CHEN J H, FENG Q M, LU Y P. Design of solidophilic groups of flotation reagents[J]. Nonferrous Metals, 1999, 51(2): 19-23.
- [6] 朱建光, 伍喜庆. 同分异构原理在合成氧化矿捕收剂中的应用[J]. 有色金属, 1990, 42(3): 32-38.
ZHU J G, WU X Q. Application of isomerism principle in the synthesis of oxide ore collector[J]. Nonferrous Metals, 1990, 42(3): 32-38.
- [7] LIU R Q, SUN W, HU Y H, et al. New collectors for the flotation of unactivated marmatite[J]. *Minerals Engineering*, 2010, 23(2): 99-103.
- [8] 张行荣, 刘龙利, 吴桂叶, 等. 浮选药剂分子结构设计原理概述[J]. 矿冶, 2013, 22(3): 25-29.
ZHANG X R, LIU L L, WU G Y et al. Overview of molecular structure design principle of flotation reagents[J]. *Mining and Metallurgy*, 2013, 22(3): 25-29.
- [9] 王福良, 孙传尧. 利用分子力学分析黄药捕收剂浮选未活化白铅矿的浮选行为[J]. 国外金属矿选矿, 2008(6): 25-27.
WANG F L, SUN C Y. Analysis of Flotation behavior of unactivated white lead ore by Xanthate collector using molecular mechanics[J]. Foreign metal ore processing, 2008(6): 25-27.
- [10] HUANG Z Q, ZHONG H, WANG S, et al. Gemini trisiloxane surfactant: Synthesis and flotation of aluminosilicate minerals[J]. *Minerals Engineering*, 2014, 56: 145-154.
- [11] PRADIP, RAI B. Molecular modeling and rational design of flotation reagents[J]. *International Journal of Mineral Processing*, 2003, 72(1/2/3/4): 95-110.
- [12] 吴桂叶, 张杰, 李松清, 等. 一种氟碳铈矿捕收剂的设计筛选及浮选性能研究[J]. 中国矿业, 2014, 23(2): 273-275.
WU G Y, ZHANG J, LI S Q, et al. Research on design, screening and flotation performance of a cerium fluocarbon collector[J]. *China Mining Industry*, 2014, 23(2): 273-275.
- [13] MARABINI A M, CIRIACHI M, PLESCIA M, et al. Chelating reagents for flotation[J]. *Minerals Engineering*, 2007, 20(10): 1014-1025.
- [14] 任霞, 王珏, 孙会敏, 等. 表面活性剂临界胶束浓度测定方法的建立和比较[J]. 中国药事, 2019, 34(8): 916-924.
REN X, WANG J, SUN H M, et al. Establishment and comparison of methods for determination of critical micelle concentration of surfactants[J]. *Chinese Journal of Pharmaceutical Sciences*, 2019, 34(8): 916-924.
- [15] 王淀佐. 浮选药剂的结构与性能——一百种含硫有机浮选剂的分子设计[J]. 有色金属(选矿部分), 1979(2): 12-26.
- WANG D Z. Structure and properties of flotation reagents—Molecular design of one hundred sulfur-containing organic flotation agents[J]. *Nonferrous Metals (Mineral Processing Section)*, 1979(2): 12-26.
- [16] 高山, 麻军法. 精制蛋黄卵磷脂亲水-亲油平衡值测定及其在鸦胆子油乳注射液中的应用[J]. 中国药业, 2011, 20(20): 21-23.
GAO S, MA J. Determination of hydrophilic and lipophilic balance value of lecithin from refined egg yolk and its application in Brucea javanica oil Emulsion injection[J]. *China Pharmaceutical Industry*, 2011, 20(20): 21-23.
- [17] 李敏. 电负性标度及其应用[D]. 大连: 大连理工大学, 2012.
LI M. Electronegativity scale and its application [D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2012.
- [18] 冯成建, 张建树. 用电负性原理定量计算捕收剂非极性基长度的意义及应用[J]. 矿产综合利用, 2003(4): 15-19.
FENG C J, ZHANG J S. Significance and application of quantitative calculation of non-polar base length of collector based on electronegativity principle[J]. *Comprehensive Utilization of Mineral Resources*, 2003(4): 15-19.
- [19] 刘文刚. 新型赤铁矿反浮选脱硅捕收剂的合成及浮选性能研究[D]. 沈阳, 东北大学, 2010.
LIU W G. Synthesis and flotation performance of a new type of hematite desilication collector [D]. Shenyang, Northeast University, 2010.
- [20] 王淀佐. 浮选剂作用原理及应用[D]. 北京: 冶金工业出版社, 1982.
WANG D Z. Principle and Application of flotation agent [D]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 1982.
- [21] LIU G Y, ZHONG H, DAI T G. Investigation of the effect of N-substituents on performance of thionocarbamates as selective collectors for copper suldes by abinitio calculations[J]. *Minerals Engineering*, 2008, 21: 1050-1054.
- [22] 曹飞. 基于密度泛函理论的硫氨基酯捕收剂的设计合成及机理研究[D]. 北京科技大学, 2016.
CAO F. Design, synthesis and mechanism study of thiamine ester collector based on density functional theory [D]. University of Science and Technology Beijing, 2016.
- [23] 钟宏, 张湘予, 马鑫, 等. 酰氨基黄药的制备及其对黄铜矿、黄铁矿的浮选性能研究[J]. 矿产保护与利用, 2021, 41(2): 10.
ZHONG H, ZHANG X Y, MA X, et al. Study on preparation of acyl-amino xanthate and its flotation performance to chalcopyrite and pyrite [J]. *Mineral Protection and Utilization*, 2021, 41 (2) : 10.
- [24] YANG X L, ALBIJANIC B, LIU G Y, et al. Structure-activity relationship of xanthates with different hydrophobic groups in the flotation of pyrite[J]. *Minerals Engineering*, 2018, 125: 155-164.
- [25] 张丹, 晁聪, 李玉坤, 等. 定量构效关系应用于水中有机污染物降解过程的研究进展[J]. 化工环保, 2021, 41(4): 418-426.
ZHANG D, CHAO C, LI Y K, et al. Research progress of quantitative structure-activity relationship applied to the degradation process of organic pollutants in water [J]. *Chemical Environmental Protection*, 2021, 41 (4) : 418-426.
- [26] HANSCH C, MALONEY P P, FUJITA T, et al. Correlation of biological activity of phenoxyacetic acids with Hammett substituent constants and partition coefficients[J]. *Nature*, 1962, 194: 178-180.
- [27] 王淀佐. 浮选剂的结构与性能(I)[J]. 中南矿冶学院学报, 1980(4): 7-15.
WANG D Z. Structure and Properties of flotation agent (I)[J]. *Journal of Central South Institute of Mining and Metallurgy*, 1980(4): 7-15.
- [28] YANG X L, ALBIJANIC B, ZHOU Y, et al. Using 3D-QSAR to predict the separation efficiencies of flotation collectors: Implications

- for rational design of non-polar side chains[J]. *Minerals Engineering*, 2018, 129: 112–119.
- [29] HU Y H, CHEN P, SUN W. Study on quantitative structure–activity relationship of quaternary ammonium salt collectors for bauxite reverse flotation[J]. *Minerals Engineering*, 2012, 26: 24–33.
- [30] 谭鑫. 钨锡矿物螯合捕收剂靶向性分子设计及其作用机理研究[D]. 东北大学, 2017.
- TAN X. Study on molecular design and mechanism of targeting of Tungsten–tin mineral chelating collector [D]. Northeastern University, 2017.
- [31] 陈硕, 李非凡, 孙国辉, 等. QSAR 建模及其在抗病毒药物设计与筛选中的研究进展[J]. *化学试剂*, 2021, 43(7): 895–905.
- CHEN S, LI F F, SUN G H, et al. Research progress of QSAR modeling and its application in antiviral drug design and screening [J]. *Chemical Reagents*, 21, 43 (7) : 895–905.
- [32] RATH S S, SAHOO H, DAS B, et al. Density functional calculations of amines on the (101) face of quartz[J]. *Minerals Engineering*, 2014, 69: 57–64.
- [33] REN L Y, QIU H, ZHANG Y M, et al. Effects of alkyl ether amine and calcium ions on fine quartz flotation and its guidance for upgrading vanadium from stone coal[J]. *Powder Technology*, 2018, 338: 180–189.
- [34] 薛正扬. 石墨烯量子点在生物医学中应用的分子动力学研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2019.
- XUE Z Y. Molecular dynamics of graphene quantum dots applied in biomedicine [D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2019.
- [35] 郝海青, 李丽匣, 张晨, 等. 经典分子动力学模拟在矿物浮选研究中的应用[J]. *矿产保护与利用*, 2018(3): 9–16.
- HAO H Q, LI L X, ZHANG C et al. Application of classical molecular dynamics simulation in mineral flotation[J]. *Mineral Conservation and Utilization*, 2018(3): 9–16.
- [36] 郭丽娜, 李志红, 朱张磊, 等. 阳离子捕收剂对高岭石的捕收性能及动力学模拟[J]. *中国矿业*, 2017, 26(5): 112–116+121.
- GUO L N, LI Z H, ZHU Z L et al. Performance and kinetics simulation of cationic collector for kaolinite[J]. *China Mining Industry*, 2017, 26(5): 112–116+121.

Application Progress for Performance Criteria of Flotation Reagents

LIU Wengang^{1,2}, DING Shengyuan², ZHAO Liang³, ZHENG Yongxing¹, LIU Wenbao²

1. State Key Laboratory of Complex Nonferrous Metal Resources Clean Utilization, Kunming 650093, Yunnan, China;

2. School of Resources and Civil Engineering, Northeastern University, Shenyang 110819, Liaoning, China;

3. School of Mining, Liaoning Technical University, Fuxin 123000, Liaoning, China

Abstract: With the development of the theory and method of chemical properties research, the relationship between the structure and properties of flotation reagents has gradually changed from qualitative analysis to quantitative research. The key of quantitative research is to determine some principles or criteria that can judge the separation performance of reagents in advance, that is, the performance criteria of flotation reagents. This paper briefly introduces the common design criteria of flotation agents and their advantages and disadvantages, in order to provide a basis for the research and development of high-efficiency flotation agents. The design criteria can be divided into chemical property criterion, group or bonded atom property criterion and binding energy criterion. These criteria pay more attention to the interaction process between the reagent and the mineral surface, which leads to its screening function in the process of use. In order to develop novel and efficient flotation agents, it is necessary to rely on the characterization theory and method of the strength of the flotation reagents and minerals, select the property parameters of flotation reagents and establish the correlation between the property parameters and the strength of the action, so as to form a novel and more efficient performance criterion of flotation reagents.

Keywords: flotation reagent; performance criteria; chemical property; group or bonded atom property; binding energy; application progress

引用格式: 刘文刚, 丁盛院, 赵亮, 郑永兴, 刘文宝. 浮选药剂性能判据应用进展[J]. *矿产保护与利用*, 2023, 43(3): 17–21.

LIU Wengang, DING Shengyuan, ZHAO Liang, ZHENG Yongxing, LIU Wenbao. Application progress for performance criteria of flotation reagents[J]. *Conservation and Utilization of Mineral Resources*, 2023, 43(3): 17–21.

投稿网址: <http://kcbhyly.xml-journal.net>

E-mail: kcbh@chinajournal.net.cn



作者简介:

刘文刚, 教授, 博士生导师, 东北大学资源高效利用与过程仿真研究所所长, 辽宁省固废产业技术创新研究院副院长, 国家级青年人才计划入选者、辽宁省“兴辽英才计划”青年拔尖人才。主要研究方向为浮选理论与工艺、非金属矿高效利用以及矿山固废资源化。承担省部级以上纵向项目 30 余项, 发表学术论文 180 余篇, 出版教材/专著 5 部, 授权发明专利 19 项; 获绿色矿山科学技术一等奖、辽宁省科技进步二等奖等省部级以上科技奖励 7 项。现担任国家非金属矿资源综合利用工程技术研究中心技术委员会委员、硼镁资源开发与精细化工技术国家地方联合工程实验室学术委员会委员、辽宁省化工学会资源化工与材料专业委员会副主任委员, 任《金属矿山》《矿产保护与利用》《黄金》等期刊编委。