doi: 10.20239/j.issn.1671-9492.2026.08.030

硫氨酯的捕收能力强化及浮选机理研究

陈奕扬[1],关 健[1],凌全帆[2],杨 琦[1],吕心扬[1],曹 飞[1],邱仙辉[2],孙德四[1]

(1. 九江学院 化学化工学院,江西 九江 332005;
2. 江西理工大学 矿业工程学院,江西 赣州 341000)

摘 要: 随着难选硫化铜矿石增多,强化捕收剂O-异丙基-N-正乙基硫氨酯(Z-200)的捕收能力,对提高黄铜矿的浮选效率具有重要作用。本文设计了一种新型捕收剂,O-异丙基-N-正戊基硫氨酯(IPPTC)。先采用密度泛函理论计算IPPTC的电子结构,利用前线轨道理论预测IPPTC的捕收能力强于Z-200;之后合成出IPPTC,进行浮选验证试验,并采用吸附量、表面张力、接触角、Zeta电位及红外光谱等研究IPPTC在矿物表面的吸附机理。浮选和吸附量试验结果证实,IPPTC的捕收能力优于Z-200,与理论预测相一致。表面张力和接触角试验结果表明,IPPTC能显著增大黄铜矿表面的疏水性,且强于Z-200。Zeta电位和红外光谱测试推断IPPTC在黄铜矿表面发生的是化学吸附,而在黄铁矿表面发生的是物理吸附。增长硫氨酯分子中与N原子相连的烃基长度,可增强硫氨酯捕收剂的捕收能力。本文丰富了铜硫分离捕收剂的分子结构和浮选性能之间的关系,为设计新型铜硫分离捕收剂提供了理论依据。

关键词: 铜硫分离;硫氨酯;捕收能力;前线轨道理论;吸附机理

中图分类号: TD923^{+}.13 **文献标志码:** A **文章编号:** 1671-9492(2026)08-0336-08

Enhancement of Collecting Capacity and Flotation Mechanism of Thionocarbamate

Chen Yiyang[1], Guan Jian[1], Ling Quanfan[2], Yang Qi[1], Lü Xinyang[1], Cao Fei[1],
Qiu Xianhui[2], Sun Desi[1]

(1. School of Chemistry and Chemical Engineering, Jiujiang University, Jiujiang 332005, Jiangxi, China;
2. School of Mining Engineering, Jiangxi University of Science and Technology, Ganzhou 341000, Jiangxi, China)

Abstract: With the increasing exploitation of refractory copper sulfide ores, enhancing the collecting capacity of the collector O-isopropyl-N-ethyl thionocarbamate (Z-200) is of great significance for improving the flotation efficiency of chalcopyrite. In this study, a novel collector, O-isopropyl-N-pentyl thionocarbamate (IPPTC), was designed and synthesized. Density functional theory (DFT) calculations were first employed to analyze the electronic structure of IPPTC, and its collecting capacity was predicted based on frontier molecular orbital theory. Subsequently, flotation experiments were carried out to evaluate its flotation performance, and the adsorption mechanism of IPPTC on mineral surfaces was investigated by adsorption capacity, surface tension, contact angle, Zeta potential and infrared spectroscopy analyses. The flotation and adsorption results indicated that IPPTC exhibited stronger collecting capacity toward chalcopyrite than Z-200, which was consistent with the theoretical prediction. Surface tension and contact angle measurements showed that IPPTC could significantly enhance the hydrophobicity of the chalcopyrite surface, and its hydrophobic modification ability was stronger than that of Z-200. Zeta potential and infrared spectroscopy analyses inferred that IPPTC was chemically adsorbed on the chalcopyrite surface, whereas only physical adsorption occurred on the pyrite surface. Increasing the hydrocarbon chain length connected to the nitrogen atom in thionocarbamate molecules could enhance the collecting capacity of thionocarbamate collectors. This work enriches the understanding of the relationship between molecular structure and flotation performance of copper-sulfur separation collectors, and provides a theoretical basis for the design of novel selective collectors.

收稿日期: 2026-06-24
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(52374267);矿物加工科学与技术全国重点实验室开放基金资助项目(BGRIMM-KJSKL-2025-23)
作者简介: 陈奕扬(2006—),女,江西吉安人,本科生,主要从事铜硫分离捕收剂的设计合成研究。
通信作者: 曹 飞(1978—),男,江西都昌人,博士,副教授,主要从事浮选药剂的分子设计、合成及吸附机理研究。

Key words: copper-sulfide separation; thionocarbamate; collecting capacity; frontier molecular orbital theory; adsorption mechanism

0　引言

铜作为关键战略金属，对国家的经济、科技以及国防都有着重要意义[1]。随着全球对关键战略金属的需求不断增长，铜矿资源的高效利用的重要性日益跃升。铜金属的主要来源是通过黄铜矿浮选，由于黄铜矿常与黄铁矿致密共生[2-4]，要得到符合冶炼要求的铜精矿，必须进行黄铜矿和黄铁矿的浮选分离，铜硫分离是选矿领域的重要难题之一[5]。捕收剂对提高铜硫浮选分离效率具有关键作用。黄药和黑药虽然捕收能力强，但选择性差。随着入选矿石越来越贫细杂，难选硫化矿石增多，矿物之间浮选性能差异越来越小，选择性好的硫氨酯捕收剂被广泛应用于铜硫分离领域[6-7]。

为了提高铜硫分离效率，研究者通过对常规捕收剂进行结构改性，以提高捕收剂的浮选性能。在常规捕收剂分子O-异丙基-N-乙基硫氨酯(Z-200)中引入不饱和基团可增强硫氨酯捕收剂的选择性。Yang等[8]通过在硫氨酯分子中引入苯甲酰基设计并合成了一种新型硫氨酯捕收剂(EBZTC)，利用分子中C＝O与C＝S的共轭效应提升螯合能力，同时借助苯环与烷基提供疏水性，显著提升了黄铜矿的浮选回收率；Sun等[9]在硫氨酯分子中引入异丁基与烯丙基结构，合成的新型捕收剂IBATC对黄铜矿表现出优异的浮选选择性，可实现黄铜矿与黄铁矿、闪锌矿的高效分离。然而，这些化合物存在合成原料成本比较高，合成难度高等不足。如果能对常规捕收剂Z-200进行比较简单的结构改性，同时又能有效提高它的浮选性能，对铜硫分离捕收剂分子的构效关系研究有一定的理论和现实意义。

目前关于铜硫分离捕收剂的研究主要集中在它们与硫化矿物的吸附机理上[10]，对其结构与性能的关系研究多为定性，缺乏系统的理论研究。要实现高效铜硫分离捕收剂的快速准确筛选，需要明晰捕收剂的性质参数、分子结构和浮选性能之间的内在联系。由于捕收剂的分子结构和性质参数众多，传统方法是将所有构型的捕收剂都合成出来，再进行浮选试验，研究成本和工作量将是巨大的，短期内难以完成。本文将量子化学计算与浮选理论相结合，利用前线轨道理论先对新型捕收剂的浮选性能进行预测，再进行浮选试验及浮选机理研究。这样可以先行排除一些浮选性能不好的捕收剂，减少了浮选试验次数，靶向性更强，大大降低药剂研发周期和研究经费。现有同类改性硫氨酯研究大多兼顾捕收能力与分选选择性，而本文仅计划开展单矿物浮选对比捕收强弱，未设计混合矿分离试验，后续研究需弥补该短板，更全面评价药剂实际分选应用价值。

捕收剂的浮选性能可利用前线轨道理论解释。矿物和捕收剂间形成的化学键强弱取决于前线轨道的组成、能量，以及键合原子的静电荷大小。最高占据分子轨道(HOMO)上电荷密度最大的位置最易与亲电试剂反应。HOMO形状可直观地反映出HOMO的电荷密度，可据此推断出对HOMO贡献最大的原子，从而确定捕收剂的键合原子。再由自然布局分析(NPA)电荷确定键合原子所带的净电荷，从而判断捕收剂的捕收能力大小[11-12]。一般认为黄铜矿与捕收剂之间的化学反应为前线轨道控制反应，是由捕收剂的HOMO提供电子转移到硫化矿的最低未占分子轨道(LUMO)上。若捕收剂的最高占据分子轨道能量(E_{HOMO})越大，则其越容易失去电子，反应活性越强，故可由E_{HOMO}判断捕收剂分子的捕收能力大小。

硫氨酯捕收剂比黄药具有更好的选择性，但其捕收能力不如黄药[13]。如能增强硫氨酯的捕收能力，对提高铜硫浮选分离效率显得十分重要[14-18]。为此，本文对常规捕收剂分子Z-200进行结构改性，增长Z-200分子中与N原子相连的烃基链长，强化给电子基团[19-23]，构建新型硫氨酯分子O-异丙基-N-正戊基硫氨酯(IPPTC)。运用密度泛函理论(DFT)对IPPTC和Z-200分子进行量子化学计算，通过分析HOMO等量子化学参考，结合前线轨道理论，预测IPPTC分子的浮选性能。之后合成出目标分子，进行浮选试验，同时进行吸附量、表面张力、接触角、Zeta电位、IR等分析测试，研究IPPTC捕收剂在黄铜矿表面的浮选机理。验证前期对捕收剂浮选性能预测的准确性，判断该方法的可行性。本文对明晰铜硫分离捕收剂分子的基因特性，丰富捕收剂的筛选判据有非常重要的理论意义。

1　试验材料和方法

1.1　试验材料

试验中使用的黄铜矿、黄铁矿均取自湖北。使用

破碎、人工手选和瓷球干式磨矿，制得高纯度及高结晶度的黄铜矿、黄铁矿，收集粒度为－0.074 mm的矿样用于单矿物浮选试验，粒度为－0.037 mm的矿样用于吸附量、表面张力、Zeta电位及红外光谱等机理测试。硫氨酯捕收剂IPPTC和Z-200由实验室自主合成。

1.2 试验方法

1.2.1 DFT计算

使用Gaussian 09软件对捕收剂分子进行几何构型优化，计算选取B3LYP泛函和6-31+G(d)基组[24]，且考虑溶剂化效应(溶剂为水)，选用IEF-PCM模型。

1.2.2 浮选试验

单矿物浮选试验在XFG Ⅱ5型挂槽式浮选机上进行。每次称取1.60 g粒度为－0.074 mm矿物于小烧杯中，用去离子水后超声清洗3 min后，再置于50 mL浮选槽中；搅拌2 min，主轴转速为1 800 r/min；再依次加入pH值调整剂(用NaOH和HCl做pH值调整剂)，及已知用量的捕收剂，浮选5 min。浮选试验结束后，分别将泡沫产品和槽内产品干燥并称重，计算泡沫产品的回收率。

1.2.3 吸附量测定试验

采用UV-9000S型紫外可见分光光度计(上海元析仪器有限公司)测定捕收剂溶液吸光度，并建立捕收剂浓度与吸光度标准曲线。准确称取1.00 g粒级为－0.037 mm的单矿物样品，经超声清洗3 min后加入相应浓度的捕收剂溶液，使用去离子水定容至50 mL并调节矿浆pH值，置于六联搅拌器中搅拌25 min后静置取上清液，经针筒过滤器过滤后测定吸光度，并根据标准曲线计算溶液中捕收剂剩余浓度。捕收剂在矿物表面的平衡吸附量(mg/g)用以下公式计算：$Q_e=\frac{(\rho_0-\rho_e)V}{1000m}$。式中，$\rho_0$、$\rho_e$分别为吸附前后捕收剂的初始、平衡浓度，mg/L；$V$为溶液的体积，mL；$m$为矿物的质量，g。

1.2.4 表面张力测定

用三重蒸馏水分别配制一系列浓度的捕收剂溶液，测定其表面张力。称取1.00 g粒度为－0.074 mm的单矿物于小烧杯中，用三重蒸馏水超声清洗3 min后，倒掉上层水。再加入相应浓度的捕收剂溶液50 mL，磁力搅拌30 min后，静置沉降5 min，吸取上清液并经滤头过滤，得到待测液。

1.2.5 接触角测量

采用JY-PHb型接触角测定仪(河北金和仪器有限公司)测定矿物表面接触角。选取表面平整的块状黄铜矿和黄铁矿，经2 000目(0.006 5 mm)金相砂纸打磨后，置于去离子水中超声清洗6 min，以去除表面杂质及氧化层。处理后的矿样浸入pH=9的捕收剂溶液中作用30 min，取出后用氮气吹干，立即进行接触角测试。

1.2.6 Zeta电位测定

采用JS94H型微电泳仪测定矿物表面Zeta电位。称取0.1 g粒级为－0.037 mm的矿物样品，加入30 mL浓度为0.001 mol/L的KCl溶液中湿法研磨90 min，随后用KCl溶液稀释至100 mL。取50 mL矿浆加入捕收剂，经磁力搅拌15 min后，采用HCl和NaOH调节矿浆pH至2、4、6、8、10和12，测定不同pH条件下矿物表面Zeta电位变化。

1.2.7 红外光谱

称取1.0 g粒度为0.074 mm单矿物，用三头玛瑙研磨机研磨至－5 μm，超声清洗3 min，置于浮选槽中，加30 mL蒸馏水，按浮选流程，加入捕收剂、pH值调整剂(pH=9)，搅拌10 min后静置，将过滤后的矿样用蒸馏水洗涤3次，低温干燥后，进行红外测量。

2 试验结果与讨论

2.1 DFT计算

为了预测IPPTC的浮选性能，采用密度泛函理论计算IPPTC和Z-200的电子结构。计算所得捕收剂分子的前线轨道形状、能量(E_{HOMO})等性质如图1所示，IPPTC和Z-200分子的HOMO主要由C=S双键的成键轨道构成。依据HOMO的轨道形状推断IPPTC分子中C=S双键中的S原子为硫氨酯分子的键合原子。当捕收剂的E_{HOMO}越大，与矿物表面金属离子的E_{LUMO}越接近，矿物与捕收剂之间形成的正常共价键越强，从而对矿物有较强的捕收能力。本文

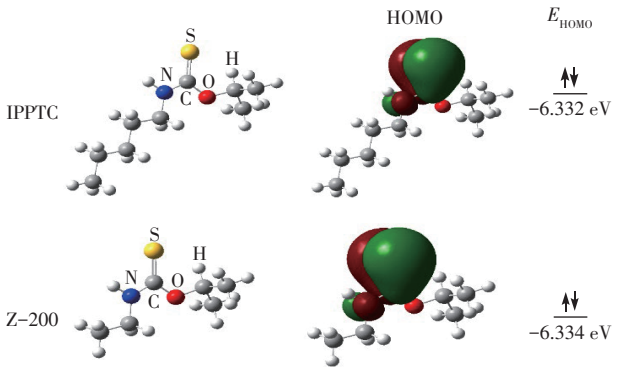


图1 IPPTC和Z-200的前线轨道特征

Fig. 1 Frontier orbital characteristics of IPPTC and Z-200

研究的是不同捕收剂与同一种矿物之间形成正常共价键的强弱，矿物的E_{LUMO}不变，故可依据捕收剂的E_{HOMO}大小推断其捕收能力。IPPTC分子的E_{HOMO}高于Z-200，表明其给电子能力更强，更容易与黄铜矿表面Cu离子形成化学键，由此推测IPPTC在黄铜矿表面的吸附能力更强。

2.2　浮选试验

IPPTC和Z-200的捕收剂用量对黄铜矿、黄铁矿浮选回收率的影响如图2(a)所示。IPPTC对黄铜矿的回收率在83.4%～91.3%内递增，均高于Z-200对黄铜矿的回收率(68.51%～76.76%)。IPPTC对黄铁矿的回收率在52.3%～75.8%内递增，也高于相应用量时Z-200对黄铁矿的回收率(18.15%～46.50%)。可见IPPTC对黄铜矿和黄铁矿的捕收能力均强于Z-200，与前期预测相吻合。

图2(b)列出了不同pH值条件下，IPPTC和Z-200两种捕收剂对黄铜矿、黄铁矿浮选回收率的影响。随着矿浆pH值增大，IPPTC和Z-200对黄铜矿浮选回收率的变化都不大，对黄铜矿具有较强的捕收能力，但IPPTC的回收率(77.48%以上)高于Z-200(62.20%～68.84%)。这两种捕收剂对黄铁矿的回收率，随着pH值的增大而逐渐减小。在pH=9、捕收剂用量为20 mg/L的条件下，IPPTC对黄铜矿和黄铁矿的回收率分别为78.20%和36.59%，IPPTC的分离系数(黄铜矿回收率/黄铁矿回收率)为2.14；而Z-200的对应回收率分别为64.94%和6.49%，分离系数为10.00，这表明在单矿物浮选条件下，IPPTC的捕收能力优于Z-200，但选择性不及Z-200。

2.3　吸附量测定

图3为不同捕收剂浓度和pH值对捕收剂在黄铜

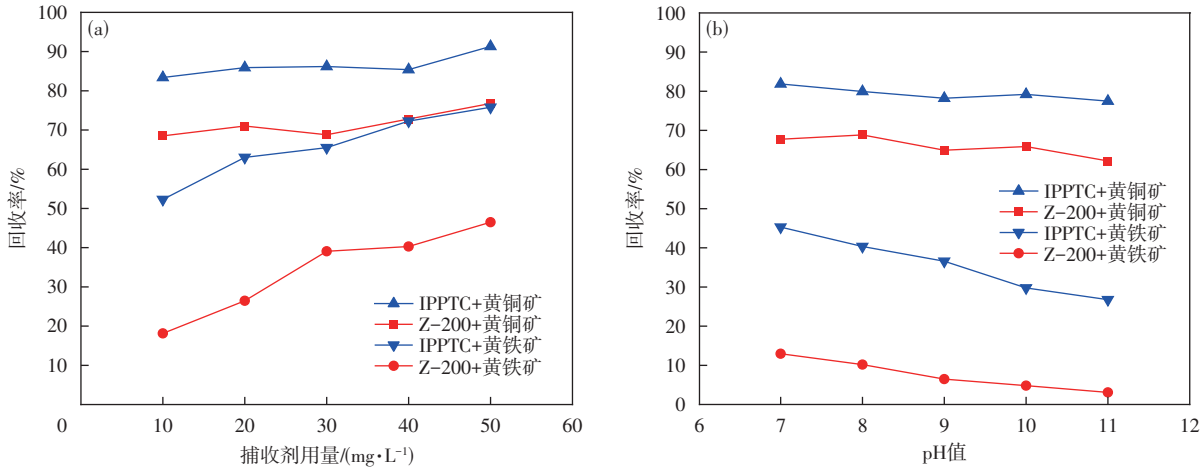


图2　捕收剂用量(a)和pH值(b)对黄铜矿和黄铁矿浮选回收率的影响

Fig. 2　Effects of collector dosage (a) and pH value (b) on the flotation recoveries of chalcopyrite and pyrite

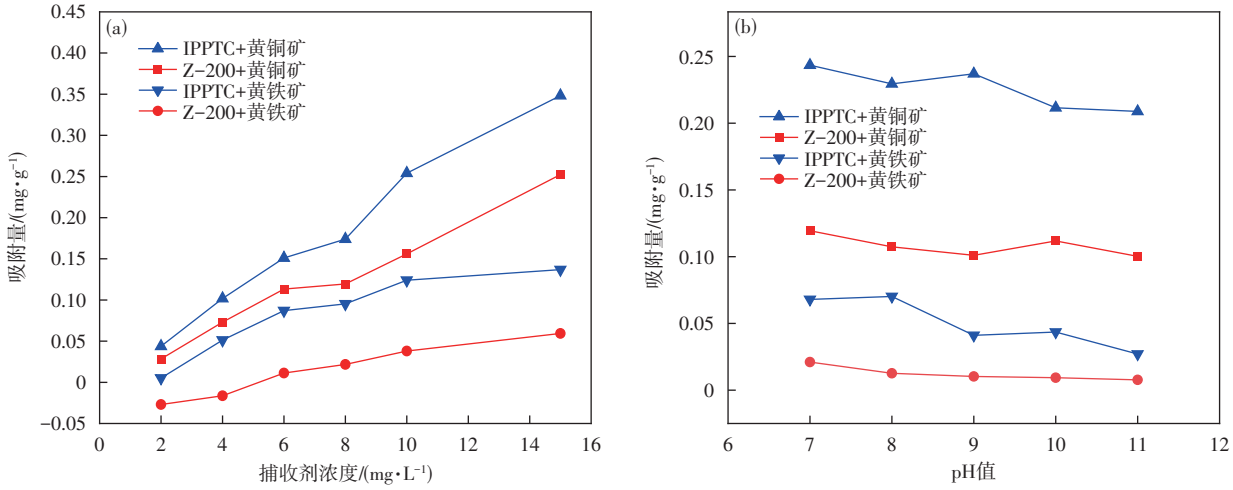


图3　捕收剂浓度(a)和pH值(b)对IPPTC与Z-200在黄铜矿和黄铁矿表面吸附量的影响

Fig. 3　Effects of collector concentration (a) and pH value (b) on the adsorption capacities of IPPTC and Z-200 on chalcopyrite and pyrite surface

矿和黄铁矿表面吸附量的影响。从图3可以看出，IPPTC和Z-200在黄铜矿表面上的吸附量均大于在黄铁矿表面上的吸附量。而且，IPPTC在黄铜矿和黄铁矿表面的吸附量均大于Z-200。pH值对IPPTC和Z-200在黄铜矿表面的吸附量影响不大，但IPPTC在黄铁矿表面的吸附量随着pH值的增加逐渐减小。吸附量试验证实，IPPTC的捕收能力强于Z-200，与浮选试验结果吻合。

2.4 表面张力测定

图4为不同捕收剂用量条件下矿浆体系表面张力的变化规律。由图4可知，随着捕收剂浓度增加，IPPTC和Z-200体系的表面张力均呈下降趋势，其中IPPTC体系表面张力下降幅度更明显。当捕收剂用量由2 mg/L增加至40 mg/L时，IPPTC体系表面张力由68.3 mN/m降至50.1 mN/m，而Z-200体系则由71.2 mN/m降至59.6 mN/m。结果表明，IPPTC较Z-200具有更强的表面活性，能够更有效地降低矿浆体系表面张力。表面张力试验结果与浮选试验、吸附量测定结果一致，从侧面反映出IPPTC能在黄铜矿表面发生较强的吸附作用。

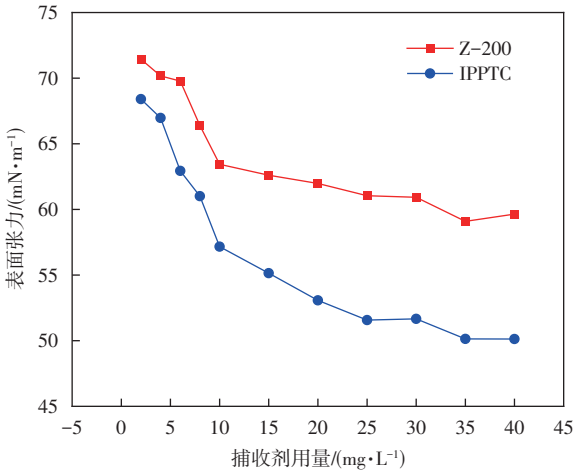


图4 IPPTC和Z-200的表面张力

Fig. 4 Surface tensions of IPPTC and Z-200 system

2.5 接触角测量

矿物表面上的接触角大小反映了其疏水性强弱。接触角越大，疏水性越强，表明可浮性越好。通过测量捕收剂与矿物作用后接触角的变化，验证捕收剂对矿物的浮选能力的强弱。图5为不同捕收剂用量条件下黄铜矿和黄铁矿表面接触角的变化规律。从图5可以看出，随着捕收剂用量增加，两种矿物表面接触角均逐渐增大，表明捕收剂吸附后提高了矿物表面疏水性。其中，IPPTC对矿物表面接触角的提升幅度整体高于Z-200。当捕收剂用量为40 mg/L时，IPPTC处理后黄铜矿和黄铁矿表面接触角分别达到92.1°和79.76°，而Z-200对应值分别为83.1°和74.94°。黄铜矿表面接触角始终高于黄铁矿，说明两种捕收剂对黄铜矿表面的疏水化作用更强。其中，IPPTC对黄铜矿表面疏水性的提升更明显，该结果与浮选试验、吸附量试验结果基本一致。

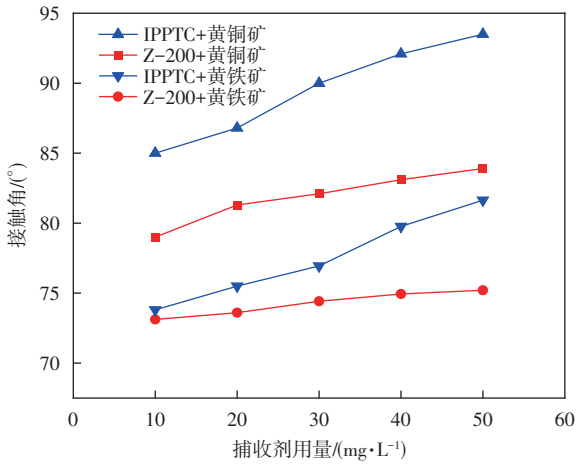


图5 捕收剂浓度对黄铜矿、黄铁矿表面接触角的影响

Fig. 5 Effects of collector concentration on the surface contact angles of chalcopyrite and pyrite

2.6 Zeta电位

当捕收剂吸附在矿物表面时，矿物表面的电荷变化可通过Zeta电位测定。若矿物表面金属离子与硫氨酯捕收剂分子中的C=S键配位，发生电子转移，矿物的表面电荷性质将发生显著变化；若仅是物理吸附，电位偏移微弱。图6为捕收剂与黄铜矿及黄铁矿作用前后的Zeta电位变化关系。从图6(a)可以看出，黄铜矿原矿的等电点约为pH=4.64，加入IPPTC后，等电点下降至pH=3.92，而加入Z-200后，等电点下降至pH=4.27，且IPPTC引起的负向偏移更明显，表明两种捕收剂在黄铜矿表面均发生了明显吸附，且IPPTC的吸附作用更强。相比之下，黄铁矿原矿的等电点约为pH=4.15，加入Z-200和IPPTC后分别变化至pH=4.09和4.12，变化幅度较小，说明两种捕收剂在黄铁矿表面的吸附较弱。

2.7 红外光谱

图7展示了IPPTC与黄铜矿、黄铁矿作用前后的红外光谱。如图7(a)所示，IPPTC纯物质的红外光谱中，2 957.82、2 981.34和2 861.89 cm^{-1}处出现归属于C—H键的伸缩振动峰，1 522.52、1 402.58 cm^{-1}处的吸收峰分别归属于—(N)—C=S和C—H键向内弯曲伸缩振动吸收峰，1 192.32 cm^{-1}

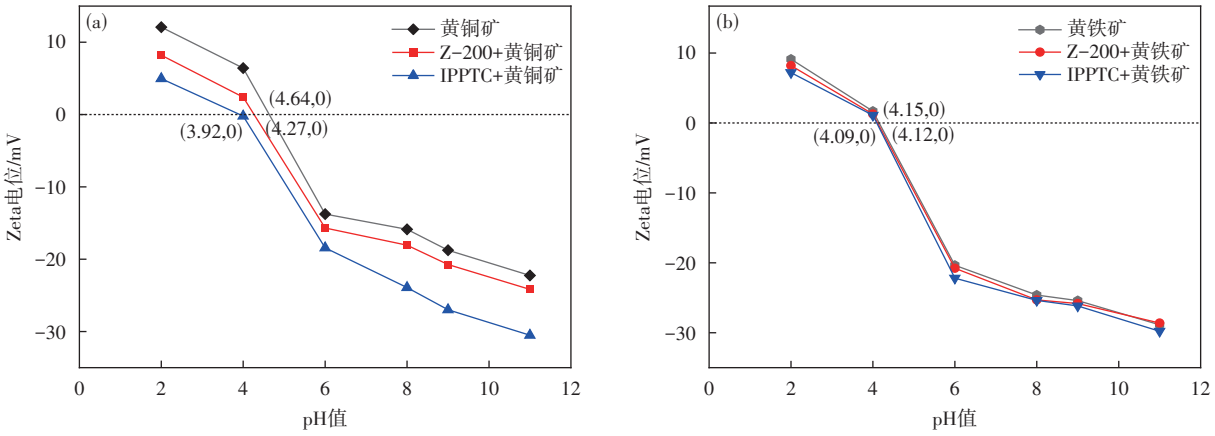


图 6　IPPTC 和 Z-200 与黄铜矿(a)和黄铁矿(b)作用前后的 Zeta 电位

Fig. 6　Zeta potentials of chalcopyrite (a) and pyrite (b) before and after interaction with IPPTC and Z-200

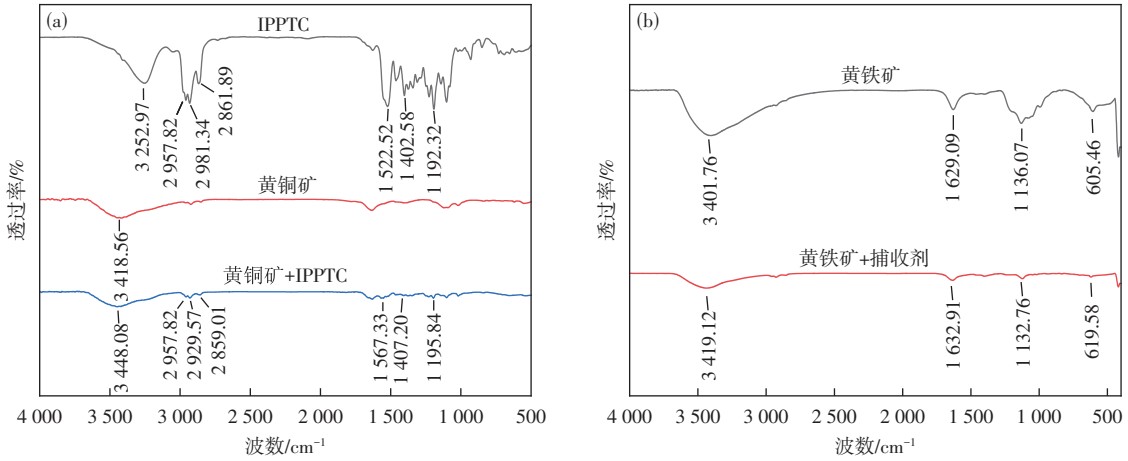


图 7　IPPTC 与黄铜矿(a)和黄铁矿(b)作用前后的红外光谱图谱

Fig. 7　FTIR spectra of chalcopyrite (a) and pyrite (b) before and after interaction with IPPTC

处为C＝S的伸缩振动吸收峰；而黄铜矿与IPPTC作用后，谱图发生明显变化，显现出IPPTC的特征吸收峰：在2 957.82、2 929.57和2 859.01 cm^{-1}处出现C—H键的伸缩振动峰，—(N)—C＝S的吸收峰出现在1 567.33，1 407.20 cm^{-1}处出现C—H键向内弯曲伸缩振动吸收峰，C＝S的吸收峰出现在1 195.84 cm^{-1}；而与IPPTC纯物质的吸收峰相比，—(N)—C＝S吸收峰由1 522.52 cm^{-1}位移至1 567.33 cm^{-1}，1 192.32 cm^{-1}处的C＝S的伸缩振动吸收峰位移至1 195.84 cm^{-1}。而黄铁矿和IPPTC作用前后红外谱图(图7(b))没有出现新的吸收峰。这些结果表明，IPPTC与黄铜矿表面形成了化学吸附，而在黄铁矿表面以物理吸附为主导，这与Zeta电位结果相互印证。

3　结论

1)增长常规硫氨酯捕收剂Z-200分子中与N原子相连的烃基长度后，给电子能力增强，根据前线轨道理论的预测，IPPTC的捕收能力可能更强。

2)浮选试验证实了前期的理论预测，IPPTC对黄铜矿及黄铁矿的捕收能力整体强于Z-200，但选择性不如Z-200。吸附量测定试验进一步证实了浮选试验结果。

3)表面张力及接触角试验结果表明，IPPTC能够显著降低矿浆体系表面张力，并提高黄铜矿表面接触角，显著增强黄铜矿表面的疏水性。相比Z-200，IPPTC分子中与N原子相连的烃基替换成正戊基后，强化了捕收剂的疏水化作用。

4)Zeta电位及红外光谱测试结果推测，IPPTC在黄铜矿表面发生了较强的化学吸附，而在黄铁矿则以物理吸附为主导。IPPTC对黄铁矿捕收能力的增强可能是由于碳链增长使其疏水性增强。

本研究仅在单矿物浮选体系中探究了烃基链长对硫氨酯捕收剂浮选性能的影响规律，后续拟开展人

工混合矿浮选试验、矿样化学物相与组成表征，进一步揭示分子结构对药剂分选选择性的内在作用机制。

参考文献

[1] 陈伟强，汪鹏，钟维琼，等. 支撑“双碳”目标的关键金属供应挑战与保障对策[J]. 中国科学院院刊，2022，37(11)：1577-1585.
Chen Weiqiang, Wang Peng, Zhong Weiqiong, et al. Challenges and security strategies of China′s critical metals supply for carbon neutrality pledge[J]. Bulletin of Chinese Academy of Sciences, 2022, 37(11): 1577-1585.

[2] Sun Dong, Li Ming, Zhang Min, et al. Utilization and mechanisms of tannic acid as a depressant for chalcopyrite and pyrite separation[J]. ACS Omega, 2023, 8(33): 30474-30482.

[3] 王璐瑶，刘胜，刘广义，等. 铜矿浮选捕收剂研究进展与展望[J]. 铜业工程，2024(3)：69-84.
Wang Luyao, Liu Sheng, Liu Guangyi, et al. Research progress and prospect of flotation collectors for copper ores[J]. Copper Engineering, 2024(3): 69-84.

[4] 吴海祥，邵延海，张铂华，等. 低碱度铜硫分离浮选药剂的研究进展[J]. 矿冶，2021，30(4)：33-40.
Wu Haixiang, Shao Yanhai, Zhang Bohua, et al. Research progress of low-alkalinity copper-sulfur separation flotation reagents[J]. Mining and Metallurgy, 2021, 30(4): 33-40.

[5] 解子花，魏志聪，李梦宇，等. 云南大平掌铜矿分支串流浮选工艺试验研究[J]. 矿产保护与利用，2023，43(2)：123-130.
Xie Zihua, Wei Zhicong, Li Mengyu, et al. Experimental study on branch-series flotation process of Yunnan Dapingzhang Copper Mine[J]. Conservation and Utilization of Mineral Resources, 2023, 43(2): 123-130.

[6] 钟宏. 浮选药剂的产品设计与工程[J]. 有色金属(选矿部分)，2025(2)：1-7.
Zhong Hong. Product design and engineering of flotation reagents[J]. Nonferrous Metals (Mineral Processing Section), 2025(2): 1-7.

[7] 陈丽，张仪杰，余安美，等. 云南某硫化铜矿石工艺矿物学及铜硫分离探索研究[J]. 有色金属(中英文)，2026，16(4)：776-784.
Chen Li, Zhang Yijie, Yu Anmei, et al. Exploration and research on the process mineralogy of sulfide copper ore from Yunnan and copper-sulfur separation[J]. Nonferrous Metals, 2026, 16(4): 776-784.

[8] Yang Hao, Huang Kai, Cao Xiaojun, et al. Investigating the adsorption performances and hydrophobic mechanism of O-ethyl-N-benzoyl thionocarbamate on chalcopyrite surface[J]. Minerals Engineering, 2022, 176: 107316. DOI: 10.1016/j.mineng.2022.107316.

[9] Sun Xin, Yu Jie, Zhang Wei, et al. Flotation separation of chalcopyrite from pyrite and sphalerite using a novel collector: an experimental and mechanism investigation[J]. Applied Surface Science, 2024, 661: 160059. DOI: 10.1016/j.apsusc.2024.160059.

[10] Jia Yun, Huang Kai, Wang Shuai, et al. The selective flotation behavior and adsorption mechanism of thiohexanamide to chalcopyrite[J]. Minerals Engineering, 2019, 137: 187-199.

[11] 程万里，邓政斌，陈玲，等. 浮选药剂与黄铁矿作用的分子动力学模拟研究[J/OL]. 矿产保护与利用：1-10[2026-05-27]. https://doi.org/10.13779/j.cnki.issn1001-0076.000034.
Cheng Wanli, Deng Zhengbin, Chen Ling, et al. Molecular dynamics simulation study on the interaction between flotation reagents and pyrite[J/OL]. Conservation and Utilization of Mineral Resources: 1-10[2026-05-27]. https://doi.org/10.13779/j.cnki.issn1001-0076.000034.

[12] Kabashi Mubarak, Fan Rui, Jiang Xiaohui, et al. Flotation mechanism of chalcopyrite separation from sphalerite and pyrite using 2-aminobenzothiazole[J]. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2025, 725: 137584. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2025.137584.

[13] Chen Tao, Liu Rui, Dong Wei, et al. Interfacial differentiation of a high-performance collector adsorption enabling selective flotation separation of chalcopyrite from pyrite[J]. Minerals Engineering, 2025, 231: 109478. DOI: 10.1016/j.mineng.2025.109478.

[14] 罗富华，刘丹，刘阅兵，等. 铜硫浮选分离现状及研究进展[J]. 有色金属(中英文)，2026，16(2)：322-338.
Luo Fuhua, Liu Dan, Liu Yuebing, et al. Current status and research progress of copper-sulfur flotation separation[J]. Nonferrous Metals, 2026, 16(2): 322-338.

[15] Zou Shunhao, Wang Shuai, Ma Xiang, et al. Highly selective flotation separation of chalcopyrite and pyrite by a novel dithiocarbamate collector with morpholine group[J]. Minerals Engineering, 2023, 202: 108292. DOI: 10.1016/j.mineng.2023.108292.

[16] Huang Xing, Jia Yun, Wang Shuai, et al. Novel sodium O-benzythioethyl xanthate surfactant: synthesis, DFT calculation and adsorption mechanism on chalcopyrite

surface[J]. Langmuir, 2019, 35(47): 15106-15113.

[17] Zhang Wei, Cao Jian, Wu Shuchun, et al. Synthesis of selective heteroatomic collectors for the improved separation of sulfide minerals[J]. Separation and Purification Technology, 2022, 287: 120563. DOI: 10.1016/j.seppur.2022.120563.

[18] Dhar P, Thornhill M, Kota H R. Investigation of copper recovery from a new copper deposit(Nussir) in Northern Norway: thionocarbamates and xanthate-thionocarbamate blend as collectors[J]. Minerals, 2019, 9(2): 118. DOI: 10.3390/min9020118.

[19] 贾云，钟宏，王帅，等. 捕收剂的分子设计与绿色合成[J]. 中国有色金属学报，2020，30(2)：456-466.
Jia Yun, Zhong Hong, Wang Shuai, et al. Molecular design and green synthesis of flotation collectors[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2020, 30(2): 456-466.

[20] 林奇阳，钟宏，徐志刚，等. 硫氨酯捕收剂的分子设计与功能强化[J]. 有色金属(选矿部分)，2025(2)：96-104，174.
Lin Qiyang, Zhong Hong, Xu Zhigang, et al. Molecular design and functional enhancement of thionocarbamate collectors[J]. Nonferrous Metals (Mineral Processing Section), 2025(2): 96-104, 174.

[21] 张连芝，郭靖宇. 异丁基乙基硫氨酯合成工艺探究[J]. 有色矿冶，2023，39(5)：29-31.
Zhang Lianzhi, Guo Jingyu. Study on the synthesis process of isobutyl ethyl thionocarbamate[J]. Non-Ferrous Mining and Metallurgy, 2023, 39(5): 29-31.

[22] 刘云霄. 不同碳链长度烷烃及其组合捕收剂对煤泥浮选的影响机制[J/OL]. 矿产保护与利用：1-15[2026-04-07]. https://doi.org/10.13779/j.cnki.issn1001-0076.000031.
Liu Yunxiao. Mechanistic study on the effects of alkanes with different carbon chain length and their combination as collectors on coal slurry flotation[J/OL]. Conservation and Utilization of Mineral Resources: 1-15[2026-04-07]. https://doi.org/10.13779/j.cnki.issn1001-0076.000031.

[23] Cao Fei, Sun Dong, Qiu Xianyang, et al. Synthesis of novel thionocarbamate for copper-sulfur flotation separation and its adsorption mechanism[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2022, 32(8): 2709-2718.

[24] Frisch M J, Trucks G W, Schlegel H B, et al. Gaussian 09, Revision A.02 [CP]. Wallingford: Gaussian, Inc., 2009.

（本文编辑 刘水红）

【缅怀寄语】

岁月无声，师恩永存。恩师辞世已届周年，思及往昔，悲恸不舍萦绕于心。幸得恩师数载悉心传道授业，师生相处点滴历历在目，成为我人生行路中最珍贵的温暖与力量。

恩师治学严谨，学识渊深。读博期间，我每一篇学术论文与学位毕业论文，他都会逐页打印，一字一句审阅、批注、修改。曾有一次，我将前线轨道理论中的“最高占据分子轨道(HOMO)”简写为“最高占据轨道”，恩师当即提点我恪守学术表述的严谨规范。彼时我心中十分感慨，深耕矿物加工领域的他，竟对结构化学理论了然于心。后来才知晓，恩师攻读硕士阶段，曾赴北京大学修习周公度先生讲授的《结构化学》。翻看他留存的工整详实的课堂笔记，身为化学专业的我，满心惭愧亦由衷敬佩。

受恩师“基因选矿”学术理念启发，我的研究方向为依托密度泛函理论，探究铜硫分离捕收剂的构效关系。通过剖析捕收剂分子特征参数、空间结构与浮选性能的内在关联，实现高效铜硫分离捕收剂的定向设计与筛选。该研究得到恩师全程鼎力支持，依托矿物加工科学与技术全国重点实验室开放基金资助，现已搭建包含近百种构型的黄药、硫氨酯捕收剂分子结构数据库，为构建预测捕收剂浮选性能的深度学习神经网络模型奠定数据基础。道阻且长，行则将至。往后我必谨记恩师谆谆教诲，沉心治学，踏实笃行。

桃李不言，下自成蹊。我将永记师恩、恪守教诲，潜心钻研、奋勇求索。谨以此文深切缅怀恩师，愿先生千古安息，治学风骨与世长存。

——曹　飞