

辉钼矿晶面各向异性及其对浮选的影响机制*

魏桢伦, 李育彪

(武汉理工大学 资源与环境工程学院, 湖北 武汉 430070)

摘要: 辉钼矿的晶面各向异性导致其“表面”和“棱面”具有截然不同的性质, 进而影响到辉钼矿的浮选效果。通过密度泛函理论, 从原子级别直观地阐释了辉钼矿“表面”和“棱面”性质差异的原因, 并分别讨论了水、煤油和黄药在辉钼矿表面的作用。结果表明辉钼矿的“表面”为强疏水面, “棱面”为强亲水面。此外, 煤油主要是通过静电作用吸附在辉钼矿的含 S 原子面, 而黄药则是通过其 C-S 单键中 S 原子与辉钼矿“棱面” Mo 原子的成键作用吸附于辉钼矿的“棱面”。

关键词: 辉钼矿; 密度泛函理论; 晶面性质; 吸附

中图分类号: TD954 **文献标识码:** B **文章编号:** 1001-0076(2018)03-0031-06

DOI: 10.13779/j.cnki.issn1001-0076.2018.03.006

Anisotropy of Molybdenite Surface and Its Effects on Flotation Mechanism

WEI Zhenlun, LI Yubiao

(School of Resources and Environmental Engineering, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China)

Abstract: The crystal anisotropy of molybdenite makes its “surface” and “edge” have very different properties, which further affects the flotation behavior of molybdenite. Through density functional theory, the reasons for the differences in the properties of molybdenite “surface” and “edge” are demonstrated from the atomic level, and the effects of water, kerosene, and xanthate on the surface of molybdenite are discussed. The results show that the “surface” of the molybdenite is strongly hydrophobic and the “edge” is strongly hydrophilic. In addition, kerosene is mainly adsorbed on the S-containing atomic face of molybdenite by electrostatic interactions, whereas xanthate is adsorbed on molybdenum “edge” by the bonding interaction of the S atom in its C-S single bond with Mo atom at the molybdenite “edge”.

Key words: molybdenite; density functional theory; surfaces properties; adsorption

辉钼矿 (MoS_2) 是钼最重要的赋存矿物, 全世界钼金属产量的 99% 都是来自辉钼矿^[1-3]。辉钼矿具有典型的层状结构, 属于六方晶系, 层与层之间通过较弱的范德华力相连接, 层间距大约为 0.65

nm^[4]。单层辉钼矿内则由较强的 S—Mo 共价键结合, 构成 S—Mo—S 三层原子层, 从而形成了“三明治夹心”结构。由于辉钼矿这种独特的晶体结构, 在其单体解离过程中会形成两类晶面——沿层间范

* 收稿日期: 2018-04-23

基金项目: 国家自然科学基金项目(51604205, 51774223); 湖北省自然科学基金项目(2016CFB268)

作者简介: 魏桢伦(1992-), 男, 汉族, 湖北随州人, 博士研究生, 研究方向为模拟计算、湿法冶金和浮选理论, E-mail: erebus@whut.edu.cn。

通信作者: 李育彪(1985-), 男, 汉族, 湖北武汉人, 博士, 副教授, 主要从事湿法冶金、浮选、表面测试技术、矿山环境修复等研究工作, E-mail: Yubiao.Li@whut.edu.cn。

德华力断裂的“表面”和沿层内共价键断裂的“棱面”^[5]。

研究表明辉钼矿的“表面”为非极性表面,具有疏水性,其“棱面”为极性表面,具有亲水性^[6],而且还有研究者分析了辉钼矿“表面”和“棱面”表面电荷和润湿性的差异^[7],但并没有对其“表面”和“棱面”性质差异的本质原因进行深入探讨,而这些晶面性质的差异会影响浮选效果。因此,有必要深入研究辉钼矿各晶面与水 and 浮选药剂的作用,进而加深辉钼矿浮选机理的理解。

本文通过基于密度泛函理论的模拟计算对辉钼矿的“表面”—(0001)面和最具代表性的“棱面”—(10 $\bar{1}0$)^[7,8]面的性质进行分析,揭示其晶面各向异性的原因,然后分别计算水和浮选药剂在(0001)面和(10 $\bar{1}0$)面的吸附,揭示不同晶面与水 and 浮选药剂的作用机理。

1 计算方法

1.1 计算参数设置

本次计算采用 Materials Studio (MS) 软件中基于密度泛函理论和平面波赝势方法的 Castep 模块进行计算^[9],对交换关联泛函选用广义梯度近似 (GGA) 下的 PW91 梯度修正近似^[10],对价电子和离子的相互作用势的描述采用超软赝势 (USP)^[11],计算中所选用的截断能为 430 eV, Brillouin 区的积分计算则采用 $8 \times 8 \times 2$ 的 Monkhorst—Pack (MP) k 点网络^[11]。进行几何优化 (Geometry Optimization) 计算时采用 BFGS 算法,对辉钼矿进行优化的收敛标准按照 fine 标准下的相关参数进行。

1.2 表面能计算方法

表面能的计算方法如式(1)^[12]:

$$E_{\text{surf}} = \left[E_{\text{slab}} - \left(\frac{N_{\text{slab}}}{N_{\text{bulk}}} \right) E_{\text{bulk}} \right] / 2A \quad (1)$$

其中 E_{surf} 为表面能 ($\text{J} \cdot \text{m}^{-2}$), E_{slab} 和 E_{bulk} 分别表示晶面和原始单胞的总能量 (eV), N_{slab} 和 N_{bulk} 分别表示晶面和原始单胞原子数目, A 表示该晶面的表面积 (m^2)。表面能越小,说明该晶面越稳定。

1.3 吸附能计算方法

在进行吸附计算时,可以通过吸附能来界定该吸附反应是否能够自发进行。吸附能的计算方法如式(2)^[13]:

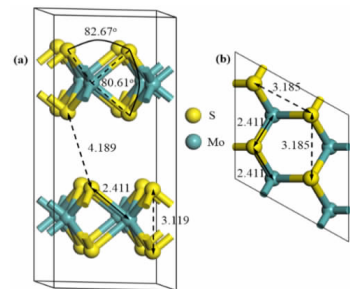
$$\Delta E_{\text{ads}} = E_{\text{slab/adsorbate}} - E_{\text{slab}} - E_{\text{adsorbate}} \quad (2)$$

其中 ΔE_{ads} 表示最终吸附能 ($\text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$), $E_{\text{slab/adsorbate}}$ 表示反应完成后整个体系总能量 ($\text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$), E_{slab} 表示反应前该晶面总能量 ($\text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$), $E_{\text{adsorbate}}$ 表示反应前的吸附质能量 ($\text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$)。当计算所得的吸附能 ΔE_{ads} 大于零时,说明该反应无法自发进行;当计算吸附能 ΔE_{ads} 小于零时,该反应可以自发的进行,且吸附能 ΔE_{ads} 越负,说明此反应越容易进行。

2 结果与讨论

2.1 辉钼矿单胞性质分析

辉钼矿为六方晶系 (空间群 P63/mmc), 晶胞参数为 $a = b = 3.16 \text{ \AA}$, $c = 12.294 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$, Mo—S 键的键长为 2.415 \AA ^[14]。通过 Materials Studio (MS) 软件中的 Crystals Builder 模块按上述参数建立相应的晶胞模型后,在上述参数下进行 Geometry Optimization 计算。图 1 显示了优化后的辉钼矿 ($2 \times 2 \times 1$) 超胞,可以很明显的看出辉钼矿的层状结构,具体的晶胞参数如表 1 所示。



(a) 侧视图; (b) 俯视图 (\AA)

图 1 优化后的辉钼矿 ($2 \times 2 \times 1$) 超胞

Fig. 1 Optimized molybdenite ($2 \times 2 \times 1$) super cell

表 1 辉钼矿单胞的晶胞参数 / \AA

Table 1 Geometrical parameters of molybdenite cell			
参数	实验值 ^[14]	Kadantsev et al ^[15]	本研究计算值
a	3.16	3.122	3.185
c	12.294	11.986	12.703
Mo—S	2.415	2.383	2.411
S—S (0001)	3.160	3.122	3.185
S—S (10 $\bar{1}0$)	3.164	3.116	3.119

通过本研究中设置的相关参数进行计算后得到的辉钼矿晶胞参数为 $a = 3.185 \text{ \AA}$, $c = 12.703 \text{ \AA}$, Mo—S 键的键长为 2.411 \AA , 这不仅与实验所得值^[14]十分接近,与其他研究者^[15]计算所得的晶格参数很接近,其中的差值可能是由于采取了不同的计算参

数和计算软件造成的。因此通过对晶胞参数的对比,可以认为本研究中所选取的计算参数合理,可以用于进一步计算。

2.2 辉钼矿(0001)面和(1010)面的弛豫

从辉钼矿的单胞中切割出(0001)面和(1010)

面,然后通过 Crystal Builder 构造一个在 c 方向为 15 Å 的真空层,从而避免层与层之间的交互作用,再使用 Castep 模块在所选参数下进行 Geometry Optimization 计算,所得弛豫前后辉钼矿(0001)和(1010)面相关参数如表 2 所示。

表 2 辉钼矿(0001)面和(1010)面弛豫前后的参数

Table 2 Parameters of molybdenite (0001) and (1010) surfaces before and after relaxation

参数	0001		(1010)		
	弛豫前	弛豫后	弛豫前	弛豫后 S 面	弛豫后 Mo 面
Mo-S	2.411	2.411	2.411	2.370 2.548	2.291
S-S(1010)	3.119	3.119	3.119	1.975	-
S-S(0110)	3.185	3.185	3.185	3.184	-
Mo-Mo(表面)	3.185	3.185	3.185	-	2.264
Mo-Mo(层间)	3.185	3.185	3.185	-	3.068
表面能/(J·m ⁻²)	-	0.004	-	3.577	3.577

通过表 2 可以发现,弛豫后辉钼矿(1010)面的表面能为 3.577 J·m⁻²,而(0001)面的表面能为 0.004 J·m⁻²,这与王晖等^[16]通过理论计算所得的辉钼矿“表面”[即(0001)面]属于低能表面的结论一致。进一步说明辉钼矿(0001)面是低能量、非极性的疏水性表面,而(1010)面是高能量、极性、亲水性表面^[6]。此外还可以发现弛豫前后辉钼矿(0001)面的相应晶格参数并未发生改变,这是因为(0001)面是沿层间的范德华力解离,没有发生键的断裂,因而没有结构重组。通过表 3 中的 Mulliken 电荷布居值的变化也可以看出,弛豫后(0001)面与体相中各原子的 Mulliken 电荷布居值没有发生改变,进一步说明辉钼矿(0001)面没有发生明显变化。

但(1010)弛豫前后的结构发生了显著改变,如图 2 所示。

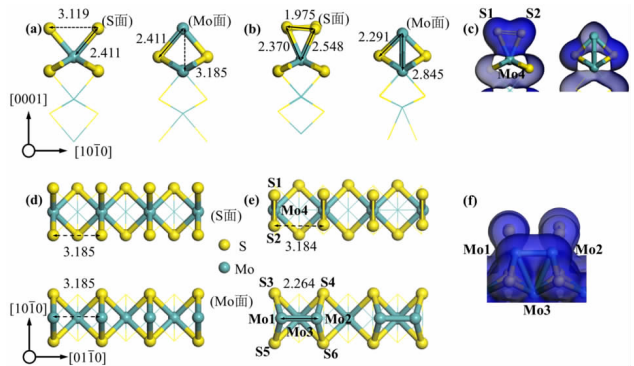


图 2 弛豫前[(a)侧视图;(d)俯视图]和弛豫后[(b)侧视图;(e)俯视图;(c)S面;(f)Mo面电荷密度图]的辉钼矿(1010)面(Å)

Fig.2 Molybdenite (1010) surface before relaxation [(a) side view; (d) top view) and after relaxation ((b) side view; (e) top view; electron density of S surface (c) and Mo surface (f))

由于辉钼矿中每个 S 原子与周围 3 个 Mo 原子成键,每个 Mo 原子与周围 6 个 S 原子成键,当辉钼矿沿(1010)面解离时,Mo—S 键断裂,且断裂后 S 面上的 S 原子有两个不饱和半键,而 Mo 面上的 Mo 原子有四个不饱和半键。弛豫后,不饱和半键趋于稳定,因而发生了结构重组^[17, 18]。S 面弛豫后两个不饱和半键的 S 原子之间相互靠近,根据图 2(c)可以发现生成了 S-S 键,其距离由 3.119 Å 减小至 1.975 Å,比通过 PBE/6-311G(d,p)理论计算^[18]的理想情况下 S—S 键 2.276 Å 的键长小,其中

表 3 体相与弛豫后辉钼矿(0001)面和(1010)面的 Mulliken 电荷布居值

Table 3 Mulliken charge populations of molybdenite bulk and relaxed molybdenite (0001) and (1010) surfaces

表面	原子	电荷布居/e			电荷/e
		s	p	d	
体相	S	1.86	4.16	0.00	-0.02
	Mo	2.48	6.45	5.03	0.04
(0001)面	S	1.86	4.16	0.00	-0.02
	Mo	2.48	6.45	5.03	0.04
(1010)面	S1	1.91	4.20	0.00	-0.11
	S2	1.90	4.10	0.00	0.00
	Mo4	2.44	6.32	5.08	0.16
	Mo1/2	2.59	6.16	5.16	0.09
	Mo3	2.46	6.42	5.01	0.11
	S3/4/5/6	1.86	4.20	0.00	-0.06

0.301 Å 的差值可以认为是 S 原子与下一层中的 Mo 原子之间成键作用的影响。受此影响,相邻的 Mo—S 键由 2.411 Å 改变至 2.370 Å 和 2.548 Å。通过 Mulliken 电荷布居分析(表 3),弛豫过程主要是 Mo4 原子和 S2 原子的 p 轨道失去电子,S1 原子和 S2 的 s 轨道以及 S1 原子的 p 轨道得到电子,从而生成 S—S 键。此外,可以明显看到弛豫后(10 $\bar{1}0$)面的 S 面上的 S 原子携带的负电荷大于(0001)面上的 S 原子。

Mo 面弛豫后有四个不饱和半键的 Mo 原子相互靠近,根据图 2(f)所示的电子密度图,可以发现生成了 Mo—Mo 键,其距离由 3.185 Å 减小至 2.264 Å。同时,表面的 Mo 原子向下一层中的 Mo 原子移动,使两层 Mo 原子之间的距离由 3.185 Å 减小至 2.845 Å,也形成了 Mo—Mo 键(图 2(f)),并将相邻的 Mo—S 键由 2.411 Å 压缩至 2.229 Å。通过 Mulliken 电荷布居分析(表 3),弛豫过程主要是 Mo1/2 原子的 p 轨道失去大量电子,Mo3 原子的 s、p、d 轨道失去少量的电子,Mo1/2 原子的 s 轨道和 d 轨道得到大量的电子,从而生成 Mo—Mo 键。同时,为了电荷平衡,S3/4/5/6 原子的 p 轨道得到电子。

2.3 水和浮选药剂在辉钼矿(0001)面和(10 $\bar{1}0$)面的吸附

众多研究表明,虽然辉钼矿具有良好的天然可浮性^[6,19],但是由于工业应用的需求及矿物性质的差异,往往会使用烃油类捕收剂甚至是含硫捕收剂进行浮选^[8,20,21]。因此,为了考察浮选药剂在辉钼矿(0001)面和(10 $\bar{1}0$)面的吸附,分别选取煤油^[22,23]和黄药类捕收剂^[21]来考察烃油类捕收剂和含硫捕收剂与辉钼矿(0001)面和(10 $\bar{1}0$)面的相互作用。此外,由于浮选是在水溶液环境中进行,还需要考虑到水在辉钼矿(0001)面和(10 $\bar{1}0$)面的作用。由于煤油主要是由碳原子数 8~16 的烃类物质组成^[24],且红外测试结果表明煤油中的有效成分主要为直链脂肪烃和芳香烃^[25],因而选取直链烷烃(C₁₂H₂₆)和直链芳香烃(C₁₂H₁₈)来计算煤油和辉钼矿的吸附。黄药则选取甲基黄原酸钠和丁基黄原酸钠。对四种药剂分别进行结构优化,所得的 Mulliken 电荷如图 3 所示。

水和浮选药剂与辉钼矿(0001)面和(10 $\bar{1}0$)面的吸附能如表 4 所示。结果表明,水在辉钼矿(0001)

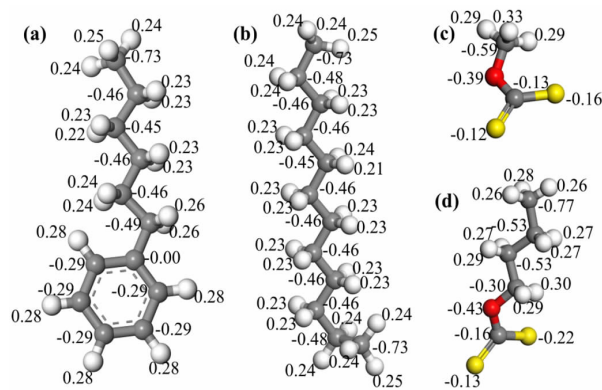


图 3 (a)直链芳香烃,(b)直链烷烃,(c)甲基黄原酸根和(d)丁基黄原酸根的 Mulliken 电荷布居图

Fig. 3 Mulliken charge populations of (a) aromatic hydrocarbon, (b) alkane, (c) methyl xanthate ion and (d) butyl xanthate ion

面和(10 $\bar{1}0$)面的吸附能分别为 106.96、-165.58 kcal·mol⁻¹,从能量的角度进一步验证了辉钼矿(0001)面为强疏水面,(10 $\bar{1}0$)面为强亲水面^[6]。

表 4 水和浮选药剂在辉钼矿(0001)面和(10 $\bar{1}0$)面的吸附能/(kcal·mol⁻¹)

Table 4 Adsorption energies of water and flotation reagents

on molybdenite (0001) and (10 $\bar{1}0$)		
种类	(0001)面	(10 $\bar{1}0$)面
水	106.96	-165.58
直链烷烃(C ₁₂ H ₂₆)	-24.05	-44.06
直链芳香烃(C ₁₂ H ₁₈)	-76.51	-104.80
甲基黄原酸钠	87.62	-227.02
丁基黄原酸钠	49.42	-299.69

直链烷烃在辉钼矿(0001)面和(10 $\bar{1}0$)面的吸附能分别为 -24.05、-44.06 kcal·mol⁻¹,直链芳香烃在辉钼矿(0001)面和(10 $\bar{1}0$)面的吸附能分别为 -76.51、-104.80 kcal·mol⁻¹。结合图 4 所示的电荷密度图,发现直链烷烃和芳香烃均没有和辉钼矿成键,因此认为其主要是以静电作用的形式吸附在辉钼矿各晶面的 S 原子上,与文献相符^[8,26]。由于辉钼矿(10 $\bar{1}0$)面 S 原子所带负电荷更多(表 3),直链烷烃和芳香烃均更倾向于吸附在辉钼矿(10 $\bar{1}0$)面的 S 面上。此外,还可以发现直链芳香烃的吸附能更负,结合图 3 所示的 Mulliken 电荷布局图,可以发现芳香烃基团上的 H 原子携带的正电荷更多,从而与辉钼矿表面的 S 原子之间的静电作用更强,说明煤油中起主要吸附作用的是芳香烃基团。

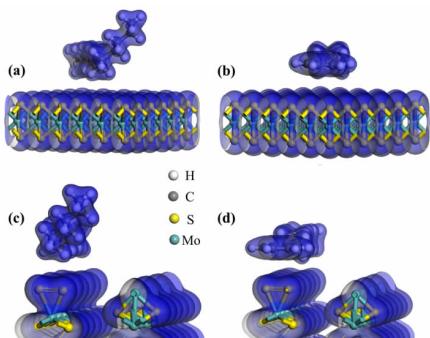


图4 (a)直链烷烃和(b)直链芳香烃吸附在辉钼矿(0001)面的电荷密度图;(c)直链烷烃和(d)直链芳香烃吸附在辉钼矿(1010)面的电荷密度图

Fig.4 Electron density of (a) alkane and (b) aromatic hydrocarbon on molybdenite (0001) surface; electron density of (c) alkane and (d) aromatic hydrocarbon on molybdenite (1010) surface

甲基黄原酸钠与丁基黄原酸钠在辉钼矿(0001)面的吸附能均为正值,在辉钼矿(1010)面的吸附能分别为 -227.02 、 $-299.69 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$,说明黄药可以与辉钼矿(1010)面发生很强的吸附,但无法与辉钼矿(0001)面发生吸附,与文献中报道的黄药等极性捕收剂只能吸附在辉钼矿“棱面”的结论相符^[2,27]。结合图5所示电荷密度图,黄药与辉钼矿的吸附作用主要是C—S单键中S原子与辉钼矿(1010)面Mo原子的成键作用。

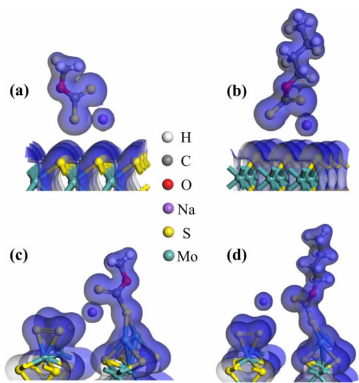


图5 (a)甲基黄原酸钠和(b)丁基黄原酸钠吸附在辉钼矿(0001)面的电荷密度图;(c)甲基黄原酸钠和(d)丁基黄原酸钠吸附在辉钼矿(1010)面的电荷密度图

Fig.5 Electron density of (a) sodium methyl xanthate and (b) sodium butyl xanthate on molybdenite (0001) surface; electron density of (c) sodium methyl xanthate and (d) sodium butyl xanthate on molybdenite (1010) surface

此外,丁基黄原酸钠比甲基黄原酸钠的吸附能大,结合图3所示的Mulliken电荷布局图,可以发现

丁基黄原酸根离子上的单键S原子携带的负电荷更多,更易与辉钼矿(1010)面的Mo原子发生作用,说明黄药类捕收剂的碳链越长,其与矿物表面的吸附效果越好^[28,29]。

3 结论

(1)辉钼矿具有晶面各向异性,其原因是解离过程中不同晶面的断键方式不同。辉钼矿(0001)面沿层间范德华力解离,因而结构稳定,表面能低。辉钼矿(1010)面沿层内Mo—S键解离,暴露出的S原子和Mo原子分别生成S—S键和Mo—Mo键,发生了明显的结构重组,导致其结构不稳定,表面能高。

(2)分别计算了水、煤油和黄药类捕收剂在辉钼矿(0001)面和(1010)面的吸附。结果表明,辉钼矿的(0001)面为强疏水面,(1010)面为强亲水面。煤油主要是通过静电作用吸附在辉钼矿的含S原子晶面,且更倾向于吸附在携带负电荷更多的S原子上。黄药则是通过其C—S单键中S原子与辉钼矿(1010)面上Mo原子的成键作用吸附于辉钼矿的(1010)面上,无法作用于辉钼矿的(0001)面上,说明黄药等极性捕收剂主要由化学成键作用吸附于辉钼矿的“棱面”,进而提高浮选回收率。

参考文献:

- [1] 王资. 辉钼矿的浮选[J]. 昆明冶金高等专科学校学报, 1996(21):46-52.
- [2] 陈建华,冯其明. 钼矿的选矿现状[J]. 矿产保护与利用, 1994(6):26-28.
- [3] Liu G Y, Lu Y P, Zhong H, et al. A novel approach for preferential flotation recovery of molybdenite from a porphyry copper - molybdenum ore [J]. Minerals Engineering, 2012, 36:37-44.
- [4] 张克难. 二硫化钼二维材料及其异质结的制备和光电特性研究[D]. 上海:中国科学院研究生院(上海技术物理研究所),2016.
- [5] 吕建业,沈耀平,张洪恩. 辉钼矿表面特性及其可浮性的研究[J]. 有色金属(选矿部分),1992(4):4-8,41.
- [6] 袁致涛,张其东,刘炯天. 金属离子对辉钼矿浮选的影响及机理研究[J]. 东北大学学报(自然科学版),2016,37(7):1013-1016.
- [7] Lu Z Z, Liu Q X, Xu Z H, et al. Probing anisotropic sur-

- face properties of molybdenite by direct force measurements [J]. *Langmuir*, 2015, 31(42):11409 – 11418.
- [8] 张宝元, 钟宏. 辉钼矿的浮选及其捕收剂的研究进展 [J]. *矿产保护与利用*, 2010(3):51 – 54.
- [9] Giannozzi P, Baroni S, Bonini N, et al. Quantum ESPRESSO: a modular and open – source software project for quantum simulations of materials [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2009, 21(39):395 – 502.
- [10] Perdew J P, Wang Y. Accurate and simple analytic representation of the electron – gas correlation energy [J]. *Physical Review B Condensed Matter*, 1992, 45(23):13244 – 13249.
- [11] Laasonen K, Pasquarello A, Car R, et al. Car – parrinello molecular dynamics with vanderbilt ultrasoft pseudopotentials [J]. *Physical Review B Condensed Matter*, 1993, 47(16):10142 – 10153.
- [12] Arya A, Carter E A. Structure, bonding and adhesion at the ZrC(100)/Fe(110) interface from first principles [J]. *Surface Science*, 2004, 560(1 – 3):103 – 120.
- [13] Lima G F D, Oliveira C D, Abreu H A D, et al. Sulfuric and hydrochloric acid adsorption on the reconstructed sulfur terminated(001) chalcopyrite surface [J]. *International Journal of Quantum Chemistry*, 2012, 112(19):3216 – 3222.
- [14] Dickinson R G, Pauling L. The crystal structure of molybdenite [J]. *J Am Chem Soc*, 1923, 45(6):1466 – 1471.
- [15] Kadantsev E S, Hawrylak P. Electronic structure of a single MoS₂ monolayer [J]. *Solid State Communications*, 2012, 152(10):909 – 913.
- [16] 王晖, 陈立, 符剑刚, 等. 辉钼矿浮选体系中的界面热力学 [J]. *中南大学学报(自然科学版)*, 2007, 38(5):893 – 899.
- [17] Oliveira C D, Duarte H A. Disulphide and metal sulphide formation on the reconstructed(001) surface of chalcopyrite: A DFT study [J]. *Applied Surface Science*, 2010, 257(4):1319 – 1324.
- [18] Oliveira C D, Lima G F D, Abreu H A D, et al. Reconstruction of the chalcopyrite surfaces—A DFT study [J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2012, 116(10):6357 – 6366.
- [19] Chander S, Fuerstenau D W. The effect of potassium diethyldithiophosphate on the electrochemical properties of platinum, copper and copper sulfide in aqueous solutions [J]. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 1974, 56(2):217 – 247.
- [20] 张艳娇, 赵平, 郭珍旭, 等. 极性捕收剂在难选辉钼矿浮选中的应用 [J]. *矿产保护与利用*, 2014(6):25 – 27.
- [21] 张文钰. 辉钼矿浮选捕收剂的寻觅 [J]. *中国铝业*, 2006, 30(2):3 – 6.
- [22] 孙丽娟, 曹亦俊, 孙利青, 等. 煤油在辉钼矿表面吸附和解吸特性研究 [J]. *矿产保护与利用*, 2017(3):37 – 41.
- [23] 谢小燕. 新型辉钼矿捕收剂的浮选作用及机理研究 [D]. 长沙: 中南大学, 2014.
- [24] Lissitsyna K, Huertas S, Quintero L C, et al. Piona analysis of kerosene by comprehensive two – dimensional gas chromatography coupled to time of flight mass spectrometry [J]. *Fuel*, 2014, 116(1):716 – 722.
- [25] 郭丽敏. 高灰细粒难浮煤泥浮选工艺研究 [D]. 太原: 太原理工大学, 2017.
- [26] 任骊东. 选钼捕收剂的应用研究与实践 [J]. *中国铝业*, 2006, 30(3):18 – 20.
- [27] 刘尚清. 黄药在单一辉钼矿浮选中的应用 [J]. *有色矿冶*, 1988(3):20 – 23.
- [28] 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, 44(6):25 – 27, 31.
- [29] 曹飞, 孙传尧, 王化军, 等. 烃基结构对黄药捕收剂浮选性能的影响 [J]. *北京科技大学学报*, 2014, 36(12):1589 – 1594.

引用格式: 魏桢伦, 李育彪. 辉钼矿晶面各向异性及其对浮选的影响机制 [J]. *矿产保护与利用*, 2018(3):31 – 36.

WEI Zhenlun, LI Yubiao. Anisotropy of molybdenite surface and its effects on flotation mechanism [J]. *Conservation and Utilization of Mineral Resources*, 2018(3):31 – 36.