

## Modelagem Molecular Aplicada à Flotação de Minérios

Luiz Claudio K. Cerqueira  
Bolsista de Iniciação Científica, Engenharia Química, UFRJ

Júlio Cesar Guedes Correia  
Orientador, Engenheiro Mineral, M.Sc.

Laurindo de Salles Leal Filho  
Co-orientador, Engenheiro Metalúrgico, Ph.D.

Peter Rudolf Seidl  
Co-orientador, Químico Industrial, Ph.D.

### RESUMO

Esse trabalho utilizou o software Cerius 2 da Silicon Graphics para modelagem molecular, com o objetivo de relacionar estruturas de alguns minerais com agentes depressores, no processo de flotação. Esses diferentes agentes depressores foram avaliados, quanto ao seu potencial de associação às superfícies minerais.

### 1. INTRODUÇÃO

Na natureza, os minerais não existem de forma pura: sempre estão associados, formando os minérios. Para serem aproveitados de forma efetiva, é necessário separar as espécies que constituem esses minérios. Desde os primórdios da sociedade, existem registros de várias formas de purificação de substâncias para usos específicos, sendo a flotação um dos métodos mais largamente empregados no tratamento de minérios.

A flotação consiste de uma operação físico-química, onde um mineral é separado dos demais componentes de um minério fazendo-se uso das diferenças entre suas propriedades interfaciais (1). O processo de flotação pode ser utilizado tanto com o intuito de conhecer espécies minerais existentes em determinado minério, como também em alguns casos para eliminar contaminantes mineralógicos indesejáveis com o objetivo de satisfazer especificações exigidas pelo mercado.

Existem substâncias que se ligam aos minerais presentes no minério, mudando o comportamento dos mesmos em relação à

afinidade com a água. Essas substâncias podem ser coletores ou depressores da flotação. Os coletores ligam-se à superfície dos minerais de forma a favorecer a flotação, aumentando sua hidrofobicidade, enquanto os depressores também se ligam a superfície dos minerais só que aumentam sua afinidade com o meio em que estão.

A forma pela qual coletores e depressores se ligam à superfície de minerais é muito específica, sendo comum o fato de certas substâncias funcionarem como coletores para um determinado tipo de mineral e não apresentarem nenhuma modificação para com outros. Esse comportamento sugere uma grande afinidade entre as estruturas dos agentes de flotação com a superfície do mineral que devem flotar. Não só pela capacidade em si de se ligar à superfície, mas também pela capacidade de recobri-la devidamente, de forma a conferir as características de molhabilidade desejadas.

Vários tipos de substâncias podem ser empregadas como agentes de flotação. Basicamente, elas devem ter um grupo funcional para se ligar à superfície exposta do mineral. Macromoléculas que apresentam grupamentos funcionais livres em suas cadeias têm apresentado grande utilidade nesses processos, por serem capazes de se ligar efetivamente aos minerais e recobrirem grande extensão de suas superfícies. Amido, taninos e outras macromoléculas naturais são empregadas como coletores ou depressores nos processos de flotação.

Essa forte influência da estrutura do sistema em sua performance, abre um grande campo para a aplicação da modelagem molecular no estudo do fenômeno (2). Sendo essa técnica baseada em como a forma da estrutura influencia em sua estabilidade, ela se aplica perfeitamente à questão de representar interações espaciais entre diferentes estruturas. Utilizado-se a modelagem molecular como ferramenta, pode-se simular tanto as superfícies dos minerais como as substâncias que devem se ligar a elas. Dessa forma, pode-se entender como diferentes moléculas interagem com as superfícies dos minerais e avaliá-las com caráter discriminatório quanto às suas funções como agentes de flotação, sabendo se elas irão se ligar, ou não às superfícies de forma efetiva.

## 2. OBJETIVO

Com este trabalho, pretende-se simular estruturas envolvidas na operação de flotação de minérios, de modo a fornecer dados que possam futuramente aprimorar o processo.

## 3. METODOLOGIA

Com a finalidade de estudar o processo de flotação de minerais, a partir do conhecimento das estruturas das espécies envolvidas no fenômeno, procurou-se relacionar tais estruturas com fatores relevantes ao processo. Sendo um fenômeno de transferência de fases, de polaridades distintas, a forma pela qual os agentes de flotação se ligam aos minerais, para modificar o caráter hidrofílico da estrutura, é um dos fatores primordiais do estudo.

Tendo informações de quais substâncias deveriam se ligar aos minerais no meio, foram feitos cálculos de mecânica molecular, utilizando os parâmetros do campo de forças dreiding com o programa CERIUS™ (3) para determinar suas formas.

Na primeira etapa do projeto, desejava-se determinar, utilizando-se modelagem molecular, qual seria a taxa de recobrimento de certas moléculas na superfície de alguns minerais, pela sua área projetada. As moléculas foram simuladas como descrito acima, e depois dispostas sobre a superfície de alguns minerais.

O passo seguinte foi determinar a forma pela qual as superfícies dos minerais seriam representadas. Uma vez que a maior parte das estruturas dos cristais de interesse já estava disponível no banco de dados do programa, utilizou-se o módulo Surface Builder que permite gerar superfícies de um determinado cristal, pelo conhecimento dos índices de Miller do plano em questão, geralmente o plano de clivagem. Para possibilitar sua criação, utilizando o módulo Crystal Builder, algumas estruturas tiveram de ser catalogadas, como também informações sobre as dimensões da célula unitária do cristal, grupos de simetria a qual pertenciam e componentes.

Uma vez simulada a superfície, os agentes de flotação foram orientados sobre a superfície construída. Utilizando os valores de raio de van der Waals, foi possível determinar a superfície de contorno das moléculas, e assim visualizar o quanto da superfície era recoberto pela área projetada do agente de flotação. Essa área

foi aproximada como um círculo, e seu diâmetro medido através das ferramentas do programa.

Dando prosseguimento ao estudo, várias macromoléculas foram simuladas. A simulação de homopolímeros, devido a sua regularidade de composição, se apresentou muito mais simples que a simulação de copolímeros. Para os homopolímeros que não apresentavam cadeias laterais, os monômeros foram simulados da mesma forma que os agentes de flotação antes descritos, para serem posteriormente ligados segundo uma reação de adição, onde há a perda de uma molécula de água. Eles eram em sua maioria polímeros multifuncionais naturais ou derivados, como a amilose e a carboximetil-celulose.

Para a construção de homopolímeros que apresentavam cadeias laterais, o processo foi basicamente o mesmo. Os monômeros foram simulados como moléculas comuns e depois unidos para formar as cadeias principais e laterais, posteriormente unidas de forma a montar a estrutura ramificada. Dos polímeros simulados, somente a amilopectina (4) possuiu tais características.

Houve o interesse de se simular copolímeros; infelizmente não existiam informações disponíveis referentes a ordem que eles seguiam dentro da macromolécula. Somente eram conhecidas as proporções nas quais os monômeros se misturavam; entretanto, suas reatividades relativas eram desconhecidas.

Depois de simuladas todas as estruturas referentes ao problema, o estudo do caso teve prosseguimento analisando parâmetros estruturais dos agentes de flotação e dos cristais que poderiam ser de importância no fenômeno.

#### 4. RESULTADOS OBTIDOS

A determinação da área projetada não correspondeu ao esperado a partir de dados experimentais, apesar de ter respondido algumas curiosidades do processo. A dúvida era relativa a dois isômeros de cadeia que apresentavam performances muito diferentes na flotação de um mesmo mineral. Através do conhecimento da conformação tridimensional das estruturas dos isômeros, foi possível visualizar que um apresentava uma capacidade de recobrimento da superfície muito maior que o outro (Figura 1).

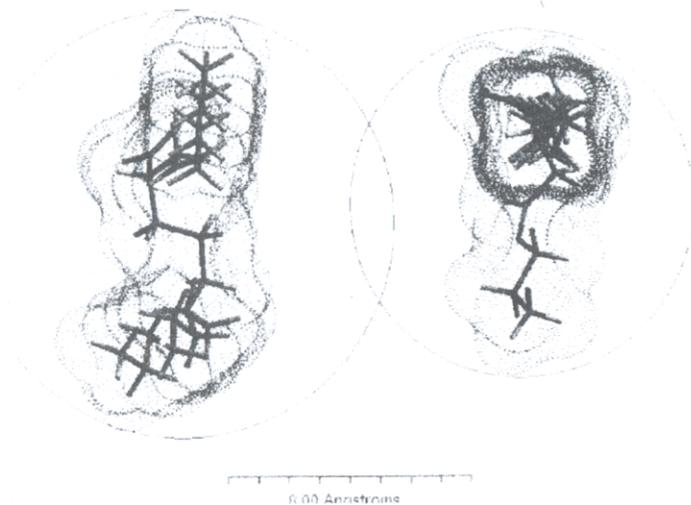


Figura 1 - Vista superior da área projetada de dois coletores

Como se pode ver através das imagens, a projeção do isômero da esquerda é bem maior, devido ao fato de sua estrutura, por ser mais simétrica, apresentar uma tendência a afastar as duas partes da cadeia, recobrimo uma maior área da superfície de um cristal. A partir da estrutura dos cristais, foi possível criar representações de diversas superfícies, como mostrado nos exemplos (Figuras 2 e 3):

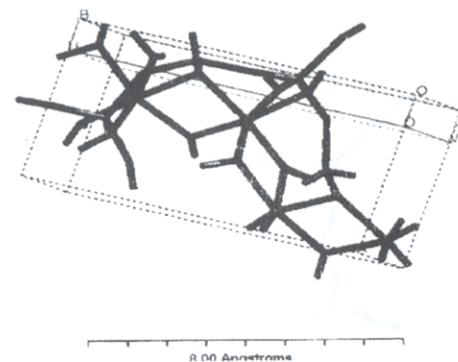


Figura 2 - Célula de cristal mostrando corte de superfície

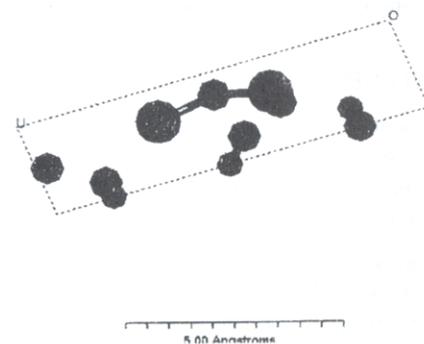


Figura 3 - Superfície do plano 001 do cristal acima

Diversas superfícies foram simuladas a partir de um mesmo cristal, de forma que se pudesse ter uma representação de todos os possíveis planos cristalinos que ficassem expostos para um determinado mineral. Essas superfícies geradas foram tratadas de forma a fornecer parâmetros que pudessem ser representados de forma estatística, e fossem capazes de relacioná-las com agentes de flotação, descrevendo sua conectividade.

O tratamento dado às macromoléculas foi semelhante ao das superfícies. Elas foram geradas segundo a metodologia descrita,

de forma a criar cadeias relativamente grandes que pudessem descrevê-las como um todo como mostrado na Figura 4.

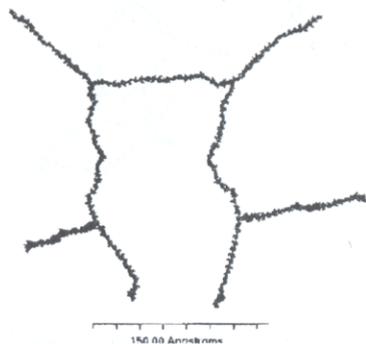


Figura 4 - Simulação de polímero natural

## 5. COMENTÁRIOS GERAIS

O trabalho apresentado é um estudo inicial de um fenômeno muito complexo, e em certos pontos de seu desenvolvimento algumas abordagens foram modificadas, por serem muito mais complexas do que aparentavam.

A simulação da área projetada não correspondeu a ensaios feitos em laboratório. Apesar da abordagem utilizada ter conseguido distinguir comportamentos diferentes de espécies semelhantes, os valores em si não foram fiéis a dados experimentais, apesar de seguirem uma mesma proporção. Deve-se descobrir qual a relação entre o raio de Van der Waals, dos átomos constituintes das moléculas, com o valor desse raio na solução em que as espécies se encontram, para prosseguir este estudo.

A representação das superfícies mostrou-se bem fiel, enquanto que algumas macromoléculas fugiram um pouco ao esperado, necessitando de um futuro refinamento nas técnicas de simulação, principalmente para as que possuem ramificações laterais.

## AGRADECIMENTOS

Prof<sup>o</sup> J. G. Eon, Instituto de Química, UFRJ, pelo auxílio no desenvolvimento da metodologia do trabalho e ao CNPq, pelo apoio financeiro.

## BIBLIOGRAFIA

1. Leal Filho, L.S. Concentração por Flotação. Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. São Paulo: Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mineral (PMI 722). 1995.
2. Correia, J.C.G., Leal Filho, L.S., Seidl, P.R. Application of Molecular Modeling in Phosphate Flotation. 1997. No prelo.
3. User Manual CERIU<sup>2</sup> Version 1.0. Molecular simulations. 1994.
4. Gray, H.B., Haight Jr., G. P. Princípios básicos de química. Barcelona: Reverté. 1974.