

Лавриненко А.А., Свечникова Н.Ю.

ИССЛЕДОВАНИЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ УГЛЕВОДОРОДОВ ПРИ ВЫБОРЕ РЕАГЕНТОВ ДЛЯ ФЛОТАЦИИ УГЛЕЙ

Разработка эффективных селективно-действующих реагентных режимов для флотации углей с использованием новых физико-химических методов исследования является актуальной научной задачей.

В последнее время для выявления энергетических возможностей изучаемых классов углеводородов, участвующих в процессе адсорбции на поверхности углей, используются различные методы квантово-химических расчетов.

Так, существует теория КЛЮ [1], предложенная М.И. Корсунским и С.А. Кутолиным, позволяющая рассчитать энергию и длину связи, а также число коллективизированных электронов в молекулах реагентов, широко распространен метод молекулярных орбиталей Хюккеля (МОХ) [2].

Заметные успехи в практике расчета межмолекулярного взаимодействия были достигнуты в последние десятилетия при оценке характеристик адсорбции соединений на плоской однородной углеродной поверхности в атом-атомном приближении с использованием межатомных потенциалов в различных формах. Метод атом-атомных потенциалов наиболее обоснован в форме Бакингема-Корнера [3].

Исследователи В.П. Фешин, Е.В. Фешина, Л.И. Жижина провели расчет заселенности валентных орбиталей этиленовых углеводородов методом RHF/6-311G(d) и MP2/6-311G(d) [4, 5].

Существуют автоматизированные программы расчета на основе методов квантово-химических расчетов INDO, MINDO/3 и RHF/6-311G(d) и MP2/6-311G(d). Эти методы позволяют рассчитать энергии молекулярных орбиталей, дипольных моментов молекул, максимальные положительные и отрицательные заряды в молекулах реагентов для определения средства реагента и молекул органической массы угля [6].

В лабораторных условиях были изучены флотационные свойства технических продуктов фракций альфа-олефинов от C₆ до C₂₆, отличающихся тем, что содержат в своем групповом составе винилдиеновые углеводороды, которые оказывают влияние на их флотационные свойства.

С целью изучения влияния на флотационные способности фракций альфа-олефи-

нов винилдиеновых углеводородов по программе Hyper Chem и Морас [7] был произведен расчет квантово-химических характеристик 2-винилгексадиена-1,5 и октена-1.

Установлено, что 2-винилгексадиен-1,5 имеет более низкие значения квантово-химических параметров в отличие от октена-1 (табл. 1).

Так, дипольный момент 2-винилгексадиена-1,5 в 5 раз меньше, чем у октена-1. Максимальный положительный заряд в молекуле 2-винилгексадиена-1,5 сконцентрирован на атоме водорода ви-

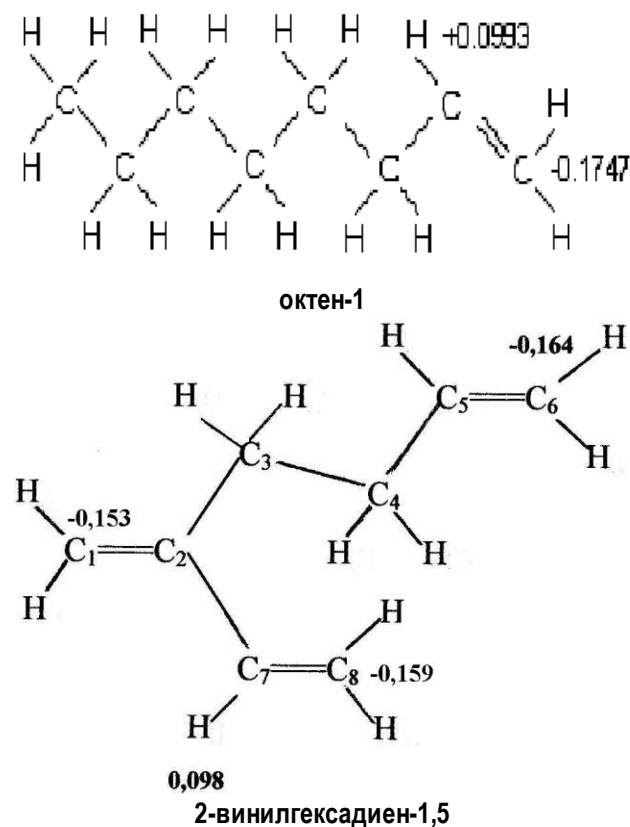


Рис. 1. Структурные формулы углеводородов

Таблица 1

Квантово-химические характеристики углеводородов

Вещество	Формула	M, г/моль	μ, D	$\epsilon_m, \text{эВ}$	$\epsilon_{m+1}, \text{эВ}$	max «+»	max «-»
Октен-1	C ₈ H ₁₆	112,21	0,25	-10,04	+1,17	0,099	0,17
2-винил-гексадиен-1,5	C ₈ H ₁₂	108,18	0,05	-9,39	+0,26	0,098	0,16

нильного радикала. В молекуле 2-винилгексадиена-1,5 отрицательный заряд сконцентрирован на 3 атомах углерода (на первом, шестом и восьмом) (рис. 1).

2-винилгексадиен-1,5 отличается наличием сопряженных связей, которые обладают механизмом взаимного влияния, отличающимся от индуктивного более мощным по силе, передающимся на большие расстояния мезомерным эффектом. В молекуле 2-винилгексадиена-1,5 происходит выравнивание π -электронной плотности по всей цепи сопряжения, делокализация π -электронов в боковой цепи.

Такое распределение электронной плотности в молекуле 2-винилгексадиена-1,5 позволяет предположить, что 2-винилгексадиен-1,5 обладает двойственной реакционной способностью по отношению к углям: с одной стороны, наличие трех центров с максимальной электроотрицательностью создает возможность более прочного специфического взаимодействия с электронно-акцепторными участками угольной поверхности; с другой стороны, делокализация электронной плотности в молекуле 2-винилгексадиена-1,5 способствует взаимодействию с аполлярными центрами угля и гидрофобизации ее поверхности; изостроение молекулы 2-винилгексадиена-1,5 также позволяет более эффективно разрыхлять гидратные слои на поверхности угля.

Полученные выводы были подтверждены результатами измерения теплот смачивания угля и флотационных опытов (табл. 2).

Так, при смачивании коксового угля 2-винилгексадиеном-1,5 тепловой эффект незначительно больше (на 0,91 Дж/г_{угля}), чем при смачивании октеном-1. А при смачивании газового угля 2-винилгексадиеном-1,5 тепловой эффект больше в 4 раза.

При флотации угля были получены аналогич-

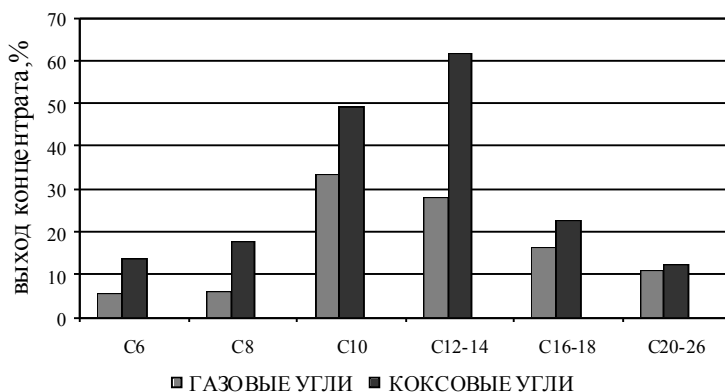


Рис. 2. Сравнительные результаты флотации фракций альфа-олефинов на различных углях

ные результаты. Так, при использовании 2-винилгексадиена-1,5 в качестве реагента-собирателя в количестве 1 кг/т для флотации коксового угля увеличивается извлечение горючей массы в концентрат на 9,9%. В случае флотации газового угля применение 2-винилгексадиена-1,5 в количестве 3 кг/т позволяет увеличить извлечение горючей массы в концентрат на 36,7%, в отличие от применения октена-1 в том же количестве (см. табл. 2). Значительное увеличение флотируемости газовых углей при использовании 2-винилгексадиена-1,5 объясняется наличием в молекуле трех активных центров, обеспечивающих повышенную адсорбцию на газовых углях, имеющих большее количество электронно-акцепторных центров.

Исследования флотационной активности фракций альфа-олефинов при флотации угольной мелочи разреза Березовский «К» показали, что лучшие результаты были получены с использованием фракции C₁₂₋₁₄. Так, при равном расходе 1 кг/т выход концентрата увеличивается от C₆ до C₁₂₋₁₄ с 13,7 до 62%, при этом селективность процесса лучше в случае использования C₁₀. Дальнейшее повышение молекулярной массы

Таблица 2

Показатели флотации с использованием различных реагентов-собирателей

Реагентный режим (расход реагента, кг/т)		Продукты флотации	Показатели, %		Извлечение горючей массы в концентрат, %	Уголь	Теплота смачивания, Дж/г _{угля}	
Собиратель	Вспениватель		Выход	Зольность				
Октен-1 (1,0)	КОБС (0,08)	Концентрат	41,6	9,3	48,2	Березовский «К»	-9,01	
		Отходы	58,6	21,7				
2-винил-гексадиен-1,5 (1,0)		Концентрат	49,3	7,8	58,1		-9,92	
		Отходы	50,7	21,8				
Октен-1 (3,0)			Концентрат	18,0	3,6	20,8	Комсомолец «Г»	-2,25
		Отходы	82,0	10,5				
2-винил-гексадиен-1,5 (3,0)			Концентрат	50,4	4,8	57,5		-10,20
		Отходы	49,6	13,8				

понижает показатели флотации.

При флотации газовых углей шахты «Комсомолец» с исходной зольностью 11,4% максимальный выход концентрата составил 35,5% при использовании фракции альфа-олефинов C_{10} , что на 22,5–36,7% меньше, чем при флотации коксовых углей с использованием фракций C_{10} и C_{12} (рис. 2).

Причем увеличение длины углеводородного радикала снижает показатели флотации на газовых углях. Это связано с тем, что в газовых углях в непосредственной близости от поверхности под влиянием некомпенсированных поверхност-

ных сил диполи воды образуют значительное количество ориентированных гидратных слоев. Поэтому адсорбция молекул альфа-олефинов, имеющих значительную длину, на поверхности угля затруднена.

Таким образом, квантово-химические расчеты энергетических параметров углеводов позволяют сделать выводы об их флотационной активности, на основании которых можно разработать эффективные реагентные режимы для флотации угольной мелочи.

Библиографический список

1. Днепровский А.С., Темникова Т.И. Теоретические основы органической химии. Л.: Химия, 1991. 560 с.
2. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь: Учеб. пособие для хим.-техн. вузов. М.: Высш. шк., 1984. 295 с.
3. Buckingham R.A., Corner J. // Proc. Roy. Soc. (A). 1974. Vol. 189. N 1016. P. 118.
4. Фешин В.П., Фешина Е.В., Жижина Л.И. // ЖОХ. 2006. Т. 76. Вып. 5. С. 776.
5. Фешин В.П. Электронные эффекты в органических и элементоорганических молекулах. Екатеринбург: Изд-во УрО РАН, 1997. 377 с.
6. Терней А. Современная органическая химия. Т. 1. М.: Химия, 1981. 652 с.
7. Гиревая Х.Я. Повышение эффективности флотации газовых углей на основе квантово-химического обоснования выбора реагентов: Автореф. дис. ... канд. техн. наук. Магнитогорск, 2006.

УДК 008:1

Юрский С.Ю.

БОЛЕН ВЛАСТЬЮ

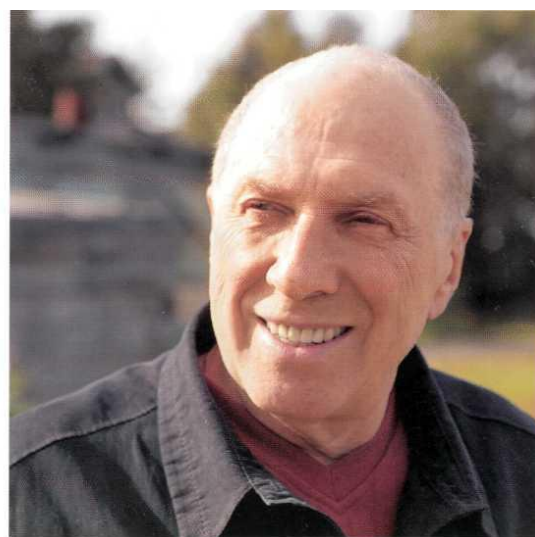
Сергей Юрский – мощный актёр, философ, писатель, Человек много раз бывал в МГТУ с концертами, поддерживал систему эстетического воспитания МГМИ, писал о ней. Рассуждения Сергея Юрьевича о власти, как явления, полезно и нам – работникам вуза, т. к. эта болезнь бывает у человека власти любого уровня.

(От редакции)

За перо когда-то взялся, потому что захотелось обратиться к зрителям письменно. Подумать вместе. Может быть, и поспорить... Конкретно с каждым, кто захочет вступить в диалог...

А сейчас разговор о нас, о нашем сегодняшнем дне и о том, как отчитаться нам перед внуками за XX век, в котором прожили мы большую часть своей жизни.

...Сталин в нашем спектакле после ухода певицы Надежды Блаженной, сделав намек понимающим его людям, что, видимо, скоро с этой слишком самостоятельной молодой женщиной должно случиться несчастье, помолчав, пошагав взад-вперед по кабинету, вдруг взрывается криком: «Никогда! Никогда не построим мы великое государство. Если не сумеем проникнуть внутрь этой.. ягодки!» – и отбрасывает виноградину, которую держал в пальцах.



Это так! Это правильная фраза. Это хорошая фраза!

Душа бессмертна. Душа открыта. И при этом она – непроницаема.

Непроницаема! Отсюда гнев Сталина.

Власть стремится к увеличению самой себя. Любая власть – государственная, власть денег, ду-