

- Першин Г.Д., Караулов Н.Г., Уляков М.С. The research of high-strength dimension stone mining technological schemes in Russia and abroad // Сборник научных трудов SWorld. Вып. 2. Т. 11. Одесса: Куприенко, 2013. С. 64–73.
- Features of diamond-wire saws application for rock overburden removal at marble quarry construction / Першин Г.Д., Караулов Н.Г., Уляков М.С., Шаров В.Н. // Сборник научных трудов SWorld. 2013. Т. 14. № 3. С. 39–42.
- Бычков Г.В., Кокунин Р.В. Оптимальные способы вскрытия рабочих горизонтов на перспективных и эксплуатирующихся месторождениях природного камня // Добыча, обработка и применение природного камня: сб. науч. тр. Магнитогорск: МГТУ им. Г.И. Носова, 2007. С. 83–92.
- Першин Г.Д., Уляков М.С. Обоснование способов подготовки к выемке блочного природного камня высокой прочности // Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г. И. Носова. 2010. №4 (32). С. 14–19.

## INFORMATION ABOUT THE PAPER IN ENGLISH

## MODERN TECHNOLOGICAL SCHEMES OF DIMENSION HIGH-STRENGTH STONE MINING

**Pershin Gennadiy Daltonovich** – D.Sc. (Eng.), Professor, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia. E-mail: pshenichnaya\_e@mail.ru.

**Karaulov Nikolay Gennadievich** – Ph.D. (Eng.), Associate Professor, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia. E-mail: n\_karaulov@mail.ru.

**Ulyakov Maxim Sergeevich** – Ph.D. (Eng.), Assistant Professor, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia. E-mail: maxim-atlet@yandex.ru.

**Abstract.** This paper analyzes technological schemes of mining blocks of granite dimension stone in Finland, Italy, Portugal, Spain, and Russia. It contains an idea of increasing the yield of commercial blocks from rock mass by minimizing processing loss of block products in deposits with a complicated bedding of natural joints limited by systems of steeply and flat dipping fissures. The authors developed methods to calculate reasonable process parameters of combined preparation for dimension high-strength stone mining in deposits with a complicated mining and geological bedding of minerals, using a high-stepped two-stage scheme of mass mining, when at the first stage blocks were cut with a diamond wire saw, and at the second stage blocks tilted on an operating platform were cut into commercial blocks with topammer drilling rigs.

**Keywords:** Diamond wire saw, performance, blocks of granite dimension stone, primary block, secondary block, damping filling, horizontal cut, block parameters, bench height, block fissuring.

## References

- Pershin G.D., Karaulov G.A., Karaulov N.G., Karaulov A.G. The influence of the height of the bench on the output of commercial marble blocks. *Gorniy zhurnal* [Mining journal]. 2008, no. 1, pp. 25-26.
- Sinelnikov O.B. Norwegian labradorite quarries near the city of Larvik. *Kamen' vokrug nas* [Stone around us]. 2009, pp. 21-25.
- Dubrovsky A.B., Ulyakov M.S. Selection of equipment when developing the Nizhne-Sanarsly granodiorite deposit. *Gorniy zhurnal* [Mining journal]. 2011, no. 5, pp. 67-70.
- Pershin G.D., Karaulov N.G., Ulyakov M.S. The research of high-strength dimension stone mining technological schemes in Russia and abroad. *Sbornik nauchnykh trudov SWorld* [Collection of scientific papers SWorld]. Iss. 2. Vol. 11. Odessa: Kuprienko, 2013, pp. 64-73.
- Pershin G.D., Karaulov N.G., Ulyakov M.S., Sharov V.N. Features of diamond-wire saws application for rock overburden removal at marble quarry construction. *Sbornik nauchnykh trudov SWorld* [Collection of scientific papers SWorld], 2013, vol. 14, no. 3, pp. 39-42.
- Bychkov G.V., Kokunin R.V. Optimum ways of stripping mining horizons in prospective and operating natural stone deposits. *Dobycha, obrabotka i primeneniye prirodnogo kamnya: sbornik nauchnykh trudov* [Mining, processing and application of natural stone: collection of scientific papers]. Magnitogorsk: MG TU, 2007, pp. 83-92.
- Pershin G.D., Ulyakov M.S. Rationale for ways to prepare dimension high-strength natural stone for mining. *Vestnik Magnitogorskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta im. G.I. Nosova* [Vestnik of Nosov Magnitogorsk State Technical University], 2010, no. 4 (32), pp. 14-19.

Першин Г.Д., Караулов Н.Г., Уляков М.С. Современные технологические схемы добычи блочного высокопрочного камня // Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова. 2015. №3. С. 5–11.

Pershin G.D., Karaulov N.G., Ulyakov M.S. Modern technological schemes of dimension high-strength stone mining. *Vestnik Magnitogorskogo Gosudarstvennogo Tekhnicheskogo Universiteta im. G.I. Nosova* [Vestnik of Nosov Magnitogorsk State Technical University]. 2015, no. 3, pp. 5–11.

УДК 622.27.235

## ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИОННОЙ АКТИВНОСТИ УГОЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Медяник Н.Л., Бодьян Л.А., Варламова И.А., Гиревая Х.Я., Калугина Н.Л., Гиревой Т.А.

Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова, Магнитогорск, Россия

**Аннотация.** Приведены результаты исследования структуры труднообогатимых углей. Установлено наличие таких гетерофункциональных сорбционных центров, как гидроксильные, карбонильные и карбоксильные группы.

Выявлена корреляционная зависимость между естественной флотуемостью углей и количеством кислородсодержащих групп, теплотой смачивания, электрокинетическим потенциалом. Изучение сорбционной активности труднообогатимых углей показало, что центрами адсорбции нуклеофильных молекул воды являются электрофильные участки угольной поверхности, возникающие в результате смещения электронной плотности на кислородсодержащие группы. Проведенные квантово-химические расчеты подтвердили наличие большого количества электрофильных центров адсорбции, обуславливающих гидрофильность поверхности. Определено, что в качестве флотореагентов для извлечения органической массы угля необходимо использовать реагенты, проявляющие более жесткий нуклеофильный характер, чем молекулы воды, и способные вытеснять их в процессе флотации.

**Ключевые слова:** гетерофункциональные сорбционные центры, естественная флотуемость, электрофильные и нуклеофильные центры адсорбции, органическая масса угля, квантово-химические расчеты.

### Введение

Исключительный дефицит углей повышенной и высокой коксумости в последние годы в России и за рубежом компенсируется увеличением добычи труднообогатимых углей, на долю которых приходится до 60% мировых запасов угля, в связи с чем развитие теории и практики флотации является одним из приоритетных направлений реструктуризации производственного потенциала углеобогатения [1–3].

Подбор реагентов-собираателей, обеспечивающих повышение эффективности процессов флотации труднообогатимых углей, чаще всего носит эмпирический характер и не имеет достаточного теоретического обоснования, что связано с недостаточной изученностью труднообогатимых углей как объектов флотации и с недостаточной изученностью механизма взаимодействия реагентов с угольной поверхностью [4]. Вышесказанное определяет целесообразность изучения сорбционной активности угольной поверхности с целью разработки качественно нового подхода к повышению эффективности флотации путем подбора флотореагентов по цепочке теоретическое исследование – практика [5–7].

### Материалы и методы исследования

В качестве объекта исследования выбраны труднообогатимые угли, поступающие в ООО «Северсталь».

Для проведения исследования в работе использовался комплекс методов, включающий методы ИК-Фурье-спектроскопии; определения петрографического состава; пенообразующей способности; электрокинетического потенциала; иодометрического определения сорбционной активности угольной поверхности; квантово-химические исследования методом параметризации РМ 3 в приближении ограниченного и неограниченного метода Хартри-Фока (RHF/6-311 G(d)) в полноэлектронном валентно-расщепленном базисном наборе 6-311 G(d) с использованием программных пакетов HyperChem 7.5 Pro.

### Результаты исследования и их обсуждение

Изучение структурных характеристик труднообогатимых углей различных шахт были проведены с использованием ИК-спектроскопии. Ре-

зультаты исследований представлены на рис. 1. Расшифровку спектров проводили по значениям характеристических частот валентных и деформационных колебаний отдельных типов связей, атомных и функциональных групп.

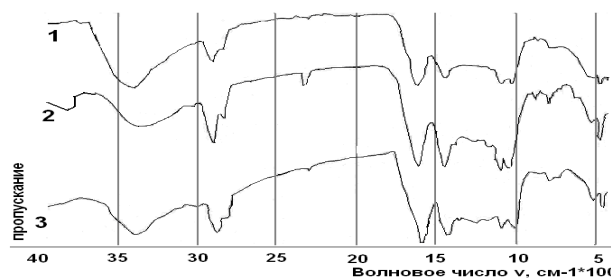


Рис. 1. ИК-спектры различных образцов труднообогатимых углей

Труднообогатимые угли разных шахт характеризуются довольно широким набором общих полос поглощения в ИК-спектре:

- полосы поглощения при 2850, 2920  $\text{см}^{-1}$  и плечо при полосе 2960  $\text{см}^{-1}$  соответствуют валентным колебаниям метильных  $-\text{CH}_3$  (наибольшее поглощение в этой области характерно для образцов 2 и 3) и метиленовых  $-\text{CH}_2-$  углеводородных групп (поглощение в этой области для исследуемых углей невелико);
- полосы поглощения при 1320 и 1460  $\text{см}^{-1}$  деформационных колебаний  $-\text{CH}_3$  и  $-\text{CH}_2-$  групп;
- полоса валентных колебаний входящей в систему сопряжения группы  $\text{C}=\text{C}$  при 1600  $\text{см}^{-1}$ ;
- полоса деформационных колебаний  $=\text{C}-\text{H}$  связи при 860  $\text{см}^{-1}$ ;
- полосы поглощения при 3040 и 780  $\text{см}^{-1}$ , принадлежащие соответственно валентным и деформационным колебаниям  $\text{C}-\text{H}$  связи в ароматических структурах, подтверждают высокий водорододонорный потенциал угольной поверхности;
- наличие в углях  $-\text{OH}$ -групп, в различной степени связанных водородной связью, подтверждают полосы поглощения с максимумами при 3100, 3300 и 3540  $\text{см}^{-1}$ ;
- присутствие в углях минеральных примесей отражается в ИК-спектрах наличием полос поглощения при 3690, 3620, 1080, 1020, 1000, 900, 680, 520 и 470  $\text{см}^{-1}$ , причем поглощение в области 3690 и 3620  $\text{см}^{-1}$  характерно также для свободной  $-\text{OH}$ -группы.

По данным результатам можно сделать выводы о том, что значительная часть кислородсодержащих групп входит в состав органической части углей. Данные спектрального анализа качественно свидетельствуют о гетерополярности угольной поверхности, ее энергетической неоднородности. В частности, преобладание в труднообогатимых углях таких сорбционных центров, как гидроксильные, карбонильные и карбоксильные группы, оказывает существенное влияние на смачиваемость угольной поверхности и способность флотироваться [8, 9].

Определение величин теплот смачивания в исследовании проводилось для углей с различным содержанием кислородсодержащих группировок (табл. 1).

**Таблица 1**  
Теплоты смачивания труднообогатимых углей водой

Образец	Содержание кислорода, %	Теплота смачивания, Дж/г
1	8,89	15,5
2	8,75	13,5
3	8,29	12,2

Существование корреляции между содержанием кислорода в органической массе углей, их энергетической неоднородностью и энергией взаимодействия с водой подтверждает существенную роль кислородсодержащих групп угольной поверхности во флотационном процессе. Увеличение теплот смачивания при повышении содержания кислородсодержащих групп свидетельствует об увеличении числа активных центров адсорбции, увеличении энергии взаимодействия с водой. Таким образом, повышенное содержание кислородсодержащих групп увеличивает гидрофильность поверхности и приводит к снижению естественной флотуемости углей (табл. 2).

**Таблица 2**  
Естественная флотуемость газовых углей

Образец	Выход концентрата, %	Зольность, %		
		концентрата	отходов	исходного угля
1	2,29	8,52	11,49	11,43
2	4,3	16,52	19,14	19,03
3	5,26	15,21	18,96	18,76

Данные таблицы позволяют констатировать пониженную природную флотуемость исследуемых углей, что, по-видимому, обусловлено высокой пористостью их поверхности и наличием функциональных кислородсодержащих групп. Естественная флотуемость как мера гидрофобности угольной поверхности находится в определенной связи с теплотами смачивания углей: с увеличением теплового эффекта естественная флотуемость уменьшается, что можно также объяснить высоким содержанием кислорода. Так, например,

образец 1 имеет низкую зольность, но пониженную флотуемость, что связано с повышенным содержанием кислородсодержащих групп и повышенным значением общей пористости. Для подтверждения этого положения проведены измерения электрокинетического потенциала ( $\xi$ -потенциала), результаты которых приведены в табл. 3.

**Таблица 3**  
Изучение электрокинетических характеристик угольных дисперсий

Образец	Содержание кислорода, %	Зольность исходного угля, %	Естественная флотуемость, %	$\xi$ -потенциал, мВ
1	8,89	11,43	2,29	-23,7
2	8,75	19,03	4,3	-21,8
3	8,29	18,76	5,26	-19,4

Увеличение содержания гидроксильных, карбонильных и карбоксильных функциональных групп приводит к уменьшению значения  $\xi$ -потенциала и, как следствие, увеличению гидрофильности поверхности и снижению естественной флотуемости углей.

Вследствие сложности строения органическая масса угля содержит нуклеофильные электронодонорные центры адсорбции и электрофильные электроноакцепторные центры. Общая проблема конкуренции между этими альтернативными центрами в процессе адсорбции воды и реагентов-собирателей на поверхности углей представляет исключительную важность. При воздействии сильными акцепторами электроны нуклеофильных центров адсорбции переходят к молекуле акцептора, а при обработке сильными донорами их электроны переходят на электрофильные центры, в результате образуются комплексы с переносом заряда (КПЗ) [5].

Для установления центров адсорбции воды, которые участвуют в образовании КПЗ и обуславливают гидрофильность поверхности углей, было проведено определение сорбционной активности по йоду (электрофильному реагенту) и по тиосульфату натрия (нуклеофильному реагенту).

Йод ( $I_2$ ) участвует в донорно-акцепторном взаимодействии в качестве акцептора электронов, что обусловлено наличием свободных молекулярных орбиталей. Для образования донорно-акцепторной связи молекула йода предоставляет нижнюю свободную молекулярную орбиталь (НСМО). Поглощение йода зависит от наличия на поверхности углей участков с повышенной электронодонорной способностью. Процесс иодирования позволяет выявить относительное количество электронодонорных (нуклеофильных) областей угольной поверхности, обуславливающих образование КПЗ.

Тиосульфат натрия ( $Na_2S_2O_3$ ) является электронодонорным реагентом. Для образования до-

норно-акцепторных связей молекула тиосульфата натрия предоставляет верхнюю занятую молекулярную орбиталь (ВЗМО). По поглощению тиосульфата можно определить относительное количество электроноакцепторных (электрофильных) центров угольной поверхности, участвующих в образовании КПЗ.

Результаты исследования адсорбционной активности центров угольной поверхности приведены в табл. 4.

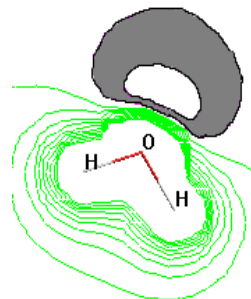
**Таблица 4**  
Количество электрофильного и нуклеофильного реагентов, адсорбированных энергетическими центрами угольной поверхности

Образец	Сухой уголь		Смоченный уголь	
	Количество $(I_2) \times 10^{-3}$ , моль/г	Количество $(Na_2S_2O_3) \times 10^{-3}$ , моль/г	Количество $(I_2) \times 10^{-3}$ , моль/г	Количество $(Na_2S_2O_3) \times 10^{-3}$ , моль/г
1	0,067	0,237	0,066	0,129
2	0,047	0,249	0,047	0,102
3	0,043	0,265	0,043	0,121

Анализ экспериментальных данных привел к заключению, что количество адсорбированного электрофильного реагента для сухого и смоченного угля практически одинаково, тогда как количество нуклеофильного реагента, адсорбированного смоченной угольной поверхностью, в 1,8–2,4 раза меньше, чем сухой. Следовательно, именно на положительно заряженных (электрофильных) участках поверхности газовых углей адсорбируются молекулы воды.

Вода проявляет по отношению к угольной поверхности жесткий нуклеофильный характер, так как имеет следующие квантово-химические характеристики: дипольный момент  $\mu = 1,739$  D; значение энергии верхней занятой молекулярной орбитали  $\epsilon_m = -12,3$  эВ; значение энергии нижней свободной молекулярной орбитали  $\epsilon_{m+1} = 4,1$  эВ; максимальный отрицательный заряд « $-0,359$ » сконцентрирован на атоме кислорода, а положительные заряды « $+0,178$ » – на атомах водорода. Для образования донорно-акцепторной связи молекула воды предоставляет свою верхнюю занятую молекулярную орбиталь ВЗМО. Проекционная карта МЭСП молекулы воды представлена на рис. 2.

Таким образом, низкая природная флотируемость исследуемых газовых углей, их повышенная гидрофильность обусловлены наличием на угольной поверхности электрофильных участков, являющихся центрами адсорбции нуклеофильных молекул воды.



**Рис. 2.** Проекционная карта МЭСП молекулы воды

Для более глубокого изучения электрофильных центров адсорбции были проведены расчеты квантово-химических параметров функциональных групп поверхности ОМУ (табл. 5) и получены проекционные карты молекулярных электростатических потенциалов (МЭСП) (рис. 3).

**Таблица 5**  
Квантово-химические параметры функциональных групп поверхности ОМУ

Функциональные группы	$\mu$ , D	$\epsilon_m$ , эВ	$\epsilon_{m+1}$ , эВ	max «+»	max «-»
Гидроксильная	1,142	-9,18	-0,29	0,1963	0,2279
Карбоксильная	2,251	-10,13	-0,53	0,4315	0,4036
Карбонильная	2,571	-9,71	-0,42	0,4401	0,4012

Примечание:  $\mu$  – дипольный момент, D;  $\epsilon_m$  – энергия верхней занятой молекулярной орбитали (ВЗМО), эВ;  $\epsilon_{m+1}$  – энергия нижней свободной молекулярной орбитали (НСМО), эВ; max «+» – максимальный положительный заряд; max «-» – максимальный отрицательный заряд.

Электронные свойства активных центров ОМУ, а именно дипольный момент, потенциал ионизации ПИ (численно равен энергии ВЗМО, взятой с обратным знаком), значение сродства к электрону СЭ (численно равно энергии НСМО, взятой с обратным знаком), значения максимальных положительного и отрицательного зарядов, определяют сорбционную способность угольной поверхности [4].



**Рис. 3.** Проекционные карты МЭСП функциональных групп поверхности ОМУ

Проекционные карты молекулярных электростатических потенциалов (см. рис. 3) показывают преобладающее количество положительно заряженных электрофильных центров (серый цвет – участки с электрофильными свойствами, черный цвет – участки с нуклеофильными свойствами). Атомы, на которых сконцентрированы положительные заряды, и будут являться центрами адсорбции молекул воды или конкурирующих с ними нуклеофильных реагентов.

### Заключение

Изучение сорбционной активности угольной поверхности показало преобладание на ней электрофильных центров, возникающих за счет смещения электронной плотности на атомы кислорода. Увеличение числа электрофильных центров труднообогатимых углей обуславливает гидрофильность их поверхности и низкую природную флотуруемость. Гидрофобизация угольной поверхности возможна нуклеофильными реагентами, способными к вытеснению адсорбированных электрофильными участками молекул воды.

### Список литературы

1. Reddick J.F., Von Blottnitz H., Kothuis B. Cleaner production in the South African coal mining and processing industry: a case study investigation // International Journal of Coal Preparation and Utilisation. 2008, vol. 28, pp. 224–236.
2. Медяник Н.Л., Варламова И.А., Гиревая Х.Я. Разработка реагента для флотации углей низкой стадии метаморфизма на основе квантово-химических расчетов Магнитогорск, 2006. 13 с. Деп. в ВИНТИ 25.01.06, №72-B2006.
3. Horsfall D.W., Zitron Z., de Korte J. The treatment of ultrafine coal, especially by froth flotation // Journal of the South African Institute of Mining and Metallurgy. 1986, vol. 86, no. 10, pp. 401–407.
4. Гиревая Х.Я. Повышение эффективности флотации газовых углей на основе квантово-химического обоснования выбора реагентов: дис. ... канд. техн. наук. Магнитогорск, 2006. 167 с.
5. Медяник Н.Л., Гиревая Х.Я., Варламова И.А. Квантово-химический подход к выбору реагента-собираателя для флотации углей низкой стадии метаморфизма // Кокс и химия. 2006. № 1. С. 8–13.
6. Изучение свойств органических молекул квантово-химическими методами / Медяник Н.Л., Калугина Н.Л., Варламова И.А., Гиревая Х.Я., Бодьян Л.А. Магнитогорск, 2013. 14 с. Деп. в ВИНТИ 01.08.2013, №224-B2013.
7. Влияние квантово-химических параметров органических соединений на их сорбционные свойства / Варламова И.А., Гиревая Х.Я., Калугина Н.Л., Медяник Н.Л. Магнитогорск, 2009. 15 с. Деп. в ВИНТИ 26.02.2009, №110-B2009.
8. Продукт химической деструкции полиэтилентерефталата как комплексный реагент для извлечения органической массы угля / Бодьян Л.А., Варламова И.А., Гиревая Х.Я., Калугина Н.Л., Медяник Н.Л. // Современные проблемы науки и образования. 2014. № 2. С. 700.
9. Кубак Д.А., Петухов В.Н., Семенов Д.Г. Исследование влияния группового химического состава комплексных реагентов на эффективность флотации углей // Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова. 2013. № 4 (44). С. 5–10.

## INFORMATION ABOUT THE PAPER IN ENGLISH

### STUDY OF THE SORPTION ACTIVITY OF A COAL SURFACE

**Medyanik Nadezhda Leonidovna** – D.Sc. (Eng.), Professor, Head of the Chemistry Department, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia. E-mail: medyanikmagnitka@mail.ru.

**Girevaya Khanifa Yanshaevna** – Ph.D. (Eng.), Associate Professor, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia. E-mail: hanifa70@list.ru.

**Kalugina Natalia Leonidovna** – Ph.D. (Education), Associate Professor, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia. E-mail: nkalugina@gmail.com.

**Varlamova Irina Alexandrovna** – Ph.D. (Education), Associate Professor, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia. E-mail: Varlamova156@gmail.com.

**Bodyan Lyubov Anatolyevna** – Ph.D. (Education), Associate Professor, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia. E-mail: bodyan\_n@mail.ru.

**Girevoy Timur Andreevich** – student, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia. E-mail: hanifa70@list.ru.

**Abstract.** This paper contains studies of the hard-cleaning coal structure. The presence of such heterofunctional sorption centers as hydroxyl, carbonyl and carboxyl groups was found. The authors found a correlation between the natural floatability of coals and the quantity of oxygen-containing groups, heat of wetting, electrokinetic potential. Studies of the sorption activity of hard-cleaning coals showed that adsorption centers of nucleophilic water molecules were electrophilic areas of the coal surface resulted from a displacement of the electron density to oxygen-containing groups. Quantum chemical calculations confirmed the presence of a large number of electrophilic adsorption centers which caused the hydrophilicity of the coal

surface. It was determined that flotation agents used to extract the coal organic matter had to be agents showing a harder nucleophilic nature than water molecules and having the ability to substitute them in flotation.

**Keywords:** Heterofunctional sorption centers, natural floatability, electrophilic and nucleophilic adsorption centers, coal organic matter, quantum chemical calculations.

### References

1. Reddick J.F., Von Blottnitz H., Kothuis B. Cleaner production in the South African coal mining and processing industry: a case study investigation. International Journal of Coal Preparation and

- Utilisation. 2008, Vol. 28, pp. 224-236.
2. Medyanik N.L., Varlamova I.A., Girevaya Kh.Ya. *Razrabotka reagenta dlya flotatsii ugley nizkoy stadii metamorfizma na osnove kvantovo-khimicheskikh raschetov* [Quantum chemical calculations to design the flotation reagent for coals with a low stage of metamorphism]. Deposited manuscript no. 72-B2006, 25.01.2006.
  3. Horsfall D.W., Zitron Z., de Korte J. The treatment of ultrafine coal, especially by froth flotation. *Journal of the South African Institute of Mining and Metallurgy*. 1986, vol. 86, no. 10, pp. 401-407.
  4. Girevaya Kh.Ya. *Povyshenie effektivnosti flotatsii gazovyh ugley na osnove kvantovo-khimicheskogo obosnovaniya vybora reagentov* [Improving efficiency of the gas coal flotation on the basis of the quantum chemical rationale for a selection of reagents Ph.D. (Eng.) dissertation.]. Magnitogorsk, 2006. 167 p.
  5. Medyanik N.L., Girevaya Kh.Ya., Varlamova I.A. *Kvantovo-khimicheskii podkhod k vyboru reagenta-sobiratelya dlya flotatsii ugley nizkoy stadii metamorfizma* [A quantum chemical approach to a selection of a collecting agent for flotation of coals with a low stage of metamorphism]. *Koks i himiya* [Coke and chemistry]. 2006, no. 1, pp. 8-13.
  6. Medyanik N.L., Kalugina N.L., Varlamova I.A., Girevaya Kh.Ya., Bodyan L.A. *Izuchenie svoystv organicheskikh molekul kvantovo-khimicheskimi metodami* [Study of properties of organic molecules applying quantum chemical methods]. Deposited manuscript no. 224-B2013, 01.08.2013.
  7. Varlamova I.A., Girevaya Kh.Ya., Kalugina N.L., Medyanik N.L. *Vliyaniye kvantovo-khimicheskikh parametrov organicheskikh soedineniy na ikh sorbtionnye svoystva*. [The influence of quantum chemical parameters of organic compounds on their sorption properties]. Deposited manuscript no. 110-B2009, 26.02.2009.
  8. Bodyan L.A., Varlamova I.A., Girevaya Kh.Ya., Kalugina N.L., Medyanik N.L. *Produkt khimicheskoy destrukttsii polietilentereftalata kak kompleksny reagent dlya izvlecheniya organicheskoy massy uglya* [A product of the chemical destruction of polyethylene terephthalate as a complex reagent to extract the coal organic matter]. *Sovremennye problemy nauki i obrazovaniya* [Modern problems of science and education]. 2014, no. 2, p. 700.
  9. Kubak D.A., Petuhov V.N., Semenov D.G. *Issledovaniye vliyaniya gruppovogo khimicheskogo sostava kompleksnykh reagentov na effektivnost flotatsii ugley* [Study of the influence of a group chemical composition of complex reagents on the efficiency of coal flotation]. *Vestnik Magnitogorskogo Gosudarstvennogo Tekhnicheskogo Universiteta im. G.I. Nosova* [Vestnik of Nosov Magnitogorsk State Technical University]. 2013, no. 4 (44), pp. 5-10.

Изучение сорбционной активности угольной поверхности / Медяник Н.Л., Бодьян Л.А., Варламова И.А., Гиревая Х.Я., Калугина Н.Л., Гиревой Т.А. // Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова. 2015. №3. С. 11–16.

Medyanik N.L., Girevaya Kh.Ya., Kalugina N.L., Varlamova I.A., Bodyan Ly.A., Girevoy T.A. Study of the sorption activity of a coal surface. *Vestnik Magnitogorskogo Gosudarstvennogo Tekhnicheskogo Universiteta im. G.I. Nosova* [Vestnik of Nosov Magnitogorsk State Technical University]. 2015, no. 3, pp. 11–16.

УДК 622.765.061

## МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ЖИРНЫЕ КИСЛОТЫ, ИХ МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЛЯ ПРОГНОЗА ФЛОТАЦИИ РУД ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Соложенкин П.М.<sup>1</sup>, Дегодя Е.Ю.<sup>2</sup>, Шавакулева О.П.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт проблем комплексного освоения недр Российской академии наук, Таджикистан

<sup>2</sup> Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова, Магнитогорск, Россия

**Аннотация.** В статье предпринята попытка показать эффективность исследований с использованием компьютерных технологий и химических программ. Исследованы флотационные активности нового класса флотационных реагентов. Молекулярное моделирование модифицированных реагентов было выполнено при использовании параметров компьютера. Флотационные опыты проводились на кальците, барите, целестине, флюорите и кварце. Изучены реагенты при флотации различных флюоритовых руд. Для оптимизации флотации флюоритовых руд были использованы сочетания реагентов. Проведенные эксперименты показали, что применение комбинации реагентов при флотации флюоритовых руд позволит получать флюоритовый концентрат с массовой долей  $\text{CaF}_2$ , равной 96,3%, при извлечении 85,4%  $\text{CaF}_2$ .

**Ключевые слова:** минералы щелочноземельных элементов, собиратели, флотация, заряды атомов, активность собирателя, молекулярное моделирование.

### Введение

Одним из путей регулирования свойств собирателей оксигидрильного типа является введение заместителей в углеводородный фрагмент карбоновой кислоты. При этом изменение свойств флотореагента, связывается с изменением гидрофобных взаимодействий в модифици-

рованном углеводородном радикале [1–5].

Было установлено, что сульфопальмитиновая кислота является более сильным собирателем апатита и гематита, чем незамещенные кислоты, а также обладает более селективным действием [6].

Введение заместителя в  $\alpha$ -положение усиливает кислотные свойства собирателя, что приводит к большей ионизации и соответственно сорбции со-