

- Utilisation. 2008, Vol. 28, pp. 224-236.
- Medyanik N.L., Varlamova I.A., Girevaya Kh.Ya. *Razrabotka reagenta dlya flotatsii uglei 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.
 - 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.
 - Girevaya Kh.Ya. *Povyshenie effektivnosti flotatsii gazovykh uglei 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.
 - Medyanik N.L., Girevaya Kh.Ya., Varlamova I.A. *Kvantovo-khimicheskii podkhod k vyboru reagenta-sobiratelya dlya flotatsii uglei 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.
 - 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.
 - 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.
 - Bodyan L.A., Varlamova I.A., Girevaya Kh.Ya., Kalugina N.L., Medyanik N.L. *Produkt khimicheskoy destruktzii polietilentereftalata kak kompleksnyy 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]. *Sovremennyye problemy nauki i obrazovaniya* [Modern problems of science and education]. 2014, no. 2, p. 700.
 - Kubak D.A., Petuhov V.N., Semenov D.G. *Issledovaniye vliyaniya gruppovogo khimicheskogo sostava kompleksnykh reagentov na effektivnost flotatsii uglei* [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 L.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.¹, Дегодя Е.Ю.², Шавакужева О.П.²

¹ Институт проблем комплексного освоения недр Российской академии наук, Таджикистан

² 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 CaF_2 , равной 96,3%, при извлечении 85,4% 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-

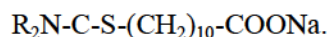
рованном углеводородном радикале [1–5].

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 α -положение усиливает кислотные свойства собирателя, что приводит к большей ионизации и соответственно сорбции со-

бирателя минералами, а также расширяет оптимум флотации кальцита и касситерита, а вольфрама сдвигает в более кислую область. По этой причине α -бромпальмитат обладает большим собирательным действием, чем пальмитат [7].

В качестве собирателей несulfидных минералов предложен ряд ω -(N, N-диалкилдитиокарбамато) ундеканатов натрия [6]. Было проведено физико-химическое изучение ω -(N, N-диэтилдитиокарбамато) ундеканата натрия (ДЭДТКУ), ω -(N, N-дибутилдитиокарбамато) ундеканата натрия (ДБДТКУ). Изучаемые реагенты имеют общую формулу



Для глубокого понимания вопросов взаимосвязи пространственного строения молекул не только с физическими и химическими свойствами веществ, но и с проявляемой ими химической активностью весьма продуктивной формой процесса исследования в последнее время является использование компьютерных технологий и химических программ [7–13].

В работе использовали молекулярное моделирование (ММ) для определения оптимальной молекулярной структуры и расчета значений атомных зарядов, энергии ВЗМО (английское HOMO) и НСМО (английское LUMO) кластеров и собирателей флотации в вакууме. Установленная теоретическая методология и полученные результаты исследований позволяют понять на атомном уровне взаимодействие и механизм образования связи между собирателем и атомами кластера минерала.

Методология экспериментов

Современные способы построения объемных моделей минералов и реагентов реализованы в программе ChemBio 3D специализированного комплекса ChemOffice Combridge Soft, а также модуля MORAC 2012 в вакууме. Данные получены после молекулярной минимизации ММ 2 с использованием расчетов по РМ 7.

В настоящее время созданы (сконструированы) модели различных минералов элементов платиновой группы (ЭПГ), подгруппы мышьяка менделеевской таблицы, а также сульфгидрильные собиратели флотации, названные нами кластерами минералов (реагентов). Так, их строение соответствует химической формуле, а расстояние между отдельными атомами соответствует известным табличным данным. Была разработана методика создания флотационных комплексов, включающая кластер минерала и связанного с атомом (атомами) минерала щелочноземельных элементов различных собирателей (композигов). Эти реакции впервые позволили создать комплекс, практически подобный соединению при закреплении собирателя на поверхности минерала в процессе реальной флотации. Были рассчитаны молекулярные орбитали для исследуемых соединений HOMO (highest occupied molecular orbital), LUMO (lowest unoccupied molecular orbital), в том числе и SOMO (second occupied molecular orbital).

Кластеры минералов щелочноземельных элементов

На рис. 1 представлены кластеры минералов и их 3D модели.

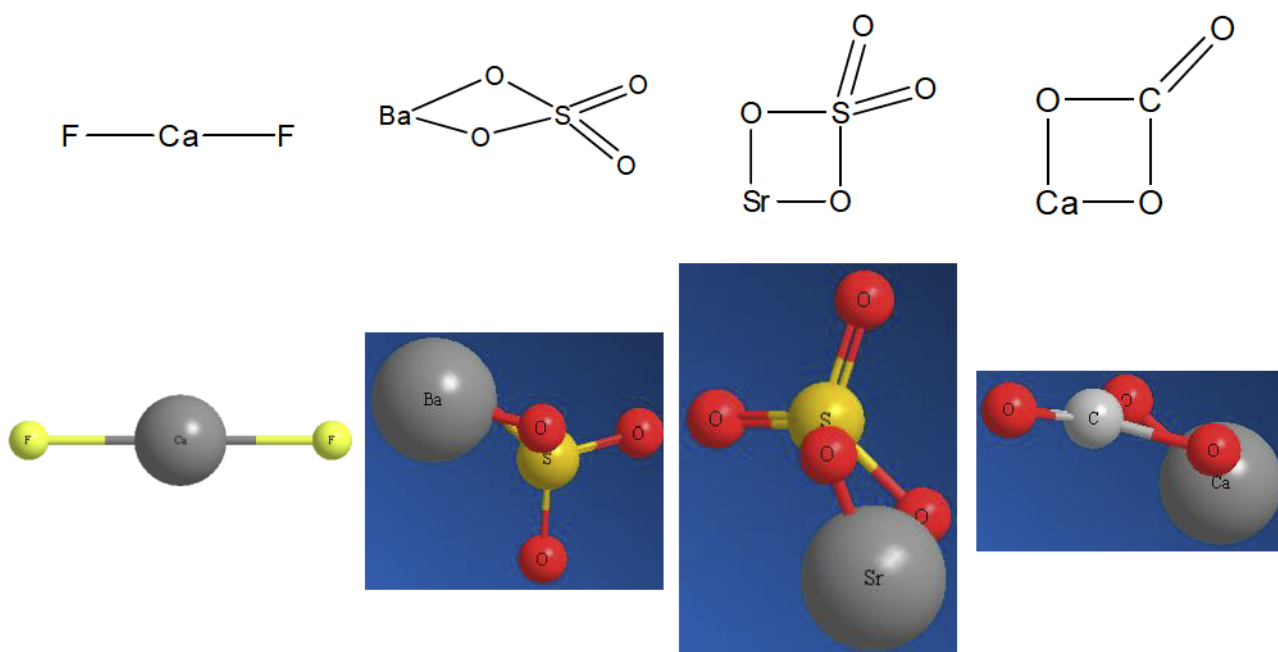


Рис. 1. Кластеры минералов CaF_2 , $CaCO_3$, $SrSO_4$, $BaSO_4$ и их 3D модели

В табл. 1 представлены компьютерные параметры исследованных кластеров минералов.

Таблица 1
Компьютерные параметры кластеров минералов

Параметр	CaF ₂	CaCO ₃	SrSO ₄	BaSO ₄
Теплота образования, кДж/моль	-705,73126	-630,66268	-1015,91510	-732,80300
Общая энергия, эВ	-955,28184	-1031,11866	-1378,21197	-1375,83345
Электронная энергия, эВ	-1312,85488	-2544,49855	-3894,04973	-3863,18595
HOMO	-13,166 0,657	-9,420	-9,490	-8,689
LUMO, эВ		-1,965	-0,288	-0,142
	Заряды, е	Заряды, е	Заряды, е	Заряды, е
	Ca 1,327146 F -0,663573 F -0,663573 Диполь 0	C 0,866645 O -0,826726 Ca 1,332443 O -0,826342 O -0,546020 Диполь 13,904	Sr 1,627575 O -1,181113 O -1,181021 S 2,681875 O -0,974953 O -0,972364 Диполь 15,825	Ba 1,653514 O -1,173378 O -1,172696 S 2,681582 O -0,969523 O -1,019500 Диполь 21,654

Теплота образования изменяется в следующем порядке: CaCO₃>CaF₂> BaSO₄>SrSO₄, в таком же порядке изменяется и дипольный момент, то есть увеличивается вандерваальсово взаимодействие. Заряды на атоме кальция меньше зарядов на атоме бария и стронция.

В случае SrSO₄ и BaSO₄ должно увеличиваться электростатическое взаимодействие минералов с собирателем.

Установлено, что при взаимодействии минералов с водой уменьшается теплота образования для CaF₂ до 303,6519 кДж/моль (-1009,3831 - (-705,73126)), для CaCO₃ - 335,43862 кДж/моль (966,10142 - (-630,66268)), для SrSO₄ - 312,1891 кДж/моль (-1328,10428 - (-1015,91510)), уменьшается заряд на атоме Ca, а также на атоме фтора флюорита. Диполь для флюорита в этом случае составил 4,497, для кальцита - 17,628 и для целестина -19,112 дебая. LUMO орбиталь имеет положительное значение для CaF₂ и SrSO₄.

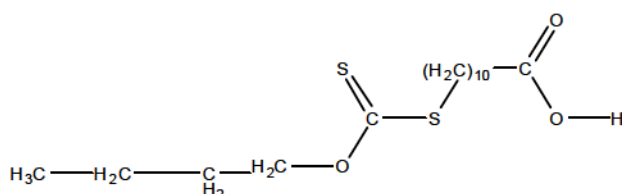
Кластеры флотационных реагентов

На рис. 2 показаны молекулярные модели (бутилксантато)ундекановой (11-((butoxycarbonylthio)undecanoic acid), (диэтилдитиокарбамато)ундекановой (11-((diethylcarbamothioyl)thio)undecanoic acid) и (дибутилдитиокарбамато)ундекановой (11-((dibutylcarbamothioyl)thio)undecanoic acid) кислот.

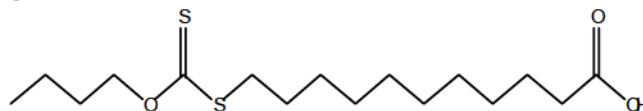
В табл. 2 представлены компьютерные параметры исследованных флотационных реагентов.

Установлено, что ¼ вандерваальсово взаимодействие увеличивается с удлинением углеводородной цепи. Все исследуемые реагенты имеют ¼ вандерваальсово взаимодействие, что является больше, чем у олеиновой кислоты. Это может положительно сказаться на извлечении минералов при использовании данных реагентов.

а



б



в

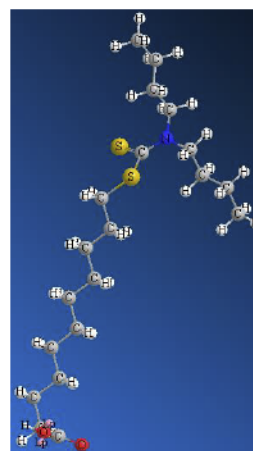
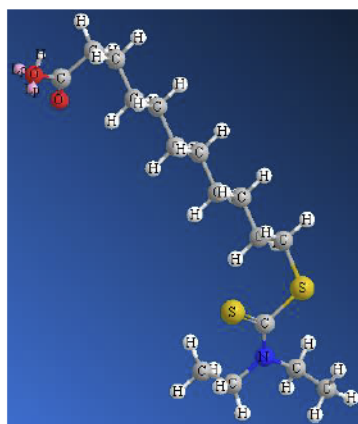


Рис. 2. Исходные схемы и молекулярные модели: а - (ксантато)ундекановой; б - (диэтилдитиокарбамато)ундекановой; в - (дибутилдитиокарбамато)ундекановой кислот

Таблица 2

Компьютерные параметры флотационных реагентов

Параметры	Реагенты				
	(C ₂ H ₅) ₂ NCS ₂ ундекановая кислота Итерация 383	(C ₄ H ₉) ₂ NCS ₂ ундекановая кислота Итерация 460	Олеиновая кислота	(C ₄ H ₉ O) ₂ PS ₂ H ундекановая кислота	(Диизобутил- дитиофосфиново) ундекановая кислота
Растяжение валентных связей	1,1604	1,3306	1,0032	1,5661	1,4608
Изгиб валентных углов	4,9058	5,4514	2,4598	7,2770	6,9302
Поправки изгиб-растяжение	0,4848	0,5408	0,3164	0,5763	0,5777
Внутреннее вращение	1,9897	3,3070	-1,6081	3,3270	3,0302
Не ¼ вандерваальсово взаимодействие	-3,7662	-3,9787	-3,4402	-6,6459	-8,0166
¼ вандерваальсово взаимодействие	11,6094	14,7534	10,7999	16,0514	11,1872
Диполь/дипольное взаимодействие	1,9300	1,8744	1,6872	3,6340	5,1632
Общая стерическая энергия, ккал/мол	18,3138	23,2788	11,2182	25,7859	20,3327

Исследование комплексов между кластерами минералов и кластерами модифицированных собирателей

Изучено прикрепление модифицированных жирных кислот к кластерам минералов CaF₂, CaCO₃, SrSO₄, BaSO₄. На рис. 3 показано только прикрепление модифицированных жирных кислот к кластеру минерала CaF₂.

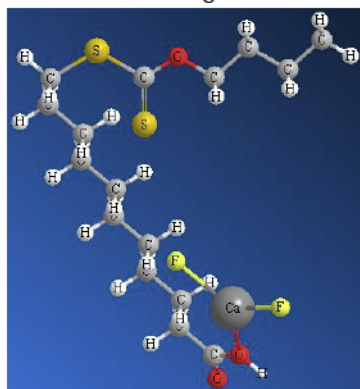
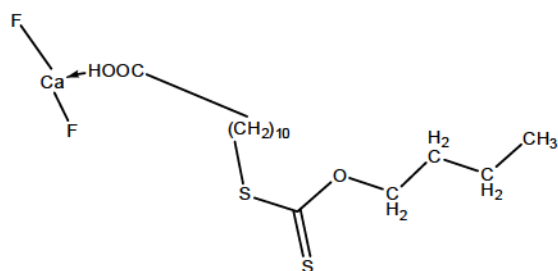


Рис. 3. Схема прикрепления модифицированной жирной кислоты к кластеру минерала CaF₂ и ее 3D модель

Проанализированы и обобщены физико-химические данные о созданных комплексах. Установлено, что НОМО и LUMO несут отрицательный заряд. По известным уравнениям были рассчитаны абсолютная жесткость и электроот-

рицательность.

Исследованы комплексы C₄H₉OCS₂ - (CH₂)₁₀COOH с катионом Ca, Sr, Ba по хелатной и бидентатной схемам связи. Расстояние между атомами O(11)-Ca(12) составляет 1,595 Å, а между C(1)-O(10) – 1,208 Å, что подтверждает тесное взаимодействие между собирателем и атомом кальция.

Необходимо отметить, что в бидентатном C₄H₉OCS₂-(CH₂)₁₀COOCa комплексе наблюдаются α SOMO LUMO и β BETA SOMO LUMO орбитали, которые будут способствовать образованию обратной донорной ковалентной связи. Наблюдается классический перенос заряда с донора собирателя на акцептор минерала и при этом уменьшается заряд на атоме кластера.

Расчет ПОАС

Для установления флотационной способности разработан прогноз оценки активности собирателя - взаимодействия собирателя с кластером минерала - в виде разницы общей энергии комплекса и суммы энергии кластера и энергии собирателя, определяемый по выражению:

$$\Delta E = E_{\text{комплекса}} - (E_{\text{кластера}} + E_{\text{собирателя}}), \text{ эВ (ПОАС)}$$

Чем меньше величина ПОАС, тем более предпочтительно взаимодействие собирателя с кластером минерала.

По данным ПОАС можно отметить, что C₄H₉OCS₂-(CH₂)₁₀ (ПОАС=8134,518 эВ) более активен при флотации минералов щелочноземельных элементов, чем олеиновая кислота (ПОАС=4866,881 эВ).

Изменение ПОАС по общей энергии можно расположить в следующем ряду CaCO₃>BaSO₄>

$\text{SrSO}_4 > \text{CaF}_2$, то есть этот ряд соответствует порядку флотации минералов. При учете электронной энергии ПОАС изменяется в следующем порядке: $\text{SrSO}_4 > \text{BaSO}_4 > \text{CaCO}_3 > \text{CaF}_2$.

Изучено изменение ПОАС от композитов модифицированных жирных кислот. ПОАС значительно снижается в присутствии бинарной смеси собирателей (дибутилдитиокарбамато) ундекановой кислоты.

Электронная энергия системы $\text{C}_4\text{H}_9\text{OCS}_2(\text{CH}_2)_{10} + \text{олеиновая кислота} + \text{CaF}_2$ уменьшилась на 14048,864 эВ (-23007,083–(-3353,58 -5604,639) по сравнению с электронной энергией системы с индивидуальными собирателями, то есть композит из бинарных собирателей более предпочтителен для флотации руд.

Флотация минералов и руд щелочноземельных элементов

Для оптимизации флотации флюоритовой руды были также испытаны сочетания реагента ДЭДТКУ с олеиновой кислотой и ДБДТКУ в соотношении 1:1. Применение сочетания ДЭДТКУ с олеиновой кислотой позволило повысить массовую долю и извлечение флюорита по сравнению с технологическими показателями, полученными при отдельном их использовании [14–18]. Качество концентрата в этом случае значительно повышается.

Использование бинарного сочетания олеиновой кислоты (100 г/т) и ω -(N, N - диэтилдитиокарбамато) ундеканата натрия (100 г/т) в соотношении 1:1 при флотации флюоритовой руды с массовой долей CaF_2 , равной 23,4%, позволяет получить флюоритовый концентрат с массовой долей флюорита, равной 96,3%, при извлечении 85,35% [19].

Выводы

1. Проведено молекулярное моделирование различных кластеров минералов щелочноземельных элементов и модифицированных жирных кислот. Установлены основные компьютерные параметры.

2. Разработан индекс ПОАС для анализа активности связывания модифицированных жирных кислот с атомом кластера минералов щелочноземельных элементов – Ca, Sr и Ba.

3. Исследован перенос заряда. При бидентантном связывании наблюдается классический перенос заряда с донора собирателя на акцептор минерала и при этом уменьшается заряд на атоме кальция кластера. Этот факт является первым экспериментальным подтверждением передачи зарядов атомов донора собирателя на акцептор-

кластер минерала.

4. Предложен композит реагентов для эффективной флотации флюорита. Созданы виртуальные реагенты типа $(\text{C}_4\text{H}_9\text{O})_2\text{PS}_2(\text{CH}_2)_{10}\text{COOH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2)_2\text{PS}_2(\text{CH}_2)_{10}\text{COOH}$ ($\text{isoC}_4\text{H}_9)_2\text{PS}_2(\text{CH}_2)_{10}\text{COOH}$ и предсказаны их технологические свойства в процессе флотации.

Список литературы

1. Физико-химические основы теории флотации / Богданов О.С., Гольман А.М., Каковский И.А. и др. // Оксидрильные реагенты. М.: Наука, 1983. 264 с.
2. Рябой В. И. О поверхностных реакциях флотореагентов с минералами на основе их донорно-акцепторного взаимодействия // Обогащение руд. 2008. №6. С. 24–30.
3. Рябой В.И. Создание и применение более эффективных реагентов на основе физико-химических представлении // Обогащение руд. 2002. №1. С. 19–23.
4. Хан Г.А., Габриелова Л.И., Власова Н.С. Флотационные реагенты и применение. М.: Недра, 1986. 271 с.
5. Сравнение собирательного действия пальмитата и бромпальмитата при флотации несulfидных минералов / Янис Н.А., Рябой В.И., Артамонова Л.А., Кривелева Э.Д., Петрова Л. Н. // Обогащение руд цветных металлов. Ч. 1. Исследования по теории и технологии обогащения руд цветных металлов. Вып. 141. Ленинград: Механообр, 1974. С. 26–39.
6. Solozhenkin Peter, Solozhenkin Oleg. Computer chemistry flotation of reagents: updating sulphhydrylic of collectors carboxyl by acids and tetraphenylantimon (V). Proceeding 14 th Conference on Environment and Mineral Processing. 2010. Czech Republic, part II, pp. 51–56.
7. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная химия. М.: Изд-во «СО-ЛОН-Пресс», 2005. 536 с.
8. Соложенкин П.М, Соложенкин О.И. Компьютерный дизайн сульфидрильных реагентов и их производных // Цветные металлы. 2010. № 7. С. 11–14.
9. Соложенкин П.М, Соложенкин О.И. Компьютерное моделирование структуры сульфидрильных собирателей и их производных // Обогащение руд. 2010. №4. С. 31–34.
10. Solozhenkin Peter M, Solozhenkin Oleg I. and Sanda Krausz. Prediction of Efficiency of Flotation Collectors Based on Quantum Chemical Computations. Books of Abstracts. XXVI International Mineral Processing Congress-IMPC-2012. New Delhi, India, 2012, vol. 2, 638 p.
11. Solozhenkin Peter M. Creative and forecasting of properties effective, less toxic reagents of the flotation reagents on a basis quantum - mechanical representations for the purpose of complex extraction colour and precious metals. Scientific and technical aspects of preservation of the environment. The survey information. VINITI, Release №1, Moscow, 2013, 120 p.
12. Solozhenkin P.M. Quantum-chemical and molecular-dynamic aspects of forecasting of properties of collectors of metals from productive solutions of nonferrous metals, Works of the international scientific symposium «Week of the miner 2012», The collection of articles, Separate release of the mountain-information analytical bulletin (scientific and technical magazine) M: Publishing house «Mountain book», 2012. NOR1. P. 431–455.
13. Соложенкин П.М., Соложенкин О.И. Компьютерное моделирование жирных кислот // Изв. вузов. Цветная металлургия. 2012. №1. С. 17–21.
14. Дегодя Е.Ю. Совершенствование технологии обогащения труднообогатимых флюоритовых руд Суранского месторождения // Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова. Магнитогорск, 2004. №3. С. 89–92.
15. Чижевский В.Б., Дегодя Е.Ю. Разработка технологии обогащения труднообогатимых флюоритовых руд Суранского ме-

- сторожения // IV Конгресс обогатителей стран СНГ: сб. тез. докл. М., 2003. С. 133–135.
16. Дегодя Е.Ю., Шавакулева О.П. Исследование закономерностей флотации флюорита различными собирателями // Научные основы и практика переработки руд и техногенного сырья: материалы Междунар. науч.-практ. конф. Екатеринбург, 2006. С. 114–117.
 17. Дегодя Е.Ю., Бахарева О.Ю., Загузина А.А. Изучение адсорбционной и флотационной активности различных модифициций флюорита // Молодежь. Наука. Будущее: сб. науч. трудов. Магнитогорск, 2006. Вып. 6. С. 315–317.
 18. Чижевский В.Б., Дегодя Е.Ю. Повышение селективности перемешивающих операций методом пропарки карбонатно-флюоритовых руд Суранского месторождения // Горный информационно-аналитический бюллетень. М.: МГГУ, 2006. №2. С. 390–392.
 19. Соложенкин П. М. Молекулярный дизайн флотореагентов, эффективных при флотации несulfидных руд // Цветные металлы. 2008. №12. С. 28–33.

INFORMATION ABOUT THE PAPER IN ENGLISH

MODIFIED FATTY ACIDS, THEIR MOLECULAR MODELLING FOR THE FORECAST OF FLOTATION OF ORES OF ALKALINE-EARTH ELEMENTS

Solozhenkin Petr Mikhailovich – D.Sc. (Eng.), Professor, Institute of Comprehensive Exploitation of Mineral Resources of the Russian Academy of Sciences (IPKON RAS), Chief Researcher of IPKON RAS, Honored Scientist of the Russian Federation, Academician of the Academy of Sciences of the Republic of Tajikistan. E-mail: solozhenkin@mail.ru.

Degodia Elena Yurievna – Ph.D. (Eng.), Associate Professor, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia. Phone: +7 (3519) 29-85-55. E-mail: magtu_opi@mail.ru.

Shavakuleva Olga Petrovna – Ph.D. (Eng.), Associate Professor, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia. Phone: +7 (3519) 29-85-55. E-mail: magtu_opi@mail.ru.

Abstract. This article intends to show efficiency of research using computer technologies and chemical programs. The flotation activity of flotation reagents of a new class was studied. Molecular modelling of the modified reagents was performed applying computer parameters. Flotation tests were carried out on calcite, barite, celestine, fluorite and quartz. The reagents under study were tested at flotation of various fluorite ores. To optimize the flotation of the fluorite ores, combinations of reagents were used. The tests showed that a combination of reagents at such flotation of fluorite ores would contribute to production of a fluorite concentrate with the CaF_2 mass fraction of 96.3 %, at extraction - CaF_2 of 85.4 %.

Keywords: Minerals of alkaline-earth elements, collecting agents, flotation, atomic charges, activity of the collecting agent, molecular modelling.

References

1. Physico-chemical fundamentals of the theory of flotation. Bogdanov O.S., Golman A. M., Kakovsky I. A. and others. *Oksgidirill'nye reagenty* [Oxyhydride reagents]. Moscow: Science, 1983. 264 p.
2. Ryaboi V.I. On the surface reactions of flotation reagents with minerals on the basis of their donor-acceptor interaction. *Obogashhenie rud* [Ore dressing]. 2008, no. 6, pp. 24–30.
3. Ryaboi V.I. Creation and use of more efficient agents based on the physico-chemical presentation. *Obogashhenie rud* [Ore dressing]. 2002, no. 1, pp. 19–23.
4. Khan G. A., Gabrielova L. I., Vlasova N.S. Flotation reagents and application. Moscow: Mineral resources, 1986, 271 p.
5. Yanis N. A., Ryaboi V.I., Artamonova L. A., Kriveleva E. D., Petrova L. N. Comparison of a collective action of palmitate and bromopalmitate in flotation of non-sulphide minerals. *Obogashhenie rud tsvetnykh metallov. Chast' 1. Issledovaniya po teorii i tekhnologii obogashheniya rud tsvetnykh metallov* [Non-ferrous metal ore dressing. Part 1. Research on the theory and technology of non-ferrous metal ore dressing]. Issue 141. Leningrad: Mekhanobr, 1974, pp. 26–39.
6. Solozhenkin Peter, Solozhenkin Oleg. Computer chemistry flotation of reagents: updating sulphydric of collectors carboxyl by acids and tetraphenylantimon (V). Proceedings of the 14th Conference on Environment and Mineral Processing. 2010. Czech Republic, part II, pp. 51–56.
7. Soloviev M. E., Soloviev M. M. *Komp'yuternaya khimiya* [Computational chemistry]. SOLON-Press Publishing House, 2005, 536 p.
8. Solozhenkin P. M., Solozhenkin O. I. Computer-aided design of sulfhydryl reagents and their derivatives. *Tsvetnye metally* [Non-ferrous metals]. 2010, no. 7, pp. 11–14.
9. Solozhenkin P. M., Solozhenkin O. I. Computer modeling of the structure of sulfhydryl collecting agents and their derivatives. *Obogashhenie rud* [Ore dressing]. 2010, no. 4, pp. 31–34.
10. Solozhenkin Peter M., Solozhenkin Oleg I. and Sanda Krausz. Prediction of Efficiency of Flotation Collectors Based on Quantum Chemical Computations. Books of Abstracts. XXVI International Mineral Processing Congress-IMPC -2012. New Delhi, India, 2012, no. 2, p.638.
11. Solozhenkin Peter M. Creative and forecasting of properties effective, less toxic reagents of the flotation reagents on a basis quantum - mechanical representations for the purpose of complex extraction non-ferrous and precious metals. Scientific and technical aspects of environment protection. Survey information. VINITI, Release 1, Moscow, 2013, 120 p.
12. Solozhenkin P.M. Quantum-chemical and molecular-dynamic aspects of forecasting of properties of collectors of metals from productive solutions of nonferrous metals. Proceedings of the international scientific symposium "Week of the miner 2012". Collection of articles. A special issue of the Mining Informational and Analytical Bulletin (scientific and technical journal). Moscow: Mountain Book Publishing House, 2012, NOR1, pp. 431–455.
13. Solozhenkin P. M., Solozhenkin O.I. Computer modeling of fatty acids. *Izvestiya vuzov. Tsvetnaya metallurgiya* [News of higher educational institutions. Non-ferrous metallurgy]. 2012, no. 1, pp. 17–21.
14. Degodia E. Yu. Improving the technology of processing of rebellious fluorite ores of the Suranskoe field. *Vestnik Magnitogorskogo Gosudarstvennogo Tekhnicheskogo Universiteta im. G.I. Nosova* [Vestnik of Nosov Magnitogorsk State Technical University]. 2004, no. 3, pp. 89–92.
15. Chizhevsky V. B., Degodia E. Yu. Development of the technology of processing of rebellious fluorite ores of the Suranskoe field. *IV Kongress obogatitelej stran SNG: sb. tez. dokl.* [The 4th Congress of Dressers from the CIS countries: collection of abstracts of papers]. Moscow, 2003, pp. 133–135.
16. Degodia E. Yu., Shavakuleva O. P. Study of regularities of fluorite flotation by various collecting agents. *Nauchnye osnovy i praktika pererabotki rud i tekhnogennogo syr'ya: materialy Mezhdunarodnoj nauchno-prakticheskoy konferentsii* [Scientific basis and practice of processing of ores and industrial raw materials: proceed-

- ings of the International Scientific and Practical Conference]. Ekaterinburg, 2006, pp. 114-117.
17. Degodia E. Yu., Bakhareva O. Yu., Zaguzina A. A. The study of the adsorption and flotation activity of various modifications of fluorite. *Molodezh'. Nauka. Budushhee: sbornik nauchnykh trudov* [Youth. Science. Future: Collection of scientific papers]. Magnitogorsk, 2006, no. 6, pp. 315-317.
 18. Chizhevsky V. B., Degodia E. Yu. The increase in the selectivity of cleaning operations by steaming carbonate-fluorite ores of the Suranskoe field. *Gornyj informatsionno-analiticheskiy byulleten'* [Mining Informational and Analytical Bulletin]. Moscow: Moscow State Mining University, 2006, no. 2, pp. 390-392.
 19. Solozhenkin P. M. Molecular design of flotation reagents, which are efficient in flotation of non-sulphide ores. *Tsvetnye metally* [Non-ferrous metals]. 2008, no. 12, pp. 28-33.

Соложенкин П.М., Дегодя Е.Ю., Шавакулева О.П. Модифицированные жирные кислоты, их молекулярное моделирование для прогноза флотации руд щелочноземельных элементов // Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова. 2015. №3. С. 16–22.

Solozhenkin P.M., Degodia E.Yu., Shavakuleva O.P. Modified fatty acids, their molecular modelling for the forecast of flotation of ores of alkaline-earth elements. *Vestnik Magnitogorskogo Gosudarstvennogo Tekhnicheskogo Universiteta im. G.I. Nosova* [Vestnik of Nosov Magnitogorsk State Technical University]. 2015, no. 3, pp. 16–22.

УДК 669.337

ИЗУЧЕНИЕ ЗАВИСИМОСТИ САМОПРОИЗВОЛЬНОГО ДОСТИЖЕНИЯ МАКСИМАЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ ХЛОРИРУЮЩЕГО ОБЖИГА ЧЕРНОВОГО МЕДНОСУЛЬФИДНОГО КОНЦЕНТРАТА

Каримова Л.М., Кайралапов Е.Т.

ТОО «Инновация», Караганда, Казахстан

Аннотация. Проведены многофакторные эксперименты по окислительно-хлорирующему обжигу гранулированных черновых медных сульфидных концентратов с целью выявления влияния температуры воздуха и скорости фильтрации воздуха через навеску, размера гранул, содержания серы и влажности гранул на максимальную температуру обжига. Получены математические модели, которые использованы для определения оптимальных областей проведения обжига и расчета кажущейся энергии активации методом Киссенгера.

Ключевые слова: гранулы, окислительно-хлорирующий обжиг, шахтная печь, многофакторная модель, графическая зависимость, диффузионный режим.

Введение

В работах [1–3] практическое осуществление низкотемпературного окислительно-хлорирующего обжига рассмотрено на сульфидных медных концентратах с добавлением NaCl и KCl в муфельных печах или во вращающих трубчатых печах на дисперсной шихте.

Известно, что технология обжига медных сульфидных концентратов в смеси с хлоридом натрия (галит) идет в присутствии кислорода воздуха с выделением тепла и частичным переходом серы из сульфида железа (пирита) в газовую фазу в виде сернистого ангидрида [4]. Поэтому для ее проведения требуется обеспечить контакт частиц концентрата с галитом и доступ кислорода при непрерывном движении смеси.

Новые возможности для работы всех современных обжиговых печей предоставляет окатывание шихты с получением гранулированного материала, в котором частицы шихты находятся в

наилучшем контакте в составе каждой гранулы. Однако размер гранул, выходящих из промышленных грануляторов, отличается широкой фракцией от 2–3 до 18–20 мм. В трубчатых печах такие гранулы частично разрушаются при пересыпании, как в мельницах, самоизмельчение и пылеунос остается на том же уровне. В печах КС тонкие фракции гранул выносятся с газовым потоком, а крупные оседают на подине газораспределительной решетки, приводя к необходимости ее чистки. Кроме того, гранулы среднего класса растрескиваются с образованием до 30–40% мелких осколков и они выносятся из печи с отходящими газами. Поэтому наилучшими обжиговыми аппаратами для гранулированных материалов являются шахтные печи. В них гранулированный материал находится в состоянии плотного слоя, через который подаваемый газ (воздух) фильтруется и обеспечивает наибольшую скорость химических реакций и наиболее полный теплообмен материала с газом. Слой опускается в шахте только под действием силы тяжести за счет