

40. Solozhenkin P.M. Molecular modeling of dithiocarbamates and their interaction with matrices of copper minerals and pyrites. *Obogashchenie rud* [Ore Concentration]. 2014, no. 4 (352), pp. 38-44.
41. Chekanova L.G., Yelchishcheva Yu.B., Pavlov P.T., Voronkova O.A., Botalova E.S., Mokrushin I.G. Physical-chemical and complex-forming properties of n-(2-ethylhexanoyl)-N'-sulfonylhydrazins. *Zhurnal obshchei khimii* [General Chemistry Journal]. 2015, vol. 85, no. 6, pp. 923-928.
42. Chekanova L.G., Manylova K.O., Pavlov P.T., Yelchishcheva Yu.B., Kandakova A.S. Physical-chemical and complex-forming properties of ethyl-2-aryl(alkyl) sulfonylamino-4,5,6,7-tetrahydrobenzothiophene-3-carboxylates. *Zhurnal obshchei khimii* [General Chemistry Journal]. 2014, vol. 84, no. 6, pp. 1025-1029.
43. Filatova E.G. Overview of technologies to treat effluents containing heavy metal ions based on physical-chemical processes. *Izvestiya vuzov. Prikladnaya khimiya i biotekhnologiya* [Bulletin of Higher Educational Institutions. Applied Chemistry and Biotechnology]. 2015, no. 2 (13), pp. 97-109.
44. Hans-Dieter Höltje, Wolfgang Sippl, Didier Rognan, and Gerd Folkers. *Molekulyarnoe modelirovanie: teoriya i praktika*. [Molecular Modeling: Basic Principles and Applications]. M.: Binom. Laboratoriya znaniy, 2013, 319 p.
45. Tussupbayev N.K., Muzdybaeva Sh.A., Musabekov K.B., Aidarova S.B. Efficiency of natural sorbents used to remove heavy metal ions from mine drainage waters. *Vestnik Kazakhskogo natsional'nogo universiteta. Seriya khimicheskaya* [Vestnik of Kazan National University. Chemistry series]. 2003, no. 1, pp. 94-100.
46. Yusupova A.I. *Ochistka stochnykh vod, soderzhashchikh iony tyazhiolykh metallov, sorbentami i ekstraktami iz tanninsoderzhashchikh othodov* [Treatment of effluents containing heavy metal ions with sorbents and extracts of tannin wastes]. Doctoral thesis. Kazan, 2015, 165 p.

Удаление тяжелых металлов из растворов методом ионной флотации / Медяник Н.Л., Тусупбаев Н.К., Варламова И.А., Гирева Х.Я., Калугина Н.Л. // Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова. 2016. Т. 14. №1. С. 18–26. doi:10.18503/1995-2732-2016-14-1-18-26

Medyanik N.L., Tussupbayev N.K., Varlamova I.A., Girevaya Kh.Ya., Kalugina N.L. Removing of heavy metals from solutions by the ion flotation method. *Vestnik Magnitogorskogo Gosudarstvennogo Tekhnicheskogo Universiteta im. G.I. Nosova* [Vestnik of Nosov Magnitogorsk State Technical University]. 2016, vol. 14, no. 1, pp. 18–26. doi:10.18503/1995-2732-2016-14-1-18-26

УДК 622.765:622.34

DOI:10.18503/1995-2732-2016-14-1-26-33

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СУЛЬФИДРИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ С ГИДРОКСИЛЬНЫМИ РАДИКАЛАМИ И ПРОГНОЗ ИХ В КАЧЕСТВЕ ФЛОТОРЕАГЕНТОВ

Соложенкин П.М.<sup>1</sup>, Кубак Д.А.<sup>2</sup>, Петухов В.Н.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт проблем комплексного освоения недр Российской академии наук (ИПКОН РАН), Москва, Россия

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

**Аннотация.** В работе показана эффективность компьютерной технологии и химических программ для изучения кластеров реагентов, которые содержат две группы: гидрофильную группу, взаимодействующую с водой, и функциональную группу, способную избирательно закрепляться на поверхности депрессируемых минералов. Определены компьютерные параметры минералов, реагентов. Разработана методика прикрепления различных сульфидрильных собирателей к отдельным атомам меди и молибдена кластеров минералов (процесс докинга) и вычислена величина ПОАСа. Созданы модели собирателей с гидроксильными радикалами и с присоединенной водой. Впервые вычислена величина энергии водородной связи отдельных гетероатомов молекулы собирателя с водой. Детально изучены системы кластеров минералов меди и кластеров медных минералов с сульфидрильными собирателями. Для медных минералов обнаружена вторичная свободная молекулярная орбиталь, которая будет способствовать переносу электронной плотности с минерала на атомы собирателя. Установлено, что энергии водородной связи между тионной серой и водородом воды колеблется от  $-1,92$  до  $-8,42$  Дж/моль. Энергии водородной связи между тиольной серой и водородом воды составляет  $-9,97$  Дж/моль. Наибольшая величина энергии водородной связи характерна для водорода гидроксильной группы собирателя и кислорода воды. Эта величина характеризуется величинами от  $-5,32$  до  $-26,90$  Дж/моль. Наиболее гидрофобной является 3,4-дигидроксibenзодитионовая кислота. Диэтанолдителиокарбаминавая кислота (ДЭДТН) обладает высокой депрессирующей способностью, так как величина энергии водородной связи с водой максимальна и составляет  $-26,9$  Дж/моль. Реагент ИМ-ДА обладает низкой депрессией минералов, так как у него водородная связь порядка  $-13,0$  Дж/моль. Изучены межмолекулярные комплексы с водородной связью, образующиеся между молекулами тионокарбаматов и водой. Наибольшей гидрофилизующей способностью обладает О-бутил-бензоилтионокарбамат (ББТК).

© Соложенкин П.М., Кубак Д.А., Петухов В.Н., 2016

Таким образом, компьютерное моделирование исследованных реагентов позволило заранее оценить их технологические свойства при флотации медных минералов.

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование, собиратели с гидроксильными радикалами, тионокарбаматы, программа MORAC 2012, водородная связь, органические депрессоры.

## Введение

Молекулярное моделирование – бурно развивающаяся область современной компьютерной химии, играющая важную роль при конструировании органических веществ. Для визуализации и наглядной демонстрации активных центров молекул флотационных реагентов, при дизайне процессов обогащения руд и углей, в частности флотации, авторы широко использовали квантово-химические характеристики реагентов и компьютерное моделирование [1–7].

Перспективным в моделировании флотационных реагентов представляется подход, основанный на изменении строения известной функциональной группировки путем введения в нее различных атомов и заместителей, что, несомненно, расширяет возможности поиска новых реагентов [8].

В настоящей статье исследуется взаимодействие сульфгидрильных реагентов с гидроксильными радикалами с кластерами медных минералов, которые способны образовывать прочные соединения с данными реагентами, а также с молекулами воды, с образованием водородной связи.

### Исследование взаимодействия сульфгидрильных реагентов с гидроксильными радикалами с кластерами медных минералов

Авторы использовали программу ChemBio 3D специализированного комплекса ChemOffice корпорации Cambridge Soft в основном для создания 3D моделей минералов, реагентов (компонентов) и их комплексов, структуры которых оптимизировали и минимизировали при использовании молекулярной механики – MM 2 и сохраняли с расширением top.

Расчет же основных данных при компьютерном моделировании минералов, реагентов осуществляли самым современным методом PM 7 с помощью программного модуля MORAC 2012 с использованием файлов типа ARC и Gaussian Output. Gaussian Output выводит файл расчета основных термодинамических свойств молекулы.

Для исследования водородной связи и построения карт молекулярного электростатического потенциала (МЭСП) реагентов применяли комплекс квантово-механических расчетов HyperChem.

Исследовали собиратели типа диэтанолдитиокарбаминовой кислоты (ДЭДТН), реагента с юпаковским названием O,O-bis(2-((2-hydroxyethyl)amino)ethyl) S-hydrogen phosphorodithioate (ИМ-ДА), реагента с юпаковским названием O,O-bis(2-(bis(2-hydroxymethyl)amino)ethyl) S-hydrogen phosphorodithioate (ИМ-ТА) и 3,4-гидроксибензодитионовой кислоты (ГБДТН). Карты молекулярного электростатического потенциала (МЭСП) реагентов приведены на рис. 1.

Из карт МЭСП видно, что молекула реагента ДЭДТН имеет 7 ярко выраженных центров: 4 – на атомах кислорода гидроксильных групп, 2 – на атомах азота аминогрупп и 1 – на атоме серы сульфидной группировки. К не ярко выраженным центрам относится атом серы тиольной группировки. В молекуле ИМ – ДА ярко выраженных центров 9 и один не ярко выраженный – также атом серы тиольной группировки. В молекуле ИМ – ТА всего два ярко и два не ярко выраженных активных центра (сульфидная и тиольная сера). ГБДТН имеет 7 ярко и один не ярко выраженный центр (атом серы сульфидной группировки).

Детально изучены системы кластеров медных минералов с сульфгидрильными собирателями.

Разработана методика докинга собирателей к отдельным атомам минералов с целью определения у созданного комплекса ряда физико-химических констант. Были рассчитаны молекулярные орбитали для исследуемых соединений НОМО (highest occupied molecular orbital), ЛУМО (lowest unoccupied molecular orbital), в том числе и СОМО (second occupied molecular orbital).

На рис. 2 показана схема прикрепления диэтанолдитиокарбаминовой кислоты к атому меди халькопирита и 3D созданного комплекса. Аналогичные комплексы были созданы для борнита, ковеллина и молибденита, которые не показаны на рисунке.



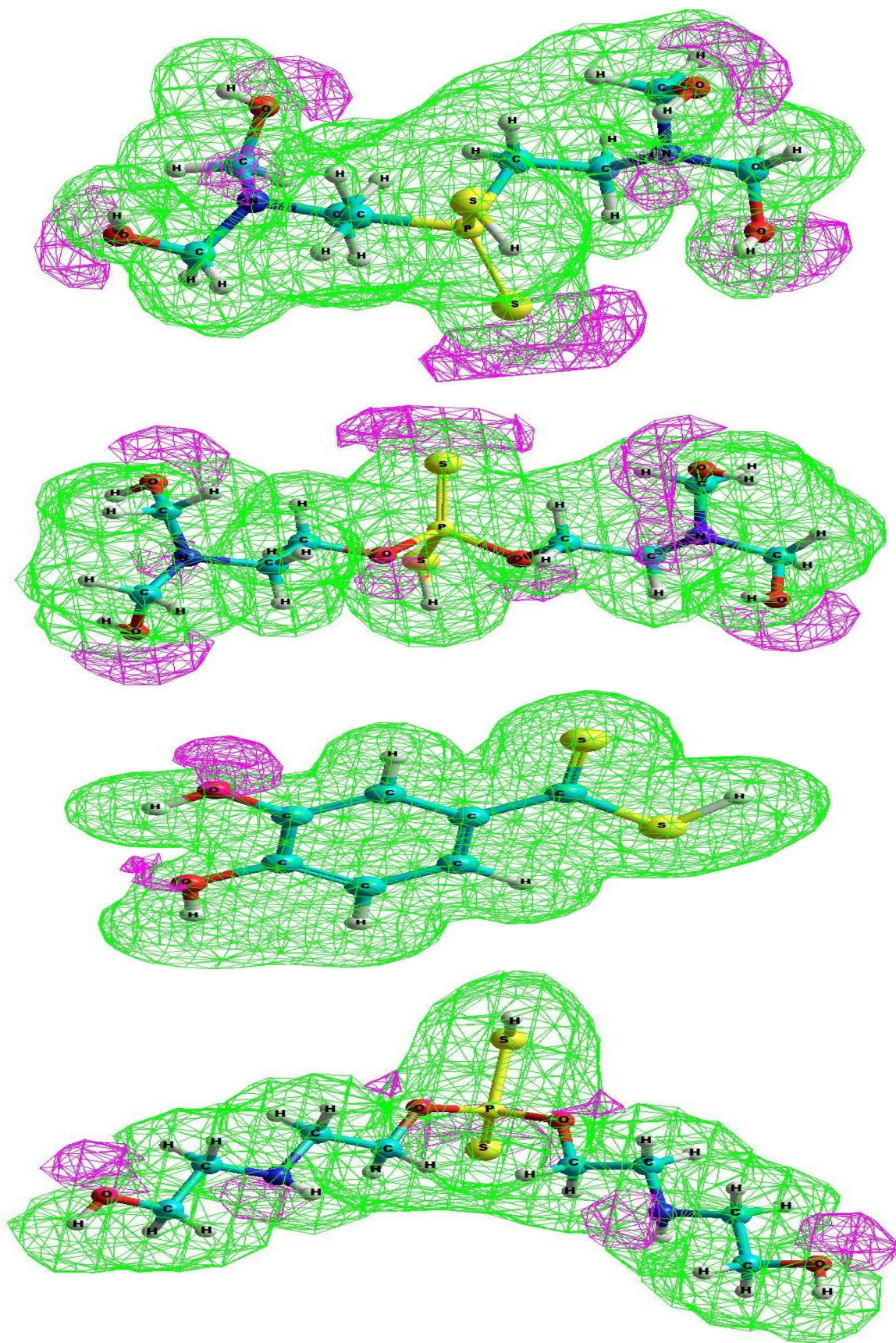


Рис. 1. Карты молекулярного электростатического потенциала реагентов:  
ДЭДТН, ИМ – ДА, ИМ – ТА, ГБДТН (сверху вниз)

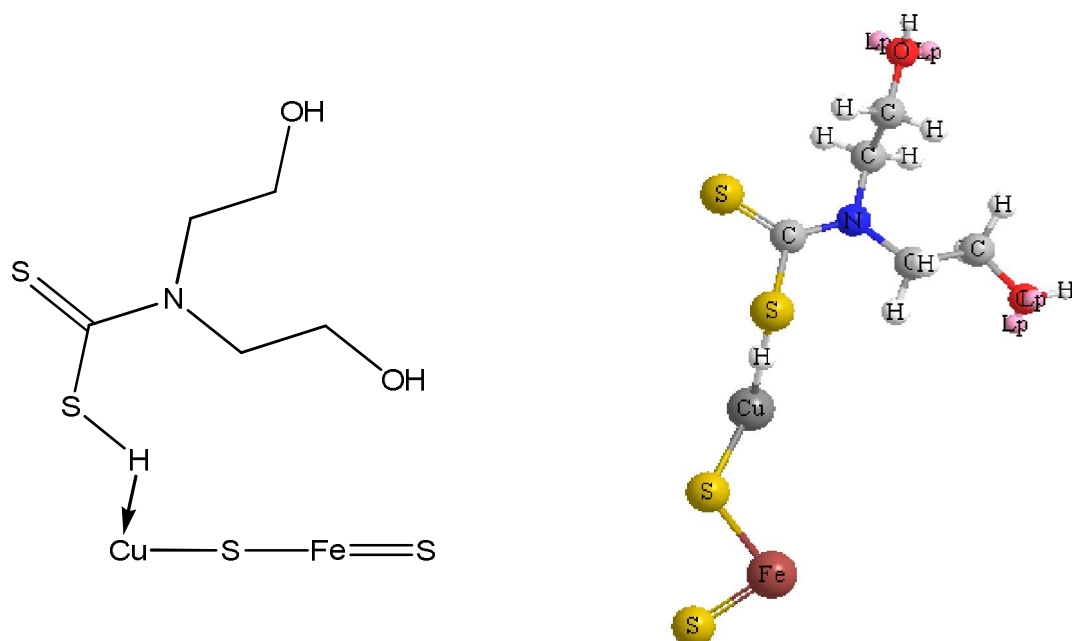


Рис. 2. Схема прикрепления диэтанолдитиокарбаминовой кислоты к атому меди халькопирита и 3 D созданного комплекса

Детально изучены системы кластеров минералов меди и кластеров медных минералов с сульфгидрильными собирателями. Для медных минералов обнаружена вторичная свободная молекулярная орбиталь, которая будет способствовать переносу электронной плотности с минерала на атомы собирателя (табл. 1).

Таблица 1  
Величины орбиталей  $\alpha$  SOMO LUMO,  
 $\beta$  SOMO LUMO, эВ

Минералы	$\alpha$ SOMO LUMO	$\beta$ SOMO LUMO
$\text{Cu}_5\text{FeS}_4$ борнит	-7.844 -1.534	-7.858 -1.065
$\text{CuSFeS}$ халькопирит	-9.140 -1.988	-9.442 -1.404
$\text{Cu}_3\text{S}_3$ ковеллин	-8.424 -1.751	-8.348 -1.322
Халькозин	-7.278 -2.071	-6.901 -0.031

Осуществляли оценку активности собирателя (ПОАС) в виде разницы общей энергии комплекса и суммы энергии кластера и энергии собирателя, определяемую по выражению  $\Delta E = E$  комплекса – ( $E$  кластера +  $E$  собирателя), эВ (ПОАС)

Чем меньше величина ПОАС, тем более предпочтительно взаимодействие собирателя с кластером минерала (табл. 2). На рис. 3 показаны схемы наиболее прочных (с точки зрения величины энергии водородной связи) межмолекулярных комплексов отдельных атомов сульфгидрильных собирателей с молекулами воды.

Молекулы воды виртуально взаимодействовали с гетероатомами S тионной и тиольной, O, N, H и определяли по известной методике величину водородной связи (Дж/ моль).

Таблица 2

Величины ПОАС для минералов и собирателей

Минерал	Величины ПОАС, эВ		
	ДЭДТН	ИМ – Та	(ГБДТН)
Борнит	-0,9487	-3,3452	-1,7256
Халькопирит	-2,9096	-2,0785	-1,1414
Ковеллин $\text{Cu}(1)2\text{Cu}(2)1\text{S}3$	-2,5238	-	- 4,6485
Молибденит	-12,503	-	-

Было установлено, что энергия водородной связи между тионной серой и водородом воды колеблется от  $-1,92$  до  $-8,42$  Дж/моль. Энергия водородной связи между тиольной серой и водородом воды составляет  $-9,97$  Дж/моль. Наибольшая величина энергии водородной связи характерна для водорода гидроксильной группы собирателя и кислорода воды. Эта величина характеризуется величинами от  $-5,32$  до  $-26,90$  Дж/моль. Наиболее гидрофобной является 3,4-дигидроксибензодитионовая кислота. Диэтанолдитиокарбаминовая кислота (ДЭДТН) обладает высокой депрессирующей способностью, так как величина энергии водородной связи с водой максимальна и составляет  $-26,9$  Дж/моль. Реагент ИМ-ДА обладает низкой депрессии минералов, так как у него водородная связь порядка  $-13,0$  Дж/моль.

В ряде работ [9, 10] отмечается высокая селективность действия тиокарбаматов при флотации различных руд.

Функциональная группа тиокарбаматов содержит одновременно 3 гетероатома – кислород, азот и серу. Это обстоятельство служит причиной

специфических свойств тионокарбаматов.

Используемые для флотации руд реагенты должны хорошо гидрофилизировать поверхность минерала. Чем выше будет энергия водородной

связи в системе «реагент-вода», тем сильнее будет гидрофилизация поверхности минералов, что установлено при флотации медных минералов с использованием сульфгидрильных собирателей.

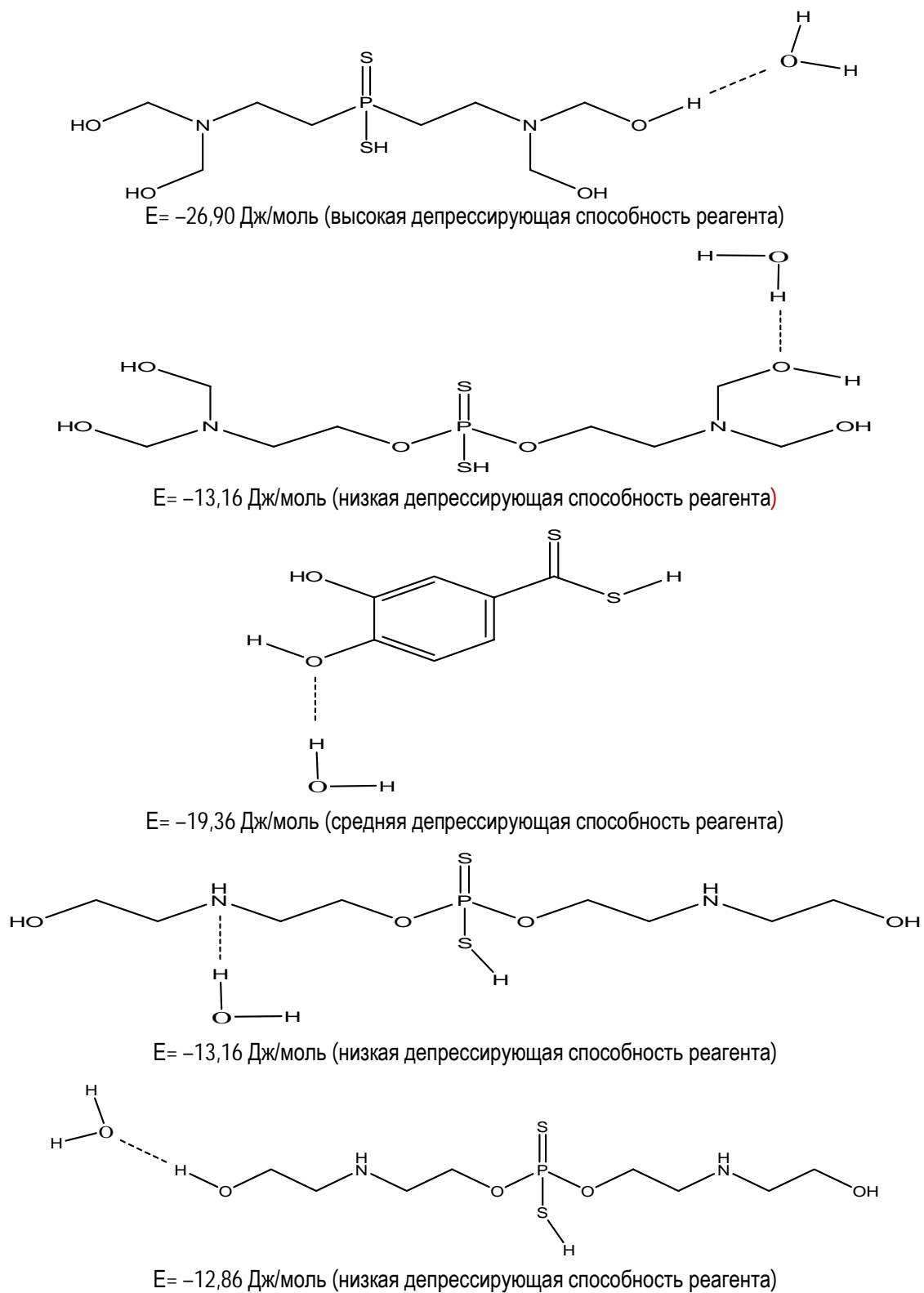


Рис. 3. Схемы моделей водородных связей сульфгидрильных собирателей с молекулой воды



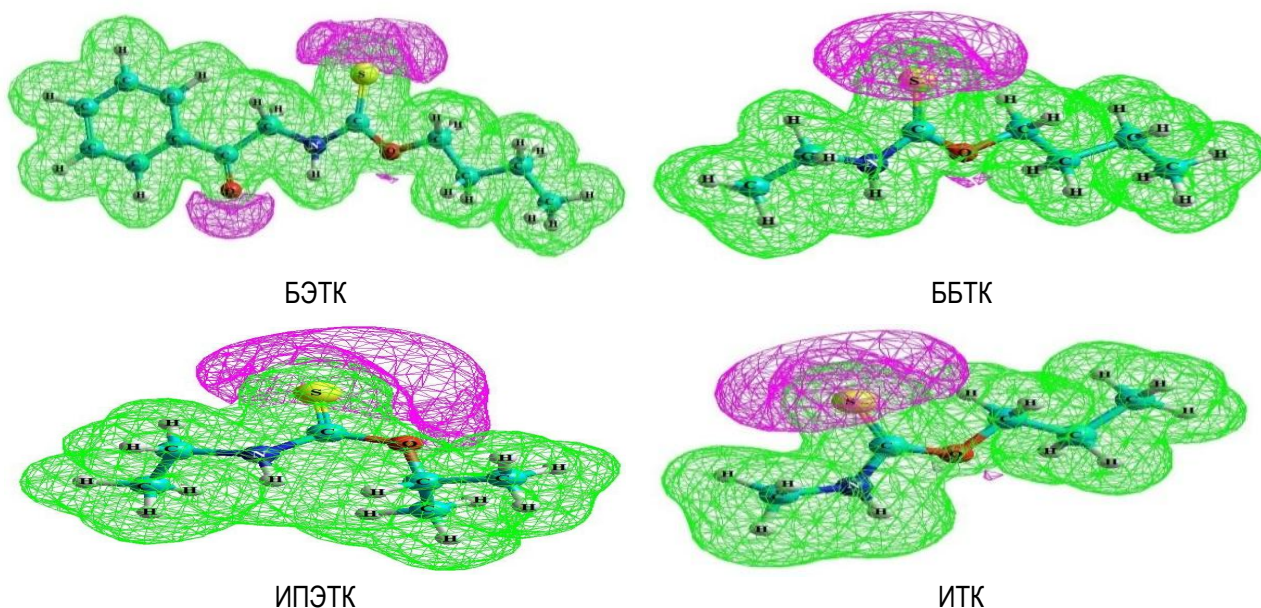


Рис. 4. Карты молекулярного электростатического потенциала тиокарбаматов

Поэтому в работе рассмотрены структуры тиокарбаматов с точки зрения возможности образования межмолекулярных комплексов с водородной связью с молекулами воды. Из карт МЭСП видно, что наиболее активные реакционные центры молекул реагентов расположены на атомах кислорода и серы. В молекулах О – бутил – N – этилтиокарбамата (БЭТК), изопропилэтилтиокарбамата (ИПЭТК) и О-пропил -N-метилтиокарбамата (ИТК) видно наличие двух ярко выраженных активных центров (фиолетовые участки), в молекуле О-бутил-N-бензоилтиокарбамата (ББТК) имеются три активных центра.

Для всех рассматриваемых реагентов наибольшее значение энергии водородной связи характерно для комплексов, образующихся через атом серы (табл. 3).

Наиболее прочные комплексы образуются при взаимодействии ББТК с молекулами воды. Энергии водородной связи межмолекулярных комплексов функциональных групп ББТК составляют – 20,1; 24,3 и 24,5 Дж/моль, что значительно выше энергии водородной связи межмолекулярных комплексов функциональных групп других реагентов (см. табл. 3). Поэтому при закреплении на поверхности минерала ББТК будет сильнее других реагентов гидрофилизировать его поверхность, что в свою очередь увеличит селективность процесса флотации полиметаллических руд.

Таким образом, компьютерное моделирование исследованных реагентов позволило заранее оценить их технологические свойства при флотации медных минералов.

#### Выводы:

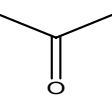
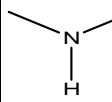
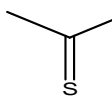
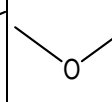
1. Изучено моделирование кластеров медных минералов. Определены компьютерные параметры минералов, заряды отдельных атомов. Установлена вторичная свободная молекулярная орбиталь типа  $\alpha$  SOMO LUMO, ( $\sigma$ B),  $\beta$  SOMO LUMO, ( $\sigma$ B).

2. Разработана методика прикрепления различных сульфгидрильных собирателей к отдельным атомам кластеров минералов. Уменьшение величины ПОАС располагается в ряд: молибденит, халькопирит, ковеллин и борнит.

3. Созданы модели собирателей при взаимодействии с водой и впервые вычислена величина энергии водородной связи отдельных гетероатомов молекулы собирателя с водой, которая колеблется в пределах от  $E = -26,9$  Дж/моль до  $E = -13,16$  Дж/моль.

Таблица 3

Величина энергии водородной связи в межмолекулярных комплексах реагентов с молекулами воды, Дж/моль

Реагент	Функциональная группа реагента, с которой молекула воды образует водородную связь			
				
БЭТК	-7,0	-12,4	-13,9	-
ББТК	-20,1	-24,3	-24,5	-1,2
ИПЭТК	-	-7,9	-14,4	-
ИТК	-	-13,7	-16,7	-5,1

4. Показано, что перспективными органическими депрессорами являются диэтанолдитиокарбаминавая кислота, 3,4-дигидроксibenзодитионовая кислота.

5. При закреплении на поверхности минералов наибольшей гидрофилизующей способностью будет обладать О-бутил-N-бензоилтионокарбамат (ББТК), что обеспечит улучшение селективности флотации полиметаллических руд.

#### Список литературы

1. Kurkov Aleksander, Pastukhova Irina. Computer modeling of the structure and action of a new class of organophosphorous collectors. Proceeding of the XIV Balcan Mineral processing Congress, Tuzla, 14–16 Juni 2011(edit.by Suncica Masic). 2011. Vol. 11.
2. Molecular Modeling for the Design of Novel Performance Chemicals and Materials, (Ed.) Beena Rai, ISBN: 9781439840788, ISBN 10: 1439840784, Publication Date: March, 2012.
3. Соложенкин П.М. Квантово-химические и молекулярно-динамические аспекты прогнозирования свойств собирателей металлов из продуктивных растворов цветных металлов // Труды международного научного симпозиума «Неделя горняка 2012»: сб. статей. Отдельный выпуск горно-информационного аналитического бюллетеня (научно-технического журнала). М.: Горная книга, 2012. № ОР1. 632 с. С. 431–455.
4. Медяник Н.Л., Гиревая Х.Я., Варламова И.А. Квантово-химический подход к выбору реагента собирателя для флотации углей низкой стадии метаморфизма // Кокс и химия. 2006. № 1. С. 8–13.
5. Гиревая Х.Я. Повышение эффективности флотации газовых углей на основе квантово-химического обоснования выбора реагентов: дис. ... канд. техн. наук. Магнитогорск, 2006.
6. Соложенкин П.М. Создание прототипов сульфидных минералов и взаимодействие их с реагентами в процессе флотации и выщелачивания руд квантово-механическим методом // Труды международного научного симпозиума «Неделя горняка 2013»: сб. статей. Отдельный выпуск горно-информационного аналитического бюллетеня (научно-технического журнала). М.: Горная книга, 2013. № ОБ1. 648 с. С. 397–424.
7. Лавриненко А.А., Свечникова Н.Ю. Исследование квантово-химических характеристик для обоснования флотационной активности реагента // Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова. 2008. №1(21). С. 83–85.
8. Соложенкин П.М., Соложенкин О.И. Моделирование флотационных реагентов с тиамидной группировкой с использованием компьютерных технологий // Цветные металлы. 2011. №10.
9. Рябой В.И. О возможности образовании дативной π-связи при взаимодействии тионокарбаматов с медью и халькопиритом // Физической химии. 1981. Т. IV. № 4. С. 56–58.
10. Mielczarski J.A. and Yoon R.H. Spectroscopic Studies of the Structure of the Adsorption Layer of Thionocarbamate.2.On Cuprous Sulfide. Langmuir. 1991, 7, pp. 101–108.

Материал поступил в редакцию 02.02.16.

#### INFORMATION ABOUT THE PAPER IN ENGLISH

DOI:10.18503/1995-2732-2016-14-1-26-33

### COMPUTER-AIDED SIMULATION OF SULPHYDRIC COMPOUNDS WITH HYDROXYL RADICALS WITH FORECAST ON THEIR APPLICATION AS FLOTATION REAGENTS

**Solozhenkin Peotr Mikhailovich** – D.Sc. (Eng.), Professor, Chief Research Scientist, Federal State Budgetary Scientific Institution Research Institute for the Comprehensive Exploitation of Mineral Resources of the Russian Academy of Sciences (IPKON of the RAS), Moscow, Russia. E-mail: solozhenkin@mail.ru.

**Kubak Denis Anatolievich** – Ph.D. (Eng.), Assistant Professor, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia.

**Petukhov Vasily Nikolaevich** – D.Sc. (Eng.), Professor, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia. Phone: +7(3519)29-84-33. E-mail: chief.Petuhov 2013@ yandex.ru.

**Abstract.** This article demonstrates the efficiency of computer technology and programmes used in computational chemistry for studying reagent clusters containing two groups: the hydrophilic group interacting with water, and the functional group able to bond to the depressed minerals surface selectively. Computer parameters of minerals and reagents have been determined. The authors have developed a technique of bonding various sulphydric collectors to separate copper atoms and molybdenum minerals clusters (docking). The value of the prognosis of collector activity evaluation has been calculated. Models of collectors with hydroxyl radicals and attached water have been built. Ab initio calculations of the hydrogen bonding interaction energy of separate heteroatoms of the wa-

ter-collector molecule have been made. Systems of clusters of copper minerals and clusters of copper minerals with sulphydric collectors have been studied in detail. A secondary unoccupied molecular orbital has been found for copper minerals. The orbital will enhance transfer of electron density from the mineral to collector atoms. The authors have specified that the value of hydrogen bonding interaction energy between thione sulfur and hydrogen ranges between -1.92 and -8.42 J·mol. The hydrogen bonding interaction energy between thiol sulfur and hydrogen is -9.97 J·mol. The greatest value of the hydrogen bonding interaction energy is specific for hydrogen of a collector hydroxyl group and oxygen, which ranges between -5.32 and -26.9 J·mol. 3,4-dihydroxybenzo-dithioic acid is the

most hydrophobic substance. Diethanol-dithiocarbamic acid has a high depressing efficiency because the value of the water-hydrogen bonding interaction energy is maximum making  $-26.9$  J·mol. IM-DA reagent has a low minerals depression since its hydrogen bonding interaction energy is  $-13.0$  J·mol. Intermolecular hydrogen-bonded complexes forming between thionocarbamates molecules and water have been studied. O-butylbenzoyl-thionocarbamate has an ultimate hydrophilic capacity. Thus, the computer-aided simulation of reagents being studied has made it possible to evaluate their process properties at copper flotation in advance.

**Keywords:** Computer-aided simulation, collectors with hydroxyl radicals, thionocarbamates, MOPAC2012 program, hydrogen bond, organic depressors.

#### References

1. Kurkov Aleksander, Pastukhova Irina. Computer modeling of the structure and action of a new class of organophosphorous collectors. Proceedings of the XIV Balcan Mineral processing Congress, Tuzla, 14–16 Juni 2011 (ed. by Suncica Masic). 2011, vol. 11.
2. Molecular Modeling for the Design of Novel Performance Chemicals and Materials, (Ed.) Beena Rai, ISBN: 9781439840788, ISBN 10: 1439840784, Publication Date: March, 2012.
3. Solozhenkin P.M. Quantum-chemical and molecular-dynamic forecasting aspects of properties of metal collectors from pregnant non-ferrous-metal solutions. *Trudy mezhdunarodnogo nauchnogo simpoziuma «Nedelya gornyaka 2012»: sb. statej. Otdel'nyj vypusk gorno-informatsionnogo analiticheskogo byulletenya (nauchno-tehnicheskogo zhurnala)* [Mining Engineer Week 2012' International Scientific Symposium Proceedings. Collection of Articles. Special edition of the mining informational analytical bulletin (of the scientific and engineering journal)]. Moscow: Book of Mining Publishing House, 2012, no. OR1. 632 p, pp. 431–455.
4. Medyanik N.L., Girevaya Kh.Ya. and Varlamova I.A. Quantum-Chemical Approach to the Selection of Collectors for Coal Flotation. *Koks i khimiya* [Koks Khim]. 2006, no.1, pp. 8–13.
5. Girevaya Kh.Ya. *Povyshenie ehffektivnosti flotatsii gazovykh uglej na osnove kvantovo-khimicheskogo obosnovaniya vybora reagentov: dissertatsiya kandidata tekhnicheskikh nauk* [More effective flotation of G coal by selecting reagents on the basis of quantum-chemical characteristics. Ph.D. dissertation]. Magnitogorsk, 2006.
6. Solozhenkin P.M. Quantum-mechanical creation of sulphide mineral prototypes and their interaction with reagents at ore floatation and leaching. *Trudy mezhdunarodnogo nauchnogo simpoziuma «Nedelya gornyaka 2013»: sb. statej. Otdel'nyj vypusk gorno-informatsionnogo analiticheskogo byulletenya (nauchno-tehnicheskogo zhurnala)* [Mining Engineer Week 2013 international scientific symposium proceedings. Collection of articles. Special edition of the mining informational analytical bulletin (of the scientific and engineering journal)]. Moscow: Book of Mining Publishing House, 2013, no. OV1, 648 p, 397–424.
7. Lavrinenko A.A., Svechnikova N.Y. Study of quantum-chemical characteristics to substantiate reagent flotation capacity. *Vestnik Magnitogorskogo Gosudarstvennogo Tekhnicheskogo Universiteta im. G.I. Nosova* [Vestnik of Nosov Magnitogorsk State Technical University]. Magnitogorsk, 2008, no. 1(21). pp. 83–85.
8. Solozhenkin P.M., Solozhenkin O.I. Computer-aided simulation of floatation reagents with thioamide groupings. *Tsvetnye metally* [Non-Ferrous metals]. 2011, no. 10.
9. Riaboy V.I. Formation of back-donation l-bonding at thionocarbamates-copper-chalcopyrite interaction. *Fizicheskoy khimii* [Journal of Physical Chemistry]. 1981, vol. IV, no. 4, pp. 56–58.
10. Mielczarski J.A. and Yoon R.H. Spectroscopic Studies of the Structure of the Adsorption Layer of Thionocarbamate. 2. On Cuprous Sulfide. *Langmuir*. 1991, 7, pp. 101–108.

Соложенкин П.М., Кубак Д.А., Петухов В.Н. Компьютерное моделирование сульфгидрильных соединений с гидроксильными радикалами и прогноз их в качестве флотореагентов // Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова. 2016. Т. 14. №1. С. 26–33. doi:10.18503/1995-2732-2016-14-1-26-33

Solozhenkin P.M., Kubak D.A., Petukhov V.N. Computer-aided simulation of sulphidric compounds with hydroxyl radicals, with forecast on their application as flotation reagents. *Vestnik Magnitogorskogo Gosudarstvennogo Tekhnicheskogo Universiteta im. G.I. Nosova* [Vestnik of Nosov Magnitogorsk State Technical University]. 2016, vol. 14, no. 1, pp. 26–33. doi:10.18503/1995-2732-2016-14-1-26-33