

Резюме

*Р. Н. Ажигулова, Р. А. Омарова, А. А. Батырбаева,
А. Арыстанбеков, М. Т. Ошакбаев*

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ АДСОРБЦИИ
В СИСТЕМАХ КЛАСТЕР СФАЛЕРИТА И
ВЮРЦИТА-МОЛЕКУЛЫ ФЛОТОРЕАГЕНТОВ

Квантово-химическим расчетным методом исследовано геометрическое и электронное строение некоторых окислителей, наиболее часто присутствующих в реакционной среде флотационной пульпы. Установлена закономерность изменения величин потенциала ионизации, на основании которой сделан вывод о реакционной способности исследованных молекул.

Ключевые слова: сульфидные минералы, сфалерит, вюрцит, молекулярное моделирование.

Резюме

*Р. Н. Ажигулова, Р. А. Омарова, А. А. Батырбаева,
А. Арыстанбеков, М. Т. Ошакбаев*

СФАЛЕРИТ ЖӘНЕ ВЮРЦИТ КЛАСТЕРІ-ФЛОТАРЕАГЕНТЕРДІҢ
МОЛЕКУЛАЛАРЫ ЖҮЙЕЛЕРІНДЕГІ АДСОРБЦИЯЛЫҚ ПРОЦЕСТЕРДІ
КВАНТТЫҚ-ХИМИЯЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУ

Флотациялық пульпадағы реакциялық ортада жиі кездесетін кейбір тотықтырғыштардың геометриялық және электрондық құрылымдары кванттық химиялық есептеу әдісімен зерттелген. Потенциал ионизацияның шамаларының өзгеру заңдылықтары анықталды, оның негізінде зерттелген молекулалардың реакциялық қабілеттіліктеріне қорытынды жасалды.

Түйін сөздер: сульфидті минералдар, сфалерит, вюрцит, тотықтырғыш, молекулалық модельдеу.