

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ  
КСАНТОГЕНАТ-ИОНОВ С РАЗЛИЧНОЙ ДЛИНОЙ УГЛЕВОДОРОДНОГО  
РАДИКАЛА В МОДЕЛЬНОЙ ФЛОТАЦИОННОЙ СИСТЕМЕ**

**И. В. Кунилова, Я. М. Шимкунас, В. Е. Вигдергауз**

*УРАН Институт проблем комплексного освоения недр РАН*

В работе проведена оценка влияния длины углеводородного радикала флотационного реагента-собираателя на изменение ИК-спектральных характеристик и молекулярной структуры водных растворов в целях исследования механизма и закономерностей направленного регулирования свойств поверхности сульфидных минералов. Выполнено исследование формирования гидрофобного слоя ксантогенатов с различной длиной углеводородного радикала на поверхности оптического элемента – селенида цинка в зависимости от концентрации ксантогената. На основании анализа ИК-Фурье спектров многократно нарушенного полного внутреннего отражения для водных растворов бутилового ксантогената калия установлено наличие нескольких экстремумов интенсивностей и смещения полос, отражающих зависимость гидрофобности от структурного, дисперсионного и электростатического факторов.

Исследования надмолекулярной структуры водных растворов флотационных реагентов дали возможность уточнения геометрических параметров при расчетах характеристик электронной структуры модельных конформаций ксантогенатов в смачивающей пленке (парциальные заряды на атомах, распределение электронной плотности, дипольный момент). Определение оптимальных по энергии конформаций ксантогенатов будет использовано при разработке модели образования межфазных ассоциатов во флотационных системах.