

реагентінің жеке қолданысы арқылы жүргізілген эксперименталды зерттеу нәтижесімен салыстырғанда 12%-ға өсті.

Пайдалы қазбаларды байыту процесі:

- бутилді натрий ксантогенаты мен оның мұнай интенсификаторымен қоспасының флотациялық байыту жағдайына әсер етуін зерттеу флотацияның технологиялық көрсеткіштерін жоғарылатуға;
- алынған қазбалардан пайдалы өнімді бөліп алу және ол өнімдерді үлкен экономикалық әсермен пайдалануға;
- пайдалы қазбаларды өндіру шығымының төмендеуінен еңбек өнімділігін жоғарылатып, өңдеу жүйесін жеңілдетуге;
- кен үлгілерінің байыту дәрежесін жоғарылатуға мүмкіндік береді.

Мыс-сульфидті кен құрамындағы жинағыштардың беттік қосылыстарының ИҚ-спектрлік анализ нәтижелері бойынша, минералдардың флотациялануына кен бөлшектеріне адсорбцияланған жинағыш көлемі емес, түзілетін беттік қосылыстардың құрылысы маңызды рөл атқаратынын көрсетті. Ал осы беттік қосылыстардың құрылысы кеннің әрі жинағыштардың химиялық құрамымен тығыз байланысты.

Әдебиеттер

[1] Абрамов А.А. Переработка, обогащение и комплексное использование твердых полезных ископаемых: Учебник для вузов. – М.: Изд-во МГГУ, 2004. – Том I. Обогащительные процессы и аппараты. – С. 311-313.

[2] Рыскина Н.П., Глембоцкий А.В., Щербаков В.А., Гурвич С.М., Иванков С.И. Современные тенденции в разработке и использовании флотореагентов для обогащения руд тяжелых цветных металлов за рубежом. // Совершенствование технологии обогащения руд цветных металлов на основе оптимизации реагентных режимов. Москва.1986.-С.4-15.

КҮКІРТІ БАР АМИНҚЫШҚЫЛЫ - ЦИСТЕИННІҢ ЭЛЕКТРОНДЫҚ ҚҰРЫЛЫСЫН КВАНТТЫ-ХИМИЯЛЫҚ ЗЕРТТЕУ

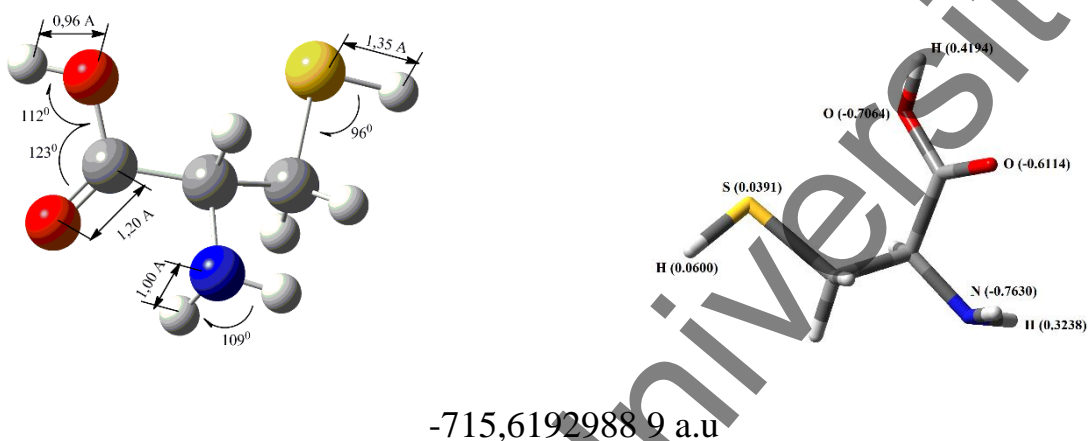
Кутжанова К.Ж., Амангелді А.А., Дәуімбай Ж.Т., Жорабеков Р.Н.,
Есенбекова С.К., Пернебай М.Ә.

Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды университеті
Қарағанды, Қазақстан

Аминқышқылдары табиғатта көп таралған: ақуыздардың, пептидтердің және т.б. физиологиялық белсенді қосылыстардың құрамына кіреді және бос күйінде де кездеседі. Тіршілік үшін аса маңызды қосылыс ақуыз молекуласы аминқышқылдар қалдықтарынан құралатындықтан, олардың маңызы өте зор.

Осыған байланысты жұмыстың мақсаты күкірті бар аминқышқылы – цистеиннің молекулааралық комплекстерінің құрылысын квантты-химиялық әдістер арқылы зерттеу болып табылады

Бастапқыда күкірті бар аминқышқылдарының қарапайым өкілі – цистеинді қарастырайық. 1-суретте ұсынылған үлгіде молекуланың атомаралық қашықтық және валенттік бұрыштары мен реперлі атомдарда зарядтарының бөлінуі тәрізді геометриялық параметрлерін көрсетілген. Геометрияның толық оңтайландыруы ең танымал және үнемді базистік жиындардың бірі - валентті-ажырау 3-21G базисінде жүргізіледі.



Сурет 1. Цистеиннің атомдарындағы зарядтарының бөлінуі және геометриялық параметрлері

1-суреттен көргеніміздей, сутегі атомдарының зарядтарының бөлінуі оның молекулада орналасуына байланысты және функционалды тобына тиесілігіне қарай ажыратылады: амин тобындағы сутегі зарядымен (цистеин: $q=0,3238$) салыстырғанда, карбоксил топтарындағы сутегі көбінесе заряды жоғары ($q=0,4194$) болады.

Сутектердің бірдей зарядтарының азотпен байланысына назар аудару керек. Бұл олардың мәнінің бірдейлігін және симметриялық құрылымын көрсетеді. Молекулалардың диполь моменті UHF 3-21G есептеуіне сәйкес цистеинде $\mu=0,8900$ Debye құрайды.

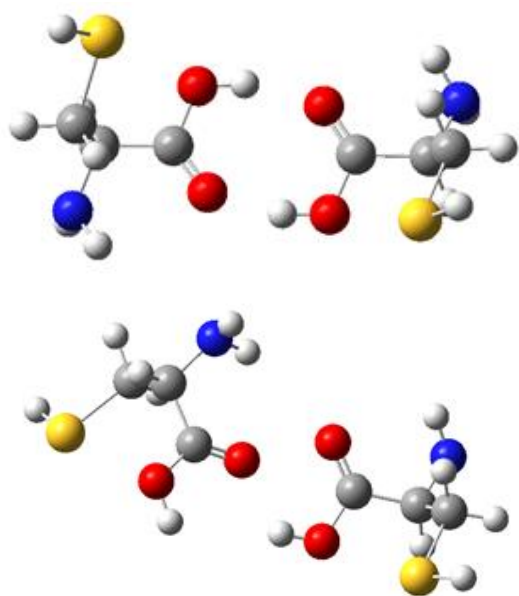
2-суретте цистеин молекуласында сутектік байланыс есебінен түзілген гидроксотоптардың бір-біріне қатысы циклдық комплекстері көрсетілген.

Осындай типті комплекстердің түзілуі туралы білім беру мүмкіндігін циклдық құрылымдарды төмен энергетикалық мәндері бойынша екі еселенген жеке молекулалар энергиясымен салыстыра отырып талқылайды (1-кесте).

Ең жоғары кинетикалық тұрақтылық димер 1-ді димер 2-мен салыстырғанда димер шамаларының толық энергиясын салыстырып болжауға мүмкіндік береді:

$$\Delta E = E_{\text{Димер 1}} - E_{\text{Димер 2}} = -166,7656 \text{ кДж/моль} \quad (1)$$

Димерлердің энергия айырмашылығы бойынша анықталған және цистеин молекуласының екі энергияға көбейткендегі ұтыс энергиясы шамамен 1 димер үшін 112 кДж/моль құрайтын цикл типтес комплекстерінде сутектік байланыс түзетін энергияны жатқызуға болады. Осыған ұқсас димер 2 үшін тасымалданатын энергетикалық мәні шамамен 15 кДж/моль-ді құрайды.



Димер I
-1431,26986426 а.у.
0,9716 Debye

Димер II
-1431,20638906 а.у.
1,4120 Debye

Сурет 2. Цистеин молекуласының КСБ циклді димерінің кинетикалық параметрлері

Екі ұқсас молекулалардың өзара орналасу айырмашылығы цистеиннің энергия мәніне және қарастырылған комплекстердің геометриялық параметрлеріне қатты әсер етеді.

2-суретте көрсетілгендей тұтастай карбоксил тобының (димер 1) сутекті байланыстар есебінен, молекулааралық сутекті байланыстар қатысында циклдік комплекс түзуі атомаралық арақашықтықтың $R_{O_8H_9}$ бен $R_{O_{12}H_{11}}$ және атомдардың валенттік бұрыштары жеке молекуламен салыстырғанда ұлғаюына әкеп соғады (1-кесте).

Кесте 1

Цистеин молекуласының және оның димерлерінің энергетикалық сипаттамалары

| Цистеин молекуласының энергиясы (а.у.) | Димер энергиясы (а.у.) | | Модуль бойынша сутек байланысының энергиясы (а.у.) | |
|--|------------------------|-------------|--|---------|
| | Димер 1 | Димер 2 | Димер 1 | Димер 2 |
| -715,61929 | -1431,26986 | -1431,20638 | 0,043 | 0,006 |

Тек қана гидроксил тобының карбоксил топтарында комплекс түзуге қатысатындимер 2 геометриялық параметрлерінің талдауын, сонымен қатар олардың ұлғаюын көрсетіп және димерлі құрылымдар тұрақтылығының пайдасында түсіндірілуі мүмкін.

Кесте 2

Цистеин және оның димерлерінің геометриялық параметрлері

| Параметр | Цистеин | Димер 1 | Димер 2 | Димер 3 | Димер 4 |
|-----------------------|---------|---------|---------|---------|---------|
| R _{O8H9} , А | 0,9690 | 0,999 | 0,971 | 0,969 | 0,969 |
| R _{O8C4} , А | 1,357 | 1,318 | 1,354 | 1,357 | 1,352 |
| R _{O7C4} , А | 2,202 | 1,224 | 1,201 | 1,202 | 1,201 |
| R _{C3N1} , А | 1,453 | 1,451 | 1,452 | 1,454 | 1,466 |
| R _{C3N1} , А | 1,003 | 1,00338 | 1,00378 | 1,00443 | 1,007 |
| /_C4O8H9 | 112,261 | 114,971 | 113,81 | 112,215 | 112,576 |
| /_O7C4O8 | 122,974 | 124,029 | 122,65 | 122,775 | 123,376 |

Егер димердің геометриялық параметрлерін салыстырсақ, онда ең жоғары мәні 1 құрылысына тиесілі. Сутектің жоғары қозғалғыштығыныңәсерінен мұндай тәуелділік молекулалар ішіндегі өте әлсіз атомаралық әрекеттесуі және осыған орай күшті молекулааралық әрекеттесуі сәйкесінше димерлерде көрсетілуі мүмкін.

Сонымен,комплекс түзуі кезінде жеке молекуламен салыстырғанда атомаралық параметрлердің NH арақашықтығы төмендейді. Сондай-ақ осы факт бойынша СБК үлкен кинетикалық тұрақтылығын түсіндіруге болады.

DFT МОДЕЛИРОВАНИЕ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНОЙ ВОДОРОДОТРОПИИ В НЕКОТОРЫХ АРОМАТИЧЕСКИХ КИСЛОТАХ

Курманова А.Ф., Стадник И.Л.

Карагандинский университет имени Е.А.Букетова

Из литературных данных следует, что кислотно-основные свойства ароматических кислот выражены более сильно по сравнению с алифатическими карбоновыми кислотами, что обусловлено влиянием индуктивного эффекта ароматического кольца, которое отнимает заряд у карбоксильной группы, будучи непосредственно присоединенным к ней.

ЭПР-спектроскопические исследования реакции протонного обмена 3,6-ди-трет.бутил-2-оксифеноксила с ароматическими кислотами показали, что в случае замещенных ароматических кислот протекание реакции протонного обмена непосредственно зависит от наличия и типа заместителя в молекуле кислоты [1-2]. В продолжение данных исследований, были проведены