

Научная статья  
УДК 622.765.061:669.292.3  
DOI: 10.21209/2227-9245-2024-30-2-72-81

## Изучение возможности применения фульвовой кислоты для флотационного извлечения ванадия на основе расчёта молекулярных дескрипторов

Надежда Леонидовна Медяник<sup>1</sup>, Анастасия Владиславовна Смирнова<sup>2</sup>,  
Юлия Александровна Карелина<sup>3</sup>, Владислав Андреевич Басков<sup>4</sup>

<sup>1,2,3,4</sup>Магнитогорский государственный технический университет им. Г. И. Носова,  
г. Магнитогорск, Россия

<sup>1</sup>medyanikmagnitka@mail.ru, <sup>2</sup>a-kremneva@mail.ru, <sup>3</sup>96bessonova74@mail.ru, <sup>4</sup>baskov-vvvl@mail.ru

### Информация о статье

Поступила в редакцию  
20.02.2024

Одобрена после  
рецензирования 06.05.2024

Принята к публикации  
20.05.2024

### Ключевые слова:

ванадий, ванадил-катион,  
фульвовая кислота, кислые  
продуктивные растворы,  
реагент-собирающий,  
принцип «структура-  
свойство / активность-  
свойство», молекулярные  
дескрипторы, зарядо-  
контролируемый механизм,  
химическое моделирование,  
флотация

Актуальность заключается в необходимости переработки кислых продуктивных растворов, содержащих ценный компонент ванадий в виде ванадил-катионов. Объект исследования – фульвовая кислота (FulvAc). Предмет исследования – возможность её применения в качестве флотационного реагента-собирающего ванадил-катионов. Цель исследования – изучение возможности флотационного извлечения ванадия из кислых продуктивных растворов. Задачи исследования: подбор селективно действующего реагента-собирающего по отношению к ценному компоненту на основе принципа «структура-свойство / активность-свойство»; проведение молекулярных расчётов, включающих структурные, физико-химические и квантово-химические параметры нового реагента природного происхождения – фульвовых кислот; применение программного комплекса для моделирования и визуализации систем «субстрат-реагент»; изучение механизма взаимодействия молекул FulvAc и субстрата  $[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ ; реализация лабораторного флотационного тестирования реагента-собирающего. В статье использованы специальные методы исследования – химического моделирования и анализа с применением систем программного обеспечения The Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) и Avogadro. Приведены расчёты молекулярных дескрипторов флотационной активности нового органического реагента FulvAc по отношению к извлекаемому ценному компоненту ванадию (субстрат металла), которые количественно позволяют оценить возможность применения реагентов на основе принципа «структура-свойство / активность-свойство». Проведённый расчёт молекулярных дескрипторов показал, что FulvAc за счёт фенольных, гидроксильных, карбонильных и карбоксильных групп способны образовывать хелатные комплексы с катионами ванадия, гетероатомы которых обуславливают центры хемосорбции. Ванадий в кислых продуктивных растворах находится в форме ванадил-катионов  $(\text{VO})^{2+}$  и акваванадилкатионов  $[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ , которые проявляют свойства комплексообразователей. Проведено моделирование образования флотосистем «субстрат-реагент» с использованием CCDC. Доказана возможность образования устойчивой флотосистемы «субстрат-реагент» « $(\text{VO})^{2+}/[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ -FulvAc» по зарядо-контролируемому механизму. Лабораторное тестирование реагента-собирающего FulvAc показало селективность и избирательность его действия по отношению к субстрату ванадия с  $\epsilon_v=92,05\%$ .

## Study of the Possibility of Using Fulvic Acid for the Flotation Extraction of Vanadium Based on the Calculation of Molecular Descriptors

Nadezhda L. Medyanik<sup>1</sup>, Anastasia V. Smirnova<sup>2</sup>,  
Yulia A. Karelina<sup>3</sup>, Vladislav A. Baskov<sup>4</sup>

<sup>1,2,3,4</sup>Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia

<sup>1</sup>medyanikmagnitka@mail.ru, <sup>2</sup>a-kremneva@mail.ru, <sup>3</sup>96bessonova74@mail.ru, <sup>4</sup>baskov-vvvl@mail.ru

### Information about the article

Received February 20, 2024

Approved after review  
May 06, 2024

Accepted for publication  
May 20, 2024

### Keywords:

vanadium, vanadyl cation, fulvic acid, acidic productive solutions, collector reagent, "structure-property/activity-property" principle, molecular descriptors, charge-controlled mechanism, chemical modeling, flotation

The relevance of the work lies in the need to process acidic productive solutions containing the valuable component vanadium in the form of vanadyl cations. The object of study in this work is fulvic acid (FulvAc), and the subject is the possibility of its use as a flotation reagent-collector of vanadyl cations. The purpose of the work is to study the possibility of flotation extraction of vanadium from acidic productive solutions. To achieve the goal, the following tasks are set: selection of a selectively acting collecting reagent in relation to a valuable component based on the "structure-property / activity-property" principle; carrying out molecular calculations, including structural, physicochemical and quantum chemical parameters of a new reagent of natural origin - fulvic acids; application of a software package for modeling and visualization of "substrate-reagent" systems; studying the mechanism of interaction between FulvAc molecules and the substrate  $[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ ; implementation of laboratory flotation testing of the collecting reagent. The following special research methods are used in the work: chemical modeling and analysis using The Cambridge Crystallographic Data Center (CCDC) and Avogadro software systems. Calculations of molecular descriptors of flotation activity of a new organic reagent FulvAc in relation to the extractable valuable component vanadium (metal substrate), which quantitatively allow to evaluate the possibility of using FulvAc for flotation extraction of vanadium substrate from solutions based on the principle of "structure-property/activity-property", are presented. The calculation of molecular descriptors carried out in this work has showed that FulvAc due to phenolic, hydroxyl, carbonyl and carboxyl groups are able to form chelate complexes with vanadium cations, oxygen heteroatoms cause chemisorption centers. Vanadium in acidic productive solutions is in the form of vanadyl cations  $(\text{VO})^{2+}$  and aquavanadylcations  $[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ , which show the properties of complexing agents. Modeling of flotosystems "substrate-reagent" formation with the use of The Cambridge Crystallographic Data Center software is carried out. The possibility of formation of stable substrate-reagent flotation system " $(\text{VO})^{2+} / [\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ –FulvAc" by charge-controlled mechanism has been proved.

**Введение.** Выбор перспективных реагентов нового поколения, селективно действующих, адаптированных к условиям ведения процесса и особенностям физико-химических свойств перерабатываемых продуктивных растворов, целесообразно осуществлять на основе принципа «структура-свойство / активность-свойство». Данный принцип разработан Н. Л. Медяник в диссертационной работе на соискание учёной степени доктора технических наук «Теоретическое обоснование и разработка ресурсовоспроизводящих технологий комплексной переработки техногенных вод медно-цинковых горных предприятий», теоретически обоснован и практически реализован в технологии комплексной переработки гидротехногенного минерального сырья медно-колчеданных месторождений, включающей стадию поэтапного флотационного извлечения катионов цинка и

меди с использованием реагента-собирающего РОЛ, имеющего оптимальный набор параметров реакционной способности. Принцип «структура-свойство / активность-свойство» базируется на определении комплекса молекулярных дескрипторов, включающих структурные (формные и фрагментарные), физико-химические и квантово-химические параметры, обеспечивающих высокую активность и селективность действия реагентов-собирающих по отношению к субстратам металла в процессе флотации.

**Актуальность** заключается в необходимости переработки кислых продуктивных растворов, образующихся на одной из стадий комплексной физико-химической переработки железного концентрата АО «Святогор» [6; 7], который содержит ценные компоненты железа (58,50 %  $\text{Fe}_{\text{общ}}$ ), ванадия (1,37 %  $\text{V}_2\text{O}_5$ ) и титана (5,64 %  $\text{TiO}_2$ ) в

пересчёте на оксиды, с целью выделения и концентрирования ванадия.

Обычно такие железные концентраты направляют на металлургические предприятия, однако металлурги его «не жалуют» из-за того, что в нём много титана, который в процессе металлургического передела переходит в титановый шлак, а также возникают проблемы с его последующей переработкой.

Кроме того, благодаря развитию супрамолекулярной химии и адаптации её теоретических основ к условиям флотации появилась возможность конструировать реагенты и их смеси с целью обеспечения наиболее эффективного связывания с субстратами – активными центрами поверхности минералов.

**Объект исследования** – фульвовая кислота *FulvAc*.

**Предмет исследования** – возможность её применения в качестве флотационного реагента-собиравателя ванадил-катионов (оксокатионов ванадия (IV)).

**Цель исследования** – изучение возможности флотационного извлечения ванадия из кислых продуктивных растворов.

**Методология и методы исследования.** В работе использованы специальные методы исследования – цифрового химического моделирования и анализа. Молекулярные дескрипторы нового реагента, механизм взаимодействия ванадия с *FulvAc*, а также моделирование флотационной системы «субстрат-реагент», в которой ценный компонент субстрат – ванадил-ион, а извлекающий агент – фульвовая кислота, проводили с применением систем программного обеспечения The Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) и Avogadro. В настоящее время CCDC включает комплекс программ, совместимых с последней версией Python 3.0: Mercury (программа для визуализации и анализа структурных данных), Cambridge Structural Database (постоянно пополняемая Кембриджская база данных), DASH (программа для анализа рентгеновской порошковой дифракции), Mogul (программа для валидации геометрии структур молекул), Hermes (программа визуализации кристаллических структур макромолекул и их комплексов с лигандами, в том числе полученных молекулярным докинггом и их анализа) и т. д. [12].

Реализовано лабораторное тестирование фульвовой кислоты как реагента-собиравателя ванадия из кислых растворов методом напорной флотации, где время флотации составляло 10 мин, а расход реагента – 0,5 г/м<sup>3</sup>.

**Разработанность темы.** В некоторых трудах [2; 6; 8] теоретически обосновано и практически доказано, что из «невысокообогатённого» железного концентрата при химическом обогащении можно получать три товарных продукта: железо, ванадий и титан марки X. Ч., два из которых – V и Ti – в настоящее время в России являются остродефицитными [10; 19].

Как установлено ранее [13; 15], в кислых растворах ванадий находится в оксованадиевом (IV) катионе – ванадил-катионе (VO)<sup>2+</sup>, который имеет самую высокую электрофильность и склонность к комплексообразованию по сравнению с другими формными состояниями ванадия. С химической точки зрения в водном растворе следует учитывать, что оксованадий (IV) ион находится преимущественно в виде аквакомплексных катионов состава [VO(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>]<sup>2+</sup> или [VO(H<sub>2</sub>O)<sub>5</sub>]<sup>2+</sup>. Ванадила (IV) катион образует лабильные комплексы, построенные либо квадратно-пирамидально, либо бипирамидально с аксиально искажённой структурой [9]. Координация ванадия катионов и оксокатионов в различных степенях окисления обеспечивается в основном атомами кислорода и азота структурных фрагментов [9; 11]. Таким образом, субстратом ванадия является оксованадиевый (IV) катион в извлекаемой структурной форме (VO)<sup>2+</sup>, [VO(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>]<sup>2+</sup> или [VO(H<sub>2</sub>O)<sub>5</sub>]<sup>2+</sup>, которые проявляют активные электрофильные свойства. Расчёт наиболее эффективной извлекаемой формы на основе квантово-химических параметров будет приведён в табл. 1.

**Результаты исследования.** Предложенный авторами реагент-собираатель – фульвовая кислота *FulvAc* (7,8-дигидрокси-3-метил-10-оксо-1Н,10Н-пирано (4,3-б) хромен-9-карбоновая) с молярной массой 308,242 г/моль,  $t_{\text{плав}} = 224$  °С, истинная химическая формула которой – C<sub>135</sub>H<sub>182</sub>O<sub>95</sub>N<sub>5</sub>S, однако для молекулярных расчётов используется фрагментарная каноническая формула C<sub>14</sub>H<sub>12</sub>O<sub>8</sub>, приведённая на рис. 1.

*FulvAc* является нетоксичной (5-й класс опасности) натуральной органической полимерной кислотой с большим количеством функциональных групп, жёлто-оранжевой окраски, которая извлекается из гумусового вещества дерновых / подзолюдерновых почв и верхового торфа методом щелочной деструкции. Она хорошо растворяется в воде, кислотах и щелочах [3–5].

Анализ физико-химических характеристик, проведённый с использованием ИК-спектрометрии [1] (рис. 2), показал, что ИК-спектр фульво-

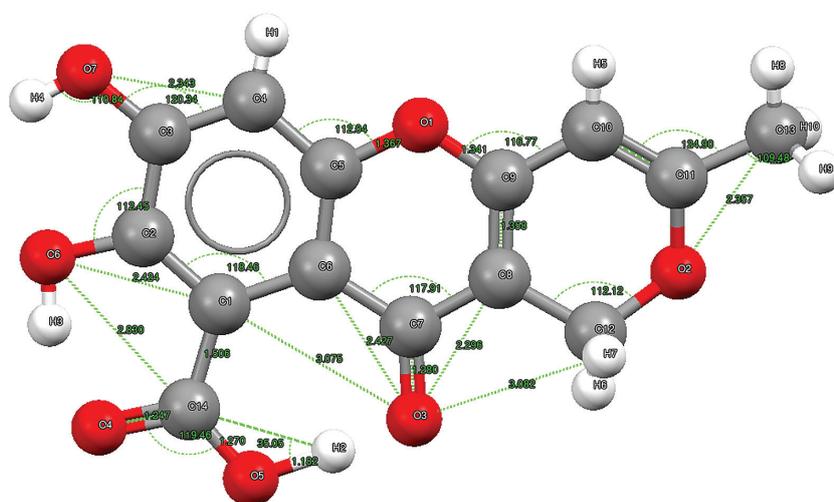
вой кислоты имеет типичный вид, характерный для гумусовых кислот, и содержит полосы поглощения, отвечающие проявлению колебаний карбоксильной группы и карбоксилат иона с частотами 1722 и 1636 см<sup>-1</sup> соответственно.

В коротковолновой области спектров в области 3440–3480 см присутствует полоса, соответствующая валентным колебаниям OH-группы. Алифатические фрагменты (метильные и метиленовые) проявляются пиками в области 2850–2950 см<sup>-1</sup>. Деформационные колебания C–H-связей находятся в спектрах в интервале значений частот 1370–1400 см. Таким образом, полоса с частотой 1720 см<sup>-1</sup> отвечает колебаниям свободной карбоксильной группы, с частотой 1610 см<sup>-1</sup> – карбоксилат иону, а пик в области 1245 см<sup>-1</sup> –

гидроксигруппам фульвокислот. Следовательно, в структуре фульвокислот присутствуют как свободная карбоксильная группа, так и её ионизированная форма.

*FulvAc* за счёт наличия фенольных X, гидроксильных OH, карбонильных C=O и карбоксильных COOH групп способны образовывать хелатные комплексы с катионами ванадия, а наличие в составе реагента гетероатомов O, N, S обуславливают нуклеофильные центры хемосорбции. Наличие данных соединений в составе реагента подтверждается и элементным анализом [1] (табл. 1).

С помощью системы программного обеспечения CCDC получены структурная и объёмная модели фульвовой кислоты, представленные на рис. 3.



**Рис. 1** Фрагмент канонической модели фульвовой кислоты / **Fig. 1.** Fragment of the canonical model of fulvic acid



**Рис. 2.** Фурье ИК-спектры фульвовой кислоты [14] / **Fig. 2.** Fourier IR spectra of fulvic acid [14]

Элементный состав фульвовых кислот (в расчете на беззольное вещество) / Elemental composition of fulvic acids (calculated as ash-free substance)

Вещество / Substance	Содержание элементов, % / Content of the elements, %				
	C	H	N	S	O
Фульвовая кислота / Fulvic acid	31,20	5,90	2,10	5,77	52,48

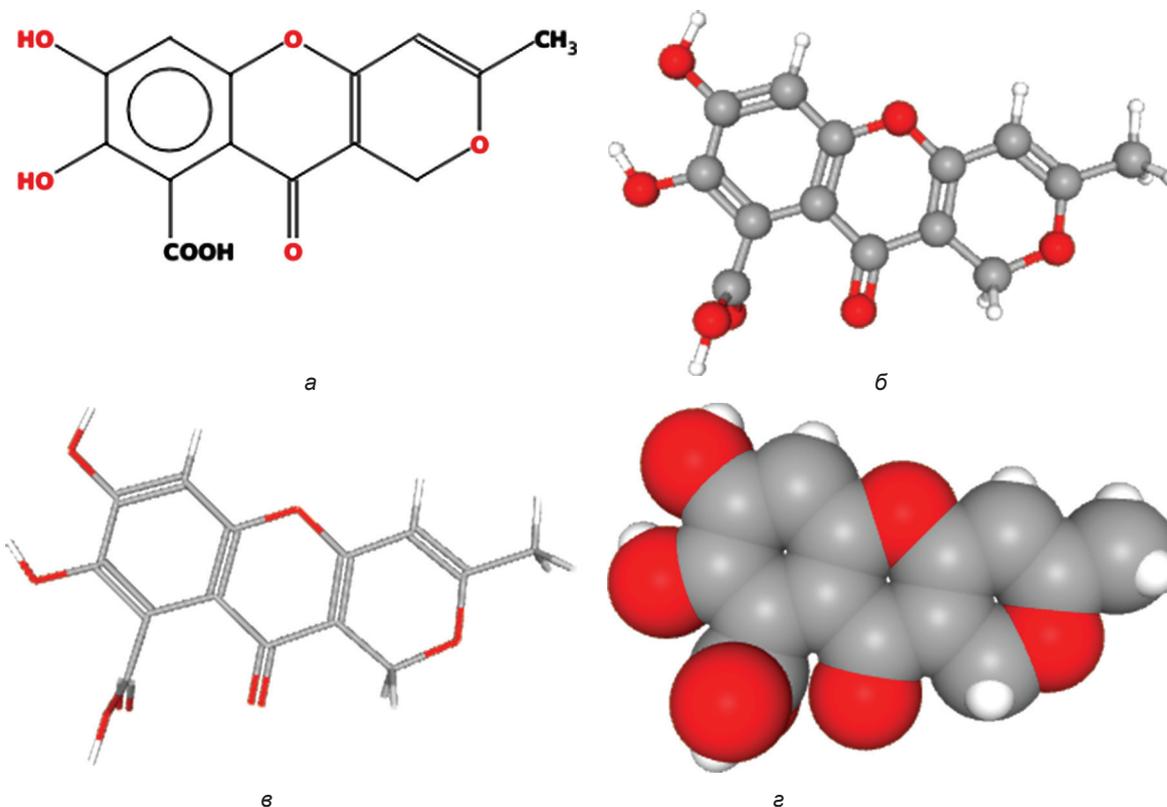


Рис. 3. Модели фульвовой кислоты, полученные при помощи CCDC:

а – структурная формула; б – шаростержневая модель; в – каркасная модель; г – молекулярная модель /  
**Fig. 3.** Fulvic acid models obtained using CCDC: a – structural formula; б – ball-and-stick model;  
 в – wireframe model; д – molecular model

Как видно из рис. 3, хромоновая кольцевая система по существу плоская, с гидроксильными и карбоновыми кислотными группами, копланарными кольцу.

Для прогнозной оценки эффективности и обоснования механизма действия *FulvAc* реагента-собираателя по отношению к субстратам оксокаатионов ванадия (IV) проведён анализ параметров реакционной способности (ПРС) на основе молекулярных расчётов

с использованием программного комплекса CCDC и программы химического моделирования структур Avogadro. Расчёты *FulvAc* извлекающего агента и возможных хемосорбированных субстратов ванадия приведены в табл. 2. Данные по значениям энергий граничных молекулярных орбиталей  $E_{\text{HOMO}}$  и  $E_{\text{LUMO}}$  хорошо коррелируют с аналогичными расчётами, приведенными в некоторых работах [14; 16–18].

Таблица 2 / Table 2

Параметры реакционной способности *FulvAc* и возможных извлекаемых форм субстрата ванадия /  
 Parameters of *FulvAc* reactivity and possible extractable forms of vanadium substrate

Соединения / Compounds	$E_{\text{HOMO}}$ эВ	$E_{\text{LUMO}}$ эВ	$\eta$ , эВ	$\chi$ , эВ	$I_E$ эВ	$I_N$ эВ
<i>FulvAc</i>	-5,77	-2,63	3,14	4,20	2,81	0,36
$\text{VO}^{2+}$	-4,53	-4,12	0,41	4,33	22,86	0,04
$[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$	-6,04	-3,78	2,23	4,91	5,41	0,18
$[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+}$	-4,13	-2,46	1,67	3,30	3,26	0,31

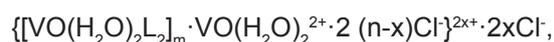
Как видно из табл. 2, катион  $[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$  характеризуется большим химическим потенциалом 4,91 эВ, что обуславливает большую реакционную способность тетраакванадидла (IV) во флотосистеме по сравнению с другими субстратами. Существенное различие между величинами верхней занятой молекулярной орбитали  $E_{\text{HOMO}}$  реагента и нижней свободной  $E_{\text{LUMO}}$  молекулярной орбитали субстрата ванадия указывает на осуществление «жестко-жесткого» взаимодействия между субстратом и реагентом преимущественно по зарядо-контролируемому механизму в соответствии с теориями Г. Льюиса и О. А. Рутова.

Для определения возможных стабильных флотационных систем «субстрат-реагент» рассчитаны молекулярные дескрипторы (табл. 3) – степень переноса заряда, энергия комплексообразования и число водородных связей.

Анализ молекулярных дескрипторов возможных флотосистем показал, что наиболее энергетически выгодной и устойчи-

вой системой «субстрат-реагент» является  $[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+} - (\text{FulvAc})$ , характеризующаяся  $\Delta E_{\text{комп}} = -233,8$  ккал/моль,  $\Delta N=0,780$  и числом водородных связей 5.

Согласно терминологии А. М. Гольмана, систему «субстрат – реагент» можно назвать и ванадилковым сублатом, образующимся в солянокислых растворах при проведении ионной флотации. Данный сублат представляет собой золь, частицы которого имеют следующую структуру:



где  $m, n, x$  – стехиометрические коэффициенты,  $L$  – *FulvAc*.

Извлечение частиц золя в пенный продукт осуществляется за счёт гетерофазной коагуляции.

Модель флотационной системы «субстрат – реагент»  $[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+} - (\text{FulvAc})$ , структура которой согласно молекулярным расчётам является энергетически выгодной и конформационно устойчивой, способной к самосборке, представлена на рис. 4.

Таблица 3 / Table 3

Молекулярные дескрипторы возможных флотационных систем «субстрат-реагент» /  
Molecular descriptors of possible "substrate-reagent" flotation systems

Система «субстрат-реагент» / "Substrate-reagent" system	$\Delta N$	$E_{\text{комп}}$ ккал/моль / $E_{\text{комп}}$ kcal/mol	Число водородных связей / Number of hydrogen bonds
$(\text{VO})^{2+} - (\text{FulvAc})$	0,048	-205,6	3
$[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+} - (\text{FulvAc})$	0,780	-233,8	5
$[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+} - (\text{FulvAc})$	0,612	-218,5	3

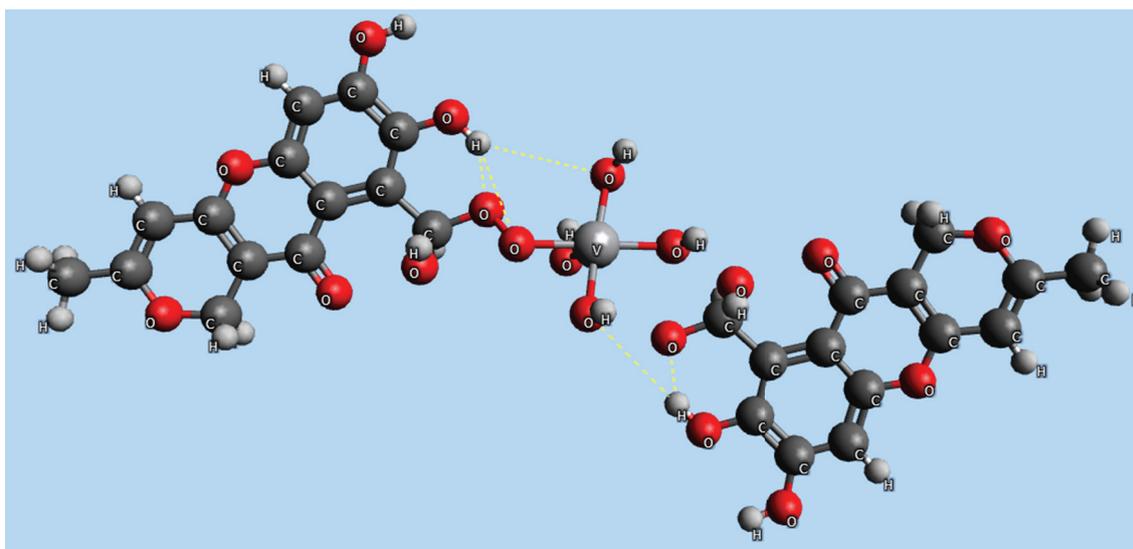
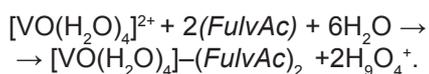


Рис. 4. Модель флотационной системы  $[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+} - (\text{FulvAc})$  с указанием 5Н-связей /  
Fig. 4. Model of the  $[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+} - (\text{FulvAc})$  flotation system indicating 5H-bonds

Длины водородных связей представленного металлокомплекса рассчитаны с помощью программного комплекса CCDC и составляют: 3,268; 2,819; 3,205; 3,410; 2,352, которые, соответственно, и подтверждены программой химического моделирования структур Avogadro. Пять водородных связей вносят значительный вклад в устойчивость образования хелатного комплекса  $[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+} - (\text{FulvAc})$ . Молекулярная масса комплекса составляет 717,436 г/моль.

Малорастворимый фульват ванадила образуется по следующей реакции:



Лабораторное тестирование *FulvAc* в качестве реагента – собирателя – показало селективность и избирательность его действия по отношению к субстрату ванадия. При расходе реагента 0,5 г/м<sup>3</sup> и времени проведения напорной флотации 10 мин извлечение ванадия, в пересчёте на марку X. Ч., составило не менее 92,05 %.

#### Выводы.

1. При переработке продуктивных растворов флотационным методом важным аспектом является количественное селективное извлечение наиболее ценных приоритетных компонентов доступными нетоксичными реагентами-собирающими, прогнозирование активности которых целесообразно осуществлять с использованием принципа «структура-свойство / активность-свойство», позволяющего квалифицированно выбирать реагенты-собирающие с заранее заданными свойствами, определёнными в зависимости от молекулярных дескрипторов реакционной

способности реагента-собирающего – по отношению к извлекаемым ценным компонентам.

2. Научно обоснован выбор эффективного реагента-собирающего для селективного извлечения оксокатионов четырёхвалентного ванадия из кислых продуктивных растворов методом флотации в соответствии с принципом «структура-свойство / активность-свойство» на основании молекулярных расчётов параметров реакционной способности субстратов, реагентов и извлекаемых систем «субстрат-реагент».

3. Нетоксичный новый реагент-собирающий – фульвовая кислота группы гумусовых веществ, которая характеризуется оптимальным набором молекулярных дескрипторов по отношению к извлекаемому компоненту ванадию, что и предопределяет его возможность применения.

4. Проведено компьютерное моделирование процессов образования систем «субстрат-реагент» с использованием программного обеспечения The Cambridge Crystallographic Data Centre. Определено, что наиболее энергетически выгодные и конформационно устойчивые к самосборке системы «ванадил-ион – реагент *FulvAc*» имеют состав  $[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+} - (\text{FulvAc})$ ,  $\Delta E_{\text{комп}} = -233,8$  ккал/моль,  $\Delta N = 0,780$  и число водородных связей 5.

5. Взаимодействие реагента *FulvAc* субстрата  $[\text{VO}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$  является «жёстко-жёстким» и осуществляется по зарядо-контролируемому механизму.

6. Лабораторное тестирование реагента-собирающего *FulvAc* показало селективность и избирательность его действия по отношению к субстрату ванадия с  $\epsilon_v = 92,05$  %.

#### Список литературы

1. Аввакумова Н. П., Кривопалова М. А., Глубокова М. Н., Фомин И. В. Физико-химические свойства фульватов бария и цинкапелоидов // Известия Самарского научного центра РАН. 2014. Т. 16, № 5. С. 1039–1041.
2. Атаджиди А. С., Гончаров К. В. О возможности получения TiO<sub>2</sub> и V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> из титаномагнетитового концентрата с высоким содержанием диоксида титана // Научный потенциал молодёжи и технический прогресс: материалы IV Всерос. науч.-практ. конф. СПб.: Индивидуальный предприниматель Жукова Елена Валерьевна, 2021. С. 43–44.
3. Бендерский Н. С., Куделина О. М., Ганцгорн Е. В., Сафроненко А. В. Фульвовая кислота – биологически активная добавка или лекарство? // Кубанский научный медицинский вестник. 2020. Т. 27, № 3. С. 78–91.
4. Броварова О. В. Трансформация гумусовых веществ дерново-подзолистой почвы при агрогенных воздействиях // Плодородие. 2021. № 6. С. 17–22.
5. Заварзина А. Г., Кравченко Е. Г., Константинов А. И., Перминова И. В., Чуков С. Н., Демин В. В. Сравнение свойств препаратов гуминовых кислот, выделенных из почв щелочной экстракцией в присутствии и отсутствии кислорода // Почвоведение. 2019. № 8. С. 910–922.
6. Медяник Н. Л., Смирнова А. В., Бессонова Ю. А., Коляда Л. Г. Физико-химические аспекты кислотного выщелачивания железного концентрата титаномагнетитовой руды Волковского месторождения // Чёрные металлы. 2023. № 6. С. 76–81.

7. Медяник Н. Л., Смирнова А. В., Коляда Л. Г., Бессонова Ю. А. Возможность химического извлечения ванадия и титана из железного концентрата титаномагнетитовой руды // Вестник Забайкальского государственного университета. 2022. Т. 28, № 7. С. 44–51.

8. Патент № 2684462 С1 Российская Федерация, МПК С22В 34/12, С22В 34/22, С21В 11/00. Способ преобразования и выделения ванадия, титана и железа из концентрата на основе ванадия-титана-железа в одну стадию: № 2017103146: заявл. 31.01.2017: опубл. 09.04.2019 / Т. Ци, Д. Чэнь, Илинъюнь [и др.]; заявитель ИНСТИТУТ ОФ ПРОУСЕС ЭНЖИНИРИНГ, ЧАЙНИЗ ЭКЭДЕМИ ОФ САЙЕНСИЗ.

9. Попова Т. В., Щеглова Н. В., Смотрина Т. В. Особенности формирования малонатных комплексов оксованадия(IV) в водных растворах // Перспективы внедрения инновационных технологий в медицине и фармации: сб. ст. V Всерос. науч.-практ. конф. с междунар. участием / под общ. ред. С. Г. Марданлы, В. В. Помазанова, В. А. Киселёвой. Орехово-Зуево: Государственный гуманитарно-технологический университет, 2018. С. 184–191.

10. Ремизова Л. И. Направления развития мировой сырьевой базы титана // Разведка и охрана недр. 2020. № 6. С. 64–74.

11. Тусупбаев С. Н., Кудайбергенова Г. М. Расчёт стандартных электродных потенциалов электрохимического восстановления ванадиевых соединений: подбор функционала плотности // Вестник КазНУ. Серия «Химическая». 2020. № 1. С. 14–21.

12. Clare F. Macrae, Ioana Sovago, Simon J. Cottrell etc. Mercury 4.0: from visualization to analysis, design and prediction // Journal of Applied Crystallography. 2020. No. 53. Pp. 226–235.

13. Costa Pessoa J. Thirty years through vanadium chemistry // Journal of Inorganic Biochemistry. 2015. Vol. 147. Pp. 4–24.

14. Guglielmo Albani, Luca Schio, Francesco Goto, Alberto Calloni, Alessio Orbelli Biroli, Alberto Bossi, Francesco Melone, Simona Achilli, Guido Fratesi, Carlo Zucchetti, Luca Floreano, Gianlorenzo Bussetti. Ordered assembly of non-planar vanadyltetraphenylporphyrins on ultra-thin iron oxide // Royal Society of Chemistry. 2022. Vol. 24. Pp. 17077–17087.

15. Karmakar M. An overview on the synthesis, structure, and application of vanadyl complexes with hydrazonic acid ligands based on salicylaldehyde or its derivatives // Inorganica Chimica Acta. 2024. Pp. 121969.

16. Mandeep Kaur, Raj Kaushal. Synthesis and in-Silico Molecular Modelling, DFT Studies, Antiradical and Antihyperglycemic Activity of Novel Vanadyl Complexes Based on Chalcone Derivatives // Journal of Molecular Structure. 2021. Pp. 132–176.

17. Nangamso Nathaniel Nyangiwe. Modelling the interactions of engineerednanoparticles with natural organic matterusing in silico techniques // Submitted in fulfilment of the requirements for the degree Doctor of Philosophy in the Faculty of Engineering, Built Environment and Information Technology. University of Pretoria. 2020. Pp. 120.

18. Sonika Sharma, Debasish Das, Biswajit Sadhy, Neeraj Sharma. Synthesis, characterization and biological activity of oxidovanadium (IV) hydroxamate complexes supported by density functional theory // Inorganic Chemistry. 2021.

19. Upward momentum build sin vanadium market. 2021. URL: <http://www.argusmedia.com/en/news/2187258-upward-momentum-builds-in-vanadium-market> (дата обращения: 12.01.2024). Текст: электронный.

## References

1. Avvakumova N. P., Krivopalova M. A., Glubokova M. N., Fomin I. V. Physico-chemical properties of barium fulvates and zincapeloids. Izvestiya Samara Scientific Center of the Russian Academy of Sciences, vol. 16, no. 5, pp. 1039–1041, 2014. (in Rus.)

2. Atmadzhidi A. S., Goncharov K. V. On the possibility of obtaining TiO<sub>2</sub> and V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> from titanium magnetite concentrate with a high content of titanium dioxide. Scientific potential of youth and technical progress: materials of the IV All-Russian Scientific and Practical Conference. Saint Petersburg: Individual entrepreneur Zhukova Elena Valeryevna, 2021. Pp. 43–44. (in Rus.)

3. Bendersky N. S., Kudelina O. M., Ganzgorn E. V., Safronenko A. V. Fulvic acid – a biologically active additive or medicine? Kuban Scientific Medical Bulletin, vol. 27, no. 3, pp. 78–91, 2020. (in Rus.)

4. Brovarova O. V. Transformation of humus substances of sod-podzolic soil under agrogenic influences. Fertility, no. 6, pp. 17–22, 2021. (in Rus.)

5. Zavarzina A. G., Kravchenko E. G., Konstantinov A. I., Perminova I. V., Chukov S. N., Demin V. V. Comparison of properties of preparations of humic acids isolated from soils by alkaline extraction in the presence and absence of oxygen. Soil Science, no. 8, pp. 910–922, 2019. (in Rus.)

6. Medyanik N. L., Smirnova A. V., Bessonova Yu. A., Kolyada L. G. Physico-chemical aspects of acid leaching of iron concentrate of titanomagnetite ore of the Volkovsky deposit. Ferrous Metals, no. 6, pp. 76–81, 2023. (in Rus.)

7. Medyanik N. L., Smirnova A. V., Kolyada L. G., Bessonova Yu. A. The possibility of chemical extraction of vanadium and titanium from iron concentrate of titanomagnetite ore. Transbaikal State University Journal, vol. 28, no. 7. pp. 44–51, 2022. (in Rus.)

8. Patent No. 2684462 C1 Russian Federation, IPC C22B 34/12, C22B 34/22, C21B 11/00. A method for converting and separating vanadium, titanium and iron from a vanadium-titanium-iron-based concentrate in one stage: No. 2017103146: application 31.01.2017: published 09.04.2019 / T. Qi, D. Chen, Yilinyun [et al.]; the applicant is the INSTITUTE OF PROCESSES ENGINEERING, CHINA ACADEMY OF SCIENCES. (in Rus.)
9. Popova T. V., Shcheglova N. V., Smotrina T. V. Features of the formation of oxovanadium(IV) malonate complexes in aqueous solutions // Prospects for the introduction of innovative technologies in medicine and pharmacy: collection of articles V. All-Russian scientific and practical conference with international participation / under the general editorship of S. G. Mardany, V. V. Pomazanov, V. A. Kiseleva. Orekhovo-Zuyevo: State University of Humanities and Technology. 2018. Pp. 184–191. (in Rus.)
10. Remizova L. I. Directions of development of the world raw material base of titanium. Exploration and protection of the subsoil, no. 6, pp. 64–74, 2020. (in Rus.)
11. Tusupbaev S. N., Kudaibergenova G. M. Calculation of standard electrode potentials for electrochemical reduction of vanadium compounds: selection of density functional. Bulletin of the Treasury. The "Chemical" Series, no. 1, pp. 14–21, 2020. (in Rus.)
12. Clare F. Macrae, Ioana Sovago, Simon J. Cottrell etc. Mercury 4.0: from visualization to analysis, design and prediction. Journal of the Applied Crystallography, no. 53, pp. 226–235, 2020. (In Eng.)
13. Costa Pessoa J. Thirty years through vanadium chemistry. Journal of Inorganic Biochemistry, vol. 147, pp. 4–24, 2015. (In Eng.)
14. Guglielmo Albani, Luca Schio, Francesco Goto, Alberto Calloni, Alessio Orbelli Biroli, Alberto Bossi, Francesco Melone, Simona Achilli, Guido Fratesi, Carlo Zucchetti, Luca Floreano, Gianlorenzo Bussetti. Ordered assembly of non-planar vanadyltetraphenylporphyrins on ultra-thin iron oxide. Royal Society of Chemistry, pp. 17077–17087, 2022. (In Eng.)
15. Karmakar M. et al. An overview on the synthesis, structure, and application of vanadyl complexes with hydrazonic acid ligands based on salicylaldehyde or its derivatives. Inorganica Chimica Acta, pp. 121969, 2024. (In Eng.)
16. Mandeep Kaur, Raj Kaushal. Synthesis and in-Silico Molecular Modelling, DFT Studies, Antiradical and Antihyperglycemic Activity of Novel Vanadyl Complexes Based on Chalcone Derivatives. Journal of Molecular Structure, pp. 132–176, 2021. (In Eng.)
17. Nangamso Nathaniel Nyangiwe. Modelling the interactions of engineered nanoparticles with natural organic matter using in silico techniques. Submitted in fulfilment of the requirements for the degree Doctor of Philosophy in the Faculty of Engineering, Built Environment and Information Technology. University of Pretoria, pp. 120–128, 2020. (In Eng.)
18. Sonika Sharma, Debasish Das, Biswajit Sadhy, Neeraj Sharma. Synthesis, characterization and biological activity of oxidovanadium (IV) hydroxamate complexes supported by density functional theory. Inorganic Chemistry, 2021. (In Eng.)
19. Upward momentum builds in vanadium market. 2021. Web. 12.01.2024. <http://www.argusmedia.com/en/news/2187258-upward-momentum-builds-in-vanadium-market>. (In Eng.)

#### **Информация об авторах**

*Медяник Надежда Леонидовна*, д-р техн. наук, профессор, зав. кафедрой химии, Магнитогорский государственный технический университет им. Г. И. Носова, г. Магнитогорск, Россия; [medyanikmagnitka@mail.ru](mailto:medyanikmagnitka@mail.ru). Область научных интересов: обогащение полезных ископаемых, комплексная технология переработки горно-обогатительного сырья.

*Смирнова Анастасия Владиславовна*, старший преподаватель кафедры химии, Магнитогорский государственный технический университет им. Г. И. Носова, г. Магнитогорск, Россия; [a-kremneva@mail.ru](mailto:a-kremneva@mail.ru). Область научных интересов: обогащение полезных ископаемых, комплексная технология переработки горно-обогатительного сырья.

*Карелина Юлия Александровна*, канд. экон. наук, доцент, доцент кафедры химии, Магнитогорский государственный технический университет им. Г. И. Носова, г. Магнитогорск, Россия; [96bessonova74@mail.ru](mailto:96bessonova74@mail.ru). Область научных интересов: обогащение полезных ископаемых, комплексная технология переработки горно-обогатительного сырья.

*Басков Владислав Андреевич*, старший лаборант кафедры химии, Магнитогорский государственный технический университет им. Г. И. Носова, г. Магнитогорск, Россия; [baskov-vvvl@mail.ru](mailto:baskov-vvvl@mail.ru). Область научных интересов: обогащение полезных ископаемых, комплексная технология переработки горно-обогатительного сырья.

#### **Information about the authors**

*Medyanik Nadezhda L.*, Doctor of Technical Sciences, Professor, Head of the Chemistry Department, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia; [medyanikmagnitka@mail.ru](mailto:medyanikmagnitka@mail.ru). Research interests: mineral processing, integrated technology for processing mining and processing raw materials.

*Smirnova Anastasia V.*, Senior Lecturer, Chemistry Department, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia; a-kremneva@mail.ru. Research interests: mineral processing, integrated technology for processing mining and processing raw materials.

*Karelina Yuliya A.*, Candidate of Economic Sciences, Associate Professor, Assistant Professor, Chemistry Department, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia; 96bessonova74@mail.ru. Research interests: mineral processing, integrated technology for processing mining and processing raw materials.

*Baskov Vladislav A.*, Senior Laboratory Assistant, Chemistry Department, Magnitogorsk State Technical University named after G. I. Nosov, Magnitogorsk, Russia; baskov-vvvl@mail.ru. Research interests: mineral processing, integrated technology for processing mining and processing raw materials

#### **Вклад авторов в статью**

---

Медяник Н. Л. – разработка теоретических основ выбора реагента-собираателя на основании принципа «структура-свойство / активность-свойство», написание текста.

Смирнова А. В. – адаптация системы программного обеспечения "The Cambridge Crystallographic Data Centre" для изучения, визуализации и анализа систем «субстрат-реагент», написание текста.

Карелина Ю. А. – проведение флотационного лабораторного тестирования.

Басков В. А. – сбор материалов, библиографии.

#### **The authors` contribution to the article**

Medyanik N. L. – development of theoretical foundations for choosing a collecting reagent based on the "structure-property/activity-property" principle, writing the text.

Smirnova A. V. – adaptation of "The Cambridge Crystallographic Data Centre" software system for the study, visualization and analysis of "substrate-reagent" systems, writing text.

Karelina Yu. A. – flotation laboratory testing.

Baskov V. A. – collecting materials, bibliographies.

#### **Для цитирования**

---

Медяник Н. Л., Смирнова А. В., Карелина Ю. А., Басков В. А. Изучение возможности применения фульвой кислоты для флотационного извлечения ванадия на основе расчета молекулярных дескрипторов // Вестник Забайкальского государственного университета. 2024. Т. 30, № 2. С. 72–81. DOI: 10.21209/2227-9245-2024-30-2-72-81.

#### **For citation**

Medyanik N. L., Smirnova A. V., Karelina Yu. A., Baskov V. A. Studying of the Possibility of Using Fulvic Acid for Flotation Extraction of Vanadium Based on the Calculation of Molecular Descriptors // Transbaikai State University Journal. Vol. 30, no. 2. P. 72–81. DOI: 10.21209/2227-9245-2024-30-2-72-81.