



## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СВОЙСТВ СТРУКТУР КАЛЬЦИЙСОДЕРЖАЩИХ МИНЕРАЛОВ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ИХ СЕЛЕКТИВНОСТИ

Дегодя Е.Ю.<sup>1</sup>, Ляо Синцзинь<sup>2</sup>, Медяник Н.Л.<sup>1</sup>, Шадрунова И.В.<sup>3</sup>, Карелина Ю.А.<sup>1</sup>, Гмызина Н.В.<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup> Шэньянская химическая компания Flotrea; Исследовательский центр по исследованию геологических и минеральных ресурсов Гуанси-Чжуанского автономного района, Китай

<sup>3</sup> Институт проблем комплексного освоения недр РАН, Москва, Россия

**Аннотация. Постановка задачи (актуальность работы).** Весьма близкие свойства флюорита и кальцита определяют сложность их флотационного разделения при обогащении средне- и высококарбонатных флюоритовых руд. Химическое родство флюорита и кальцита, обусловленное наличием в узлах кристаллической решетки минералов катионов  $\text{Ca}^{2+}$ , определяет их физико-химические характеристики, ограничивает эффективность селективного флотационного разделения этих минералов и требуют новых подходов совершенствования реагентных режимов. **Цель работы.** Определение адсорбционных центров в структурах флюорита и кальцита для изыскания селективно действующих реагентов при обогащении труднообогатимых флюоритовых руд. **Используемые методы.** Результаты получены с использованием программного комплекса Materials Studio в модуле Forcite Plus, метода Charge Equilibration (QE) для расчёта зарядов на атомах кальцийсодержащих минералов, метода Эвальда для вычисления кулоновских взаимодействий. **Новизна.** Впервые в работе представлен сравнительный анализ реакционной способности поверхности флюорита и кальцита через изучение по Малликену распределения атомных зарядов и оценки влияния электронных заселенностей для связи  $\text{Ca} - \text{X}$  (где  $\text{X} - \text{F}, \text{O}, \text{C}$ ) при изучении свойств кристаллических решеток разделяемых минералов. **Результат.** Путем молекулярно-динамического моделирования выявлены активные хемосорбционные центры флюорита и кальцита, представленные атомами  $\text{Ca}$  с общим зарядом, соответственно равным  $1,41 e^-$  для флюорита и  $1,45 e^-$  для кальцита. Установлено, что контрастность флотационного разделения между флюоритом и кальцитом практически отсутствует и может быть достигнута подбором современных флотационных реагентов с заранее заданными свойствами, определёнными молекулярно-динамическими расчётами реакционной способности извлекаемого ценного компонента флюорита. **Практическая значимость.** Повышение селективности флотации труднообогатимых флюоритовых руд достигается применением предварительной дезактивации кальцита в начале технологического цикла при последующей флотации активированного флюорита.

**Ключевые слова:** кристаллическая решетка, флюорит, кальцит, заряд по Малликену, флотация, смачиваемость, моделирование

© Дегодя Е.Ю., Ляо Синцзинь, Медяник Н.Л., Шадрунова И.В., Карелина Ю.А., Гмызина Н.В., 2026

### Для цитирования

Молекулярно-динамические аспекты прогнозирования свойств структур кальцийсодержащих минералов для повышения их селективности / Дегодя Е.Ю., Ляо Синцзинь, Медяник Н.Л., Шадрунова И.В., Карелина Ю.А., Гмызина Н.В. // Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова. 2026. Т. 24. №2. С. 5-13. <https://doi.org/10.18503/1995-2732-2026-24-2-5-13>



Контент доступен под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License.  
The content is available under Creative Commons Attribution 4.0 License.

# MOLECULAR DYNAMIC ASPECTS OF PREDICTING THE STRUCTURAL PROPERTIES OF CALCIUM-BEARING MINERALS TO INCREASE THEIR SELECTIVENESS

Degodya E.Yu.<sup>1</sup>, Liao Xingjin<sup>2</sup>, Medyanik N.L.<sup>1</sup>, Shadrinova I.V.<sup>3</sup>, Karelina Yu.A.<sup>1</sup>, Gmyzina N.V.<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup> Shenyang Florrea Chemical Co., Guangxi Zhuang Autonomous Region Geological and Mineral Resources Research Center, China

<sup>3</sup> Research Institute of Comprehensive Exploitation of Mineral Resources (IPKON), Moscow, Russia

**Abstract. Problem Statement (Relevance).** The similar properties of fluorite and calcite make their flotation separation difficult during the beneficiation of medium- and high-carbonate fluorite ores. The chemical affinity between fluorite and calcite, resulting from the presence of  $\text{Ca}^{2+}$  cations in the crystal lattice nodes of both minerals, determines their physical and chemical characteristics, limits the efficiency of their selective flotation separation, and necessitates new approaches to improving reagent regimes. **Objectives.** The research is aimed at identifying adsorption centers in the structures of fluorite and calcite for the development of selectively acting reagents in the beneficiation of refractory fluorite ores. **Methods Applied.** The results were obtained using the Materials Studio software package (Forcite Plus module), the Charge Equilibration (QE) method for calculating atomic charges in calcium-bearing minerals, and the Ewald method for evaluating Coulombic interactions. **Originality.** For the first time, a comparative analysis of the surface reactivity of fluorite and calcite is presented based on the study of Mulliken atomic charge distribution and the assessment of electron population effects on Ca-X bonds (where X is F, O, C) in the crystal lattices of the minerals under separation. **Result.** Molecular dynamic modeling identified active chemisorption centers in fluorite and calcite, represented by Ca atoms with total charges of 1.41 e for fluorite and 1.45 e for calcite, respectively. It was established that the contrast in flotation separation between fluorite and calcite is practically absent and can be achieved only through the selection of modern flotation reagents with predetermined properties identified by molecular dynamic calculations of the reactivity of the valuable fluorite component. **Practical Relevance.** Improved selectivity in the flotation of refractory fluorite ores can be achieved by preliminary deactivation of calcite at the beginning of the processing cycle, followed by flotation of activated fluorite.

**Keywords:** crystal lattice, fluorite, calcite, Mulliken charge, flotation, wettability, modeling

## For citation

Degodya E.Yu., Liao Xingjin, Medyanik N.L., Shadrinova I.V., Karelina Yu.A., Gmyzina N.V. Molecular Dynamic Aspects of Predicting the Structural Properties of Calcium-Bearing Minerals to Increase Their Selectiveness. *Vestnik Magnitogorskogo Gosudarstvennogo Tekhnicheskogo Universiteta im. G.I. Nosova* [Vestnik of Nosov Magnitogorsk State Technical University]. 2026, vol. 24, no. 2, pp. 5-13. <https://doi.org/10.18503/1995-2732-2026-24-2-5-13>

## Введение

Флюорит (плавиковый шпат), согласно распоряжению Правительства Российской Федерации от 30.08.2022 № 2473-р, входит в перечень основных видов стратегического минерального сырья, а распоряжением Правительства Российской Федерации № 939-р от 16.04.2024 он внесён в перечень дефицитных видов твёрдых полезных ископаемых. В соответствии со Стратегией развития минерально-сырьевой базы до 2050 года, утверждённой распоряжением Правительства Российской Федерации от 11.07.2024 № 1838-р, флюорит относится к третьей группе полезных ископаемых по степени обеспеченности потребностей национальной экономики и необходимого экспорта запасами минерального сырья (с учётом геологических перспектив наращивания минерально-сырьевой базы), внутреннее потребление которых в существенной степени обеспечивается импортом [1].

Российская сырьевая база флюоритовых руд значительна, однако для гарантированного обеспечения

потребностей российской промышленности в данном сырье необходимо совершенствовать технологии обогащения. Анализ практики обогащения флюоритовых руд показал, что в результате истощения легкообогащаемых руд в переработку вовлекаются труднообогащаемые карбонатно-флюоритовые руды со средним и низким флюорито-карбонатным модулем [1]. Флотация является основным методом обогащения таких руд и единственным способом получения высококачественных флюоритовых концентратов, содержащих 92-97% флюорита, которые необходимы в химической, металлургической и других отраслях промышленности. Однако близкие свойства флюорита и кальцита определяют сложность их флотационного разделения и обуславливают неудовлетворительные показатели процесса флотации.

С целью совершенствования технологии обогащения средне- и высококарбонатных флюоритовых руд и получения высококачественных флюоритовых концентратов на протяжении последних лет проводились практические изыскания [2]. В работах Л.А. Киенко, Л.А.

Саматовой, О. В. Вороновой предприняты попытки флотации тонковкрапленных карбонатно-флюоритовых руд без подогрева пульпы с использованием комбинаций жирнокислотных собирателей различных по составу и строению углеводородного радикала в сочетании с фторидом натрия. Также предложено использование композиций модификаторов, состоящих из фторидов натрия и смесей на основе аммонийно-фтористых солей с лигно-сульфонатами. Ими же было изучено влияние ультразвуковой обработки пульпы на селективность флотации при обогащении карбонатно-флюоритовых руд [3-7]. Авторы изобретения [8] предложили применение модифицированного жирнокислотного собирателя с целью повышения селективности флотации и технологических показателей обогащения. В работе [9] показаны пути повышения эффективности рудоподготовки труднообогатимых флюоритовых руд, которые достигаются в получении узкокласифицированного неошламованного дробленого продукта перед измельчением и/или обогащением, а также повышении производительности дробления и сокращении затрат электроэнергии на рудоподготовку, а в работе [10] предприняты попытки интенсификации процесса флотации тонких частиц путем применения электролизной обработки жидкой фазы пульпы. Однако обзор литературных данных показал, что до настоящего времени исследования и научные изыскания по совершенствованию и разработке технологии обогащения труднообогатимых флюоритовых руд с низким флюорито-карбонатным модулем носят фрагментный характер.

Труднообогатимость флюоритового сырья, связанная прежде всего с близкими свойствами кальцийсодержащих минералов, требует исследований в рамках прогнозной оценки особенностей кристаллических решеток флюорита и кальцита. Актуальность проблематики нацелена на выявление реакционных центров в структурах данных кристаллов, способных участвовать в химических реакциях для избирательной флотации флюорита и дезактивации кальцита. Из анализа литературных данных установлено, что предпринимались попытки молекулярного моделирования для выбора селективных собирателей для флотации флюорита, однако при этом не учитывалось влияние сродства флюорита и кальцита [11]. Контрастность флотационного разделения между флюоритом и кальцитом практически отсутствует, что указывает на применение предварительной дезактивации кальцита в начале технологического цикла и последующую флотацию активированного флюорита. Изыскание реагента-собирателя, содержащего в своем составе молекулы, селективно хемoadсорбирующиеся на поверхности флюорита, требует применения принципа «структура – свойство/активность – свойство», что позволяет квалифицированно выбирать флотационные реагенты с заранее заданными свойствами, определёнными в зависимости от квантово-химических, физико-химических и структурных параметров реакционной способности извлекаемого ценного компонента [12, 13].

### Теория, материалы и методы исследования

Необходимость углубленного изучения свойств кристаллических решеток флюорита и кальцита обусловлена близостью флотационных свойств данных минералов и трудностью их разделения в процессе флотации. Для исследований кристаллических структур флюорита и кальцита применен метод молекулярно-динамического моделирования, позволяющий описать электронные структуры кристаллов и занятость молекулярных орбиталей.

**Флюорит** – кальцийсодержащий минерал с химической формулой  $\text{CaF}_2$ , относится к кубической сингонии (рис. 1). В его структуре восемь атомов фтора образуют кубическую упаковку вокруг атома кальция, формируя кубическую плотную упаковку. Атом  $\text{Ca}^{2+}$  связан с ионами  $\text{F}^-$  в восьмикоординационной структуре, тогда как каждый ион  $\text{F}^-$  образует тетраэдрическую четырёхкоординационную связь с соседними четырьмя атомами Ca [14].

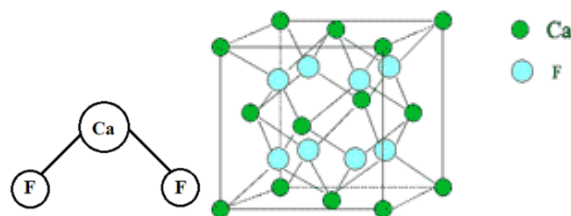


Рис. 1. Кристаллическая решетка флюорита  
Fig. 1. Crystal lattice of fluorite

**Кальцит** представляет собой карбонатный минерал с химической формулой  $\text{CaCO}_3$ , относящийся к ромбической сингонии (рис. 2). В его молекулярной формуле присутствуют ионы  $\text{Ca}^{2+}$  и  $\text{CO}_3^{2-}$ . Как видно из рис. 2, атомы в кристаллической решётке кальцита подчиняются принципу плотнейшей упаковки: атомы Ca занимают междуузлия решётки, а ионы  $\text{CO}_3^{2-}$  образуют гексагональную плотную упаковку вокруг них. Из анализа элементарной ячейки кальцита видно, что атом Ca формирует шестикоординационную структуру с атомами O из окружающих ионов  $\text{CO}_3^{2-}$  [14].

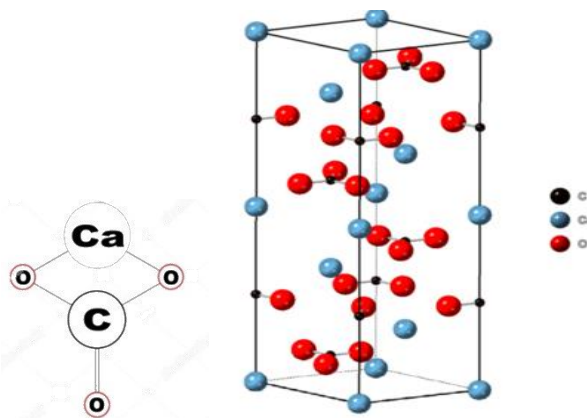


Рис. 2. Кристаллическая решетка кальцита  
Fig. 2. Crystal lattice of calcite

Согласно литературным данным, плоскость спайности {104} кальцита является наиболее стабильной, поэтому для исследования была выбрана именно эта плоскость. Для флюорита наиболее стабильной считается плоскость спайности {111}, следовательно, объектом исследования стала плоскость {111}. Поверхностные модели минералов, построенные на основе этих стабильных плоскостей, представлены на рис. 3. Обе модели созданы из оптимизированных кристаллических структур минералов, при этом в качестве объекта исследования использовались крупные суперъчейки.

**Полученные результаты и их обсуждение**

Для описания группировок энергетических уровней электронов в кристаллах определены оптимизированные зонные структуры и плотности состояний, которые представлены на рис. 4. Расчётная ширина запрещённой зоны для кальцита составляет 4,966 эВ, что характерно для полупроводника. У флюорита ширина зоны выше и составляет 7,049 эВ, что затрудняет электронные переходы. В обоих минералах металлические ионы представлены атомами Са, взаимодействия которого с окружающими атомами отражены на графиках плотности состояний (см. рис. 4).

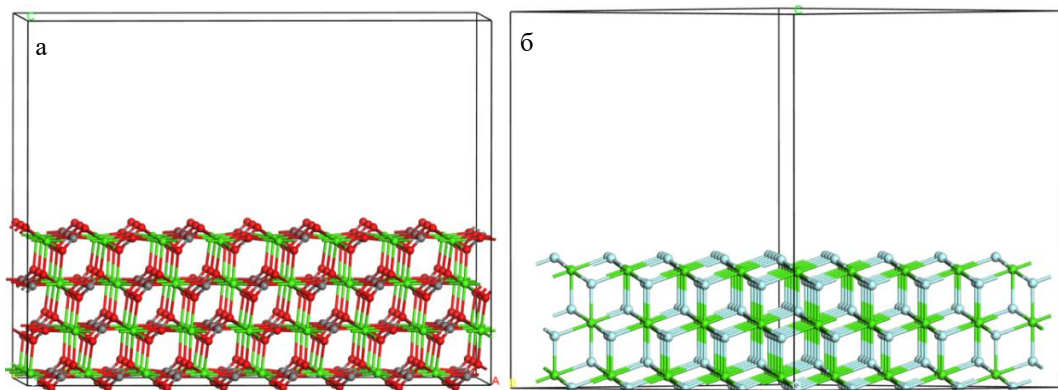


Рис. 3. Суперъчейки минеральной поверхности: а – кальцит; б – флюорит  
 Fig. 3. Supercells of mineral surfaces: a is calcite; б is fluorite

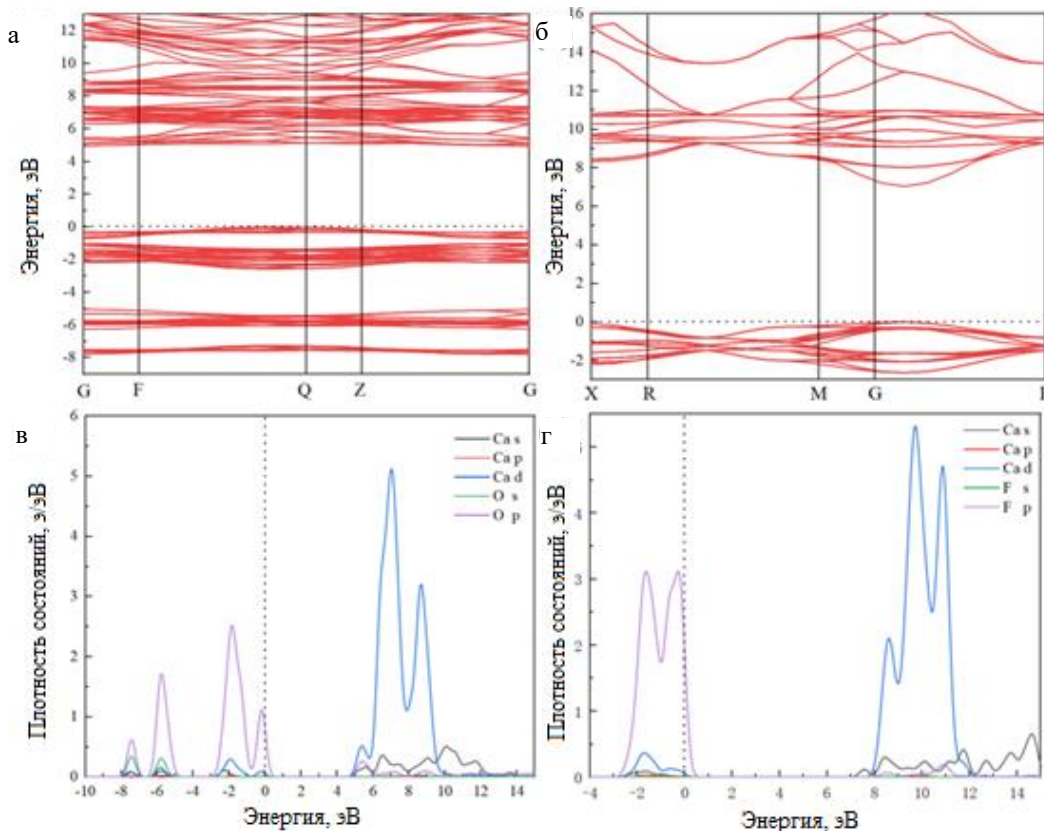


Рис. 4. Карта зон минеральной ячейки и плотности состояний: а, в – кальцит; б, г – флюорит  
 Fig. 4. Mineral cell zone and state density map: а, в are calcite; б, г are fluorite

Из анализа **рис. 4** видно, что вблизи уровня Ферми доминируют  $p$ -орбитали неметаллов (O и F). На графике плотности состояний Ca — O для кальцита (**рис. 4, в**) основные взаимодействия сосредоточены в диапазоне от -4 до 1 эВ. Глубокие энергетические уровни преимущественно соответствуют  $3d$ -орбиталям Ca. Поскольку эти уровни расположены глубоко, их активность относительно низка. Кроме того, в интервале от 1 до 4 эВ наблюдается явление расщепления энергетических уровней. В энергетическом диапазоне от -3 до 1 эВ преимущественно происходит взаимодействие  $2p$ -орбиталей O с  $3s$ - и  $3d$ -орбиталями Ca. В глубоком энергетическом диапазоне от -7 до -5 эВ для связи Ca — O в кальците в основном наблюдается взаимодействие  $2s$ -орбиталей O с  $3d$ -орбиталями Ca. В высокоэнергетическом диапазоне от 5 до 10 эВ доминирует взаимодействие  $3d$ -орбиталей Ca с  $2p$ -орбиталями O, при этом пики  $3d$ -орбиталей Ca имеют большую амплитуду, что указывает на высокую концентрацию электронов на этих орбиталях.

Во флюорите основные взаимодействия связаны со связью Ca — F (**рис. 4, г**). Вблизи уровня Ферми преимущественно наблюдается взаимодействие  $3s$ - и  $3d$ -орбиталей атомов Ca с  $2p$ -орбиталями F. В интервале от 1 до 7 эВ присутствует явление расщепления уровней, причём по сравнению с кальцитом это расщепление выражено значительно сильнее. В глубоком энергетическом диапазоне от 8 до 12 эВ происходит гибридизация  $3d$ -орбиталей Ca,  $p$ -орбиталей F и  $3s$ -орбиталей Ca. На глубоких уровнях преимущественно присутствуют  $3d$ -орбитали Ca, причём они, аналогично кальциту, демонстрируют высокие пики.

Следовательно, в обоих кристаллах основные взаимодействия связаны с  $3d$ - и  $3s$ -орбиталями Ca и неметаллическими атомами.

Проведен анализ распределения зарядов по Малликену для поверхностных атомов кальцита и флюорита. Из **таблицы** видно, что на  $d$ -орбиталях атомов Ca на поверхности кальцита и флюорита присутствуют электроны. Общий заряд атомов Ca на поверхности кальцита составляет  $1,45e$ , на поверхности флюорита —  $1,41e$ . Поскольку заряд атомов Ca на поверхности кальцита больше, чем на поверхности флюорита, считается, что поверхностные атомы Ca в кальците обладают большим положительным зарядом, что повышает вероятность их взаимодействия с молекулами реагентов. Атомы O на поверхности кальцита имеют отрицательный заряд, равный  $-0,75e$ , который преимущественно локализован на  $p$ -орбиталях. Атомы F на поверхности флюорита имеют заряд, равный  $-0,71e$ , также сосредоточенный на  $p$ -орбиталях. Значения отрицательного заряда O на флюорите несколько ниже, чем на кальците, что указывает на его меньшую реакционную способность.

В элементарной ячейке кальцита электронная заселенность по Малликену для связей C — O составляет  $-0,83$  и  $-0,84$ , для связи O — O  $-0,21$ , а для связи Ca — O  $-0,11$ . Среди них наибольшая заселенность

наблюдается для связей C — O, что указывает на сильное ковалентное взаимодействие. Ковалентный характер связи Ca — O отсутствует, а отрицательное значение заселенности для связи O — O, равное  $-0,21$  означает, что эта связь соответствует антисвязывающей орбитали и характеризуется слабым взаимодействием.

Таблица. Заряд по Малликену поверхностных атомов минералов

Table. Mulliken charges of surface atoms in the minerals

Тип	Атом	$s$	$p$	$d$	Итого	Заряд/е
Кальцит	Ca	2,12	6,00	0,42	8,54	1,45
	O	1,81	4,94	0,00	6,75	-0,75
	C	0,85	2,38	0,00	3,23	0,77
Флюорит	Ca	2,13	6,00	0,46	8,59	1,41
	F	1,91	5,74	0,00	7,71	-0,71

Во флюорите электронная заселенность по Малликену для связи Ca — F составляет  $-0,08$ , а для связи F — F  $-0,03$ . Из чего следует, что характер связи Ca — F слабый, причём значительно слабее по сравнению со связью Ca — O в кальците. Кроме того, отрицательные значения заселенностей для связей F — F и O — O ( $-0,03$  и  $-0,21$  соответственно) подтверждают их антисвязывающую природу. Таким образом, среди изученных минералов ковалентный характер связи наблюдается для связи O — O ( $-0,21$ ) в кальците, за которой следует ионная связь Ca — O, а в молекуле флюорита более слабая связь F — F ( $-0,03$ ) предшествует ионной связи Ca — F.

Для оценки смачиваемости поверхности исследуемых минералов методом молекулярно-динамического моделирования были получены профили относительной концентрации молекул воды вдоль вертикального направления к поверхностям кальцита {104} и флюорита {111}. Эти данные характеризуют адсорбционные особенности воды на поверхностях минералов, а изменение гидрофильности поверхности оценивается через относительную концентрацию молекул воды в гидратной плёнке. Молекулярно-динамическое моделирование структур кальцийсодержащих минералов проводилось с применением Forcite Plus программного комплекса Materials Studio с использованием: силового поля Universal, метода QEQ для расчёта зарядов, метода Эвальда для вычисления кулоновских взаимодействий. Полученные результаты были проанализированы с помощью функции радиального распределения (RDF) для определения структуры адсорбции воды на поверхности минералов.

Для количественного сравнения распределения молекул воды на поверхностях кальцита {104} и флюорита {111} были рассчитаны зависимости относительной концентрации молекул воды от расстояния вдоль вертикальной оси (**рис. 5**).

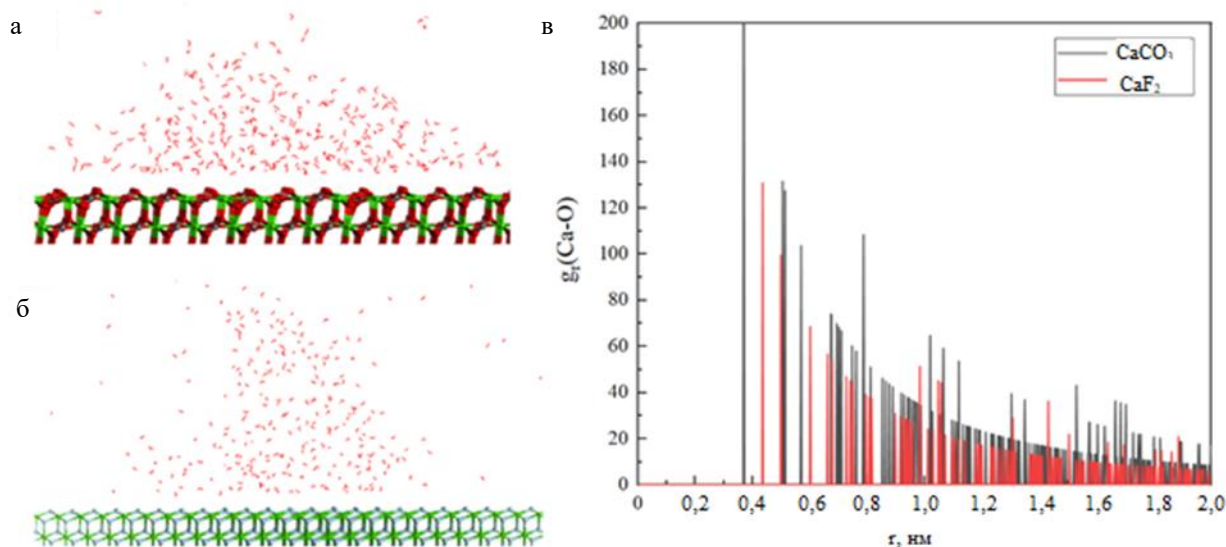


Рис. 5. Вычислительные модели воды с поверхностью кальцита (а) и поверхностью флюорита (б), радиальная функция распределения атома О в воде с поверхностями кальцита и флюорита на расстоянии (в)  
 Fig. 5. Computational models of water with the calcite surface (a) and the fluorite surface (б); radial distribution function of the oxygen atom in water with calcite and fluorite surfaces at distance (в)

Результаты исследований (рис. 5, а, б) показывают, что на обеих поверхностях чётко наблюдаются многослойные структуры гидратной оболочки воды, подтверждающие формирование выраженных гидратных плёнок. Согласно результатам на рис. 5, в, определено, что первый пик атомов кислорода воды для кальцита расположен на расстоянии 0,38 нм от поверхности, тогда как для флюорита – на расстоянии 0,43 нм. Кроме того, молекулы воды равномерно распределены за пределами ~0,4 нм от поверхности минералов, что указывает на отсутствие адсорбции. Эти результаты свидетельствуют, что расстояние между атомами кислорода воды и поверхностью минералов практически одинаково, то есть кальцит и флюорит обладают схожей смачиваемостью, что не способствует флотационному разделению этих минералов.

### Заключение

Исследованы кристаллические структуры кальцийсодержащих минералов путем молекулярно-динамического моделирования и доказано химическое сродство флюорита и кальцита, обуславливающее отсутствие их селективного флотационного разделения. Выявлено наличие хемосорбционных центров у флюорита и кальцита – катионы  $\text{Ca}^{2+}$ , способные активно взаимодействовать с реакционными центрами молекул флотационных реагентов. В частности, из анализа диаграмм плотности состояний поверхностей двух минералов видно, что на поверхностях кальцита и флюорита основное взаимодействие возможно между атомами Са и неметаллами X (где X – F, O, C). На поверхности кальцита вблизи уровня Ферми наблюдается гибридизация *p*-орбиталей О с *3d*-орбиталями Са, пересекающая уровень Ферми. В

энергетическом диапазоне от 4 до 5 эВ доминирует антисвязывающее взаимодействие *3d*-орбиталей Са и *2p*-орбиталей О.

При изучении плотности состояний структуры кальцита чётко видно, что локализация плотности состояний для связи Са — О на поверхности значительно возрастает, следовательно, реакционная способность поверхности увеличивается, что облегчает взаимодействие с молекулами реагентов. На поверхности флюорита взаимодействие атомов Са с F преимущественно происходит в диапазоне -3–1 эВ, где наблюдается гибридизация *3d*-орбиталей Са с *p*-орбиталями F. Однако это взаимодействие существенно слабее. Кроме того, концентрация электронов вблизи уровня Ферми у флюорита значительно ниже, чем у кальцита. В диапазоне от -3 до 1 эВ флюорит демонстрирует положительные значения, поэтому реакционная способность кальция флюорита заметно уступает Са в кальците.

Анализ заселенностей связей по Малликену показал, что в кальците значительная электронная заселенность наблюдается для связи С — О, далее для связи Са — О, что указывает на сильное ковалентное взаимодействие между ними. Во флюорите характер связи Са — F слабый, причём значительно слабее по сравнению со связью Са — О в кальците.

Моделированием взаимодействия молекул воды с поверхностью кальцийсодержащих минералов для оценки смачиваемости поверхности было установлено, что кальцит и флюорит обладают схожей смачиваемостью, что затрудняет их флотационное разделение.

Создать контрастность разделения кальцийсодержащих минералов при наличии однотипных актив-

ных центров взаимодействия с молекулами реагентов и практически одинаковой смачивостью поверхности кальцита и флюорита не представляется возможным. Для создания условий избирательной флотации минеральных частиц флюорита от кальцита необходимо последний первоначально убрать из зеркала флотации.

Таким образом, выявленное химическое средство флюорита и кальцита, обусловленное наличием в узлах кристаллической решетки минералов катионов  $\text{Ca}^{2+}$ , определяет их физико-химические характеристики поверхности разделяемых минеральных частиц. Молекулярно-динамическими расчётами доказано, что избирательное флотационное разделение между флюоритом и кальцитом практически отсутствует и может быть достигнуто путем предварительной дезактивации кальцита в начале технологического цикла при последующей флотации активированного флюорита подбором современных флотационных реагентов с заранее заданными свойствами, определёнными реакционной способностью извлекаемого ценного компонента флюорита.

#### Список источников

1. Государственный доклад «О состоянии и использовании минерально-сырьевых ресурсов Российской Федерации в 2022 году» / Министерство природных ресурсов и экологии Российской Федерации. М., 2023. 640 с.
2. Дегодя Е.Ю., Шадрунова И.В., Медяник Н.Л. Современное состояние и тенденции в развитии технологий обогащения флюоритовых руд // Инновационные процессы комплексной и глубокой переработки природного и нетрадиционного минерального сырья (Плаксинские чтения – 2025), г. Екатеринбург, 29 сентября – 4 октября 2025 г. : материалы международной конференции. Екатеринбург : Изд-во «Форт-Диалог Исеть», 2025. С. 74-76.
3. Применение смесей собирателей при флотации тонковкрапленных карбонатно-флюоритовых руд / Л. А. Киенко, Л. А. Саматова, О. В. Воронова, Л. Н. Плюснина // Обогащение руд. 2009. № 3. С. 25-28. EDN KWAEMB.
4. К проблеме снижения температуры флотации при обогащении карбонатно-флюоритовых руд / Л. А. Киенко, Л. А. Саматова, В. Воронова, С. А. Кондратьев // Физико-технические проблемы разработки полезных ископаемых. 2010. № 3. С. 97-104. EDN MSNTEN.
5. Киенко Л.А., Саматова Л.А., Воронова О.В. К проблеме повышения селективности флотации при обогащении карбонатно-флюоритовых руд месторождений Приморского края // Горный журнал. 2013. № 12. С. 63-67. EDN RUCOWJ.
6. Киенко Л.А., Воронова О.В. Использование высокоселективных модификаторов при флотации карбонатно-флюоритовых руд Приморья // Горный информационно-аналитический бюллетень (научно-технический журнал). 2015. № S30. С. 213-219. EDN UQCPER.
7. Киенко Л.А., Воронова О.В., Шагина Ж.А. Повышение эффективности флотации флюорита на основе применения ультразвуковой обработки пульпы // Гор-

ный информационно-аналитический бюллетень (научно-технический журнал). 2016. № S21. С. 233-241. EDN WRKMBR.

8. Патент № 2826138 С1 Российская Федерация, МПК В03D 1/02 (2006/01). Способ флотации карбонатно-флюоритовых руд : заявл. 26.12.2023 : опубл. 04.09.2024 / А. И. Сосипаторов, А. Н. Слепнев, А. Г. Перетолчин, А. В. Фефелов; патентообладатель ООО «Эгитинский ГОК Плюс».
9. Патент № 2840149 С1 Российская Федерация, МПК В02С 23/00, В02С 1/02. Способ дробления флюоритовых руд : заявл. 04.12.2024 : опубл. 19.05.2025 / Е. Ю. Дегодя, С. Е. Гавришев, И. А. Пыталев, Н. В. Гмызина; заявитель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Магнитогорский государственный технический университет им. Г. И. Носова».
10. Киенко Л.А., Воронова О.В. Исследования перспектив применения электролизной обработки жидкой фазы пульпы с целью интенсификации процесса флотации тонких частиц // Научные основы и практика переработки руд и техногенного сырья : материалы XXVII Международной научно-технической конференции, проводимой в рамках XX Уральской горнопромышленной декады, Екатеринбург, 07–08 апреля 2022 года. Екатеринбург: ИП Русских А.В., 2022. С. 186-190. EDN MKKOIB.
11. Соложенкин П.М., Дегодя Е.Ю., Шавакулева О.П. Модифицированные жирные кислоты, их молекулярное моделирование для прогноза флотации руд шельночзмельных элементов // Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова. 2015. № 3(51). С. 16-22. EDN ULEZEF.
12. Медяник Н.Л. Реализация принципа «структурасвойство/активность-свойство для направленного выбора реагентов-собирателей // Новые технологии обогащения и комплексной переработки труднообогатимого природного и техногенного минерального сырья: матер. междунар. совещания «Плаксинские чтения». Екатеринбург: Изд-во «Форт-Диалог-Исеть», 2021. С. 213–217.
13. Медяник Н.Л., Чантурия В.А., Шадрунова И.В. Квантово-химический метод выбора реагента-собирателя и его использование в процессе флотационного извлечения катионов цинка и меди (II) из техногенных вод горных предприятий // Физико-технические проблемы разработки полезных ископаемых. 2012. № 1. С. 154-164.
14. Минералогическая энциклопедия: пер. с англ. / под ред. К. Фрея. Л.: Недра, 1985. 512 с.

#### References

1. State Report “On the state and use of mineral resources of the Russian Federation in 2022. Ministry of Natural Resources and Environment of the Russian Federation. Moscow, 2023. 640 p. (In Russ.).
2. Degodya E.Yu., Shadrunova I.V., Medyanik N.L. Current state and trends in the development of fluorite ore beneficiation technologies. *Innovatsionnye protsessy kompleksnoy i glubokoy pererabotki prirodnogo i netraditsionnogo mineralnogo syr'ya (Plaksinskie chteniya – 2025). Materialy mezhdunarodnoy konferentsii* [Innovative pro-

- cesses of integrated and deep processing of natural and non-traditional mineral raw materials (Plaksinsky Readings – 2025). Proceedings of the international conference]. Yekaterinburg, Fort-Dialog Iset Publishing House, 2025, pp. 74-76. (In Russ.).
3. Kienko L.A., Samatova L.A., Voronova O.V., Plyusnina L.N. Application of collector mixtures in the flotation of fine-grained carbonate-fluorite ores. *Obogashchenie Rud* [Ore Beneficiation]. 2009;(3):25-28. (In Russ.) EDN KWAEMB.
  4. Kienko L.A., Samatova L.A., Voronova V., Kondratev S.A. On reducing flotation temperature in the beneficiation of carbonate-fluorite ores. *Fiziko-tehnicheskie problemy razrabotki poleznykh iskopaemykh* [Journal of Mining Science]. 2010;(3):97-104. (In Russ.) EDN MSNTEN.
  5. Kienko L.A., Samatova L.A., Voronova O.V. Improving flotation selectivity in beneficiation of carbonate-fluorite ores from Primorsky Krai deposits. *Gorniy Zhurnal* [Mining Journal], 2013;(12):63-67. (In Russ.) EDN RUCOWJ.
  6. Kienko L.A., Voronova O.V. Application of highly selective modifiers in the flotation of carbonate-fluorite ores of Primorye. *Gornyy informatsionno-analiticheskiy byulleten* [Mining Informational and Analytical Bulletin]. 2015;(S30):213-219. (In Russ.) EDN UQCPER.
  7. Kienko L.A., Voronova O.V., Shagina Zh.A. Improving fluorite flotation efficiency by applying ultrasonic pulp treatment]. *Gornyy informatsionno-analiticheskiy byulleten* [Mining Informational and Analytical Bulletin]. 2016;(S21):233-241. (In Russ.) EDN WRKMBR.
  8. Sosipatorov A.I., Slepnev A.N., Peretolchin A.G., Fefelov A.V. *Sposob flotatsii karbonatno-flyuoritovykh rud* [Method for flotation of carbonate-fluorite ores]. Patent RU, no. 2826138 C1, 2024.
  9. Degodya E.Yu., Gavrishev S.E., Pytalev I.A., Gmyzina N.V. *Sposob drobleniya flyuoritovykh rud* [Method for crushing fluorite ores]. Patent RU, no. 2840149 C1, 2025.
  10. Kienko L.A., Voronova O.V. Prospects for electrolytic treatment of the liquid phase of pulp to intensify fine particle flotation. *Nauchnye osnovy i praktika pererabotki rud i tekhnogennoogo syrya. Materialy XXVII Mezhdunarodnoy nauchno-tehnicheskoy konferentsii, provodimoy v ramkakh XX Uralskoy gornopromyshlennoy dekady* [Scientific foundations and practice of ore and technogenic raw material processing. Proceedings of the XXVII International Scientific and Technical Conference dedicated to the XX Ural mining-industrial decade ]. Yekaterinburg, 2022, pp. 186-190. (In Russ.)
  11. Solozhenkin P.M., Degodya E.Yu., Shavakuleva O.P. Modified fatty acids and their molecular modeling for predicting flotation of alkaline-earth element ores. *Vestnik Magnitogorskogo Gosudarstvennogo Tekhnicheskogo Universiteta im. G.I. Nosova* [Vestnik of Nosov Magnitogorsk State Technical University]. 2015;(3(51)):16-22. (In Russ.) EDN ULEZEF.
  12. Medyanik N.L. Implementation of the “structure-property/activity-property” principle for directed selection of collector reagents. *Novye tekhnologii obogashcheniya i kompleksnoy pererabotki trudnoobogatimogo prirodnogo i tekhnogennoogo mineralnogo syrya. Materialy mezhdunarodnogo soveshchaniya «Plaksinskie chteniya»* [New technologies for beneficiation and complex processing of refractory natural and technogenic mineral raw materials. Proceedings of the International Meeting “Plaksinsky Readings”]. Yekaterinburg, Fort-Dialog-Iset Publishing House, 2021, pp. 213-217. (In Russ.)
  13. Medyanik N.L., Chanturiya V.A., Shadrunova I.V. Quantum-chemical method for selecting a collector reagent and its application in flotation recovery of zinc and copper (II) cations from mining wastewaters. *Fiziko-tehnicheskie problemy razrabotki poleznykh iskopaemykh* [Journal of Mining Science]. 2012;(1):154-164. (In Russ.)
  14. Frey K. *Mineralogicheskaya entsiklopediya* [Encyclopedia of Mineralogy]. Translated from English. Leningrad: Nedra, 1985, 512 p. (In Russ.)

Поступила 14.01.2026; принята к публикации 21.02.2026; опубликована 30.06.2026  
Submitted 14/01/2026; revised 21/02/2026; published 30/06/2026

**Дегодя Елена Юрьевна** – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры геологии, маркшейдерского дела и обогащения полезных ископаемых, кандидат технических наук, Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова, Магнитогорск, Россия.  
Email: magur@mail.ru. ORCID 0000-0002-4220-7371

**Ляо Синцинь** – доктор философии, старший инженер, Шэньянская химическая компания Флогтеа; Исследовательский центр по исследованию геологических и минеральных ресурсов Гуанси-Чжуанского автономного района, Китай.  
E-mail: xingjinliao@126.com. ORCID 0009-0009-5616-1122

**Медяник Надежда Леонидовна** – доктор технических наук, профессор кафедры химии, Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова, Магнитогорск, Россия.  
Email: chem@magtu.ru. ORCID 0000-0003-0973-8899

**Шадрунова Ирина Владимировна** – доктор технических наук, профессор, заведующий отделом горной экологии, Институт проблем комплексного освоения недр РАН, Москва, Россия.  
Email: shadrunova\_@mail.ru. ORCID 0000-0003-3520-2705

**Карелина Юлия Александровна** – кандидат экономических наук, доцент кафедры химии, Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова, Магнитогорск, Россия.  
Email: medyanik@inbox.ru. ORCID 0000-0001-8027-3567

**Гмызина Наталья Викторовна** – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры геологии, маркшейдерского дела и обогащения полезных ископаемых, кандидат технических наук, Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова, Магнитогорск, Россия.  
Email: gmnat1307@mail.ru. ORCID 0000-0002-7959-45-04

**Elena Yu. Degodya** – PhD (Eng.), Associate Professor, Associate Professor of the Department of Geology, Mine Surveying and Mineral Processing, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia.  
Email: magur@mail.ru. ORCID 0000-0002-4220-7371

**Liao Xingjin** – PhD (Eng.), Senior Engineer at Shenyang Florrea Chemical Co., Ltd. and the Guangxi Zhuang Autonomous Region Geological and Mineral Resources Research Center, China.  
Email: xingjinliao@126.com. ORCID 0009-0009-5616-1122

**Nadezhda L. Medyanik** – DrSc (Eng.), Professor of the Department of Chemistry, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia.  
Email: chem@magtu.ru. ORCID 0000-0003-0973-8899

**Irina V. Shadrunova** – DrSc (Eng.), Professor, Head of the Department of Mountain Ecology, Research Institute of Comprehensive Exploitation of Mineral Resources (IPKON, Moscow, Russia).  
Email: shadrunova\_@mail.ru. ORCID 0000-0003-3520-2705

**Yulia A. Karelina** – PhD (Eng.), Associate Professor of the Department of Chemistry, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia.  
Email: medyanik@inbox.ru. ORCID 0000-0001-8027-3567

**Natalia V. Gmyzina** – PhD (Eng.), Associate Professor, Associate Professor of the Department of Geology, Mine Surveying and Mineral Processing, Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia.  
Email: gmnat1307@mail.ru. ORCID 0000-0002-7959-45-04