



Imam Khomeini International University
Vol. 9, No. 1, Spring 2024



نشریه مهندسی منابع معدنی
Journal of Mineral Resources Engineering
(JMRE)

Research Paper

Comparison of NaOL Adsorption on the Hematite 001 Surface with Water Molecules Adsorption on the Hydrophilic Hematite Surface Using Molecular Dynamics Simulation

Hashemi Sh.¹, Noaparast M.^{2*}, Mabudi A.³

- 1- Ph.D Student, Dept. of Mining Engineering, Faculty of Engineering, University of Tehran, Tehran, Iran
- 2- Professor, Dept. of Mining Engineering, Faculty of Engineering, University of Tehran, Tehran, Iran
- 3- Assistant Professor, Dept. of Mining Engineering, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran

Received: 03 May 2023

Accepted: 28 Aug. 2023

Abstract: This article reports on a molecular dynamics simulation-based research that investigates the adsorption of sodium oleate (NaOl) on the of the highly hydrophilic 001 hematite surface in froth flotation and its effect on the mineral's wettability properties. The molecular dynamics simulation was conducted using LAMMPS. The wettability properties were evaluated by comparing the thermodynamic characteristics of two surfaces, one net and the other coated by the collector. Surface energy, center of mass location of water molecules, water density in contact layers and adjacent to the surface, and fluid permeability coefficient were used as indicators of wettability. The simulation results showed that the 001 surface of hematite is highly hydrophilic due to strong electrostatic interactions and feasible hydrogen bond formation sites. However, with the adsorption of the collector, the surface became hydrophobic due to a sharp decrease in surface tension, reduction of intermolecular interactions, and loss of hydrogen bond formation sites. The results confirm that the selective absorption of the collector on the hematite surface enables its floatability.

Keywords: Adsorption, Molecular dynamics simulation, Hematite, Sodium oleate, Wettability.

How to cite this article

Hashemi, Sh., Noaparast, M., and Mabudi, A. (2024). "Comparison of NaOL adsorption on the hematite 001 surface with water molecules adsorption on the hydrophilic hematite surface using molecular dynamics simulation". Journal of Mineral Resources Engineering, 9(1): 103-114.

DOI: [10.30479/JMRE.2023.18726.1641](https://doi.org/10.30479/JMRE.2023.18726.1641)

*Corresponding Author Email: noparast@ut.ac.ir

COPYRIGHTS



©2024 by the authors. Published by Imam Khomeini International University.

This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0) (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)

INTRODUCTION

The flotation mechanism of oxide and silicate minerals depends mainly on their electrical properties, solubility, surface charge, collector chain length, and metal-collector salt stability [1-6]. Hematite (iron oxide) enrichment is a crucial process as it is one of the primary sources of iron ore and steel production [7]. Flotation and magnetic separation are commonly used for hematite enrichment or removal [8]. Unlike Sulphides, hematite is highly hydrophilic due to the presence of oxygen in its chemical composition, which forms hydrogen bonds. Therefore, flotation is not possible without the presence of collectors [8,9]. Molecular dynamics simulation (MDS) is a method that analyses the microscopic properties of a system, such as the mass and interactions of atoms or molecular structure, to predict its macroscopic properties [9]. This simulation method is advantageous because it can study many conditions and states of the system from a molecular perspective [10].

METHODS

In this research, the mechanism of sodium oleate (NaOl) adsorption on the 001 surface of hematite in the flotation environment and its effect on the wettability of this mineral were investigated using MDS. The simulation was carried out in the LAMMPS open source code environment. Wettability was investigated by comparing the thermodynamic characteristics of the hematite surface with and without the collector, including surface energy, center of mass of water molecule location, water density in contact layers and adjacent to the surface, and fluid permeability coefficient.

FINDINGS AND ARGUMENT

The results showed that, without the addition of a collector, strong electrostatic interactions between water molecules and the mineral surface caused the absorption of water molecules, resulting in system equilibrium being achieved in a very short time (approximately 0.5 nanoseconds) and a diffusion coefficient. However, on hematite surfaces coated with a collector, the time increased to 4 nanoseconds due to the sharp decrease in surface tension and the reduction of intermolecular interactions between the hematite surface and water molecules, resulting in hydrophobicity of the surface (see Figure 1). The results of the water density distribution profile at different distances from the hematite surface indicated changes in the wetting regime of the surface due to the absorption of the collector. Additionally, the difference in water density in different fluid layers near the solid surface confirmed the hydrophobicity of the hematite surface covered by the collector. Furthermore, the collector led to a decrease in the number of hydrogen bonds, confirming the important role of hydrogen bond formation in the hydrophilic behavior of this mineral.

The variation in wettability regime and hydrophobicity of the hematite surface after collector adsorption was mainly due to the loss of absorption sites and possible locations for hydrogen bond formation. The center mass of water molecules diagram on the hematite surface along the z-axis was in good agreement with other results and confirmed that the center of gravity of water molecules moved away from the hematite surface (indicating hydrophobicity of the hematite surface).

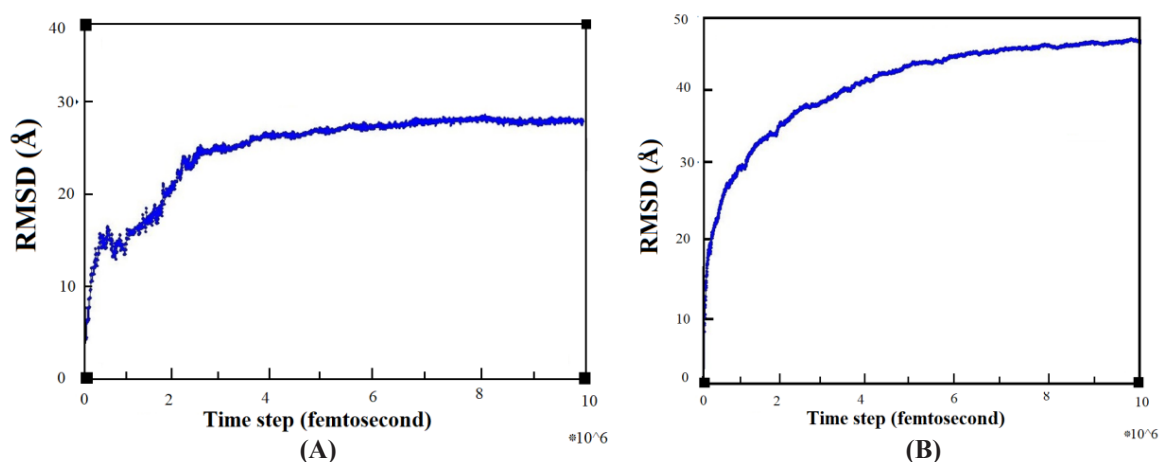


Figure 1. A: Carbon RMSD in sodium oleate composition and B: hydrogen RMSD in water molecule

CONCLUSIONS

The simulation findings generally showed good agreement with the laboratory results [11,12], revealing that the selective absorption of sodium oleate collector on the hematite surface leads to a hydrophobic surface that enables hematite floatability.

REFERENCES

- [1] Xie, R., Zhu, Y., Liu, J., and Li, Y. (2021). "The flotation behavior and adsorption mechanism of a new cationic collector on the separation of spodumene from feldspar and quartz". *Separation and Purification Technology*, 264: 118445.
- [2] Silva, K., Filippov, L. O., Piçarra, A., Flilippova, I. V., Lima, N., Skliar, A., Faustino, L., and Leal Filho, L. (2021). "New perspectives in iron ore flotation: Use of collector reagents without depressants in reverse cationic flotation of quartz". *Minerals Engineering*, 170: 107004.
- [3] Huang, Z., Shuai, S., Wang, H., Liu, R., Zhang, S., Cheng, C., Hu, Y., Yu, X., He, G., and Fu, W. (2022). "Froth flotation separation of lepidolite ore using a new Gemini surfactant as the flotation collector". *Separation and Purification Technology*, 282: 119122.
- [4] Li, H., Zheng, H., Chen, Q., Kasomo, R. M., Leng, J., Weng, X., Song, S., Xiao, L., and Tian, C. (2020). "Flotation separation of rutile from almandine using octadecyl amine polyoxyethylene ether as collector". *Physicochemical Problems of Mineral Processing*, 56(4): 653-664.
- [5] Xu, L., Jiao, F., Jia, W., Pan, Z., Hu, C., and Qin, W. (2020). "Selective flotation separation of spodumene from feldspar using mixed anionic/nonionic collector". *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 594: 124605.
- [6] Javanshir, S., Massinaei, M., and Tavakoli, M. (2018). "Desulfuration of Sangan Iron ore concentrate using flotation". *Journal of Mineral Resources Engineering*, 3(3): 77-86. (In Persian)
- [7] Clout, J. M. F., and Manuel, J. R. (2003). "Fundamental investigations of differences in bonding mechanisms in iron ore sinter formed from magnetite concentrates and hematite ores". *Powder Technology*, 130(1-3): 393-399.
- [8] Jin, J., Gao, H., Chen, X., and Peng, Y. (2016). "The separation of kyanite from quartz by flotation at acidic pH". *Minerals Engineering*, 92: 221-228.
- [9] Jensen, F. (2017). "Introduction to computational chemistry". John Wiley & Sons, 46-115.
- [10] Hollingsworth, S. A., and Dror, R. O. (2018). "Molecular dynamics simulation for all". *Neuron*, 99(6): 1129-1143.
- [11] Zhang, R., Xing, Y., Xia, Y., Luo, J., Tan, J., Rong, G., and Gui, X. (2020). "New insight into surface wetting of coal with varying coalification degree: An experimental and molecular dynamics simulation study". *Applied Surface Science*, 511: 145610.
- [12] Sun, L., Ge, S., Jing, D., Liu, S., and Chen, X. (2021). "Wetting Mechanism and Experimental Study of Synergistic Wetting of Bituminous Coal with SDS and APG1214". *ACS Omega*, 7(1): 780-785.



مقایسه شبیه سازی جذب کلکتور سدیم اولئات بر سطح OOI هماتیت با جذب مولکول آب بر سطح آبدوست هماتیت به روش دینامیک مولکولی

شرمین هاشمی^۱، محمد نوع پرست^{۲*}، امیر معبودی^۳

۱- دانشجوی دکتری، گروه فرآوری مواد معدنی، دانشکده مهندسی معدن، پردیس دانشکده‌های فنی، دانشگاه تهران، تهران
۲- استاد، گروه فرآوری مواد معدنی، دانشکده مهندسی معدن، پردیس دانشکده‌های فنی، دانشگاه تهران، تهران
۳- استادیار، گروه فرآوری مواد معدنی، دانشگاه صنعتی سهند، تبریز

پذیرش: ۱۴۰۲/۰۶/۰۶

دریافت: ۱۴۰۲/۰۲/۱۳

چکیده

این مقاله، یک تحقیق بر پایه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است که به بررسی مکانیزیم جذب سدیم اولئات (NaOI) بر روی سطح OOI کانی اکسیدی و به شدت آبدوست هماتیت در محیط فلوتاسیون و تاثیر آن بر خواص ترشوندگی این کانی می‌پردازد. شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی انجام‌یافته در این تحقیق، در محیط کد متن‌باز لمپس انجام شد. بررسی خواص ترشوندگی سطح هماتیت نیز با مقایسه ویژگی‌های ترمودینامیکی دو سطح بکر و پوشش داده شده آن به وسیله کلکتور انجام گرفت. شاخص‌های مورد بررسی در مقایسه ترشوندگی دو سطح بکر و پوشش داده شده به وسیله کلکتور، انرژی سطح، محل قرارگیری مرکز جرم مولکول‌های آب، دانسیته آب در لایه‌های تماس و مجاور سطح و ضریب نفوذ سیال در دو سیستم بود. در مجموع نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها نشان داد، سطح OOI هماتیت به دلیل چگالی بالای بار الکتریکی تجمع یافته، به شدت آبدوست بوده و تنش سطحی بالایی دارد. وجود اتم‌های اکسیژن در سطح هماتیت نیز سبب ایجاد سایت‌های تشکیل پیوند هیدروژنی بر روی سطح کانی شده و آبدوستی سطح را تشدید می‌کند. در مقابل، با جذب سدیم اولئات بر روی سطح هماتیت، کاهش شدید در میزان انرژی سطحی و کاهش تمایل سطح به جذب مولکول‌های آب مشاهده شد. همچنین، میزان تنش سطحی و بار الکتریکی تمرکز یافته بر روی سطح که سبب آبدوستی سطح می‌شد، تا حد زیادی کاهش یافت. همچنین، پوشش سطح به وسیله کلکتور احتمال تشکیل پیوندهای هیدروژنی مابین مولکول‌های آب و سطح هماتیت را از بین برد و در نهایت موجب تغییر رژیم ترشوندگی سطح کانی از آبدوست به آبگریز شد.

کلمات کلیدی

جذب سطحی، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، هماتیت، سدیم اولئات، رژیم ترشوندگی.

استناد به این مقاله

هاشمی، ش.، نوع پرست، م.، معبودی، ا.؛ ۱۴۰۳؛ "مقایسه شبیه‌سازی جذب کلکتور سدیم اولئات بر سطح OOI هماتیت با جذب مولکول آب بر سطح آبدوست هماتیت به روش دینامیک مولکولی". نشریه مهندسی منابع معدنی، دوره نهم، شماره ۱، ص ۱۱۴-۱۰۳.

DOI: 10.30479/JMRE.2023.18726.1641



۱- مقدمه

فرآیند فلوتاسیون تا حد زیادی وابسته به موفقیت در جذب انتخابی کلکتور بر روی سطح کانی هدف و آگریزی این سطح با کلکتور جذب شده است.

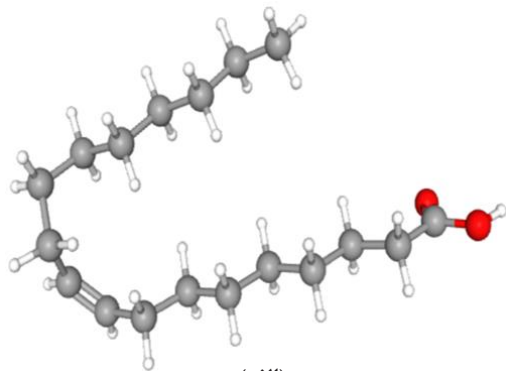
بر این اساس، در سال‌های اخیر تحقیقات بر روی مکانیزم عملکرد کلکتورها و اصلاح ساختار آنها و توسعه نسل جدید کلکتورها توجه ویژه‌ای را به خود جلب کرده است [۱۳، ۱۴]. در کنار مطالعات رایج به روش آزمایشگاهی و پایلوت، مطالعات به روش مدل‌سازی و شبیه‌سازی، یکی از جدیدترین روش‌ها در انجام این مطالعات است که در سال‌های اخیر و با پیشرفت‌های حاصله در زمینه علوم رایانه‌ای، مطرح شده است [۱۵]. در این بین، روش‌های مبتنی بر شیمی محاسباتی [۱۶]، روش‌های مبتنی بر مکانیک کوانتوم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و الگوریتم مونت کارلو از کارآمدترین روش‌ها در مطالعات در مقیاس مولکولی و میکروسکوپی هستند [۱۷، ۱۸] که با توجه به فیزیک شبیه‌سازی مد نظر در این تحقیق از روش دینامیک مولکولی استفاده شده است.

دینامیک مولکولی روشی مستقیم برای بررسی ویژگی‌های میکروسکوپی یک سیستم مانند جرم اتم‌ها، برهمکنش‌های آن‌ها و ساختار مولکولی است [۱۹] که با استفاده از این خواص میکروسکوپی می‌توان به خواص ماکروسکوپی سیستم نیز رسید. ویژگی اصلی این روش شبیه‌سازی امکان بررسی شرایط و حالات سیستم از دیدگاه مولکولی است [۲۰]. ایجاد یک شناخت دقیق از کیفیت و کمیت توزیع بار الکتریکی بر روی سطح کانی‌ها و پتانسیل ناشی از بار سطحی کانی‌های اکسیدی قبل و بعد از جذب کلکتور در محیط فلوتاسیون که در دستیابی به موفقیت فلوتاسیون کانی‌های اکسیدی و سیلیکات‌ها امری اجتناب‌ناپذیر است، از ویژگی‌های مهم این روش است که سبب تمایل روزافزون به استفاده از این روش می‌شود [۱۵].

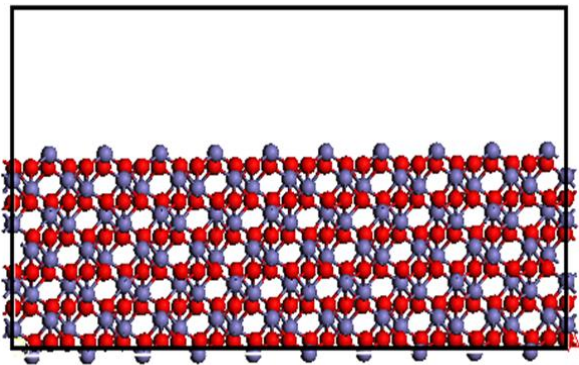
مروری مختصر بر این تحقیقات نشان می‌دهد که غالب مطالعات انجام یافته در زمینه جذب سدیم اولئات بر روی هماتیت، در مقیاس ماکروسکوپی و آزمایشگاهی یا صنعتی بوده [۲۱] و مکانیزم جذب این کلکتور از دیدگاه میکروسکوپی، بحث و بررسی نشده است، بنابراین در این مطالعه مکانیزم جذب سدیم اولئات بر روی سطح کانی هماتیت و تاثیر این جذب بر رژیم ترشوندگی سطح ۰۰۱ هماتیت از دیدگاه میکروسکوپی بحث و بررسی می‌شود. روش انجام تحقیق نیز، روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کوانتومی انتخاب

در بین روش‌های رایج در فرآوری مواد معدنی، فلوتاسیون یک فرآیند بسیار کارآمد و پرکاربرد است که طی یک قرن اخیر، با استفاده از آن سالیانه میلیون‌ها تن مواد معدنی سولفیدی و اکسیدی تحت پرعیارسازی قرار گرفته است. اگرچه، اساس طراحی ابتدایی این روش برای پرعیارسازی کانی‌های سولفیدی بوده است، اما بعدها با طراحی و سنتز کلکتورهای خاص، قابلیت استفاده از این روش برای شناورسازی کانی‌های اکسیدی نیز فراهم شد [۱]. فلوتاسیون کانی‌های اکسیدی و سیلیکات‌ها در مقیاس صنعتی، عمدتاً شامل پرعیارسازی و یا حذف کانی‌هایی مانند کوارتز [۲]، هماتیت [۳]، میکا [۴]، روتیل [۵] و فلدسپات‌ها [۶] می‌شود. مکانیزم شناورسازی این کانی‌ها عمدتاً وابسته به خواص الکتریکی و حلالیت کانی، بار سطحی کانی‌ها، طول زنجیره کلکتور مورد استفاده و پایداری نمک فلز- کلکتور است. در این میان، پرعیارسازی کانی اکسیدی آهن‌دار هماتیت، به عنوان یکی از منابع اصلی تولید آهن و فولاد اهمیت ویژه‌ای دارد. در کنار روش‌های پرعیارسازی مغناطیسی، فلوتاسیون نیز به دلیل کارآمدی بالا برای تغلیظ و یا حذف کانی‌های هماتیته استفاده می‌شود [۷، ۸]. با توجه به وجود اکسیژن در ترکیب شیمیایی هماتیت و امکان تشکیل پیوند هیدروژنی با مولکول‌های آب، این کانی بر خلاف سولفیدها رفتار سطحی شدیداً آبدوست داشته و بدون وجود عوامل سطح‌ساز (کلکتورها) امکان فلوتاسیون آن وجود ندارد [۹، ۱۰].

کلکتورها، زنجیره هیدروکربنی متصل به یک گروه قطبی معدنی هستند که بر اساس بار الکتریکی این گروه قطبی در حالت یونیزه شده، ممکن است آنیونی و یا کاتیونی باشند. جذب سطحی این کلکتورها ممکن است به وسیله اندرکنش‌های الکترواستاتیکی مابین سطح کانی و کلکتور (جذب فیزیکی) یا به وسیله یک فعل و انفعال شیمیایی (جذب شیمیایی) مابین آن‌ها رخ دهد [۱۱]. کلکتورهای کاتیونی غالباً مکانیزم جذب فیزیکی دارند و در اثر اندرکنش‌های برد بلند الکترواستاتیک و واندروالسی جذب سطح کانی می‌شوند. به دلیل ماهیت نیروهای موثر در جذب، این نوع جذب می‌تواند به صورت تک و یا چند لایه اتفاق بیفتد. در مقابل، کلکتورهای آنیونی، غالباً مکانیزم جذب شیمیایی دارند و به دلیل جذب بر روی سایت‌های جذب محدود و مشخص، فقط به صورت تک لایه اتفاق می‌افتند [۱۲]. بر اساس آنچه گفته شد، موفقیت هر



(الف)



(ب)

شکل ۱: (الف) مولکول سدیم اولئات، (ب) بلور هماتیت، دید از جهت محور x (گوی‌های سفید، نشان‌دهنده اتم هیدروژن، خاکستری کربن، قرمز اکسیژن و آبی آهن است).

هماتیت، با استفاده از شاخص RMSD بررسی شد. فاکتور RMSD شاخصی برای اندازه‌گیری فاصله متوسط میان اتم‌های تشکیل‌دهنده مولکول‌ها در ساختار مولکول‌های بزرگ است و همگرایی این شاخص به یک مقدار ثابت بیان‌گر تنظیم شدن فواصل اتمی و مولکولی، تحت تاثیر اندرکنش‌های جاذبه و دافعه درون مولکولی و بین مولکولی است. معادله ۱، بیان‌گر رابطه ریاضی محاسبه مقدار شاخص RMSD برای مولکول‌ها در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است:

$$RMSD = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_i^2} \quad (1)$$

که در آن:

r_i : فاصله میان اتم i ساختار مرجع یا موقعیت اصلی با سایر اتم‌های معادل یا غیر معادل در سیستم
 N : تعداد ذرات است [۲۵].

شده است. شاخص‌های آبدوستی-آگریزی سطح کانی بکر و پوشش داده شده هماتیت به وسیله کلکتور شامل محل قرارگیری مرکز ثقل مولکول‌های آب، پروفیل توزیع چگالی آب در لایه‌های مختلف مجاور کانی هماتیت و متوسط تعداد پیوندهای هیدروژنی تشکیل شده به وسیله مولکول‌های آب است.

۲- روش انجام شبیه‌سازی‌ها

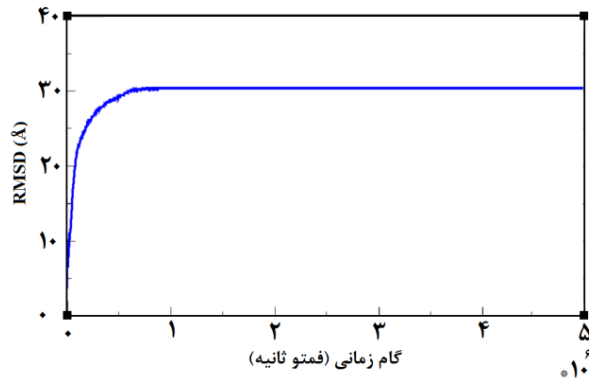
شکل ۱-الف نشان‌دهنده ساختار شیمیایی سدیم اولئات $(C_{18}H_{33}NaO_2)$ و شکل ۱-ب نشان‌دهنده ساختار فضایی بلور هماتیت است. شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با استفاده از کد متن باز لمپس انجام شد [۲۲]. سطح ۰۰۱ هماتیت با ابعاد $27 \times 10.5 \times 10.1$ آنگستروم در سه راستای x و y و z به عنوان سطح آبدوست شبیه‌سازی ساخته شد. بر حسب محاسبات استکیومتری، تعداد ۲۵ عدد کلکتور سدیم اولئات برای جذب بر روی سطح هماتیت بر روی این سطح قرار گرفت. بررسی خواص ترشوندگی سطوح بکر و پوشش داده شده هماتیت به وسیله شبیه‌سازی نحوه آرایش مولکول‌های آب در یک جعبه شکل‌پذیر آب که بر روی دو سطح بکر و پوشش داده شده به وسیله کلکتور قرار گرفته بود، انجام گرفت (شکل ۲). به جهت تطابق شرایط المان انتخابی با سیستم ماکروسکوپی و شرایط آزمایشگاهی، شرایط مرزی در باکس شبیه‌سازی المان انتخاب شده در دو جهت x و y متناوب و در جهت z به صورت غیرمتناوب در نظر گرفته شد. میدان نیروی مورد استفاده برای اختصاص مقادیر کوانتومی مورد نیاز در محاسبه اندرکنش‌های بین مولکولی در انجام شبیه‌سازی‌ها، میدان نیروی واکنشی (reax-ff) بود [۲۳]. برای محاسبه اندرکنش‌های غیرپیوندی از پتانسیل لنارد-جونز استفاده شد [۲۴]. زمان کل شبیه‌سازی برای سیستم هماتیت-آب، ۵ نانو ثانیه و برای سیستم هماتیت-کلکتور-آب، ۱۰ نانو ثانیه در نظر گرفته شد. فرآیند جذب آب و سدیم اولئات بر روی سطح هماتیت در سیستم‌های شبیه‌سازی با استفاده از هنگرد ترمودینامیکی حجم ثابت-دما ثابت (NVT) در دمای ۳۰۰ درجه کلون انجام شد.

۳- مباحث و نتایج

۳-۱- بررسی پایداری فرآیندهای جذب

بررسی تکمیل شدن فرآیند جذب و پایداری شدن مولکول‌های کلکتور و آب جذب شده بر روی سطح ۰۰۱

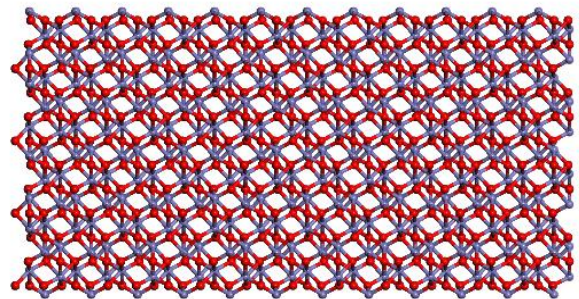
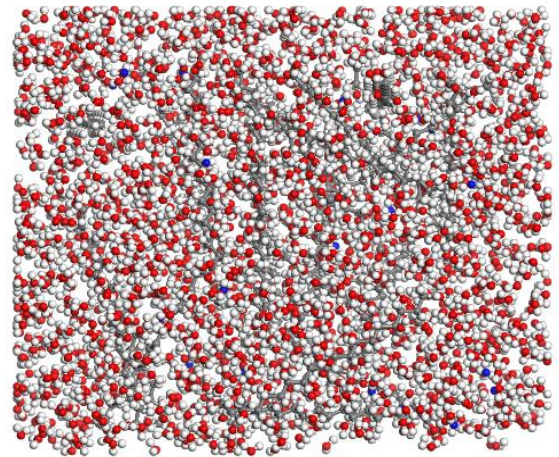
شکل ۳، نشان‌دهنده شاخص RMSD جذب مولکول‌های آب بر روی سطح بکر و بدون پوشش هماتیت است که نسبت به اتم‌های هیدروژن حاضر در مولکول‌های آب رسم شده است.



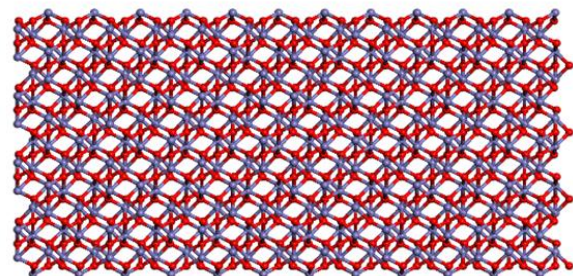
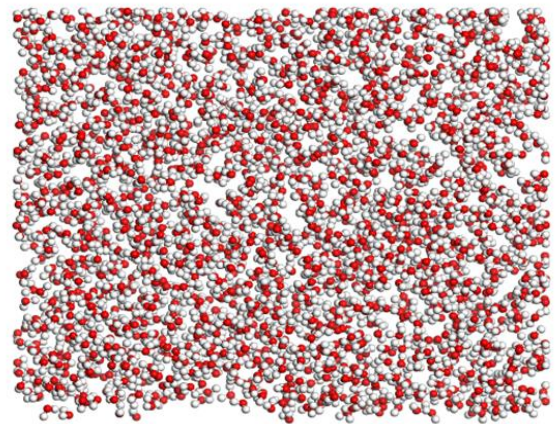
شکل ۳: RMSD جذب مولکول‌های آب بر روی سطح بکر هماتیت و تشکیل نانو قطره آب

همان‌طور که در شکل ۳ به خوبی مشاهده می‌شود، در ۰٫۵ نانو ثانیه ابتدایی مولکول‌های آب به سرعت جذب سطح بلور هماتیت شده و بر روی سطح پایدار می‌شوند. روند همگرایی نمودار در ادامه شبیه‌سازی نشان‌دهنده تشکیل پیوندهای هیدروژنی مابین مولکول‌های آب و سطح و وصل‌شدگی قطره آب به روی سطح بلور هماتیت و پایداری آن بر روی سطح است. همگرایی شدید و تبدیل شدن نمودار RMSD به یک خط کاملاً افقی بیانگر شدت بالای اندرکنش‌های الکترواستاتیکی میان مولکول‌های آب و سطح بلور است.

شکل ۴-الف و ب نیز به ترتیب نشان‌دهنده شاخص RMSD جذب مولکول‌های کلکتور و آب بر روی سطح هماتیت و پایدار شدن آنها بر روی سطح است. نمودار الف نسبت به اتم‌های کربن حاضر در ترکیب سدیم اولئات و نمودار ب نسبت به اتم‌های هیدروژن حاضر در ترکیب مولکول آب رسم شده است. شیب شدید نمودار RMSD در لحظات ابتدایی، بیانگر وجود اندرکنش‌های بسیار شدید مابین اتم‌های سطح و مولکول‌های کلکتور است که سبب به وجود آمدن نیروی شدید برای مولکول‌های کلکتور در همان لحظات ابتدایی می‌شود. این کلکتورها با یک حرکت قائم مانند که در علم شیمی سطح تحت عنوان Ballistic motion شناخته می‌شود، به سرعت جذب سطح بلور هماتیت شده و بر روی سطح به پایداری می‌شوند. دلیل این امر نیز اندرکنش قوی‌تر



(الف)



(ب)

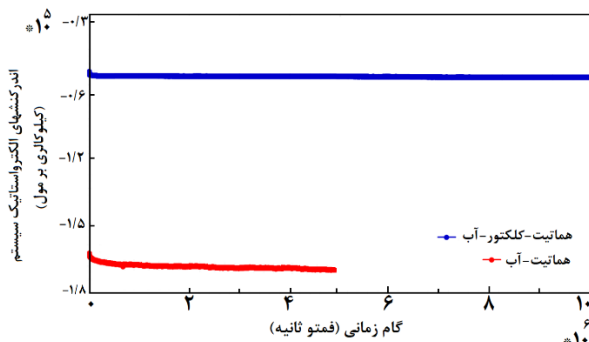
شکل ۴: الف) سیستم هماتیت-آب، ب) سیستم هماتیت-سدیم اولئات-آب (گوی‌های قرمز و سفید نشانگر اتم اکسیژن و هیدروژن، گوی‌های آبی نشانگر اتم آهن، گوی‌های سیاه نشانگر کربن و گوی بنفش نشانگر اتم سدیم است.)

سطح بلور هماتیت در زمانی مابین ۳ تا ۴ نانوثانیه است. شیب بالای نمودار RMSD جذب کلکتور بر روی سطح در لحظات آغازین شبیه‌سازی نیز نشان‌دهنده اندرکنش‌های شدید مابین سطح و سرهای قطبی یونیزه شده کلکتور است که بعد از جذب آنها بر روی سطح سبب پین‌شدگی آنها بر روی سطح و جلوگیری از فرآیند واجذب می‌شود. همچنین، این امر سبب کاهش شدید تنش سطحی در بلور هماتیت می‌شود.

۳-۲- محاسبه انرژی سطحی سطح ۰۰۱ هماتیت

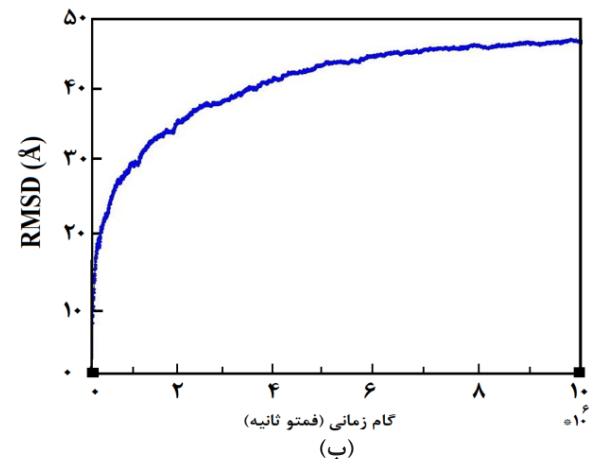
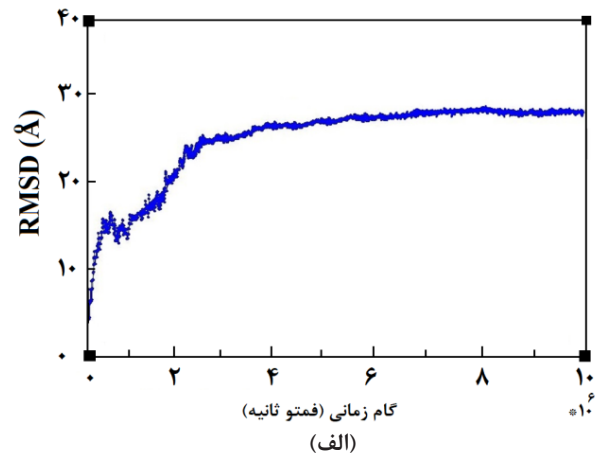
خاصیت ترشوندگی هر سطح بلوری در محیط آبی، ناشی از میزان تنش سطحی حاصل از بار الکتریکی متمرکز شده بر روی آن است [۲۶]. این تنش در مقیاس میکروسکوپی به صورت برآیند دو نیروی چسبندگی و پیوستگی تحلیل و بررسی می‌شود. برآیند این اثر یک زاویه تماس مابین قطره سیال با سطح جامد ایجاد می‌کند. در مقیاس میکروسکوپی نیز بررسی این اثر با بررسی اندرکنش‌های غیرپیوندی بردبلند امکان‌پذیر است. اندرکنش‌های غیرپیوندی بردبلند به دو گروه اندرکنش‌های واندروالسی و الکترواستاتیک تقسیم می‌شوند. برای کانی‌ها، به دلیل ترکیب شیمیایی و ساختار بلوری، اندرکنش‌های الکترواستاتیک به مراتب (بیش از ۹۰ بار) قوی‌تر از اندرکنش‌های واندروالسی بوده و نقش موثرتری در آبدوستی یا آبگریزی این سطوح دارد و اندرکنش‌های واندروالسی در مقایسه با الکترواستاتیک قابل صرف‌نظر کردن است، بنابراین تحلیل اندرکنش‌های الکترواستاتیک یک سیستم قطبی، شاخصی مطلوب برای ارزیابی میزان ترشوندگی سطح است [۲۷].

شکل ۵ نشان‌دهنده شبیه‌سازی توزیع اندرکنش‌های الکترواستاتیک در دو سیستم هماتیت-آب و هماتیت-سدیم اولئات-آب است.



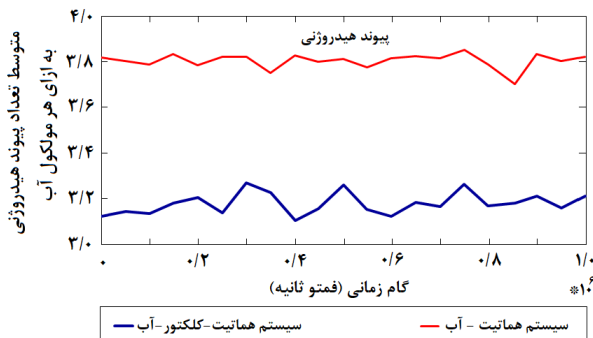
شکل ۵: توزیع اندرکنش‌های الکترواستاتیک در دو سیستم هماتیت-آب (قرمز) و هماتیت-کلکتور-آب (آبی)

مابین اتم‌های سطح و سرهای قطبی یونیزه شده مولکول‌های کلکتور در مقایسه با مولکول‌های آب است که در باز شعاع تاثیر سطح قرار دارند.



شکل ۴: الف) RMSD اتم‌های کربن در ترکیب سدیم اولئات، ب) RMSD اتم‌های هیدروژن مولکول آب

اما بر خلاف سطح بکر، این‌بار در سطح هماتیت پوشش داده شده به وسیله کلکتور، جذب مولکول‌های آب به روی سطح روندی به مراتب کندتر داشته و جذب و پایدار شدن آنها بر روی هماتیت تقریباً زمانی در حدود ۶ نانوثانیه (۱۲ برابر کندتر) به طول می‌کشد. این امر نشان‌دهنده کاهش چشمگیر در میزان انرژی سطح هماتیت پوشش داده شده به وسیله مولکول‌های کلکتور و کاهش شدت اندرکنش‌های میان مولکول‌های آب با سطح هماتیت و کاهش چشمگیر در ترشوندگی سطح است. نتایج نمودارهای RMSD در شبیه‌سازی‌های جذب کلکتور به روی هماتیت نشان‌دهنده جذب این مولکول‌ها بر رُس سطح پایدار شدت آن‌ها بر روی



شکل ۶: متوسط تعداد پیوندهای هیدروژنی تشکیل یافته در ۱ نانوثانیه آخر شبیه‌سازی

۴-۳- پروفیل توزیع چگالی

سیالات قطبی در مجاورت سطوح جامد، لایه‌بندی‌های مختلفی را تشکیل می‌دهند که این لایه‌بندی‌ها به لایه تماس، لایه مجاور و عمق سیال معروف است [۳۰]. ضخامت اولین و دومین لایه از سیال در مجاورت سطح جامد که به لایه تماس و لایه مجاور معروف هستند، معمولاً تابعی از شدت آبدوست یا آبگریز بودن سطح جامد است و هرچه سطح آبدوست‌تر باشد، چگالی سیال قطبی در این لایه‌ها افزایش می‌یابد. البته این چگالی در لایه تماس به مراتب بیشتر از لایه مجاور است و در مجاورت سطوح کانی‌های به شدت آبدوست در لایه تماس، حتی زاویه مولکولی مولکول آب از 104.5° نیز افزایش و تحرک مولکول‌ها در این لایه به شدت کاهش می‌یابد. همچنین با حرکت از لایه مجاور به طرف عمق سیال چگالی سیال به چگالی مایع همگرا می‌شود [۳۱].

شکل ۷ پروفیل توزیع چگالی دو سیستم مختلف را نشان می‌دهد.

در شکل ۷ پیک اول پروفیل توزیع چگالی که نشان‌دهنده شدت انرژی سطح است، برای سطح بکر هماتیت به مراتب شدیدتر از سطح پوشش داده شده هماتیت به وسیله کلکتور سدیم اولئات است. این امر بیانگر شدت آبدوستی سطح بکر و آبگریزی سطح پوشش داده شده سطح به وسیله کلکتور است. همچنین محل قرارگیری این پیک برای سطح بدون پوشش نزدیک به سطح هماتیت قرار دارد که نشان‌دهنده شدت جاذبه سطح به مولکول‌های آب است.

۵-۳- بررسی مرکز مولکول‌های آب

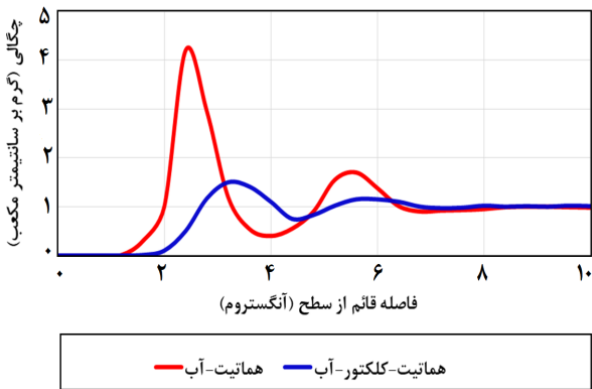
فاصله قرارگیری مرکز جرم مولکول‌های آب در هر سیستم

همگرایی این دو نمودار به مقادیر ثابت، بیانگر جذب مولکول‌های آب و مولکول‌های کلکتور سدیم اولئات بر روی سطح 0.01 بلور هماتیت و اتمام فرآیند جذب است. همچنین تفاوت در مقادیر همگرایی و کمتر بودن ۳ برابری سیستم هماتیت-کلکتور-آب در مقایسه با سیستم هماتیت-آب بیانگر اندرکنش‌های بیشتر در سیستم دارای کلکتور و کاهش بیشتر تنش سطحی این سیستم و در نتیجه آب‌گریزی بیشتر این سطح در مقایسه با سطح بکر هماتیت است.

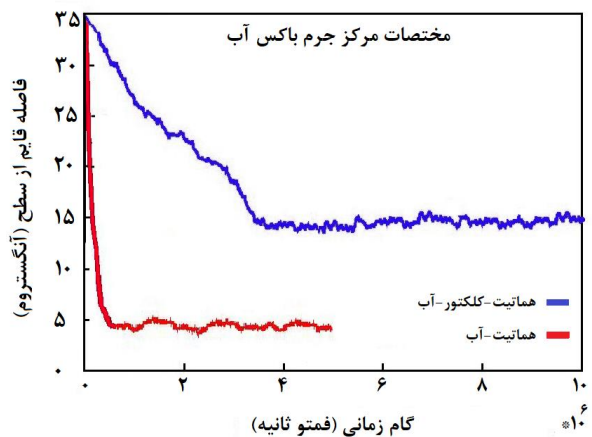
۳-۳- محاسبه تعداد پیوندهای هیدروژنی

یکی از علل اصلی آبدوستی شدید کانی‌های اکسیدی و سیلیکاته، وجود اتم‌های اکسیژن بر روی سطح این کانی‌ها است. این اتم‌ها معمولاً به دلیل قرار گرفتن در سطح، لبه و گوشه‌ها، گاه پیوند ناقص نیز دارند که سبب تولید یون و تشدید خاصیت الکترونگاتیوی آن می‌شود. این اتم‌ها غالباً در محیط‌های آبی با اتم‌های هیدروژن مولکول‌های آب پیوند هیدروژنی ایجاد می‌کنند که این امر سبب تشدید خاصیت آبدوستی سطح کانی و کاهش زاویه تماس قطره با سطح در حالت ماکروسکوپی می‌شود [۲۸]. معمولاً، با پوشش سطح، لبه‌ها و گوشه‌ها به وسیله مولکول‌های کلکتور، تنش سطحی بلور تا حد زیادی کاهش یافته و اتم‌های اکسیژن سطحی به عنوان سایت‌های جذب توان و تمایل خود را برای جذب مولکول‌های آب به سمت خود و تشکیل پیوند هیدروژنی از دست می‌دهند، بنابراین تعداد متوسط پیوندهای هیدروژنی در سیستم پوشش داده شده با کلکتور کاهش می‌یابد [۲۹]. شکل ۶ نشان‌دهنده متوسط تعداد پیوندهای هیدروژنی تشکیل شده برای دو سیستم هماتیت-آب و هماتیت-کلکتور-آب در نانوثانیه آخر شبیه‌سازی‌ها است.

همان‌طور که به خوبی از شکل ۶ دیده می‌شود، در ۱ نانوثانیه پایانی شبیه‌سازی سیستم هماتیت-آب، متوسط تعداد پیوندهای هیدروژنی موجود در سیستم عدد 3.8 پیوند به ازای هر مولکول آب است که با پوشش سطح کانی هماتیت به وسیله کلکتور این عدد به 3.2 پیوند به ازای هر مولکول آب کاهش می‌یابد. این کاهش در تعداد پیوندهای هیدروژنی بیانگر کاهش انرژی سطحی، آب‌گریز شدن سطح بعد از جذب کلکتور و از بین رفتن سایت‌های جذب بر روی سطح کانی هماتیت برای تشکیل پیوند هیدروژنی است.



شکل ۷: پروفیل توزیع چگالی آب بر روی سطح بکر (قرمز) و پوشش داده شده هماتیت به وسیله کلکتور (آبی)



شکل ۸: نمودار مختصات قرارگیری مرکز جرم مولکول‌های آب در سیستم شبیه‌سازی سطح بکر (قرمز) و پوشش داده به وسیله کلکتور هماتیت (آبی)

آبدوست به آبگریز بوده و مطابقت خوبی با نتایج شبیه‌سازی پروفایل توزیع چگالی و انرژی سطحی دارد.

۴- نتیجه‌گیری

در این تحقیق، جذب سطحی کلکتور سدیم اولئات بر روی سطح ۰۰۱ کانی هماتیت و اثرات آن بر رژیم ترشوندگی سطح این کانی با استفاده از شبیه‌سازی به روش دینامیک مولکولی بررسی شد. نتایج RMSD برای بررسی پایداری جذب مولکول‌های آب و کلکتور بر روی سطح هماتیت در دو حالت مختلف مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد، بر روی سطح بکر هماتیت، به دلیل اندرکنش‌های شدید الکترواستاتیک بین مولکول‌های آب و سطح بلور، جذب مولکول‌های آب و

شبیه‌سازی مربوط به ترشوندگی سطحی رابطه مستقیمی با رفتار ترشوندگی آن سطح دارد. به عبارت دیگر، در سیستم‌های آبدوست، به دلیل شدت اندرکنش‌های غیرپیوندی مابین مولکول‌های آب و سطح، غالب مولکول‌های آب در فاصله‌ای نزدیک به سطح قرار گرفته و در نتیجه مرکز جرم برآیندی کل آنها نیز در نقطه‌ای نزدیک به سطح کانی قرار می‌گیرد. در نقطه مقابل در سطوح آبگریز، سطح به دلیل انرژی سطحی کم، تمایلی به جذب مولکول‌های آب به سمت خود نداشته و در نتیجه غالب مولکول‌ها در فاصله‌ای دورتر از سطح قرار می‌گیرند. در نتیجه، مرکز ثقل برآیندی آنها نیز در نقطه‌ای دورتر از سطح قرار می‌گیرد. شکل ۸، موقعیت قرارگیری مرکز ثقل مولکول‌های آب نسبت به بلور هماتیت در راستای بردار نرمال سطح ۰۰۱ در دو سیستم مختلف شبیه‌سازی را نشان می‌دهد.

همان‌طور که از این شکل به خوبی دیده می‌شود، در سطح بکر و بدون پوشش هماتیت، به دلیل شدت بالای تنش سطحی ناشی از باندهای ناقص و نقص‌های ساختاری و تمرکز بالای بار الکتریکی (به ویژه در لبه‌ها و گوشه‌ها)، اندرکنش‌های الکترواستاتیک شدیدی از نوع نیروهای جاذبه از طرف سطح بر مولکول‌های آب اعمال می‌شود که این نیروی جاذبه هم سبب کشش و تراکم شدید مولکول‌های آب در نزدیکی سطح شده و به تبع آن افزایش دانسیته مولکول‌های آب در لایه تماس و مجاور مشاهده و همچنین سبب قرارگیری مرکز ثقل مولکول‌های آب در فاصله‌ای نزدیک به سطح کانی (فاصله ۵ آنگسترومی سطح) می‌شود. در مقابل، با پوشش سطح به وسیله مولکول‌های کلکتور سدیم اولئات، انرژی سطح و بار الکتریکی تجمع‌یافته بر روی آن به شدت کاهش می‌یابد. به تبع کاهش در بار الکتریکی تجمع‌یافته بر روی سطح هماتیت پوشش داده شده به وسیله مولکول‌های کلکتور سدیم اولئات، اندرکنش‌های غیرپیوندی مابین سطح هماتیت و مولکول‌های آب نیز کاهش یافته و در نتیجه شدت نیروهای جاذبه بین مولکولی اعمالی از طرف سطح هماتیت کلکتور پوشش شده بر مولکول آب نیز کاهش می‌یابد. با کاهش این شدت جاذبه، تحرک و آزادی عمل مولکول‌های آب به شدت افزایش یافته و در مقابل تراکم مولکول‌های آب در لایه‌های همسایگی و مجاور سطح هماتیت نیز کاهش یافته و در نتیجه موقعیت قرارگیری مرکز ثقل مولکول‌های آب به نقطه‌ای در فاصله‌ای دورتر از سطح هماتیت (در حدود ۱۵ آنگسترومی سطح) منتقل می‌شود. این امر، نشان‌دهنده تغییر رژیم ترشوندگی سطح از

- [3] Silva, K., Filippov, L. O., Piçarra, A., Filippova, I. V., Lima, N., Skliar, A., Faustino, L., and Filho, L. L. (2021). "New perspectives in iron ore flotation: Use of collector reagents without depressants in reverse cationic flotation of quartz". *Minerals Engineering*, 170: 107004.
- [4] Huang, Z., Shuai, S., Wang, H., Liu, R., Zhang, S., Cheng, C., Hu, Y., Yu, X., He, G., and Fu, W. (2022). "Froth flotation separation of lepidolite ore using a new Gemini surfactant as the flotation collector". *Separation and Purification Technology*, 282: 119122.
- [5] Li, H., Zheng, H., Chen, Q., Kasomo, R. M., Leng, J., Weng, X., Song, S., Xiao, L., and Tian, C. (2020). "Flotation separation of rutile from almandine using octadecyl amine polyoxyethylene ether as collector". *Physicochemical Problems of Mineral Processing*, 56(4): 653-664.
- [6] Xu, L., Jiao, F., Jia, W., Pan, Z., Hu, C., and Qin, W. (2020). "Selective flotation separation of spodumene from feldspar using mixed anionic/nonionic collector". *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 594: 124605.
- [7] جوانشیر، س.، مسینایی، م.، توکلی، م.؛ ۱۳۹۶؛ "سولفورزادایی کنسانتره سنگ آهن سنگان به روش فلوتاسیون". نشریه مهندسی منابع معدنی، دوره سوم، شماره ۳، ص ۸۶-۷۷.
- [8] حق محمدی پسند، ر.، وظیفه مهربانی، ج.، پورقهرمانی، پ.؛ ۱۳۹۸؛ "بررسی کاهش میزان گوگرد کنسانتره منتبتی کارخانه تغلیظ سنگ آهن همدان". نشریه مهندسی منابع معدنی، دوره پنجم، شماره ۴، ص ۹۵-۱۱۰.
- [9] Jin, J., Gao, H., Chen, X., and Peng, Y. (2016). "The separation of kyanite from quartz by flotation at acidic pH". *Minerals Engineering*, 92: 221-228.
- [10] Fuerstenau, D. (2005). "Zeta potentials in the flotation of oxide and silicate minerals". *Advances in Colloid and Interface Science*, 114: 9-26.
- [11] Fuerstenau, M. C., Jameson, G. J., and Yoon, R.-H. (2007). "Froth flotation: a century of innovation". Society for Mining, Metallurgy, and Exploration, Inc., pp. 891.
- [12] Nakhac, F., and Irannajad, M. (2018). "Reagents types in flotation of iron oxide minerals: A review". *Mineral Processing and Extractive Metallurgy Review*, 39(2): 89-124.

[۱۳] مهرآبادی عسگری، م.، کارآموزیان، م.؛ ۱۳۹۷؛ "بررسی پارامترهای موثر بر فلوتاسیون کانی کربناته سرب در مقیاس آزمایشگاهی". نشریه مهندسی منابع معدنی، دوره چهارم، شماره ۳، ص ۱۰۳-۸۷.

[۱۴] شجاع، ف.، عبداللهی، م.، اسکالو، ا.؛ ۱۳۹۶؛ "بررسی امکان کاهش

به تعادل رسیدن سیستم‌ها در زمانی بسیار کوتاه (حدود ۰/۵ نانوثانیه) و با ضریب نفوذی بسیار بالا اتفاق می‌افتد، در حالی که در سطوح پوشش داده شده هماتیت به وسیله کلکتور سدیم اولئات به دلیل کاهش شدید تنش سطحی این زمان به حدود ۴ نانوثانیه افزایش می‌یابد که بیانگر کاهش شدید در انرژی سطح هماتیت پوشش داده شده به وسیله کلکتور سدیم اولئات، کاهش اندرکنش‌های بین مولکولی مابین سطح هماتیت پوشش داده شده به وسیله کلکتور و مولکول‌های آب و آبگریز شدن سطح است. نتایج پروفیل توزیع چگالی آب در فواصل مختلف از سطح هماتیت نیز بیانگر تغییر در رژیم ترشوندگی سطح هماتیت ناشی از فرآیند جذب کلکتور است. تفاوت چگالی آب در لایه‌های مختلف سیال در مجاورت سطح جامد تاییدکننده آب‌گریز شدن سطح هماتیت پوشش داده شده به وسیله کلکتور است. همچنین، پوشش سطح هماتیت به وسیله کلکتور به کاهش تعداد پیوندهای هیدروژنی منجر شد که این خود نیز تاییدکننده نقش مهم تشکیل پیوندهای هیدروژنی در رفتار آب‌دوست سطح این کانی است. تغییر در رژیم ترشوندگی و آب‌گریز شدن سطح کانی هماتیت بعد از جذب کلکتور نیز به عمدتا به دلیل از بین رفتن سایت‌های جذب و نقاط محتمل برای تشکیل پیوند هیدروژنی با مولکول‌های آب بر روی سطح است. نتایج نمودار مختصات قرارگیری مرکز جرم مولکول‌های آب بر سطح هماتیت در راستای محور z نیز مطابقت خوبی با نتایج دیگر داشته و تاییدکننده دور شدن مرکز ثقل مولکول‌های آب از سطح هماتیت (آبگریز شدن سطح کانی هماتیت) است.

در مجموع نتایج شبیه‌سازی‌ها مطابقت خوبی با نتایج آزمایشگاهی داشته و نشان می‌دهد که جذب هدفمند کلکتور سدیم اولئات بر روی سطح کانی هماتیت در محیط فلوتاسیون رفتار سطحی آن را از آب‌دوست به آبگریز تغییر می‌دهد و امکان فلوتاسیون آن را فراهم می‌سازد [۳۳، ۳۲].

۵- مراجع

- [1] Bulatovic, S. M. (2009). "Handbook of Flotation Reagents: Chemistry, Theory and Practice: Flotation of Gold, Pgm and Oxide Minerals". Elsevier Science. DOI: <https://doi.org/10.1016/C2009-0-17331-2>.
- [2] Xie, R., Zhu, Y., Liu, J., and Li, Y. (2021). "The flotation behavior and adsorption mechanism of a new cationic collector on the separation of spodumene from feldspar and quartz". *Separation and Purification Technology*, 264: 118445.

- [25] Liu, B., Dai, M., Ali, I., Li, S., Sun, L., Peng, C., and Naz, I. (2021). "Molecular insights on the influence of temperature and metal ions on the hydration of kaolinite (001) surface". *Molecular Simulation*, 47(12): 1029-1036.
- [26] Pan, B., Yin, X., and Iglauer, S. (2020). "A review on clay wettability: From experimental investigations to molecular dynamics simulations". *Advances in Colloid and Interface Science*, 285: 102266.
- [27] Yuan, Y., and Lee, T. R. (2013). "Contact angle and wetting properties". *Surface Science Techniques*, 2013: 3-34.
- [28] Wang, J., Kalinichev, A. G., and Kirkpatrick, R.J. (2006). "Effects of substrate structure and composition on the structure, dynamics, and energetics of water at mineral surfaces: A molecular dynamics modeling study". *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 70(3): 562-582.
- [29] Mabudi, A., Noaparast, M., Gharabaghi, M., and Vasquez, V. R. (2019). "Polystyrene nanoparticles as a flotation collector: A molecular dynamics study". *Journal of Molecular Liquids*, 275: 554-566.
- [30] Wongkoblap, A., and Do, D. D. (2008). "Adsorption of polar and nonpolar fluids in finite-length carbon slit pore: a Monte Carlo simulation study". *Chemical Engineering Communications*, 195(11): 1382-1395.
- [31] Foroutan, M., Fatemi, S. M., Esmacilian, F., Fadaei Naeini, V., and Baniassadi, M. (2018). "Contact angle hysteresis and motion behaviors of a water nano-droplet on suspended graphene under temperature gradient". *Physics of Fluids*, 30(5): 052101.
- [32] Al-Busaidi, I. K., Al-Maamari, R. S., Karimi, M., Naser, J. (2019). "Effect of different polar organic compounds on wettability of calcite surfaces". *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 180: 569-583.
- [33] Shi, K.-Y., Chen, J.-Q., Pang, X.-Q., Jiang, F.-J., Hui, S.-S., Zhao, Z.-C., Chen, D., Cong, Q., Wang, T., Xiao, H.-Y., Yang, X.-B., and Wang, Y.-Y. (2023). "Wettability of different clay mineral surfaces in shale: Implications from molecular dynamics simulations". *Petroleum Science*, 20(2): 689-704.
- گوگرد کانسنگ آهن معدن سورک". نشریه مهندسی منابع معدنی، دوره دوم، شماره ۴، ص ۶۷-۷۴.
- [15] Rao, K. H., Kundu, T., and Parker, S. (2012). "Molecular Modeling of Mineral Surface Reactions in Flotation". In: *Molecular Modeling for the Design of Novel Performance Chemicals and Materials*, Rai, B. (Ed.), CRC Press, Chapter 3, 65-105.
- [16] Rogers, D. W. (2003). "Computational Chemistry using the PC". John Wiley & Sons.
- [17] Hénin, J., Lelièvre, T., Shirts, M. R., Valsson, O., and Delemotte, L. (2022). "Enhanced sampling methods for molecular dynamics simulations". *Living Journal of Computational Molecular Science*, 4(1): 1583.
- [18] Begušić, T., Tao, X., Blake, G. A., and Miller, T. F. (2022). "Equilibrium–nonequilibrium ring-polymer molecular dynamics for nonlinear spectroscopy". *The Journal of Chemical Physics*, 156(13): 131102.
- [19] Jensen, F. (2017). "Introduction to computational chemistry". John Wiley & Sons.
- [20] Hollingsworth, S. A., and Dror, R. O. (2018). "Molecular dynamics simulation for all". *Neuron*, 99(6): 1129-1143.
- [21] Vidyadhar, A., Kumari, N., and Bhagat, R. (2012). "Flotation of quartz and hematite: adsorption mechanism of mixed cationic/anionic collector systems". XXVI International Mineral Processing Congress(IMPC) 2012 Proceedings, New Delhi, India, 24-28 September.
- [22] Sharma, S., Kumar, P., and Chandra, R. (2019). "Applications of BIOVIA materials studio, LAMMPS, and GROMACS in various fields of science and engineering". *Molecular Dynamics Simulation of Nanocomposites Using BIOVIA Materials Studio, Lammops and Gromacs*, 2019: 329-341.
- [23] Han, Y., Jiang, D., Zhang, J., Li, W., Gan, Z., and Gu, J. (2016). "Development, applications and challenges of ReaxFF reactive force field in molecular simulations". *Frontiers of Chemical Science and Engineering*, 10: 16-38.
- [24] Maghfiroh, C., Arkundato, A., and Maulina, W. (2020). "Parameters (σ , ϵ) of Lennard-Jones for Fe, Ni, Pb for potential and cr based on melting point values using the molecular dynamics method of the lammops program". In: *Journal of Physics: Conference Series*, IOP Publishing.

¹ Lennard Jones