

عنوان مقاله:

بررسی اثر جذب کلکتور دو دسیل آمین بر روی سطح ۰۰۱ کوارتز و اثرات آن بر روی ترشوندگی سطح این کانی با استفاده از دینامیک مولکولی

محل انتشار:

اولین کنفرانس بین المللی تحقیقات بنیادین در مهندسی متالورژی، مکانیک و معدن (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:

شرمین هاشمی - دانشجوی دکتری فرآوری مواد معدنی، دانشکده مهندسی معدن، دانشگاه تهران، تهران،

محمد نوع پرست - استاد دانشکده مهندسی معدن، پردیس دانشکده‌های فنی، دانشگاه تهران، تهران،

امیر معبودی - استادیار دانشکده مهندسی معدن، دانشگاه صنعتی سهند، تبریز،

خلاصه مقاله:

این تحقیق با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی انجام شده است و به بررسی مکانیزیم جذب دو دسیل آمین (DDA) در محیط فلوتاسیون بر روی سطح ۰۰۱ کوارتز و تاثیر آن بر خواص ترشوندگی این کانی می پردازد. شبیه سازی های دینامیک مولکولی با استفاده از نرم افزار متریالز استودیو و (کد متن باز) لمپس انجام شد. خواص ترشوندگی سطح کوارتز نیز برای دو سطح بکر و پوشش داده شده آن توسط کلکتور صورت گرفت و مقایسه نتایج در این دو شبیه سازی مورد تجزیه تحلیل قرار گرفت. شاخص های مورد بررسی در مقایسه ترشوندگی دو سطح، شامل متوسط تعداد پیوندهای هیدروژنی، محل قرارگیری مرکز جرم مولکول های آب، انرژی سطح، فاصله متوسط میان اتم های تشکیل دهنده مولکول ها و دانسیته آب در لایه های تماس با سطح در نظر گرفته شد. نتایج حاصل از شبیه سازی ها نشان داد، در حالت اول حضور کانی کوارتز و آب در باکس شبیه سازی، سطح کوارتز آبدوست بوده و حضور اتم های اکسیژن در سطح ۰۰۱ کوارتز نیز سبب ایجاد سایت های تشکیل پیوند هیدروژنی بر روی سطح کانی شده و آبدوستی آن را تشدید می نماید. در مقابل، در حالت دوم با حضور کلکتور دو دسیل آمین و جذب آن روی سطح کوارتز، کاهش شدید در میزان انرژی سطحی و در نتیجه کاهش تمایل سطح به جذب مولکول های آب مشاهده گردید. همچنین، میزان تنش سطحی و بار الکتریکی تمرکز یافته بر روی سطح که سبب آبدوستی سطح می شد، تا حد زیادی کاهش یافت. پوشش سطح کانی توسط کلکتور احتمال تشکیل پیوندهای هیدروژنی مابین مولکول های آب و سطح کوارتز را از بین برد و نهایتاً رژیم ترشوندگی سطح کانی را از آبدوست به آبگریز تغییر داد.

کلمات کلیدی:

شبیه سازی دینامیک مولکولی، دو دسیل آمین، کوارتز، خواص ترشوندگی، پیوند هیدروژنی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1902188>

