

DINÁMICA MOLECULAR: UNA ALTERNATIVA PARA LA PREDICCIÓN DE AFINIDAD ENTRE COMPUESTOS MINEROS

MOLECULAR DYNAMICS: AN ALTERNATIVE FOR THE PREDICTION OF AFFINITY BETWEEN MINING COMPOUNDS

F. A. De la Torre Martínez¹

D. Reyes Jáquez²

H. Medrano Roldán³

RESUMEN

Debido a las condiciones actuales, la simulación de procesos en el área de ingeniería ha cobrado mayor auge en la formación de recursos humanos, especialmente, en la industria de la transformación, como lo es la minería. El objetivo de esta investigación fue determinar la afinidad entre el trióxido de arsénico y los diferentes minerales que componen una muestra extraída de mina, con la finalidad de evaluar la formación del complejo bismuto-arsénico sin tener un efecto en otros minerales de mayor interés, mediante el uso de una técnica alternativa a la experimentación para la obtención del parámetro de solubilidad de compuestos minerales amorfos, utilizando la simulación mediante la técnica de dinámica molecular. Se determinó la composición de la muestra mineral mediante difracción de rayos X, se construyeron las estructuras cristalinas, utilizan do el programa Materials Studio cuyas geometrías fueron optimizadas mediante una metodología de minimización de energía y fueron validadas utilizando la ecuación de la figura del mérito y densidad. Las simulaciones de dinámica molecular se realizaron a presión y temperatura constantes y se obtuvo el parámetro de solubilidad. Los resultados de los minerales identificados en la muestra fueron comparados con el trióxido de arsénico que, de acuerdo con el principio de similitud y a la magnitud en las diferencias, existe una miscibilidad entre As_2O_3 y Bi_2O_3 , una posible miscibilidad con otros 10 minerales y una inmiscibilidad con el resto de ellos.

ABSTRACT

Due to the current conditions, process simulation in the engineering area has become more relevant in the training of human resources, especially in the transformation industry, such as mining. The objective of this research was to determine the affinity between arsenic trioxide and the different minerals that compose a sample extracted from a mine, to evaluate the formation of a bismuth-arsenic complex without affecting other minerals of greater interest, through the use of an alternative technique for experimentation to obtain the solubility parameter of amorphous mineral compounds using the simulation through molecular dynamics technique. The composition of the mineral sample was determined by X-ray diffraction, the crystalline structures were built using Materials Studio software whose geometries were optimized using an energy minimization methodology and were validated using the figure of merit and density equation. Molecular dynamics simulations were performed at constant pressure and temperature and the solubility parameter was obtained. The results of the identified minerals in the sample were compared with the arsenic trioxide that, according to the principle of similarity and the magnitude of the differences, there is miscibility between As_2O_3 and Bi_2O_3 , a possible miscibility with 10 other minerals, and an immiscibility with the rest of them.

ANTECEDENTES

Debido a las condiciones actuales, el uso de nuevas tecnologías digitales ha sido un eje fundamental para llevar a cabo la educación a distancia en todos sus niveles, incluyendo, la formación de ingenieros y tecnólogos. Una de las áreas que, si bien ha venido cobrando

¹ Estudiante de posgrado en Ingeniería Bioquímica del Instituto Tecnológico de Durango. 19041701@itdurango.edu.mx

² Jefe de laboratorio, Posgrado en Ingeniería Bioquímica del Instituto Tecnológico de Durango.

damian.reyes@itdurango.edu.mx.

³ Académico, Posgrado en Ingeniería Bioquímica del Instituto Tecnológico de Durango. hmedrano@itdurango.edu.mx

mucho auge en las últimas décadas, en la actualidad, ha alcanzado nuevos niveles de interés, es la simulación en todas las áreas, especialmente en la ingeniería de procesos.

En el caso de la ingeniería minera, se busca la optimización de los procesos de extracción de metales de interés con el objetivo de maximizar las utilidades, ya que, en dichos procesos, el mineral extraído de las minas suele pasar por un proceso de reducción de partícula o procesos de purificación, en donde, se pueden generar altas cantidades de fases amorfas (Xiao *et al.*, 2012) que presentan impurezas al ser compuestos no deseados en el producto final. Regularmente, concentraciones superiores a las establecidas por el comprador se traducen en sanciones, disminuyendo el precio final (Fu *et al.*, 2020). La eliminación de las impurezas, como lo es el bismuto, en los procesos de extracción de metales de alto valor comercial, se ha convertido en un área de oportunidad clave que enfrentan las empresas mineras.

Un punto negativo es la poca investigación para su remoción, ya que se han desarrollado pocos métodos para este fin, entre ellos, sobresale el uso del trióxido de arsénico para formar complejos que precipiten y puedan ser removidos posteriormente (Xiao *et al.*, 2008 & Xiao *et al.*, 2012). Sin embargo, a pesar de ser un método efectivo, aún no se comprende del todo este mecanismo, por lo cual es conveniente evaluarlo, y, de ser posible, optimizarlo, siendo una consideración clave para determinar la afinidad entre los minerales el conocer la miscibilidad entre los compuestos de interés.

No obstante, limitantes como el alto costo de los reactivos, el riesgo de exposición a sustancias peligrosas como el arsénico y las medidas a la emergencia de salud que se vive actualmente al restringir actividades de movilidad, han llevado a la utilización de técnicas alternativas como lo es la simulación computacional, mediante la técnica de dinámica molecular (DM), donde se puede representar una estructura molecular y analizar su comportamiento con respecto al tiempo, tomando en cuenta las fuerzas intramoleculares e intermoleculares, así como las fuerzas de Van der Waals, electrostáticas, entre otras (Li *et al.*, 2019).

A partir de la simulación se pueden calcular diferentes propiedades fisicoquímicas del sistema como el parámetro de solubilidad de la sustancia, el cual, siguiendo el principio de similitud donde dos sustancias con valores similares son miscibles, podría dilucidar si dos sustancias son miscibles o no (Salehi *et al.*, 2019). Por lo cual, en esta investigación se utilizó esta técnica por medio del programa Materials Studio 8.0, para la obtención de los parámetros de solubilidad de celdas amorfas simuladas de trióxido de arsénico (As_2O_3) y diferentes minerales que componen la muestra, entre ellos, el óxido de bismuto (Bi_2O_3) que serán indicativos de la miscibilidad y la afinidad entre ambos para la formación de un complejo bismuto-arsénico que pueda ser precipitado.

METODOLOGÍA

Materiales

La muestra mineral provino de la compañía Avino Silver & Gold ubicada en la región de la sierra madre occidental de Durango, México, la cual se procesó a un tamaño de partícula de malla 200.

Métodos

Difracción de Rayos X

La difracción de rayos X (DRX) de la muestra mineral en polvo se llevó a cabo en un equipo Mini Flex 300 en un intervalo angular 2θ entre $5-90^\circ$ a un tamaño de paso 0.02° . El patrón de difracción obtenido fue refinado mediante el método Rietveld (Singh *et al.*, 2020) y se determinó la composición cristalina. Las estructuras cristalinas se obtuvieron de la base de datos abierta de cristalografía (COD) (Gražulis *et al.*, 2012).

Simulación de Dinámica molecular

Se utilizó el programa Materials Studio 8.0 (Accelrys, San Diego, CA) donde se crearon los cristales utilizando los datos de latencia previamente obtenidos de la técnica DRX, a partir de los cuales se obtuvieron las celdas amorfas con el módulo AMORPHOUS CELL.

Posteriormente, se crearon 10 cajas cúbicas que contenían 100 repeticiones de cada una de las moléculas a 298 K. Después se realizó una optimización geométrica mediante el uso del módulo FORCITE, utilizando el campo de fuerzas *Universal Force Field* (UFF) y el algoritmo de cuasi newton de Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS), utilizando el método de suma de átomos para las interacciones no derivadas de Van der Waals y electrostáticas, las cuales se truncaron utilizando una distancia de grupo menor a la mitad de la longitud de la caja.

El termostato y baróstato de Anderson se utilizaron para mantener la temperatura y la presión; respectivamente. Se utilizó la caja con la menor energía para realizar una dinámica NPT a presión y temperatura constante de 298 K y 1 atm por un lapso de 200 ps con un paso de tiempo de 1 fs. Al final se obtuvo la densidad de energía cohesiva para la obtención del parámetro de solubilidad.

RESULTADOS

Determinación de la composición de la muestra mineral mediante difracción de rayos X

Los resultados de DRX se muestran en la Figura 1, donde predomina el óxido de silicio o cuarzo (Si_2O), esto debido a que la muestra no fue procesada anteriormente. También se encontró plata y oro, entre otros. Como elemento de interés se detectó bismuto, ya que, es considerado como impureza y es el objeto de estudio de la investigación, debido a los intereses económicos de la compañía minera.

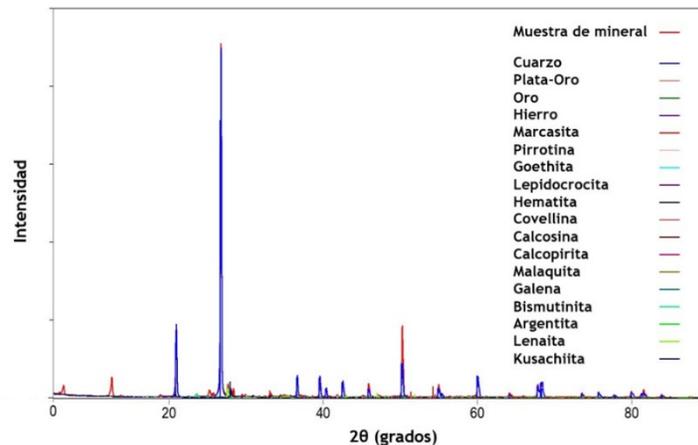


Figura 1. *Difractograma de la muestra mineral y su composición cristalina*

El equipo Mini Flex 300 viene equipado con un programa y una base de datos de los cristales que proporciona datos cristalográficos como parámetros de red, tipo de cristal y grupo espacial, entre otros (Tabla 1). Estos datos fueron ingresados al programa Materials Studio 8.0 para la creación de los cristales *in-silico*.

Tabla 1. *Tabla de datos cristalográficos de los cristales*

Nombre	Nomenclatura	Grupo espacial	Tipo de Cristal	Parámetros de red				
				a (Å)	b (Å)	c(Å)	β (°)	γ (°)
Plata	Ag	225: Fm-3m	Cúbico	4.09	4.09	4.09	90.00	90.00
Argentita	Ag ₂ S	229: Im-3m	Cúbico	4.88	4.88	4.88	90.00	90.00
Lenaita	AgFeS ₂	122: I-42d	Tetragonal	5.94	5.94	10.17	90.00	90.00
Oro	Au	194: P63/mmc	Cúbico	2.35	2.35	4.00	90.00	120.00
Kusachiita	Bi ₂ CuO ₄	130: P4/ncc	Tetragonal	8.56	8.56	5.79	90.00	90.00
Bismita	Bi ₂ O ₃	14: P21/c	Monoclínico	5.85	8.17	7.51	112.58	90.00
Bismutina	Bi ₂ S ₃	62: Pnma	Ortorrómico	11.04	4.25	10.33	90.00	90.00
Malaquita	Cu ₂ (CO ₃)(OH) ₂	14: P121	Monoclínico	9.41	10.85	2.92	95.90	90.00
Calcosina	Cu ₂ S	194: P63/mmc	Monoclínico	3.57	3.57	6.29	90.00	120.00
Calcopirita	CuFeS ₂	122: I-42d	Tetragonal	5.28	5.28	10.41	90.00	90.00
Covellina	CuS	194: P63/mmc	Hexagonal	4.00	4.00	16.00	90.00	120.00
Hierro	Fe	225: Fm-3m	Cúbico	2.83	2.83	2.83	90.00	90.00
Pirrotina	Fe _(1-x) S	147: P-3	Monoclínico	6.14	6.14	57.40	90.00	120.00
Hematita	Fe ₂ O ₃	167: R-3c	Hexagonal	5.02	5.02	13.78	90.00	120.00
Goethita	Fe ³⁺ O(OH)	62: Pbnm	Ortorrómico	4.50	9.80	2.90	90.00	90.00
Marcasita	FeS ₂	58: Pnnm	Ortorrómico	4.52	5.43	3.38	90.00	90.00
Galena	PbS	225: Fm-3m	Cúbico	6.20	6.20	6.20	90.00	90.00
Cuarzo	SiO ₂	154: P3221	Hexagonal	4.91	4.91	5.40	90.00	120.00
Lepidocrocita	γ-FeO(OH)	63: Cmcm	Ortorrómico	3.13	12.37	3.98	90.00	90.00

Simulación Dinámica Molecular

La simulación computacional se llevó a cabo utilizando el programa Materials Studio 8.0, en el cual se crearon las estructuras a partir de los datos cristalográficos obtenidos de DRX que se muestran en la Figura 2. Inicialmente, todos los cristales creados se modelaron amorfos al eliminar los parámetros del cristal y manteniendo las posiciones de los átomos; creando así, la celda amorfa (Figura 3). Se utilizó la técnica de dinámica molecular para modelar la estructura molecular de los minerales y se analizó su comportamiento con respecto al tiempo, tomando en cuenta las fuerzas intramoleculares llamadas en conjunto *Campo de Fuerzas*. El *campo de fuerzas* utilizado fue *Universal Force Field* (UFF), que toma un potencial de energía (Rappé *et al.*, 1993) y se expresa mediante la Ecuación 1.

$$E_{pot} = E_R + E_{\theta} + E_{\phi} + E_{\omega} + E_{vdW} + E_{el} \quad (1)$$

Donde E_R = energía de estiramiento de enlace, E_{θ} = energía de flexión del ángulo de valencia, E_{ϕ} = energía de torsión diédrica, E_{ω} = energía de inversión, E_{vdW} = energía de interacción de Van der Waals y E_{el} = energía electrostática.

El *campo de fuerza* elegido se desarrolló para ser utilizado con todos los elementos de la tabla periódica y así obtener parámetros apropiados (Arab & Shokuhfar, 2013; Martin, 2006 & Rappé *et al.*, 1992). En este campo de fuerza, los tres primeros términos parametrizan las interacciones vinculadas de corto alcance, el cuarto es la energía necesaria para transformar una molécula de una forma espacial a otra, mientras que los dos últimos términos parametrizan las interacciones inter e intramoleculares no vinculadas (Rappé *et al.*, 1993).

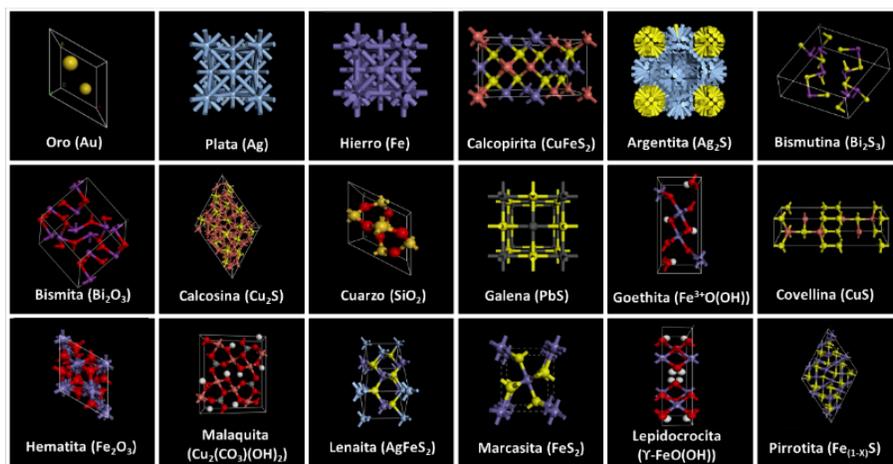


Figura 2. Cristales creados mediante simulación en Materials Studio.

Después se analizaron los puntos mínimos en la superficie de energía potencial que corresponden a los estados estables del sistema y se realizó una optimización geométrica empleando el algoritmo BFGS diseñado para la relajación de cristales (Pfrommer *et al.*, 1997) hasta alcanzar la convergencia.

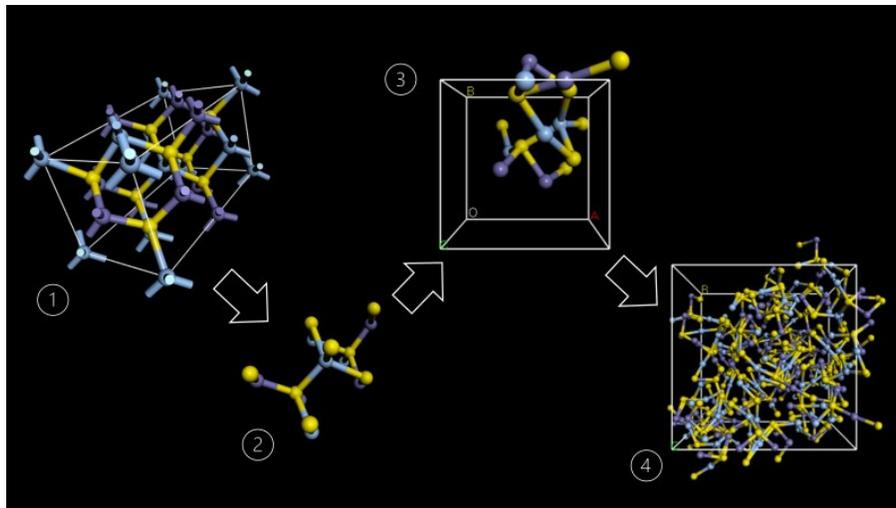


Figura 3. Creación de la celda amorfa a partir del (1) cristal de AgFeS_2 , (2) estructura molecular AgFeS_2 sin parámetros de red, (3) celda amorfa unitaria de AgFeS_2 , (4) celda amorfa con 100 unidades de repetidas de AgFeS_2

En la Figura 4 se puede observar en la imagen (a) la celda amorfa del trióxido de arsénico en su forma inicial donde la energía total está por encima de 12 millones de kcal/mol, y, en la imagen (b), la misma celda después de su optimización a 298 K donde la energía es de 6707.6 kcal/mol, indicando que es una estructura más cercana a su estado mínimo de energía, y, por lo tanto, más estable y probable de encontrar en la realidad.

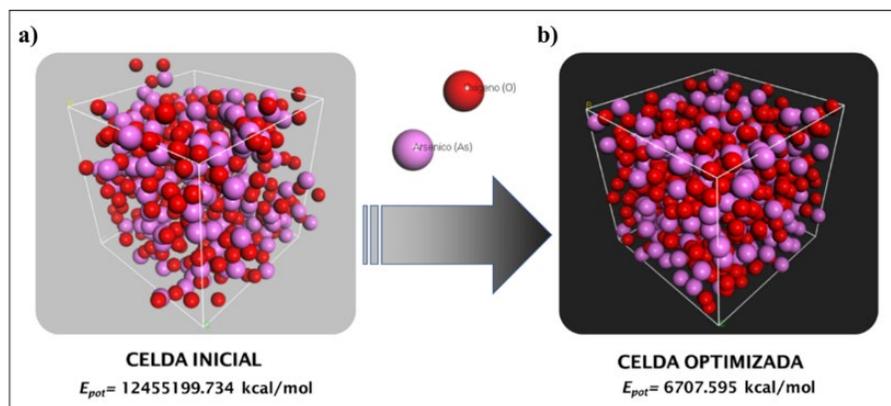


Figura 4. Estructura de As_2O_3 a) antes y, b) después de la optimización por minimización de energía a 298 K

La densidad es una de las propiedades físicas básicas y la racionalidad del sistema de simulación se verificó comparando la densidad simulada con la densidad de referencia experimental del Manual de la Minería publicados por la Sociedad Mineralógica de América (Anthony *et al.*, 2020) como se muestra en la Tabla 2.

Gupta *et al.* (2011) mencionan que, una estrecha concordancia entre los valores de densidad simulada y experimental significa una optimización efectiva de las interacciones

intermoleculares y, por lo tanto, una predicción precisa. Todos los valores de la densidad se mantuvieron dentro de los rangos correctos, a excepción de la Kusachiita y la Argentita, que mostraron una discrepancia del 1.16% y 1.67%, respectivamente.

Tabla 2. Comparación de densidades simuladas y experimentales

Nombre	Formula	Densidad g/cm ³	
		Simulada	Experimental
Plata	Ag	10.50	10.1 - 11.1
Argentita	Ag ₂ S	7.08	7.2 - 7.4
Lenaita	AgFeS ₂	4.60	4.6
Claudetita	As ₂ O ₃	4.17	3.9 - 4.2
Arsenolita	As ₂ O ₃	3.87	3.86 - 3.88
Oro	Au	18.40	16 - 19.3
Kusachiita	Bi ₂ CuO ₄	8.60	8.5
Bismita	Bi ₂ O ₃	9.37	8.5 - 9.5
Bismutina	Bi ₂ S ₃	6.81	6.8 - 7.2
Malaquita	Cu ₂ (CO ₃)(OH) ₂	4.00	3.6 - 4
Calcosina	Cu ₂ S	5.74	5.5 - 5.8
Calcopirita	CuFeS ₂	4.19	4.1 - 4.3
Covellita	CuS	4.63	4.6 - 4.8
Hierro	Fe	7.87	7.3 - 7.9
Pirrotina	Fe _(1-x) S	4.62	4.6 - 4.7
Hematita	Fe ₂ O ₃	5.30	5.2 - 5.3
Goethita	Fe ³⁺ O(OH)	4.27	3.3 - 4.3
Marcasita	FeS ₂	4.88	4.8 - 4.9
Galena	PbS	7.37	7.2 - 7.6
Cuarzo	SiO ₂	2.65	2.6 - 2.7
Lepidocrocita	γ-FeO(OH)	4.00	4

Para la validación se utilizaron los patrones de DRX experimental y simulados (Figura 5), y, mediante la Ecuación 2, que corresponde a la figura del mérito (FoM), se evaluó la similitud entre ellas tomando en cuenta el número total de picos coincidentes, así como la intensidad y valor en los picos más altos (Tabla 3).

$$FoM = \sqrt{\frac{FoM_{db} \cdot (w_{\theta} \cdot FoM_{\theta} + w_I \cdot FoM_I + w_{ph} \cdot FoM_{ph})}{w_{\theta} + w_I + w_{ph}}} \quad (2)$$

Donde FoM_{db} es la contribución debido a las intensidades de los picos de base de datos asociados y su porcentaje, FoM_{θ} proveniente de 2θ es la diferencia entre los picos de la base de datos experimental, FoM_I es la diferencia entre las intensidades de los picos de la base de datos experimental, FoM_{ph} es la contribución debido a las intensidades de los picos experimentales asociados y su porcentaje, y w_{θ} , w_I , w_{ph} son factores de ponderación.

Tabla 3. Resultados de comparación de patrones DRX simulados y experimentales.

Nombre	Fórmula	FoM
Arsenolita	As ₂ O ₃	0.94
Bismita	Bi ₂ O ₃	0.91
Bismutina	Bi ₂ S ₃	0.91
Galena	PbS	0.85
Lenaita	AgFeS ₂	0.98
Cuarzo	SiO ₂	0.89
Calcopirita	CuFeS ₂	0.98
Covellita	CuS	0.92
Oro	Au	0.98
Kusachiita	Bi ₂ CuO ₄	0.96
Marcasita	FeS ₂	0.98
Hematita	Fe ₂ O ₃	0.97
Lepidocrocita	γ-FeO(OH)	0.95
Goethita	Fe ³⁺ O(OH)	0.96
Hierro	Fe	0.99

Los patrones de los cristales simulados coincidieron coherentemente con los reales de la base de datos, aquellos valores mayores a 0.8, se consideran aceptables para su identificación.

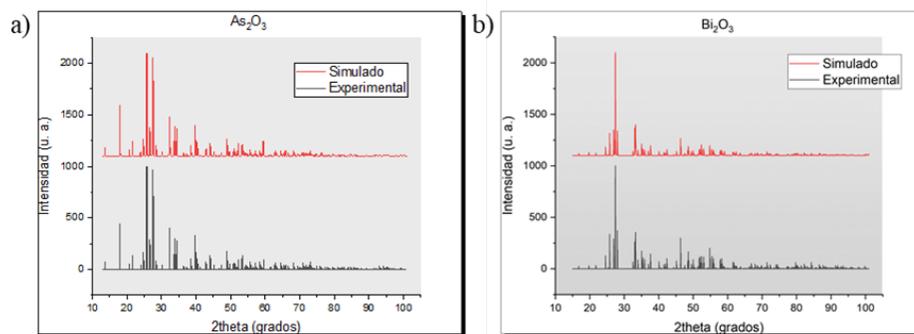


Figura 5. Comparación de patrón de difracción de rayos X simulado y experimental para a) As₂O₃ y b) Bi₂O₃

Parámetros de solubilidad

Hildebrand (1936) introdujo el concepto del parámetro de solubilidad (δ_{hil}), al definirlo como la raíz cuadrada de la densidad de energía de cohesiva (CED) (Ecuación 3), la cual es la energía necesaria para romper los enlaces intermoleculares por unidad de volumen. De acuerdo con Grennhalgh *et al.* (1999) y Forster *et al.* (2001), aquellos compuestos con parámetros de solubilidad con diferencias menores a 2 serían miscibles, valores entre 2 y 7, posiblemente lo serían y valores mayores a 7 serían inmiscibles. El parámetro de solubilidad se calcula mediante la Ecuación 3.

$$\delta_{hil} = \sqrt{CED} = \sqrt{\frac{E_{coh}}{V}} \tag{3}$$

Donde E_{coh} es la energía cohesiva y V es el volumen molar de la sustancia.

En la Tabla 4 se muestra la diferencia de los parámetros de los cristales con respecto al trióxido de arsénico, obteniendo valores de $24.33 \text{ (J/cm}^3\text{)}^{0.5}$ y $22.65 \text{ (J/cm}^3\text{)}^{0.5}$ para el Bi_2O_3 y As_2O_3 , respectivamente. Por otro lado, minerales como el hierro, oro y plata obtuvieron diferencias más altas con valores menores a $11.00 \text{ (J/cm}^3\text{)}^{0.5}$.

Tabla 4. *Parámetros de solubilidad en $\text{MPa}^{0.5}$ a partir de la simulación de las celdas amorfas de los minerales comparados con el As_2O_3 .*

Nombre	Fórmula	$\delta_{Hildebrand}$	$(\delta_{Arsenolita} - \delta_{Mineral})$	Miscibilidad con As_2O_3
Arsenolita	As_2O_3	22.65	-	-
Bismita	Bi_2O_3	24.33	1.68	Miscible
Marcasita	FeS_2	20.49	2.15	Posiblemente miscible
Cuarzo	SiO_2	24.91	2.26	Posiblemente miscible
Bismutina	Bi_2S_3	25.86	3.21	Posiblemente miscible
Galena	PbS	27.64	4.99	Posiblemente miscible
Malaquita	$\text{Cu}_2(\text{CO}_3)(\text{OH})_2$	17.23	5.42	Posiblemente miscible
Lenaita	AgFeS_2	16.96	5.69	Posiblemente miscible
Kusachiita	Bi_2CuO_4	16.42	6.23	Posiblemente miscible
Argentita	Ag_2S	16.21	6.44	Posiblemente miscible
Covellita	CuS	15.90	6.75	Posiblemente miscible
Pirrotina	$\text{Fe}_{(1-x)}\text{S}$	15.60	7.05	Posiblemente miscible
Calcopirita	CuFeS_2	15.53	7.12	No miscible
Lepidocrocita	$\text{Y-FeO}(\text{OH})$	14.78	7.87	No miscible
Goethita	$\text{Fe}^{3+}\text{O}(\text{OH})$	14.78	7.87	No miscible
Calcosina	Cu_2S	12.82	9.83	No miscible
Hematita	Fe_2O_3	12.55	10.09	No miscible
Plata	Ag	10.31	12.34	No miscible
Oro	Au	10.00	12.65	No miscible
Hierro	Fe	6.95	15.70	No miscible

CONCLUSIONES

La composición de la muestra mineral contenía 18 diferentes cristales identificados. Se crearon los cristales a partir de los datos de DRX obtenidos y como interés especial para la investigación se creó la estructura de Bi_2O_3 . Además, inicialmente se modelaron las estructuras cristalinas amorfas para la obtención del parámetro de solubilidad y los valores obtenidos fueron comparados con respecto al del As_2O_3 , indicando una afinidad en la miscibilidad entre As_2O_3 y Bi_2O_3 , una posible miscibilidad con otros 10 minerales que, entre

sus compuestos, se encuentran el Bi_2S_3 , y una inmiscibilidad con el resto de los minerales en los que destacan oro, plata y cobre. Los resultados indican que el As_2O_3 puede ser utilizado para la remoción del Bi_2O_3 a condiciones de presión y temperatura ambiente sin tener un efecto negativo en la recuperación de otros minerales de mayor valor comercial.

BIBLIOGRAFÍA

- Anthony, J., Bideaux, R., Bladh, K. & Nichols, M. (Eds.) (2020). Handbook of Mineralogy. *Mineralogical Society of America*. <http://www.handbookofmineralogy.org/>
- Arab, B., & Shokuhfar, A. (2013). Molecular Dynamics Simulation of Cross-Linked Epoxy Polymers : the Effect of Force Field on the Estimation of Properties. *Journal of Nano-and Electronic Physics*, 5(1), 1–5. https://www.researchgate.net/publication/286902080_Molecular_Dynamics_Simulati_on_of_Cross-Linked_Epoxy_Polymers_the_Effect_of_Force_Field_on_the_Estimation_of_Propert_ies
- Forster, A., Hempenstall, J., Tucker, I. & Rades, T. (2001). Selection of excipients for melt extrusion with two poorly water-soluble drugs by solubility parameter calculation and thermal analysis. *International Journal of Pharmaceutics*, vol. 226(1–2), 147–161. [https://doi.org/10.1016/S0378-5173\(01\)00801-8](https://doi.org/10.1016/S0378-5173(01)00801-8)
- Fu, W., Ram, R., Etschmann, B., Brugger, J., & Vaughan, J. (2020). Selective impurity removal and Cu upgrading of copper flotation concentrate by a spontaneously oxidative H_2SO_4 leaching process. *Hydrometallurgy*, vol. 195. <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2020.105411>
- Gražulis, S., Daškevič, A., Merkys, A., Chateigner, D., Lutterotti, L., Quirós, M., Serebryanaya, N., Moeck, P. Downs, R. & Le Bail, A. (2012). Crystallography Open Database (COD): An open-access collection of crystal structures and platform for world-wide collaboration. *Nucleic Acids Research*, vol. 40, pp. 420–427. <https://doi.org/10.1093/nar/gkr900>
- Greenhalgh, D., Williams, A., Timmins, P. & York, P. (1999). Solubility parameters as predictors of miscibility in solid dispersions. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 88(11), 1182–1190. <https://doi.org/10.1021/js9900856>
- Gupta, J., Nunes, C., Vyas, S. & Jonnalagadda, S. (2011). Prediction of solubility parameters and miscibility of pharmaceutical compounds by molecular dynamics simulations. *Journal of Physical Chemistry B*, 115(9), pp. 2014–2023. <https://doi.org/10.1021/jp108540n>
- Hildebrand, J. H. (1936). Solubility of Non-Electrolytes. *Nature*, vol. 138(742), <https://doi.org/10.1038/138742a0>
- Li, B., Liu, G., Xing, X., Chen, L., Lu, X., Teng, H. & Wang, J. (2019). Molecular dynamics

- simulation of CO₂ dissolution in heavy oil resin-asphaltene. *Journal of CO₂ Utilization*, vol. 33, pp. 303–310. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2019.06.011>
- Martin, M. (2006). Comparison of the AMBER, CHARMM, COMPASS, GROMOS, OPLS, TraPPE and UFF force fields for prediction of vapor-liquid coexistence curves and liquid densities. *Fluid Phase Equilibria*, vol. 248(1), pp. 50–55. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2006.07.014>
- Pfrommer, B., Côté, M., Louie, S. & Cohen, M. (1997). Relaxation of Crystals with the Quasi-Newton Method. *Journal of Computational Physics*, vol. 131(1), pp 233–240. <https://doi.org/10.1006/jcph.1996.5612>
- Rappé, A., Casewit, C., Colwell, K., Goddard, W. & Skiff, W. (1992). UFF, a Full Periodic Table Force Field for Molecular Mechanics and Molecular Dynamics Simulations. *Journal of the American Chemical Society*, vol. 114(25), pp. 10024–10035. <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja00051a040>
- Rappé, A., Colwell, K. & Casewit, C. (1993). Application of a Universal Force Field to Metal Complexes. *Inorganic Chemistry*, vol. 32(16), pp. 3438–3450. <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ic00068a012>
- Salehi, H., Ramdin, M., Moulton, O. & Vlugt, T. (2019). Computing solubility parameters of deep eutectic solvents from Molecular Dynamics simulations. *Fluid Phase Equilibria*, vol. 497, pp. 10–18. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2019.05.022>
- Singh, V., Batra, S. & Bhushan, I. (2020). Rietveld analysis for crystal structure determination of polycrystalline materials. *Materials Today: Proceedings*, vol. 29, pp. 832–835. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.04.867>
- Xiao, F., Mao, J., Cao, D., Shen, X., & Volinsky, A. A. (2012). The role of trivalent arsenic in removal of antimony and bismuth impurities from copper electrolytes. *Hydrometallurgy*, vol. 125–126, pp. 76–80. <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2012.05.011>
- Xiao, F., Zheng, Y., Wang, Y., Jian, H., Huang, X. & Ma, Y. (2008). Purification mechanism of copper electrolyte by As (III). *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 18(5), pp. 1275–1279. [https://doi.org/10.1016/S1003-6326\(08\)60216-2](https://doi.org/10.1016/S1003-6326(08)60216-2)