

6-1-2020

## Interaction of Particle-Particle and Particle-Bubble in Water: Molecular Dynamics Simulation

Qingqun Luo

*Taiyuan University of Technology, Key Laboratory Advanced Transducers and Intelligent Control System, Ministry of Education, Taiyuan 030024, China;*

Jieming Yang

*Taiyuan University of Technology, Key Laboratory Advanced Transducers and Intelligent Control System, Ministry of Education, Taiyuan 030024, China;*

Follow this and additional works at: <https://dc-china-simulation.researchcommons.org/journal>



Part of the Artificial Intelligence and Robotics Commons, Computer Engineering Commons, Numerical Analysis and Scientific Computing Commons, Operations Research, Systems Engineering and Industrial Engineering Commons, and the Systems Science Commons

---

This Paper is brought to you for free and open access by Journal of System Simulation. It has been accepted for inclusion in Journal of System Simulation by an authorized editor of Journal of System Simulation.

---

## Interaction of Particle-Particle and Particle-Bubble in Water:Molecular Dynamics Simulation

### Abstract

*Abstract: Graphene and a bulk of gas were used to represent a part of particle and a part of bubble, respectively, and their interactions in liquid water with dissolved gas were simulated. Changes of the structural phase diagram, the gas density, and the potential of mean force were analyzed. The results show that the interactions of particle-particle and particle-bubble are both related to the nanobubble bridges therein. The forming processes of nanobubble bridges were shown in details. The range of nanobubble bridges and the energy change of the system were quantitatively calculated.*

### Keywords

hydrophobic interaction, molecular dynamics, nanobubble bridge, potential of mean force

### Recommended Citation

Luo Qingqun, Yang Jieming. Interaction of Particle-Particle and Particle-Bubble in Water:Molecular Dynamics Simulation[J]. Journal of System Simulation, 2017, 29(8): 1795-1801.

## 水中颗粒-颗粒和颗粒-气泡间引力的分子动力学仿真

骆庆群, 杨洁明

(太原理工大学新型传感器与智能控制教育部与山西重点实验室, 太原 030024)

**摘要:** 通过分子动力学模拟的方法建立了疏水颗粒之间、疏水颗粒与气泡之间相互作用的模型, 阐明了疏水表面间和疏水表面与气泡间纳米气泡桥的形成和消失过程, 并定量计算了纳米气泡桥的作用距离和作用力大小。结果表明: 溶解在水中的气体会在疏水表面吸附, 当疏水颗粒彼此靠近到一定程度时, 吸附在它们表面上的气体会相互连通形成纳米气泡桥; 同样, 当疏水颗粒和气泡接近到一定程度时, 吸附在疏水颗粒表面的气体会与气泡内的气体相互连通形成纳米气泡桥, 纳米气泡桥是它们之间引力的根源。

**关键词:** 疏水作用; 分子动力学模拟; 纳米气泡桥; 平均力势

中图分类号: O56 文献标识码: A 文章编号: 1004-731X (2017) 08-1795-07

DOI: 10.16182/j.issn1004731x.joss.201708020

### Interaction of Particle-Particle and Particle-Bubble in Water: Molecular Dynamics Simulation

Luo Qingqun, Yang Jieming

(Taiyuan University of Technology, Key Laboratory Advanced Transducers and Intelligent Control System, Ministry of Education, Taiyuan 030024, China)

**Abstract:** Graphene and a bulk of gas were used to represent a part of particle and a part of bubble, respectively, and their interactions in liquid water with dissolved gas were simulated. Changes of the structural phase diagram, the gas density, and the potential of mean force were analyzed. The results show that the interactions of particle-particle and particle-bubble are both related to the nanobubble bridges therein. The forming processes of nanobubble bridges were shown in details. The range of nanobubble bridges and the energy change of the system were quantitatively calculated.

**Keywords:** hydrophobic interaction; molecular dynamics; nanobubble bridge; potential of mean force

## 引言

由于许多矿物都是由泡沫浮选工艺分选的, 因此水中疏水颗粒-疏水颗粒间和疏水颗粒-气泡间 (如下简称: 粒-粒/泡) 的相互作用备受关注。实践

证明在水中粒-粒/泡之间存在引力。学界对这些引力的研究一直没有间断, 近 20 年间学者们开始使用原子力显微镜直接测量粒-粒/泡间引力与粒-粒/泡间距离的关系。通过分析这些力-距离曲线发现气泡所表现出的作用属性和疏水表面的作用属性非常类似<sup>[1]</sup>, 粒-粒/泡间相互作用的力-距离曲线都如图 1 所示。如图 1 的 Approach 曲线所示, 粒-粒/泡彼此靠近过程中的作用力的变化分为三个阶段: (1) 最先出现的是一个斥力。关于这个斥力的存在根源有 2 种说法: 一是认为这个斥力是双电层力<sup>[1-3]</sup>;



收稿日期: 2015-09-24 修回日期: 2015-12-21;  
基金项目: 国家自然科学基金(21376161), 山西省科技攻关项目(20120321004-03);  
作者简介: 骆庆群(1978-), 男, 河北饶阳, 博士生, 研究方向为气体在疏水表面的吸附; 杨洁明(1956-), 女, 山西太古, 博士, 教授, 研究方向为煤炭浮选的控制和浮选机理。

<http://www.china-simulation.com>

• 1795 •

二是认为这个斥力是由粒-粒/泡的运动引起的流体阻力,并证实当它们的运动速度小于  $1 \mu\text{m/s}$  时这个斥力就不再存在了<sup>[4-6]</sup>。(2) 在这个斥力之后是一个“跃入式”的引力。这个引力在所有的实验中都有发现,它的特点是作用强度和作用距离都很大。这个引力的来源最广泛的共识是:粒-粒/泡之间形成了纳米气泡桥,纳米气泡桥力导致了这个引力<sup>[7-12]</sup>。(3) 再之后又是斥力。这个斥力是颗粒刺穿气泡后形成的三相接触线卡住了原子力显微镜的悬臂梁而形成的阻力,或疏水颗粒与另一个颗粒实质接触后的反作用力。粒-粒/泡远离过程中的作用力存在“滞后”现象,这是因为纳米气泡桥被拉伸所致。最后,相互作用力的消失是因为气泡桥的断裂。

从这些实验结果可以看出,存在于粒-粒/泡间的作用力不外乎三种,它们是静电力(包括双电层力和范德华力)、流体的动态阻力和纳米气泡桥力。并且静电力和流体阻力相比于纳米气泡桥的引力作用很小<sup>[3-5]</sup>。

综上所述,纳米气泡桥力在粒-粒/泡间相互吸引过程中起主导作用。因此,弄清楚纳米气泡桥的形成过程,并定量计算纳米气泡桥力的作用距离和作用大小是认识粒-粒/泡间引力的关键。本文的任务是通过分子动力学模拟的方法建立粒-粒/泡间相互作用的模型,阐释粒-粒/泡间纳米气泡桥的形

成和消失过程,并寻求实现定量计算纳米气泡桥的作用距和作用力大小的方法。

## 1 模拟模型、模拟算法与模拟方法

### 1.1 初始模型

受计算能力和累积误差的限制,分子动力学模拟模型一般不超过纳米级<sup>[13]</sup>。现实中颗粒和气泡的尺寸分别在微米级和毫米级。建模的惯用方法是取颗粒的一部分表面和气泡的一部分来进行模拟,对于纳米级尺度的颗粒表面其弧度可以忽略。因此,我们用  $2.5 \times 2.5(\text{nm}^2)$  的石墨烯来代替疏水颗粒的表面,用一块气团来代表气泡的一部分。通过模拟两片石墨烯间的相互作用和一片石墨烯与气体团的相互作用来诠释颗粒-颗粒和颗粒-气泡间的相互作用。初始模型如图 1 所示,  $5 \times 5 \times 35(\text{nm}^3)$  的模拟盒子从左到右被分为大小为  $5 \times 5 \times 15(\text{nm}^3)$ 、 $5 \times 5 \times 5(\text{nm}^3)$  和  $5 \times 5 \times 15(\text{nm}^3)$  的三部分,中间的部分充满 1 000 个氮气分子作为气泡的一部分,其它两部分按照每  $\text{nm}^3$  填充 33 个 SPC (simple point charge) 水分子作为水(每  $\text{nm}^3$  填充 33 个水分子符合 310 K 时水的密度),并在水中引入 3 000 个氮气分子作为溶解在水中的气体相。左侧 7 nm 处,平行地放置相距 0.5 nm 面积为  $2.5 \times 2.5(\text{nm}^2)$  的两片石墨烯。

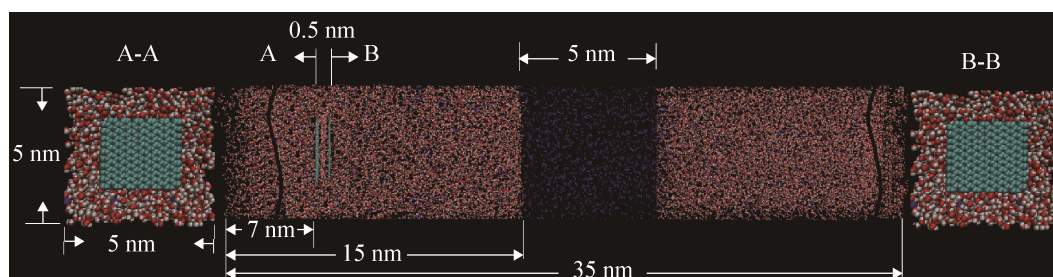


图 1 分子动力学模拟的初始模型

Fig. 1 Initial model of molecular dynamics simulation

### 1.2 原子间的受力计算

对于组成共价键的原子间的相互作用由谐振势  $V(r) = k_b(r - b_0)^2/2$  描述,其中  $k_b$  和  $b_0$  分别代表键常数和键的平衡长度。对于没有组成键的原子之间

的相互作用由 Lennard-Jones 势函数  $U = 4\epsilon_{ij}[(\sigma_{ij}/r)^{12} - (\sigma_{ij}/r)^6]$ <sup>[14]</sup> 描述,其中  $\sigma_{ij}$  和  $\epsilon_{ij}$  分别是原子间的距离和能量常数。这些参数间的关系遵从如下计算法则:  $\sigma_{ij} = (\sigma_{ii} + \sigma_{jj})/2$ ,  $\epsilon_{ij} = (\epsilon_{ii}\epsilon_{jj})^{1/2}$ 。气体和固体的力场参数如表 1 所示,水的力场参数遵从

Amber 96 力场中的设置。另外, 模型盒子的  $xyz$  三个方向均设置了周期边界条件用来处理边界上粒子间相互作用的计算。

表 1 模拟参数

Tab. 1 Simulation parameters

Atom type	$b_0/$ nm	$K_b/$ (kJ/mol·nm <sup>2</sup> )	$\epsilon/$ (kJ/mol)	$\sigma/$ nm
N	0.112 0	1 280 025	0.711 280	0.325 000
C	0.142 0	334 720	0.359 824	0.339 967

### 1.3 算法的选择

对于分子动力学模拟来说, 用于计算运动方程积分的时间远少于用于计算粒子间相互作用力的时间, 选择允许较大时间步长的算法用于运动方程的积分计算既不会影响计算速度又能提高准确度, 并且这样也会使单位模拟时间内力的计算量减少, 有助于提高计算效率, 因此本模拟采用的是预测-校正算法。预测-校正算法是一种高阶算法, 由于其精度的提高使得采用较长积分步长成为可能。预测-校正算法的基本思想是用粒子在  $t$  时刻的位置坐标和位置坐标的  $n$  阶导数来预测粒子在  $t+\Delta t$  时刻的位置坐标及其位置坐标的  $n$  阶导数, 然后计算粒子在预测位置的受力和加速度, 根据预测加速度和实际加速度的差值来不断调整预测加速度以接近事实, 再进一步改进对位置坐标及其  $n-1$  阶导数的估算。以三阶预测-校正为例, 某粒子的坐标在  $t+\Delta t$  时刻的泰勒展开式为

$$r(t+\delta t) = r(t) + \delta t \frac{\partial r}{\partial t} + \frac{\delta t^2}{2!} \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} + \frac{\delta t^3}{3!} \frac{\partial^3 r}{\partial t^3} + \dots \quad (1)$$

设  $r_0(t) = r(t)$ ,  $r_1(t) = \delta t \frac{\partial r}{\partial t}$ ,  $r_2(t) = \frac{\delta t^2}{2!} \frac{\partial^2 r}{\partial t^2}$ ,  $r_3(t) = \frac{\delta t^3}{3!} \frac{\partial^3 r}{\partial t^3}$ , 则粒子的位置预测如下:

$$\begin{bmatrix} r_0^p(t+\delta t) \\ r_1^p(t+\delta t) \\ r_2^p(t+\delta t) \\ r_3^p(t+\delta t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_0(t+\delta t) \\ r_1(t+\delta t) \\ r_2(t+\delta t) \\ r_3(t+\delta t) \end{bmatrix} \quad (2)$$

求得坐标  $r_0^p(t+\delta t)$ , 就可以计算粒子在预测

位置的受力  $F$  和坐标  $r_2^p(t+\delta t)$  的校正值  $r_2^c(t+\delta t) = \frac{F}{m}$ , 预测中的位置误差为:

$$\Delta r_2(t+\delta t) = r_2^c(t+\delta t) - r_2^p(t+\delta t) \quad (3)$$

其校正如下:

$$\begin{bmatrix} r_0^c(t+\delta t) \\ r_1^c(t+\delta t) \\ r_2^c(t+\delta t) \\ r_3^c(t+\delta t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_0^p(t+\delta t) \\ r_1^p(t+\delta t) \\ r_2^p(t+\delta t) \\ r_3^p(t+\delta t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} C_0 \\ C_1 \\ C_2 \\ C_3 \end{bmatrix} \Delta r_2(t+\delta t) \quad (4)$$

校正系数  $C_i$  的最佳取值与计算中  $r_i$  有几阶导数有关。对于三阶预测-校正方法, 四个参数的取值分别为  $C_0=1/6$ ,  $C_1=5/6$ ,  $C_2=1$ ,  $C_3=1/3$ <sup>[15]</sup>。从计算原理可以看出用该方法计算的过程中要存储粒子坐标的高阶导数信息, 因此对内存要求较高, 这是该算法的缺点。但是通过本文的模拟实践发现, 如果把模拟中的截断距离设为 1 nm, 积分步长设为 2 fs, 采用 4G 内存就可以满足要求。

### 1.4 自由能变化的计算方法

系统自由能的变化可以很好的反应系统与外界相互做功的情况。对于本系统来说, 自由能的变化可以反映纳米气泡桥作用过程中系统对外做功还是需要外界对系统做功; 另外, 做功对距离的微分可以直接反映力的变化情况, 因此计算自由能变化是定量计算粒-粒/泡间相互作用力的必要途径。本模拟对自由能变化的计算方法采用的是基于概率分布的平均力势法。其原理是: 假设系统有 A, B 两个状态, 通过统计系统在状态 A 上的时间  $t_A$  和在状态 B 上的时间  $t_B$ , 以此求系统在状态 A 上的概率  $P_A = t_A / (t_A + t_B)$  和系统在状态 B 上的概率  $P_B = t_B / (t_A + t_B)$ , 得到平衡常数  $K = P_B / P_A$ , AB 两个状态的自由能差就可以通过  $\Delta G = -RT \ln K$  求得。而对于本系统是有无数个状态, 解决方法是沿着石墨烯的相互作用坐标把作用过程分成若干小段, 将其离散化, 然后让系统在每一段上自由地移动, 最后统计系统落在每一段上的时间比例, 得到一个概率密度分布, 然后换成每一小段(状态)上的自由能变化, 连成一条自由能变化曲线

(平均力势曲线), 以此来看自由能的变化。但是, 由于模拟本身的缺陷系统不会自动访问所有的状态, 特别是高势垒的状态, 会造成结果采样不足, 无法统计。针对这一难题可以采用伞状抽样方法解决, 具体做法是在石墨烯 B 上加载一个偏势来进行偏采样, 再经过加权直方图分析法把偏采样的统计结果转换为无偏采样的统计结果, 得到平均力势曲线。曲线的起伏反映自由能的变化, 曲线的斜率反映作用力的大小。

### 1.5 模拟方法和步骤

所有计算采用 GROMACS 程序<sup>[16]</sup>在 linux 平台运行。具体模拟步骤如下: 第 1 步, 采用最速下降法对初始模型进行能量最小化。第 2 步, 对初始模型进行 NVT 平衡, 采用 Berendsen 弱耦合合法使温度保持在 310 K。第 3 步, 对初始模型进行 NPT 平衡, 同样用 Berendsen 弱耦合合法<sup>[17]</sup>使压力保持在 1.0 bar。这三步模拟中, 石墨烯片均被固定在原来的位置上不动。第 4 步, 自由运动模拟, 这一步中用 Nose-Hoover 恒温器维持温度不变, 用 Parrinello-Rahman 恒压器维持压强不变, 这种组合可以保证模拟为真正的正则系综, 这期间 A 石墨烯被固定, B 石墨烯处于自由状态。第 5 步, 拉动阶段, 在这个阶段把 A 石墨烯固定不动, 在 B 石墨烯上加载一个正弦势来拉动 B 石墨烯离开 A 石墨烯。其中, 正弦势的力常数为  $10\ 000\ \text{kJ}\ \text{mol}^{-1}\cdot\text{nm}^{-2}$ , 拉开速度为  $0.017\ \text{nm/ps}$ , 用时  $1\ 000\ \text{ps}$  把 B 石墨烯沿着 Z 方向拉动  $17\ \text{nm}$ , 并从拉动过程中的轨迹数据中提取出  $1\ 000$  个系统分子构象, 再在这  $1\ 000$  个构象中按照采样距离约为  $0.17\ \text{nm}$  选取  $100$  个构象作为伞状抽样初始构象。第 6 步, 伞状抽样, 首先让上一步提取的  $100$  个初始构象达到平衡状态(每个构象用  $100\ \text{ps}$  的时间来平衡)。然后, 再对各个初始构象进行  $400\ \text{ps}$  的伞状抽样。第 7 步, 用加权直方图分析法<sup>[18]</sup>对偏采样进行还原, 得出平均力势曲线。

## 2 分析与讨论

经过前 3 步的模拟, 初始模型达到平衡状态; 第 4 步的模拟是为了研究自由状态下各相分子的运动和分布。分析方法有两种, 一是直接观察分子构象图来看各相粒子的分布。二是通过分析各相粒子的密度分布, 以分析气体密度分布为例, 方法是在原子的运动轨迹数据中引入等体积的格子, 计算每个格子内的气体密度, 每个格子的气体密度对应格子的坐标分布就形成了整个模拟系统内的气体密度分布(如图 2 所示)。通过如上方法, 在第 4 步模拟中发现了两个现象。第一个现象是两片石墨烯的间距从初始的  $0.5\ \text{nm}$  缩小至约  $0.37\ \text{nm}$ , 这说明它们之间存在引力(如图 2a 所示); 第二个现象是石墨烯上吸附和积聚了气体分子(如图 2a 所示)。关于气体在疏水表面的吸附和积聚现象已经是学界的共识<sup>[19-21]</sup>, 并且详细描述气体吸附和积聚过程的分子动力学模型已由作者建立, 因此关于“气体是如何吸附的”本文不再赘述, 请参考文献[22]。在第 5 步拉动阶段中, B 石墨烯从距 A 石墨烯  $0.37\ \text{nm}$  拉到  $17.37\ \text{nm}$  处, 沿途提取出的一些构象图和对应这些构象的气体密度分布被列举在了图 2 中。从图 2 中可以很清楚的看出: 当石墨烯间距小于约  $0.5\ \text{nm}$  时, 两片石墨烯之间形成了一个空穴, 其中既没有水分子也没有气体分子(如图 2a 所示); 当石墨烯间距大于约  $0.5\ \text{nm}$  时, 气体分子开始进入空穴, 直到  $0.8\ \text{nm}$  空穴被气体充满形成了一个纳米气泡桥, 如图 2b 和 2c 所示; 之后, 随着石墨烯间距的增加水分子开始挤压气体分子(如图 2c~2e 所示); 直到约  $1.6\ \text{nm}$  时, 纳米气泡桥破裂(如图 2g 所示); 当石墨烯间距约  $8\ \text{nm}$  时, 吸附在 B 石墨烯上的气体与气团的气体开始联通, 在气团和 B 石墨烯之间形成了一个纳米气泡桥(如图 2h); 之后, B 石墨烯逐渐被气泡吞入(如图 2i~2j); 再之后, B 石墨烯穿过气泡(如图 2k); 当石墨烯间距大于约  $13\ \text{nm}$  时, 石墨烯 B 开始离开气泡, 但是后面拖着一个气体尾巴(如图 2k~2n); 直到石墨烯间距约为  $15\ \text{nm}$  时, 这个气



体尾巴断裂(如图 2o); 这个气体尾巴是石墨烯表面吸附气泡内的气体的结果, 它也是一个纳米气泡桥。综上可以看出, 当一个疏水表面和另一个疏水表面距离足够靠近时, 吸附在其表面的气体相互连通形成纳米气泡桥; 当它们分离时气泡桥被拉伸直至断裂。同样, 当一个疏水表面和一个气泡距离足够近时, 吸附在疏水表面的气体和气泡内的气体连通也形成纳米气泡桥, 分离时也一样。

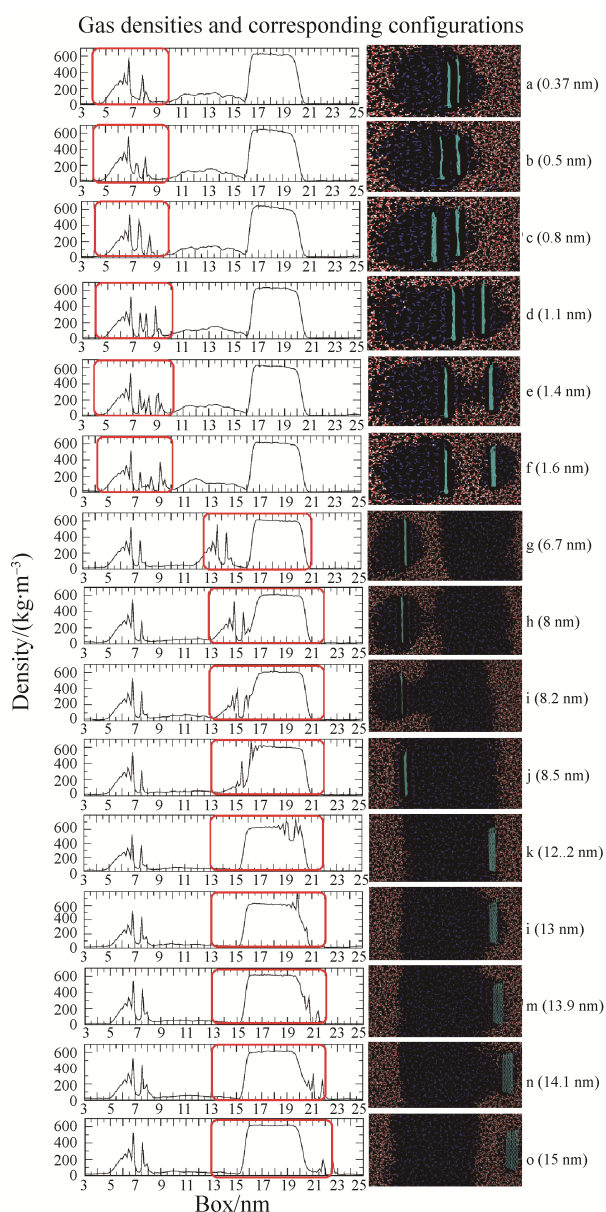


图 2 不同石墨烯间距的气体分布图和对应的构象图  
Fig. 2 Gas densities and corresponding configurations between graphene at different spacing

经过第 6 步和第 7 步得到如图 3 所示的平均力势曲线。从图 3 可以看出, 随着石墨烯间距增大自由能变化如下: 从约 0.37 nm 到约 1.6 nm 自由能增加, 这说明两片石墨烯之间存在引力, 把它们分开需要外力做功; 并且 0.37~0.8 nm 间的曲线斜率大于 0.8~1.6 nm 的斜率, 这说明 0.37~0.8 nm 间的真空纳米气泡桥的桥力大于 0.8~1.6 nm 间的气体纳米气泡桥的桥力; 然后, 从约 1.6 nm 到约 8 nm 石墨烯 B 在水中移动, 自由能保持不变, 这一过程中无需外力做功, 即受力为零; 从约 8 nm 到约 9.5 nm 自由能减小, 说明这一过程是自发过程, 这是 B 石墨烯和气泡之间形成的纳米气泡桥的引力作用的结果; 从约 9.5 nm 到约 13 nm 自由能保持不变, 作用力为零, 即 B 石墨烯在气泡中穿过; 从约 13 nm 到 15 nm 自由能增加是因为石墨烯 B 离开气泡时, 纳米气泡桥的引力形成的阻力。对比图 2 和图 3 可以发现, 自由能的变化和气泡桥的形成与消失过程完全对应, 这进一步表明纳米气泡桥力是疏水引力的根本来源。

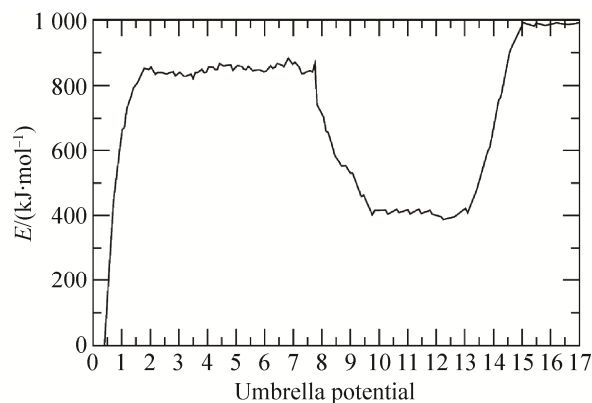


图 3 PMF-石墨烯距离曲线  
Fig. 3 PMF curve between graphene at different spacing

另外本模拟的结果和文献[23]中用原子力显微镜测量的在饱和和溶解氮气的水中聚乙烯球和聚乙烯表面的相互作用结果一致。

### 3 结论

(1) 用分子动力学软件模拟了疏水颗粒间和疏水颗粒与气泡间纳米气泡桥的形成和消失过程。结果显

示: 气体首先吸附在疏水表面, 当疏水表面和另一个疏水表面靠近时, 它们表面上吸附的气体相连接形成纳米气泡桥; 当疏水表面和气泡接近时, 颗粒表面吸附的气体会与气泡的气体连通形成纳米气泡桥。当它们彼此离开时纳米气泡桥被拉伸形成引力。

(2) 通过自由能变化定量计算了颗粒-颗粒和颗粒-气泡间作用力和作用距离的大小。

(3) 模拟结果和文献的实验结果一致, 表明本模拟中所采用的初始模型、参数设置和模拟方法是合理的。

### 参考文献:

- [1] Ducker W A, Xu Z, Israelachvili J N. Measurements of Hydrophobic and DLVO Forces in Bubble-Surface Interactions in Aqueous Solutions [J]. *Langmuir* (S0743-7463), 1994, 10(9): 3279-3289.
- [2] Ishida N. Direct measurement of hydrophobic particle-bubble interactions in aqueous solutions by atomic force microscopy: Effect of particle hydrophobicity [J]. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* (S0927-7757), 2007, 300(3): 293-299.
- [3] Ren S, Masliyah J, Xu Z. Studying bitumen-bubble interactions using atomic force microscopy [J]. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* (S0927-7757), 2014, 444(4): 165-172.
- [4] Nguyen A V, Nalaskowski J, Miller J D. A study of bubble-particle interaction using atomic force microscopy [J]. *Minerals Engineering* (S0892-6875), 2003, 16(11): 1173-1181.
- [5] Nguyen A V, Evans G M, Nalaskowski J, et al. Hydrodynamic interaction between an air bubble and a particle: atomic force microscopy measurements [J]. *Experimental Thermal and Fluid Science* (S0894-1777), 2004, 28(5): 387-394.
- [6] Butt H J. A Technique for Measuring the Force between a Colloidal Particle in Water and a Bubble [J]. *Journal of Colloid and Interface Science* (S0021-9797), 1994, 166(1): 109-117.
- [7] Attard P. Thermodynamic Analysis of Bridging Bubbles and a Quantitative Comparison with the Measured Hydrophobic Attraction [J]. *Langmuir* (S0743-7463), 2000, 16(10): 4455-4466.
- [8] Attard P. Nanobubbles and the hydrophobic attraction [J]. *Advances in Colloid and Interface Science* (S0001-8686), 2003, 104(1): 75-91.
- [9] Ishida N, Sakamoto M, Miyahara M, et al. Attraction between Hydrophobic Surfaces with and without Gas Phase [J]. *Langmuir* (S0743-7463), 2000, 16(13): 5681-5687.
- [10] Ishida N, Higashitani K. Interaction forces between chemically modified hydrophobic surfaces evaluated by AFM-The role of nanoscopic bubbles in the interactions [J]. *Minerals Engineering* (S0892-6875), 2006, 19(6/8): 719-725.
- [11] Esben Thormann A C S, Per L Hansen, Ole G Mouritsen. Force Trace Hysteresis and Temperature Dependence of Bridging Nanobubble Induced Forces between Hydrophobic Surfaces [J]. *ACS nano* (S1936-0851), 2008, 2(9): 1817-1824.
- [12] Koishi T, Yoo S, Yasuoka K, et al. Nanoscale Hydrophobic Interaction and Nanobubble Nucleation [J]. *Physical Review Letters* (S0031-9007), 2004, 93(18): 185701-185708.
- [13] 司加全, 刘群. 基于构件技术的三维分子动力学仿真软件的开发 [J]. *系统仿真学报*, 2008, 20(23): 6380-6382. (Si Jiaquan, Liu qun. Development of three-dimensional molecular dynamics simulation software based on components technology [J]. *Journal of System Simulation* (S1004-731X), 2008, 20(23): 6380-6382.)
- [14] Duan Y, Wu C, Chowdhury S, et al. A point-charge force field for molecular mechanics simulations of proteins based on condensed - phase quantum mechanical calculations [J]. *Journal of computational chemistry* (S0192-8651), 2003, 24(16): 1999-2012.
- [15] Frenkel D, Smit B. *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications* [M]. USA: Academic Press Inc., 1996: 66.
- [16] Hess B, Kutzner C, Van Der Spoel D, et al. GROMACS 4: Algorithms for Highly Efficient, Load-Balanced, and Scalable Molecular Simulation [J]. *Journal of Chemical Theory and Computation* (S1549-9618), 2008, 4(3): 435-447.
- [17] Berendsen H J C, Postma J P M, Van Gunsteren W F, et al. Molecular dynamics with coupling to an external bath [J]. *The Journal of Chemical Physics* (S0021-9606), 1984, 81(8): 3684-3690.
- [18] Hub J S, De Groot B L, Van Der Spoel D. g\_wham—A Free Weighted Histogram Analysis Implementation Including Robust Error and Autocorrelation Estimates [J]. *Journal of Chemical Theory and Computation* (S1549-9618), 2010, 6(12): 3713-3720.

(下转第 1808 页)

<http://www.china-simulation.com>

• 1800 •