

纳米胶体团聚现象的分子动力学模拟

倪中华*, 张鑫杰

东南大学机械工程学院, 南京 210096

* E-mail: nzh2003@seu.edu.cn

收稿日期: 2008-03-03; 接受日期: 2008-08-18

国家高技术研究发展计划(“863”计划)(批准号: 2006AA04Z351)和国家自然科学基金项目(批准号: 50675033, 30770553)资助

摘要 采用非平衡态分子动力学方法模拟可极化纳米胶体在非均匀电场下的介电泳情况, 通过改变电场强度和系统温度, 分析纳米胶体的团聚现象. 常温状态下的仿真结果表明, 虽然布朗力能影响纳米胶体的介电泳状况, 但当纳米胶体之间的距离小于 12σ 时, 其相互吸引力迅速增大, 从而克服布朗力影响, 使胶体产生团聚. 当布朗力对胶体运动影响较小时, 电场强度增大使得胶体所受的介电泳力增大, 相应地胶体所受的吸引力也增大, 最终导致胶体的聚集速度变快. 仿真结果也显示系统温度的升高使得胶体所受的布朗力增大, 从而影响纳米胶体的团聚. 最后, 采用 DLVO 理论对相互作用的胶体运动状态进行研究, 得出胶体的位能曲线图和胶体间吸引力随胶体中心距变化的曲线图, 并将后者与分子动力学方法得出的结论进行对比, 发现这两条曲线的变化趋势基本相同, 这说明本文的仿真模型是符合理论的.

关键词

分子动力学
纳米胶体
介电泳
团聚现象
DLVO 理论

介电泳(dielectrophoresis, DEP)是指可极化粒子在非均匀电场作用下朝着电场强度高(正介电泳)或低(负介电泳)方向的运动^[1]. 基于介电泳力的微纳米生物粒子操纵技术与基于机械力、流体力、声辐射力和光辐射力等操纵技术相比, 由于没有移动部件、实施简单且满足大量并行的主动式非接触操作的需求, 成为目前微纳米生物粒子操纵技术中一项重要的使能技术^[2-4].

随着微机电系统(micro-electro-mechanical systems, MEMS)的发展, 特别是微纳米电极制造水平的提高, 纳米介电泳理论研究成为该领域研究的热点. 代表性的研究: Zheng等人^[5,6]详细分析了粒子的尺度效应、电极尺度效应对分子尺度粒子大规模并行操纵的影响, 并进行了定量分析研究; Morgan等人^[7]采用了一种微流体管道, 对不同类型的纳米粒子进行控制, 并对粒子运动进行动力学仿真; Wong等人^[8]研究了微流体中微纳米粒子在各种电动力作用下的运动

规律, 给出了微流体环境下各种电动力与粒子大小和电极尺寸之间的大小关系图; Li等人^[9]采用一种典型的交叉指状电极, 在交流电学情况下, 使用行波介电泳对纳米粒子进行有选择地控制和分离, 并提出了一种无网格数值计算方法.

目前大多采用多相流体直接数值模拟方法来模拟生物粒子的团聚和分离过程. 一般来说, 在两相流体直接数值模型中, 最常用的模型有两种. 第一种模型需要将Navier-Stokes等式离散化为一个固定的欧拉网格, 然后令粒子在这个网格上移动. 例如Kadakhsham等人^[10]采用离散拉格朗日乘法器(DLM)方法研究了非导电溶液中微纳米尺度粒子分别在均匀电场和非均匀电场下的介电泳情况. Tryggvason等人^[11]采用类似的方法模拟了分布式流体粒子的运动. 所不同的是后者的模型中, 粒子的外形是变化的. 第二种模型使用移动网格方法, 通常需要重画网格和进行插补运算, 采用这类方法的有Hu^[12], Johanson和

Tezduyar^[13].

上述方法通常用于微纳米级粒子(几百纳米)的团聚和分离过程的模拟,而对纳米级粒子(几十纳米以下)则还没有相关研究.近年来有些学者提出采用分子动力学(molecular dynamics, MD)方法对纳米级粒子的介电泳情况进行模拟. MD方法通过求解有相互作用的各个粒子的运动方程,得到每个粒子空间位置和运动状态随时间的变化状况,从而统计出材料的宏观行为特性.由于MD方法能够研究原子级粒子的运动,因此在研究纳米级粒子的介电泳方面有其独特的优势.代表性的研究有Salonen等人^[14,15]采用MD方法研究单个纳米胶体在变化的电场和温度下的介电泳特性;此外,他们还讨论了二聚物的介电泳特性,得出胶体聚合物可以有效地克服布朗运动影响的结论. Yuan等人^[16]采用MD方法建立了一种MD 软球模型,并研究了微米级粒子的正、负介电泳情况.

鉴于 MD 方法在研究纳米级粒子方面的优越性,本文采用非平衡态分子动力学方法对纳米胶体的介电泳情况进行研究,分析其在变化的非均匀电场强度和温度情况下的团聚现象,并研究胶体在聚集过程中的受力情况.最后,采用 DLVO 理论对上述研究进行理论验证.

1 模型与方法

1.1 分子动力学模型

本文采用纳米胶体及周围溶剂粒子作为仿真系统. 仿真晶格采用具有周期性边界条件的立方体,边长为 $L_0=70\sigma$ (σ 为单位长度, $\sigma=1.0\times 10^{-9}$ m). 纳米胶体模型采用一种通用模型^[17],即一个带电荷 q_{mac} 的大离子和吸附于其表面的 n 个分别带电荷 q_{mic} 的小离子组成一个纳米胶体,并令 $q_{\text{mac}}+nq_{\text{mic}}=0$,以保证该胶体为电中性的电介质. 令大离子半径为 $R=5\sigma$,质量为 $m_{\text{mac}}=155m$ (m 为单位质量, $m=35$ u),所带电量为 $q_{\text{mac}}=-20e$ (e 为单位电量, $e=1.602\times 10^{-19}$ C);小离子半径为 $r=0.5\sigma$,质量为 $m_{\text{mic}}=1m$,所带电量为 $q_{\text{mic}}=+2e$,小离子个数为 $n=10$. 溶剂粒子的半径和质量与小离子相同. 除被胶体所占的空间外,近似在 $(3\sigma)^3$ 的立方体内分布一个溶剂粒子,取这个较小的密度值是

为了减小溶剂粒子对胶体摩擦的影响,这对本文的研究结果并没有多大影响. 仿真系统中纳米胶体的个数为 12,中性溶剂粒子的个数约为 11935. 胶体和仿真系统模型如图 1 所示.

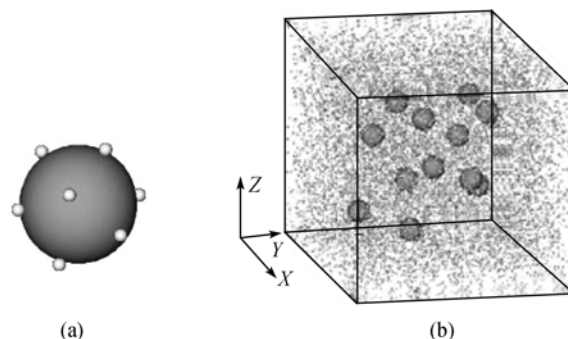


图 1 模型示意图

(a) 纳米胶体模型; (b) 仿真系统模型

任何两个粒子间都会有相互作用,其作用势采用Lennard-Jones (LJ)作用势. 因为模型中的粒子都为实体,且相互间的最短距离近似为 1σ ,为便于计算,需考虑一硬核半径 r_0 ^[18],将实体粒子转化为质点来计算,从而得到模型的势函数表达式为

$$\phi_{\text{LJ}}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij} - r_0} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij} - r_0} \right)^6 + \frac{1}{4} \right], \quad r_{ij} \leq r_c; \quad (1)$$

$$0, \quad r_{ij} > r_c,$$

上式中, $r_{ij}=|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|$,是相互作用粒子 i 与 j 的中心距($\mathbf{r}_i$ 是粒子 i 的位置向量),位势的截断距离为 $r_c=r_0+2^{1/6}\sigma$. 大离子之间相互作用时, $r_0=9.0\sigma$,大离子与小离子作用时, $r_0=4.5\sigma$,其它情况 $r_0=0$. 单位时间用 $\tau=\sigma\sqrt{m/\epsilon}$ 表示,其中特征参数 ϵ 为单位能量, $\epsilon=1.0\times 10^{-20}$ J.

离子间静电相互作用为库仑力作用,则离子 i 与 j 的静电相互作用的能量表达式为

$$\phi_c(r_{ij}) = \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r_{ij}}, \quad (2)$$

上式中, q_i 为离子 i 所带的电量, ϵ_0 为真空介电常量, ϵ_r 为媒介的相对介电常数. 采用强库仑耦合以确保小离子吸附在大离子表面,即令 $(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)^{-1}=56\epsilon\sigma/e^2$.

1.2 仿真过程

随机分布大离子和溶剂粒子的位置, 小离子按静电相互作用分布于大离子表面, 并令所有粒子间的距离大于它们的 LJ 势的截断距离. 给定所有粒子的质量、半径、电量等, 并初始化系统中粒子的速度, 粒子的初速度可以从初始温度分布下的 Maxwell-Boltzmann 分布来随机选取. 采用 Velocity-Verlet 算法对经典力学方程进行积分

$$\begin{cases} R_i(t+\Delta t) = R_i(t) + V_i(t)\Delta t + \frac{F_i(t)}{2m}\Delta t^2; \\ V_i(t+\Delta t) = V_i(t) + \frac{F_i(t) + F_i(t+\Delta t)}{2m}\Delta t, \end{cases} \quad (3)$$

其中, R_i , V_i 和 F_i 分别是粒子的位置、速度和所受的力, 积分时步长 Δt 为 0.003τ .

仿真过程前 20000 步, 模拟采用正则系统, 并使用 Berendsen 热浴法调整系统的温度, 使系统平衡在所期望的温度上. 20000 步以后, 模拟采用非平衡态 MD 方法, 不再进行调温. 对胶体施加非均匀电场, 非均匀电场采用球对称直流电场, 该电场模型可以产生较强的电场梯度. 令该球对称直流电场位于 $-Y$ 轴方向, 电场^[14]公式如下:

$$\mathbf{E}(R) = E_0 \left(\frac{R_0}{R} \right)^2 \mathbf{e}_R, \quad (4)$$

上式中, E_0 是胶体初始径向位置处的电场强度, R 为粒子的位移, R_0 为胶体初始径向位置, 令为 1500σ , $\mathbf{e}_R$ 为胶体径向矢量.

本文使用的胶体模型近似为一电偶极子, 且电偶极子两端距离远小于外加非均匀电场两端电极间的距离, 则其所受的介电泳力可以表示为 $\mathbf{F}_{\text{DEP}} = (\mathbf{p} \cdot \nabla) \mathbf{E}$. 结合电偶极距和电场强度的关系 $\mathbf{p} = \alpha_p \mathbf{E}$ (α_p 为胶体的总极化率), 得出该电场下胶体的介电泳力表达式为

$$\mathbf{F}_{\text{DEP}} = 2\alpha_p \frac{E_0^2}{R_0} \left(\frac{R_0}{R} \right)^5 \mathbf{e}_R. \quad (5)$$

MD 方法中胶体的介电泳力可以简单的用胶体所受的净电场力来表示

$$\mathbf{F}'_{\text{DEP}} = \sum \mathbf{F}_{E,i} = \sum q_i \mathbf{E}_i(R_i), \quad (6)$$

上式中, $\mathbf{F}_{E,i}$ 为组成胶体的离子所受的电场力.

胶体所受的吸引力 $\mathbf{F}_A$ 与其介电泳力和静电力有关, 计算公式如下

$$\mathbf{F}_A = \mathbf{F}_D + \mathbf{F}'_{\text{DEP}}, \quad (7)$$

上式中, $\mathbf{F}_D$ 为胶体之间的静电相互作用力.

胶体所受的布朗力 $\mathbf{F}_B$ 与 LJ 力有关, 计算公式为

$$\mathbf{F}_B = \sum_k \mathbf{F}_{\text{LJ}}, \quad (8)$$

上式中, $\mathbf{F}_{\text{LJ}}$ 为溶剂粒子作用于该胶体的 LJ 力.

2 仿真结果与分析

本章节讨论了采用 MD 方法模拟可极化纳米胶体的介电泳状况所得到的一些结论, 分析其在变化的电场强度和温度下的团聚情况, 并通过研究两个相互作用胶体间的吸引力来探讨其团聚的内在原因. 此外, 应用 DLVO 理论对胶体的团聚特性进行研究, 将分析得到的结果与采用 MD 方法所得的结论进行对比, 以验证本文 MD 模型的可行性.

2.1 非均匀电场对胶体团聚的影响

图 2 所示的为常温下纳米胶体在施加非均匀电场前后的分布情况. 图 2 中, 非均匀电场参数 E_0 为 $1.0\epsilon/\epsilon\sigma$ (为了更清楚的体现胶体的团聚现象, 图 2 中没有显示溶剂粒子). 图 2(a) 为仿真 20000 步时胶体的分布情况, 由于之前并没有对胶体施加非均匀电场, 因此胶体为电中性, 且基本上呈均匀分布(图 2 中由于视角问题, 均匀分布现象并不明显). 20000 步以后对胶体施加非均匀电场, 胶体表面的小离子位置重新分布, 胶体电偶极化且开始相互吸引. 仿真 80000 步后胶体的分布情况如图 2(b) 所示, 此时胶体所受的介电泳力约为 $10^{-3}\epsilon/\sigma \sim 10^{-2}\epsilon/\sigma$, 而它所受的布朗力最大可以达到 $0.0437\epsilon/\sigma$, 即胶体所受的布朗力大于介电泳力. 在这种情况下, 布朗力会影响胶体的介电

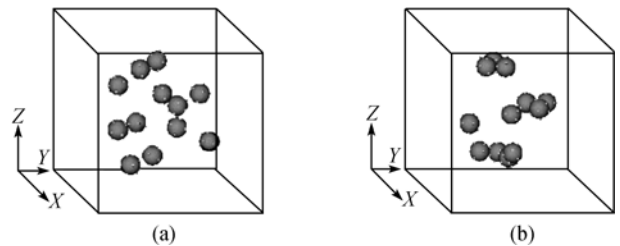


图 2 胶体的团聚现象

(a) 初始状态胶体均匀分布; (b) 加电场后胶体团聚

泳状况, 而图 2(b)的情况表明此时胶体所受的布朗力并不能阻碍其团聚运动. 因此, 可极化纳米粒子在非均匀电场作用下电偶极化后, 其团聚现象是可能发生的.

图 3 显示的为不同非均匀电场强度对纳米胶体团聚效应的影响. 为了更好地体现电场强度对胶体团聚的影响, 在此选用较低的系统温度 $T=0.03\varepsilon/k_b$ 以减小胶体的布朗运动. 图 3(a), (b), (c) 分别表示 $E_0=1.0, 1.75$ 和 $2.5\varepsilon/e\sigma$ 时胶体的团聚情况. 仿真 50000 步, 对比这三幅图, 发现图 3(a)只有少数几个胶体团聚在一起, 胶体分布较为分散; 图 3(b)中团聚的胶体数较图 3(a)稍多, 且相互临近的胶体或者团聚在一起, 或者即将团聚; 而图 3(c)中几乎所有的胶体都已团聚在一起, 形成一个不规则的曲线链. 可见, 当纳米胶体的布朗运动较弱时, 电场强度越大, 团聚在一起的胶体就越多.

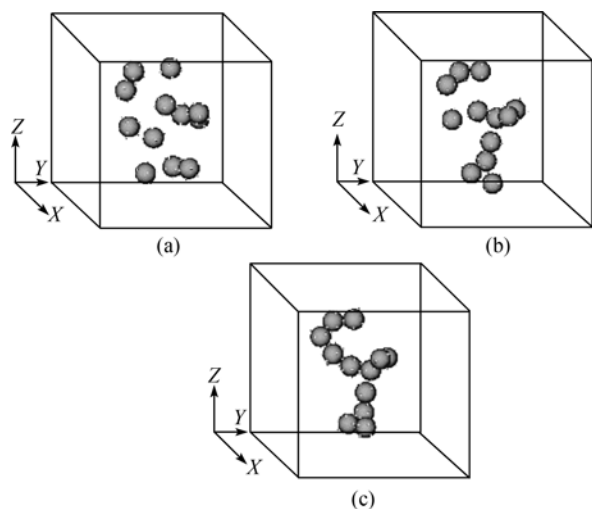


图 3 胶体在不同电场强度下的团聚现象

(a) $E_0=1.0\varepsilon/e\sigma$, (b) $E_0=1.75\varepsilon/e\sigma$, (c) $E_0=2.5\varepsilon/e\sigma$

纳米胶体在外加非均匀电场下产生团聚现象, 原因在于胶体在非均匀电场的作用下变得带有极性, 而极化后的胶体在距离足够近时会相互吸引. 如果胶体之间的相互吸引力能克服布朗力的影响, 那么胶体就会产生团聚.

2.2 胶体间相互作用力

为深入了解非均匀电场对胶体团聚的影响作用, 本文经过多次仿真, 单独考虑两个胶体之间的相互

作用力与它们中心距的变化关系. 图 4 显示的为常温状态下胶体间相互吸引力与布朗力的比值 F_A/F_B 随胶体中心距的变化关系. 对仿真结果进行分析, 发现当这两个胶体中心距小于 15σ 时, 胶体间相互吸引力就会逐渐增大, 但其大小还不足以克服布朗力的影响. 而当胶体中心距小于 12σ 时, 吸引力迅速增大, 且逐渐克服布朗力的影响成为主导力, 使胶体聚集. 因此, 若能有效地控制纳米粒子之间的距离, 就可以控制它们的团聚情况, 而团聚在一起的纳米粒子形成的聚合物能够很好地克服布朗力的影响^[15], 从而为纳米尺度粒子介电泳操纵提供了可能.

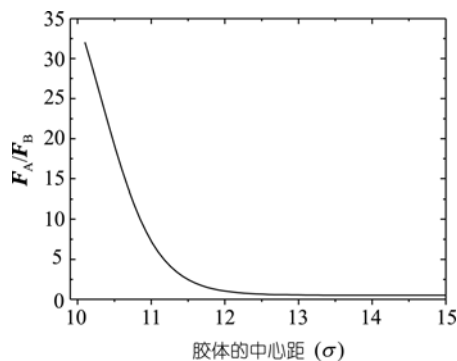


图 4 F_A/F_B 与胶体中心距的关系

图 5 显示的为胶体间相互吸引力在不同非均匀电场强度下的变化情况. 图 5 中系统温度为 $T=0.03\varepsilon/k_b$, 非均匀电场参数 E_0 分别为 1.0, 1.5, 2.0 和 $2.5\varepsilon/e\sigma$. 从图 5 中可以看出, 当 $E_0=1.0\varepsilon/e\sigma$ 时, 约仿真 70000 步, 胶体所受的吸引力开始突增, 这说明胶体开始聚集了. 相应地, 当 E_0 分别为 1.5, 2.0 和 $2.5\varepsilon/e\sigma$ 时, 约分别仿真 52000 步、48000 步和 43000 步, 胶体所受的吸引力开始突增. 可见, 在布朗运动较弱的情况下, 电场强度越大, 胶体产生团聚的速度就越快. 从理论上解释这种现象, 由于电场强度的变化并不会引起胶体间静电相互作用力的变化, 即由(7)式可知, 电场只能通过影响胶体的介电泳力来影响其吸引力. 而胶体的介电泳力 $F_{DEP} \propto E_0^2$, 因此电场强度的增大会导致胶体的介电泳力增大, 则胶体所受的吸引力也增大, 最终使得胶体团聚速度变快. 图 6 所示的胶体团聚平均速度和电场强度的关系很好的说明了上述理论(图 6 中纵坐标为规格化后胶体的团聚平均速度, 即令电场参数 $E_0=1.0\varepsilon/e\sigma$ 时胶体聚集平均速度

为 1)。

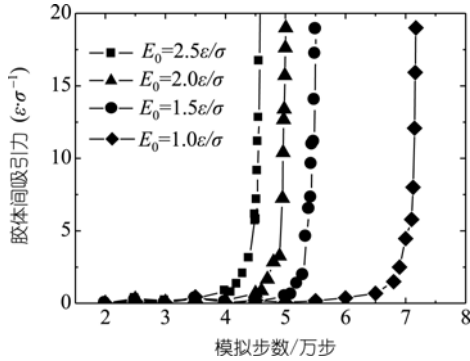


图 5 胶体间相互吸引力与电场强度的关系

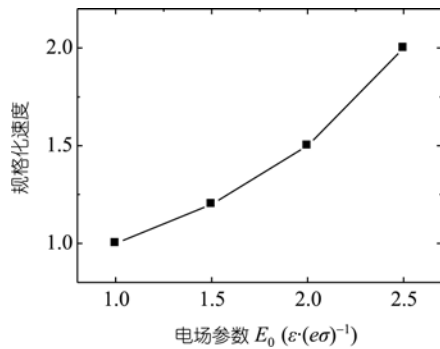


图 6 胶体团聚平均速度和电场强度的关系

2.3 温度对胶体团聚的影响

图 7 显示的为非均匀电场参数 $E_0 = 1.0\epsilon/e\sigma$ 时, 同一仿真步数、不同系统温度下的胶体团聚现象. 图 7(a) 中系统温度为 $0.03\epsilon/k_b$, 可以看到有若干对胶体相团聚; 图 7(b) 中系统温度为 $0.5\epsilon/k_b$, 几乎所有的胶体都团聚在一起; 图 7(c) 中系统温度为 $1.0\epsilon/k_b$, 只有一对胶体相团聚. 因此, 由 MD 仿真结果可知, 温度会影响纳米胶体的团聚特性, 温度的升高导致胶体的团聚变得很不稳定. 由于这种不稳定性是由胶体所受的布朗力引起的, 在此需要分析布朗力随温度的变化情况. 溶液中粒子所受的最大布朗力可以用下式来表示:

$$F_B = \frac{k_b T}{\sqrt[3]{v}}, \quad (9)$$

上式中, v 是粒子的体积. 由上式可知, 图 7(b) 和 (c) 中胶体所受的最大布朗力分别比图 7(a) 大了 16.7 倍和 33 倍, 这远大于胶体所受的介电泳力. 此时, 胶体的

布朗运动极大地影响其介电泳运动, 使胶体的运动状态变的很不稳定. 因此, 在这种情况下, 甚至团聚在一起的胶体也会由于剧烈的布朗运动而重新分开, 最终出现图 7(c) 中的情况. 由此可见, 温度对胶体团聚的影响很大, 控制温度就可以在一定程度上控制胶体的团聚情况.

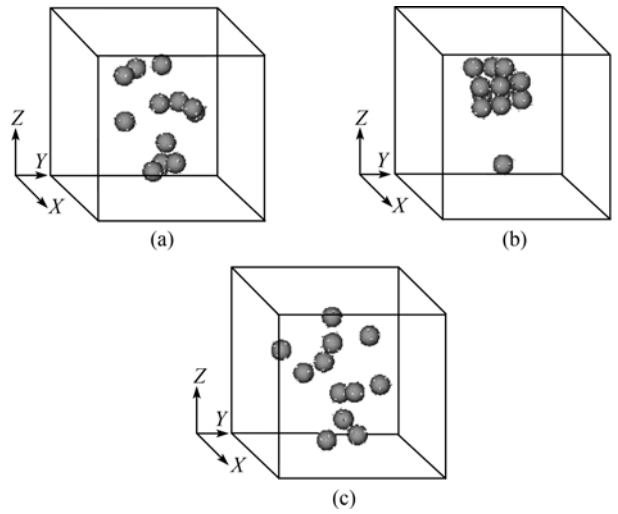


图 7 温度对胶体团聚的影响

(a) $T = 0.03\epsilon/k_b$; (b) $T = 0.5\epsilon/k_b$; (c) $T = 1.0\epsilon/k_b$

2.4 DLVO 理论验证

DLVO 理论由 Derjaguin, Landau, Verwey 和 Overbeek 提出, 用来解释胶体稳定性和电解质之间的影响. 由 DLVO 理论可知, 任何相互作用的粒子之间都存在范德华力, 球形胶体之间的范德华吸引位能为^[19]

$$E_A = -\frac{A}{6} \left[\frac{2a_1a_2}{C^2 - (a_1 + a_2)^2} + \frac{2a_1a_2}{C^2 - (a_1 - a_2)^2} + \ln \frac{C^2 - (a_1 + a_2)^2}{C^2 - (a_1 - a_2)^2} \right], \quad (10)$$

上式中, A 为 Hamaker 常数, 其值为 10^{-20} J; C 为胶体的中心距; a_1 和 a_2 为胶体的半径.

当胶体相互靠近到它们的扩散层发生重叠时, 具有相同电荷的胶体之间就存在静电排斥力. 球形胶体之间的排斥力位能为

$$E_R = \frac{64\pi n_0 k_b T \gamma^2}{\kappa^2} \exp(-\kappa H_0), \quad (11)$$

上式中, a 为粒子半径, n_0 为溶液中单位体积内正、负

离子的总数, k_b 为波尔兹曼常数, H_0 为两球面间的最短距离, κ 为扩散双电层厚度的倒数. 由于系统模型中小离子是吸附在大离子表面的, 因此扩散双电层

厚度为 1σ . 参数 $\gamma = \frac{\exp[ze\phi_0/(2k_bT)] - 1}{\exp[ze\phi_0/(2k_bT)] + 1}$, 其中, z 为

胶体所带电荷的绝对值, ϕ_0 为胶体表面电位.

将胶体所受的排斥位能和吸引位能相加, 得到胶体的总位能, 代入数据并化简得到以下表达式

$$E_{\text{tot}} = -\frac{1}{6} \left(\frac{50}{C^2 - 100} + \frac{50}{C^2} + \ln \frac{C^2 - 100}{C^2} \right) + 0.0232 \exp(10 - C), \quad (12)$$

将上式对 C 求偏导, 得到胶体间相互作用力的表达式如下

$$F_{\text{tot}} = -\frac{1}{6} \left(-\frac{100C}{(C^2 - 100)^2} - \frac{200}{C^2} + \frac{200}{C(C^2 - 100)} \right) - 0.0232 \exp(10 - C). \quad (13)$$

胶体总位能与胶体中心距的关系如图 8 所示. 系统温度为 $T = 0.03\epsilon/k_b$, 非均匀电场参数为 $E_0 = 1.0\epsilon/e\sigma$. 图 8 中显示的为胶体总位能的绝对值, 实际求得的位能为负数, 说明胶体间吸引位能总是大于排斥位能. 由于胶体的热运动能量为 k_bT , 即 0.03ϵ , 若胶体的总位能大于其热运动能, 胶体就会产生团聚. 从图 8 中可以看出, 随着相互作用的胶体中心距的不断减小, 胶体的总位能不断增大. 而当胶体间距小于 12σ 时, 其总位能大于热运动能量. 因此, 只要胶体间距小于 12σ , 胶体就会产生团聚现象. 此外, 由于位能曲线并没有出现斥力势垒, 因此, 在这种情况下, 只要胶体产生团聚, 这种团聚一般就为不可逆团聚, 即团聚稳定. 这证实了非均匀电场下纳米胶体团聚的可能性.

将采用 DLVO 理论得到的胶体间相互吸引力随着胶体中心距变化的曲线与之前采用 MD 方法得到的曲线进行对比, 如图 9 所示. 虚线表示采用 MD 方法得到的曲线, 这里称为 MD 曲线. 实线表示采用 DLVO 理论得到的曲线, 称为 DLVO 曲线. 对比这两条曲线, 发现虽然 DLVO 曲线的斜率比 MD 曲线的斜率要稍陡一些, 但两条曲线的变化趋势基本一致. 由此可见, 本文 MD 模型中胶体团聚符合上述理论.

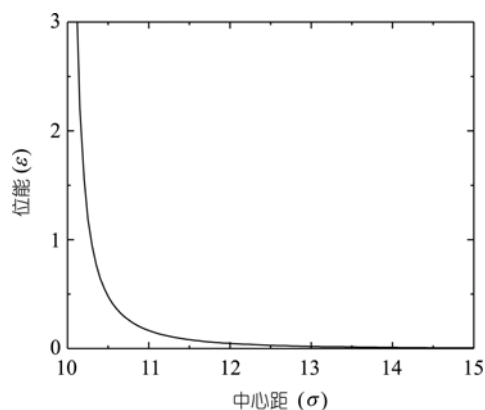


图 8 胶体总位能和胶体中心距的关系

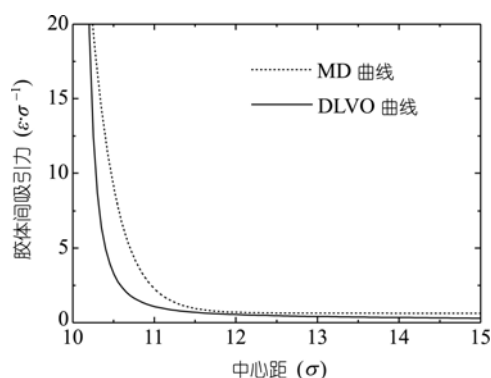


图 9 MD 曲线和 DLVO 曲线的对比

3 结论

本文采用非平衡态分子动力学方法对非均匀电场下的可极化纳米胶体的介电泳情况进行模拟, 分析变化的电场强度和系统温度对胶体团聚现象的影响, 并采用 DLVO 理论对相互作用的胶体的运动状况进行研究, 得出以下结论:

- 1) 对常温下的纳米胶体施加非均匀电场进行 MD 模拟, 发现虽然胶体的布朗运动能影响胶体的介电泳运动, 但当相互作用胶体的中心距在 12σ 以下时, 胶体间相互吸引力迅速增大克服布朗力的影响, 使胶体团聚成为可能;
- 2) 当布朗运动对纳米胶体的运动影响较小时, 电场强度增强使得胶体所受的介电泳力增大, 从而使胶体间相互吸引力增大, 最终导致胶体的团聚速度变快, 同时团聚在一起的胶体也就越多;
- 3) 通过对不同温度情况下纳米胶体运动状况的

MD 模拟, 发现温度的升高使胶体所受的布朗力增大, 且胶体的运动变得愈发剧烈, 从而使胶体团聚变得不稳定;

4) 应用 DLVO 理论, 得出胶体的总位能曲线图. 对胶体的总位能曲线进行分析, 发现随着相互作用胶体的中心距的不断减小, 胶体的吸引位能逐渐大

于排斥位能, 而当胶体的总位能大于其热运动能时, 胶体就会团聚. 此外, 将采用 DLVO 理论得出的胶体间吸引力随胶体中心距变化的曲线与采用 MD 方法得出的曲线进行对比, 发现这两条曲线的变化趋势基本一致. 这说明本文 MD 模型中胶体团聚是符合理论的.

参考文献

- 1 Pohl H. Dielectrophoresis. New York: Cambridge University Press, 1978
- 2 Kim J E, Han C S. Use of dielectrophoresis in the fabrication of an atomic force microscope tip with a carbon nanotube: A numerical analysis. *Nanotechnology*, 2005, 16(10): 2245—2250 [\[DOI\]](#)
- 3 Tuukkanen S, Kuzyk A, Toppari J J, et al. Dielectrophoresis of nanoscale dsDNA and humidity effects on its electrical conductivity. *Appl Phys Lett*, 2005, 87(18): 183102 [\[DOI\]](#)
- 4 Gray D S, Tan J L, Voldman J, et al. Dielectrophoretic registration of living cells to a microelectrode array. *Biosens Bioelectron*, 2004, 19(7): 771—780 [\[DOI\]](#)
- 5 Zheng L F, Li S D, Burk P J, et al. Towards single molecule manipulation with dielectrophoresis using nanoelectrodes. *IEEE Nano*, 2003, 1(12): 437—440
- 6 Zheng L F, Brody J B, Burke P J. Electronic manipulation of DNA, proteins, and nanoparticles for potential circuit assembly. *Biosens Bioelectron*, 2004, 20(3): 606—619 [\[DOI\]](#)
- 7 Morgan H, Holmes D, Green N G. 3D focusing of nanoparticles in microfluidic channels. *IEE P-Nanobiotechnol*, 2003, 150(2): 76—81 [\[DOI\]](#)
- 8 Wong P K, Wang T H, Deval J H, et al. Electrokinetics in micro devices for biotechnology applications. *IEEE/ASME T Mechatron*, 2003, 9(2): 1—12
- 9 Li W H, Du H, Chen D F, et al. Analysis of dielectrophoretic electrode arrays for nanoparticle manipulation. *Comput Mater Sci*, 2004, 30(3-4): 320—325 [\[DOI\]](#)
- 10 Kadaksham A T J, Singh P, Aubry N. Dielectrophoresis of nanoparticles. *Electrophoresis*, 2004, 25(21-22): 3625—3632 [\[DOI\]](#)
- 11 Tryggvason G, Esmaceli A, Al-Rawahi N. Direct numerical simulations of flows with phase change. *Comput Struct*, 2005, 83(6-7): 445—453 [\[DOI\]](#)
- 12 Hu H H. Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures. *Int J Multiphase Flow*, 1996, 22(2): 335—352 [\[DOI\]](#)
- 13 Johnson A A, Tezduyar T E. 3D simulation of fluid-particle interactions with the number of particles reaching 100. *Comput Method Appl M*, 1997, 145(3-4): 301—321 [\[DOI\]](#)
- 14 Salonen E, Terama E, Vattulainen I, et al. Dielectrophoresis of nanocolloids: A molecular dynamics study. *Europhys Lett*, 2005, 18(2): 133—142
- 15 Salonen E, Terama E, Vattulainen I, et al. Enhanced dielectrophoresis of nanocolloids by dimer formation. *Europhys Lett*, 2007, 78(4): 48004 [\[DOI\]](#)
- 16 Yuan L, Amberg G, Aldaeus F, et al. Simulation of dielectrophoretic motion of micro-particles using a molecular dynamics approach. In: *Proc ICNMM2006*. Ireland: Limerick, 2006. 96095
- 17 Linse P, Lobaskin V. Electrostatic attraction and phase separation in solutions of like-charged colloidal particles. *Phys Rev Lett*, 1999, 83(20): 4208—4211 [\[DOI\]](#)
- 18 Laird B B, Skinner J L. Microscopic theory of reversible pressure broadening in hole-burning spectra of impurities in glasses. *J Chem Phys*, 1989, 90(6): 3274—3281 [\[DOI\]](#)
- 19 陈宗洪, 王光信, 徐桂英. 胶体与界面化学. 北京: 高等教育出版社, 2001. 150—193