



## مدل سازی و شبیه سازی دینامیکی حرکت نانوذرات در محیط های مختلف با استفاده از AFM نانوربات

امین حبیب نژاد کورایم<sup>۱</sup>، معین طاهری<sup>۲</sup>، محرم حبیب نژاد کورایم<sup>۳\*</sup>

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

۲- دانشجوی دکترا، مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

۳- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

\* تهران، صندوق پستی 16846-13114

hkorayem@iust.ac.ir

### چکیده

امروزه یکی از بحث هایی که در دنیای نانو مطرح است، بحث جابه جایی یا منیپولیشن نانوذرات است. این بحث به این دلیل مهم است که می توان با جابه جایی نانوذرات، ساختاری متفاوت از آنچه در حال حاضر در دسترس است، را به دست آورد. لذا برای رسیدن به این مهم از پروب میکروسکوپ نیروی اتمی به عنوان منیپولاتور استفاده می شود. با استفاده از پروب میکروسکوپ نیروی اتمی، نانوذرات با کشیدن و یا راندن روی سطح، جابه جا شده و به نقطه ای طلوب رسانده می شوند. اگر نیروی واردہ بیش از حد نیاز باشد، نانوذره پس از ایستادن پروب میکروسکوپ نیروی اتمی همچنان به حرکت خود (لغشی یا غلتی) ادامه داده و از نقطه ای مطلوب نهایی دور می شود. از طرف دیگر، اگر نیروی واردہ کم باشد، بدظوری که تواند بر نیروی اصطکاک ایستایی غلبه کند، نانوذره هیچ حرکتی نخواهد داشت. پس پیدا کردن نیروی بینه در امر نانومنیپولیشن از اهمیت بالایی برخوردار است. در این مقاله، با استفاده از شبیه سازی دینامیکی نانوذره، مطالعات حاکم بر نانوذره در هنگام منیپولیشن استخراج و شبیه سازی شده تا با استفاده از آن ها بتوان نیروی بحرانی و زمان بحرانی را برای نانوذرات طلا، مخمر و پلاکت در محیط های گازی، آبی، الکلی و پلاسمای محسوسه کرد. با مقایسه نتایج به دست آمده، نتیجه گیری می شود که حرکت ذرات در محیط های مختلف بیولوژیکی با تأخیر زمانی و نیروی بحرانی بیشتر نسبت به محیط گازی صورت می گیرد.

### اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی كامل

دریافت: 03 مهر 1393

پذیرش: 17 آبان 1393

ارائه در سایت: 18 آذر 1393

کلید واژگان:

تیرک، منیپولیشن

نیرو و زمان بحرانی

میکروسکوپ نیروی اتمی

نانوذرات

## Dynamic Modeling and simulation of nanoparticle motion in different environments using AFM nano-robot

Amin Habibnejad Korayem, Moein Taheri, Moharam Habibnejad Korayem\*

Department of Mechanical Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

\*P.O.B. 16846-13114, Tehran, Iran, hkorayem@iust.ac.ir

### ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper

Received 25 September 2014

Accepted 08 November 2014

Available Online 09 December 2014

Keywords:

Cantilever

Manipulation

Critical force and time

Atomic force microscope

Nanoparticles

### ABSTRACT

Nowadays one of the arguments that have been raised in the world of nanotechnologies is moving or manipulation of nanoparticles. This discussion is important because the displacement of nanoparticles can make nanoparticle structurally different than what is currently available. So to achieve this goal, the atomic force microscope probe is used as manipulator. By the use of atomic force microscope probe, nanoparticles by pulling or pushing on the surface, are displaced and brought to the desired point. If the applied force was too much, Nanoparticle has been continued movement (sliding or rolling) after standing atomic force microscopy probes and away from the desired point. On the other hand, if the force is low, so that it can't overcome the static friction force, Nanoparticles will not move. So finding the optimal force is important in nanomanipulation. In this paper, using nanoparticle dynamic simulation, the governing equations on nanoparticle are derived and simulated during manipulation so that they can be used to obtain the critical force and time for gold, yeast and platelets nanoparticles in gaseous, water, alcohol, and plasma environments. By comparing the results obtained in this paper, it is concluded that the movement of particles in different biological environments starts later, and by a force of higher magnitude relative to the gaseous medium.

تحقیقات گوناگونی با اهداف دستیابی به دقت بیشتر در جابه جایی و اسambil کردن میکرو نانوذرات توسط میکروسکوپ نیروی اتمی<sup>۱</sup> و اتوماسیون این فرآیند انجام شده است که پیشگامان آن گروه ساموئل سون بودند. آنها با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی به صورت تجربی به منیپولیشن پرداختند [۱].

1- Atomic Force Microscope (AFM)

### ۱- مقدمه

تعیین دقیق نیرو و زمان بحرانی منیپولیشن به منظور دقت عمل در انجام این فرآیند و جابه جایی دقیق نانوذرات هدف بدون آسیب رسیدن به آنها، از اهداف مهم منیپولیشن ذرات زیستی می باشد. قابلیت میکروسکوپ نیروی اتمی در منیپولیشن میکرو نانوذرات در سال های اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته و

Please cite this article using:

A. Habibnejad Korayem, M. Taheri, M. Habibnejad Korayem, Dynamic Modeling and simulation of nanoparticle motion in different environments using AFM nano-robot, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 1, pp. 294-300, 2015 (In Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

حاصل از این روش‌ها را باهم مقایسه کرده است. از نظر کنترل منیپولیشن نیز وی به طراحی کنترل‌کننده مود لغزشی در راستای محور افقی و عمودی پرداخته است [13,12]. امیدی به بررسی رفتار هندسه‌های مختلف تیرک شامل مستطیلی، وی شکل و خنجروی پرداخته و با ایجاد معادله بین جابه‌جایی نانوذره با سختی تیرک به استخراج معادلات دینامیکی حاکم پرداخته است [14]. کورایم و همکارانش به توسعه و مدل‌سازی تغوری‌های تماسی الستیک-پلاستیک چهت نانوآکتری‌های نرم کروی شکل به منظور کاربرد در منیپولیشن میکرو/نانوذرات زیستی مختلف بر پایه‌ی میکروسکوپ نیروی اتمی پرداخته‌اند [15].

با توجه به بررسی‌ها، این موضوع حاصل شده که در کارهای گذشته، نیرو و زمان بحرانی برای نانوذرات مختلف در محیط‌های زیستی بررسی نشده است، لذا در این مقاله مقادیر نیرو و زمان بحرانی برای نانوذرات طلا، پلاکت و مخمر در محیط‌های گاز، آب، الكل و پلاسمما محاسبه شده و همچنین این مقادیر برای نانوذرات دی‌ان‌ای در محیط گازی محاسبه شده است.

## 2- بردسی سینماتیک منیپولیشن

در این قسمت با استفاده از مدل‌سازی سینماتیک، معادلات هندسی برای نانوذره و پروب به دست می‌آید. برای این منظور با در نظر گرفتن تغییر شکل تماسی بین نانوذره-رأس ابزار، آب، نانوذره-صفحه‌ی مبدأ،  $\delta_t$  و با توجه به شکل 1، معادلات سینماتیکی حرکت در راستای محورهای  $x$  و  $y$  از معادلات 1 و 2 به دست می‌آیند [16].

$$y_p = y_{\text{sub}} + (R_p - \delta_t) \sin \theta - H \sin \theta \quad (1)$$

$$z_p = z_{\text{sub}} + (R_p - \delta_t) \cos \theta + (R_p - \delta_s) - H \cos \theta \quad (2)$$

با دوبار مشتق‌گیری از معادلات 1 و 2 مقادیر  $\ddot{y}_p$  و  $\ddot{z}_p$  به صورت معادلات 3 و 4 به دست می‌آید که شتاب در راستای محورهای  $x$  و  $y$  را نشان می‌دهد.

$$\ddot{y}_p = \ddot{y}_{\text{sub}} - \ddot{\delta}_t \sin \theta - H \ddot{\theta} \cos \theta + H \dot{\theta}^2 \sin \theta \quad (3)$$

$$\ddot{z}_p = \ddot{z}_{\text{sub}} - \ddot{\delta}_t \cos \theta - \ddot{\delta}_s - H \ddot{\theta} \sin \theta - H \dot{\theta}^2 \cos \theta \quad (4)$$

از مقادیر دیگری که در مشتق‌گیری ظاهر می‌شوند و دارای مشتق درجه دوم هستند و خود آن‌ها نیز کوچک هستند، صرف نظر شده است.

## 3- بردسی دینامیک منیپولیشن

در منیپولیشن دقیق نانوذرات توسط میکروسکوپ نیروی اتمی، ابتدا رأس پروب در تماس با نانوذره قرار می‌گیرد. سپس با شروع حرکت صفحه‌ی مبدأ با سرعت ثابت  $V_{\text{sub}}$  و قبل از شروع حرکت نانوذره بر روی صفحه‌ی مبدأ، نانوذره و متقابلاً رأس پروب منیپولاتور با همان سرعت شروع به حرکت می‌کند و در نتیجه نیروهای اعمالی بر نانوذره و عکس‌العمل آن بر رأس پروب شروع به افزایش می‌کنند. این نیروی عکس‌العمل موجب خمش و پیچش در تیرک می‌شود.

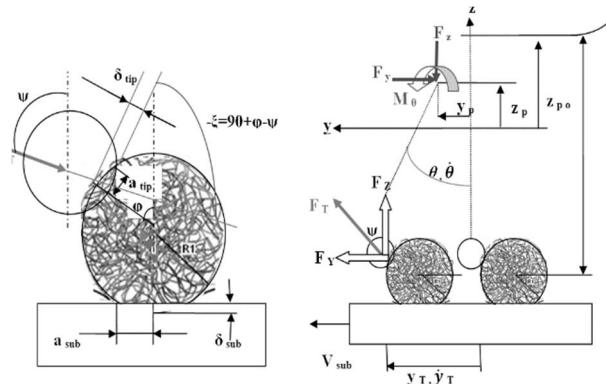
معادلات نیروها و گشتاور وارد بر انتهای تیرک به صورت معادلات 5 تا 7 می‌باشد [16]:

$$F_y = K_y y_p \quad (5)$$

$$F_z = K_z z_p \quad (6)$$

$$M_\theta = K_\theta \theta \quad (7)$$

نیروها و گشتاور فنری تیرک ( $M_\theta, F_y, F_z$ )، نیروهای عمودی و افقی رأس پروب ( $F_y$  و  $F_z$ ) و نیروی اعمالی ابزار در حرکت افقی نانوذرات، در شکل 2 مشاهده می‌گردد. نیروها بر زاویه پیچش ( $z_p$ ) و خیز ( $y_p$ ) عمودند. با توجه به شکل 2 و با استفاده از معادلات نیوتن معادلات دینامیکی اولیه برای پروب به صورت معادلات 8 تا 10 است [16].



شکل 1 سینماتیک و دینامیک منیپولیشن [16]

سپس گروه بور نانوذرات طلا را در دمای اتاق و شرایط محیطی روی صفحه مبنایی از جنس میکا حرکت داده‌اند، که این کار به صورت تجربی انجام شده و توانسته‌اند چند حرف را با استفاده از منیپولیشن نانوذرات طلا پدیدآورند [2,3]. لیو و زانک نیز به بررسی تجربی نانوذرات دی‌ان‌ای پرداختند [4,5]. محدودیت این تحقیقات در این است که در هیچ یک از آن‌ها به بررسی شرایط محیط‌های بیولوژیکی جهت ذرات مختلف زیستی پرداخته نشده است.

بررسی تأثیر خصوصیات محیط‌های مختلف بر عملیات نانومنیپولیشن، به این صورت است که بعد از آشنایی با خصوصیات محیط‌های مختلف اقدام به وارد کردن این خصوصیات در فرآیند نانومنیپولیشن، می‌توان حرکت نانوذره را در این خصوصیات در فرآیند نانومنیپولیشن، می‌توان حرکت نانوذره را در محیط‌های مختلف پیش‌بینی کرد. این امر از آن جهت مهم است که فرآیند نانومنیپولیشن ذرات زیستی باید در محیط‌های بیولوژیکی که عموماً مایع هستند، رخ دهد و باید بتوان حرکت نانوذره را در آن محیط‌ها نیز پیش‌بینی کرد [7,6].

ریتر به مدل‌سازی منیپولیشن نانوذرات پرداخته و به این نتیجه رسیده که نیروی لزム جهت جابه‌جایی وابسته به اندازه‌ی نانوذرات است که این نتایج را ابتدا با اعمال معادلات استاتیکی و دینامیکی به دست آورده و سپس با نتایج تجربی مقایسه نموده است. وی همچنین به این نتیجه رسیده که حرکت لغزشی قبل از غلتش اتفاق می‌افتد [8]. تفضیل و سیتی به منیپولیشن نانوذرات پرداخته و در آن با به دست آوردن جابه‌جایی‌های تیرک و دو بار مشتق‌گیری از آن به معادلات دینامیکی جابه‌جایی نانوذرات دست یافته‌اند [9,10]. ذاکری به منیپولیشن نانوذرات پرداخته و با استفاده از مدل تماسی جی کا آر<sup>2</sup> و اعمال نیروهای چسبندگی و اصطکاکی به شبیه‌سازی پرداخته است. وی همچنین شبیه‌سازی نانوذرات طلا برای شرایط بحرانی را نیز انجام داده است. وی به این نتیجه رسیده که نیروی بحرانی در محیط آب محسوسی ایجاد نمی‌شود [11]. در این تحقیقات نیز ذرات و محیط‌های بیولوژیکی مورد توجه قرار نگرفته‌اند.

دایی نیز به مدل‌سازی تراکنشی سوزن با استفاده از مدل‌های هرتز<sup>3</sup>، ام<sup>4</sup>، جی کا آر، دی ام تی<sup>5</sup>، بی سی پی<sup>6</sup>، پی تی<sup>7</sup> و سان<sup>8</sup> پرداخته و نتایج

1- DNA

2- JKR

3- Hertz

4- MD

5- DMT

6- BCP

7- PT

8- SUN

می‌توان نانوذره را در مسیری مشخص و برای رسیدن به نقطه‌ی هدف مشخصی جایه‌جا نمود.

با توجه به معادله‌ی ۱۷، نیروی بحرانی ( $F_{cr}$ ) برای مدل انتخاب شده در لحظه‌ی حرکت به دست می‌آید و زمان آن را نیز  $T_{cr}$  می‌نامیم. نمودارهای نیروی بحرانی شروع حرکت نانوذره با شبیه‌سازی معادلات دینامیکی ابزار و نانوذره و با استفاده از پارامترهای هندسی و ماده‌ای ابزار و نمونه و صفحه‌ی مبدأ، به دست می‌آیند.

#### ۴- مطالعه‌ی تأثیر محیط‌های مختلف بر دینامیک منیپولیشن

در این بخش با پرداختن به تأثیر محیط‌های مختلف بر دینامیک منیپولیشن، به تکمیل فرآیند نانومنیپولیشن پرداخته می‌شود. چرا که در اغلب مواردی که کاربرد بیولوژیکی وجود دارد، محیط می‌عایتی به کار می‌رود که اغلب کاربرد پژوهشی دارند، لذا این مهم ایجاد می‌کند که دینامیک نانومنیپولیشن در محیط‌های زیستی از اهمیت بالایی برخوردار باشند. برای این کار ابتدا باید میزان تأثیر تغییر محیط بر روی عملیات نانومنیپولیشن سنجیده شود.

بنابراین در ادامه به بررسی تأثیر و نحوه‌ی ورود به معادلات دینامیکی منیپولیشن پرداخته می‌شود.

در این قسمت از تغوری جی کا آر استفاده می‌کنیم که در این تئوری نیروهای مؤثر در تماس یک کره به شاعر  $R$  و سطح برابر با معادله‌ی ۱۸ خواهد بود:

$$F_H^{JKR} = F_1 + 3\pi R\gamma \pm \sqrt{6\pi R\gamma F_1 + (3\pi R\gamma)^2} \quad (18)$$

که در آن  $F_1$  نیروهای اعمالی خارجی است. در این معادله باید نیروهای مولکولی اصلی (الکترواستاتیک، آبپوشی و...) به نیروی اعمالی خارجی  $F_1$  اضافه شود و با توجه به این که تأثیر برخی از نیروهای مولکولی ناچیز است، فقط نیروهایی را وارد می‌کنیم که مقدار آنها غیرقابل صرف‌نظر کردن باشد. همان طور که گفته شد نیروی اعمالی برای محاسبه شاعر تماس و عمق نفوذ در تغییر محیط عوض شده و این نیرو مطابق شکل ۳ با نماد  $F_1$  نشان داده شده است.

این نیروها که شامل سه نیرو می‌باشد، به نیروی اعمالی خارجی اضافه می‌شود و معادلات ۱۹ تا ۲۲ حاصل می‌شود.

$$P \rightarrow F_1 + F_{el} + F_{hyd} + F_{ster} \quad (19)$$

$$F_H^{JKR} = P + 3\pi R\gamma \pm \sqrt{6\pi R\gamma F_1 + (3\pi R\gamma)^2} \quad (20)$$

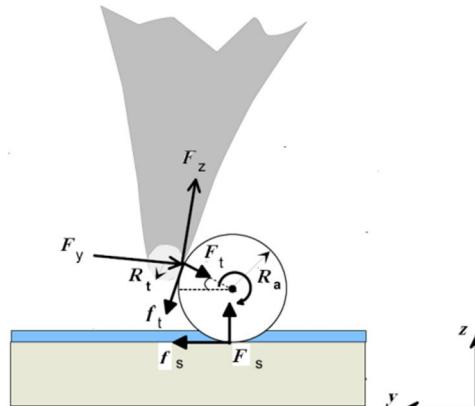
$$\delta = \frac{a^2}{R} - \sqrt{\frac{8\pi\gamma a}{3K}} \quad (21)$$

$$a = \left(\frac{RF_{H-mod}^{JKR}}{K}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (22)$$

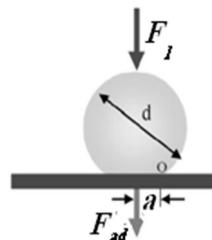
این تنها تأثیر تغییر محیط بر عملیات نانومنیپولیشن نیست، بلکه برای شبیه‌سازی عملیات نانومنیپولیشن به بررسی سختی تیرک و به تعیین آن به میزان خم شدن تیرک، جهت به دست آوردن زمان و نیروی بحرانی نیاز می‌باشد. نوع تیرک به کار رفته، در میزان خم شدن تیرک مؤثر می‌باشد، زیرا وقتی سختی تیرک تغییر می‌کند، میزان خم شدن و نیروهای وارد بر آن نیز تغییر می‌باید. در این مقاله تیرک به شکل مستطیلی در نظر گرفته شده و معادلات سختی تیرک با استفاده از مدل اویلر-برنولی و با توجه به شکل ۴ بهصورت معادلات ۲۳ تا ۲۵ است [۱۶].

$$K_y = \frac{Ew^3t}{4l^3} \quad (23)$$

$$K_z = \frac{Ewt^3}{4l^3} \quad (24)$$



شکل ۲ نیروهای وارد بر نانوذره از طرف پروب



شکل ۳ شماتیک تماس بین کره و یک سطح

$$F_Y - F_y = m\ddot{y} = m \frac{(y\ddot{\theta} + \dot{y}_p)}{2} \quad (8)$$

$$F_Z - F_z = m\ddot{z} = m \frac{(z\ddot{\theta} + \dot{z}_p)}{2} \quad (9)$$

$$-M_\theta + F_Z H \sin \theta + F_y H \cos \theta = I_p \ddot{\theta} \quad (10)$$

با جایگذاری مقادیر شتاب‌ها، معادلات نیروهای رأس پروب ۱۱ تا

۱۳ (برحسب  $y_p$  و  $z_p$  به دست می‌آیند)، که در آن  $F_Y$  و  $F_Z$  نیروهای وارد بر نانوذره از طریق پروب،  $\psi$  و  $\varphi$  به ترتیب زاویه‌ی نیروی پروب و زاویه‌ی تماس رأس پروب و نانوذره هستند و در آن مقادیر  $\ddot{\theta}$  و  $\ddot{z}_T$  برابر صفر می‌باشد.

$F_Z = F_z - m[\frac{H}{2}(-\ddot{\theta} \sin \theta + \dot{\theta}^2 \cos \theta) + \dot{\theta}_t \cos(\theta + \dot{\theta}) + \dot{\theta}_s \cos^2 \theta] \quad (11)$

$$F_Y = F_y + m \left[ \frac{H}{2}(-\ddot{\theta} \cos \theta + \dot{\theta}^2 \sin \theta) - \dot{\theta}_t \sin \theta \right] \quad (12)$$

$$F_T = \sqrt{F_Y^2 + F_Z^2} \quad (13)$$

لذا معادلات ۱۴ و ۱۵ را داریم:

$$\psi = \text{Arctan}(\frac{F_Y}{F_Z}) \quad (14)$$

$$\zeta = \text{Abs}(\psi - \phi - \frac{\pi}{2}) \quad (15)$$

بنابراین هنگامی که نانوذره توسط سوزن پروب میکروسکوب نیروی اتمی بر روی سطح رانده می‌شود، نیروی اصطکاک میان نانوذره و سطح ( $f_s$ ) را می‌توان برحسب نیروی برآیند وارد بر نانوذره ( $P_T$ ) و زاویه‌ی ( $\psi$ ) بهصورت معادله‌ی ۱۶ نوشت:

$$f_s = F_Y = F_T \sin \psi \quad (16)$$

برای آن که نانوذره شروع به لغزش بر روی سطح کند، شرط معادله‌ی ۱۷ می‌باشد که برآورده گردد:

$$f_s > \mu_s F_S + \tau_s A_S \quad (17)$$

که در آن ضریب اصطکاک نانوذره ( $\mu_s$ ) و تنش برشی ( $\tau_s$ ) بر روی سطح و سوزن برابر با یکدیگر و ثابت فرض شده‌اند. به این ترتیب با گذر مقدار نیرو از میزان بحرانی آن، فرآیند منیپولیشن آغاز می‌گردد و با تحلیل‌های بیشتر

نیروی درگ است. نیروی درگ وارد بر تیرک در دو سمت آن و نیروی کشش سطحی وارد بر مقطع تیرک به صورت معادلات 28 و 29 محاسبه می‌شوند:

$$F_D = 2(W\mu_v) \frac{V_{\text{sub}}}{H} \quad (28)$$

$$F_{\text{SUR}} = b \times \gamma \quad (29)$$

که در آن  $b$  محیط سطح مقطع تیرک،  $\gamma$  کشش سطحی سیال،  $V_{\text{sub}}$  سرعت سطح مبدأ،  $\mu_v$  لزجت سیال می‌باشدند. میزان تغییر شکل حاصل از آن‌ها نیز به صورت معادلات 30 و 31 محاسبه می‌شوند:

$$\delta_{\text{Sur}} = \frac{F_{\text{SUR}} L_1^3}{3E_{\text{afm}} IM} \quad (30)$$

$$\delta_{\text{Drag}} = \frac{F_D (L - L_1)^3}{8E_{\text{afm}} IM} \quad (31)$$

و در آن  $I$  میزان فرورفتگی تیرک در سیال است. در این تحقیق فرض شده است که نصف طول تیرک در سیال فرورفته است.

## 5- شبیه‌سازی منیپولیشن نانوذرات استوانه‌ای

در این بخش ابتدا مقادیر اولیه و سپس شرایط اولیه لازم در حل مسئله ارائه خواهد شد. الگوریتم شبیه‌سازی مسئله مشابه الگوریتم به دست آمده که در تحقیقات قبلی ارائه شده، می‌باشد. لازم به ذکر است که برای اطمینان از نتایج شبیه‌سازی مسئله، تمام مقادیر و شرایط اولیه مطابق با داده‌های شبیه‌سازی موجود در تحقیقات قبلی می‌باشد.

در این مقاله ورودی مسئله موقعیت نانوذره است که قبل از حرکت نانوذره بر روی صفحه می‌باشد. خروجی مقدار نیروی اعمالی  $F_T$  از طرف رأس پرورب بر نانوذره است. در این مرحله مقادیر خمسمترمال و پیچش تیرک، با روش‌های نوری یا روش‌های دیگر مستقیماً اندازه‌گیری می‌شود. با افزایش بیشتر نیرو تا رسیدن به حد بحرانی که در آن نانوذره شروع به حرکت می‌کند،  $F_T$  ثابت مانده و نانوذره بر روی صفحه می‌باشد. خروجی این نانوذره شروع به حرکت فاز دوم الگوریتم شبیه‌سازی نشان داده شده است. خروجی این بخش بیان‌گر رفتار دینامیکی و میزان جابه‌جایی نانوذره است.

الگوریتم مورد استفاده در این مقاله به منظور به دست آوردن نیرو و زمان بحرانی مطابق شکل 5 می‌باشد.

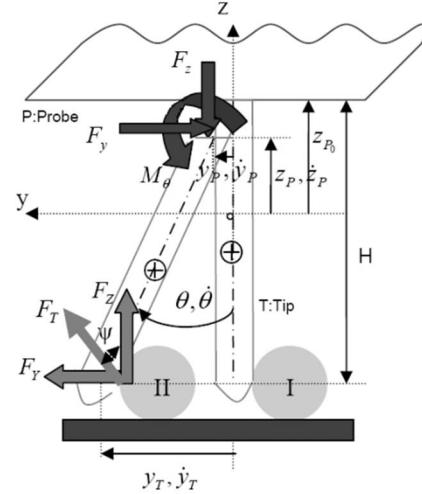
نیروی اعمالی تیرک بر نانوذره ( $F_T$ ) و میزان نیروی لازم برای حرکت نانوذره در حالت لغزشی ( $F_c$ ) و در حالت غلطشی ( $F_r$ ) در شکل 6 نشان داده شده است. برای منیپولیشن نانوذرات استوانه‌ای طلا در محیط‌ها از مدل تماسی هرتز استفاده شده است. همان‌گونه که در شکل 6 مشخص است، با توجه به برخورد منحنی نیروهای اعمالی تیرک بر نانوذره ( $F_T$ ) با منحنی نیروی لغزشی ( $F_c$ ) قبل از نیروی غلطشی ( $F_r$ )، مود لغزشی قبل از مود غلطشی رخ داده و نیروی بحرانی ( $F_{cr}$ ) برای چهار نانوذره می‌ختلف یعنی طلا، دی‌ان‌ای، مخمر و پلاکت به ترتیب برابر است با  $0.07278 \text{ mN}$ ,  $0.0910 \text{ mN}$ ,  $0.09279 \text{ mN}$  و  $0.0010 \text{ mN}$ . زمان بحرانی منیپولیشن ( $T_{cr}$ ) برای چهار نانوذره در نظر گرفته شده نیز به ترتیب برابر  $0.0277 \text{ sec}$ ,  $0.0449 \text{ sec}$ ,  $0.0500 \text{ sec}$  و  $0.405 \text{ sec}$  می‌باشد.

## 6- شبیه‌سازی دینامیک منیپولیشن در محیط‌های زیستی

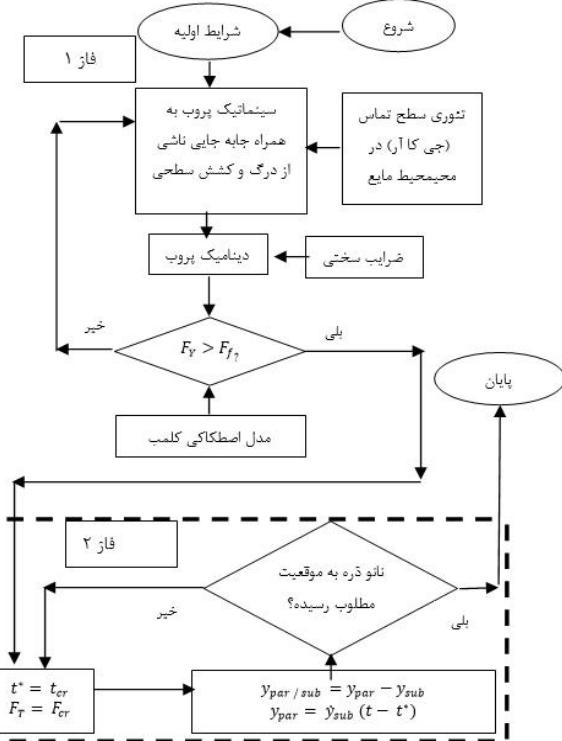
در بخش‌های قبل به استخراج معادلات حاکم بر عملیات نانومنیپولیشن در محیط مایع پرداخته و شبیه‌سازی دینامیک نانوذرات در محیط گازی بررسی شده است. اما در اغلب مواردی که کاربرد بیولوژیکی وجود دارد، محیط مایع به کار می‌رود که در اکثر موارد کاربرد پزشکی دارد. به این منظور در این بخش به شبیه‌سازی دینامیکی نانوذرات در محیط‌های بیولوژیکی پرداخته می‌شود.

محیط‌های بیولوژیکی مورد بررسی در این بخش شامل سه محیط مختلف

$$K_\theta = \frac{Ewt^3}{6L(1+\vartheta)} \quad (25)$$



شکل 4 مشخصات دینامیکی و هندسی تیرک [17]



شکل 5 الگوریتم فرآیند شبیه‌سازی منیپولیشن نانوذرات [16]

که در آن  $E$  مدول الاستیسیته،  $W$  پهنای تیرک،  $L$  طول تیرک،  $t$  ضخامت تیرک است. طبق قانون هوک می‌توانیم با ضرب سختی تیرک در میزان جابه‌جایی آن نیروی وارد بر آن را حساب نموده و این میزان جابه‌جایی از معادلات 26 و 27 محاسبه می‌گردد.

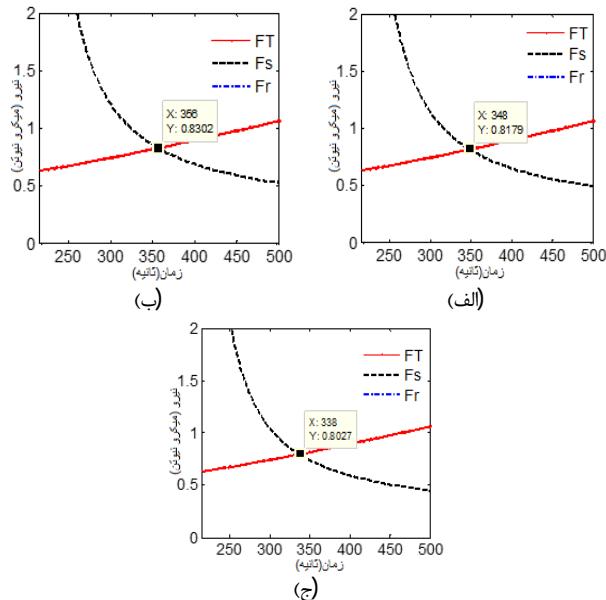
$$y_p = \delta_1 + \delta_2 + \delta_3 = \frac{F_y}{K_y} + \delta_D + \delta_{ST} \quad (26)$$

$$F_y = K_y(y_p - \delta_D - \delta_{ST}) \quad (27)$$

که در آن  $\delta_D$  تغییر شکل تیرک تحت تأثیر نیروهای درگ و  $\delta_{ST}$  تغییر شکل تیرک تحت تأثیر کشش سطحی در محیط مایع بوده و  $y_p$  مقدار تغییر شکل افقی پرورب می‌باشد.

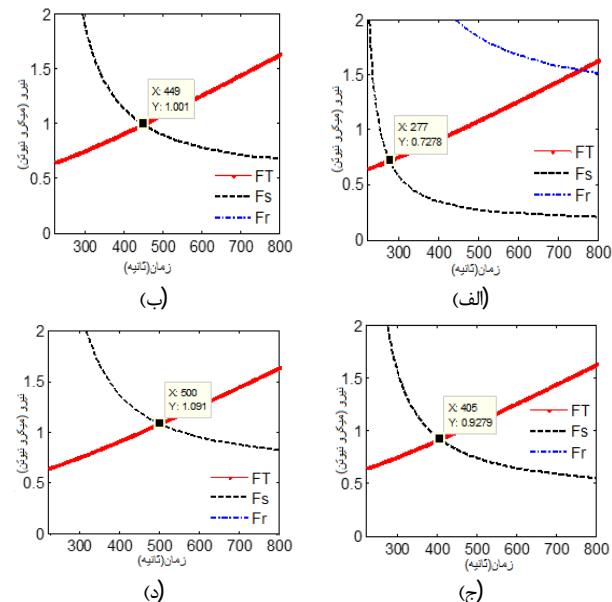
در محیط مایع نیروی دیگری که به معادلات در محیط گازی اضافه می‌شود،

نیز از مدل تماسی جی کا آر استفاده شده است. در ادامه به تحلیل و بررسی خروجی‌های به دست آمده از شبیه‌سازی نانوذرات مختلف در محیط‌های مختلف پرداخته می‌شود.

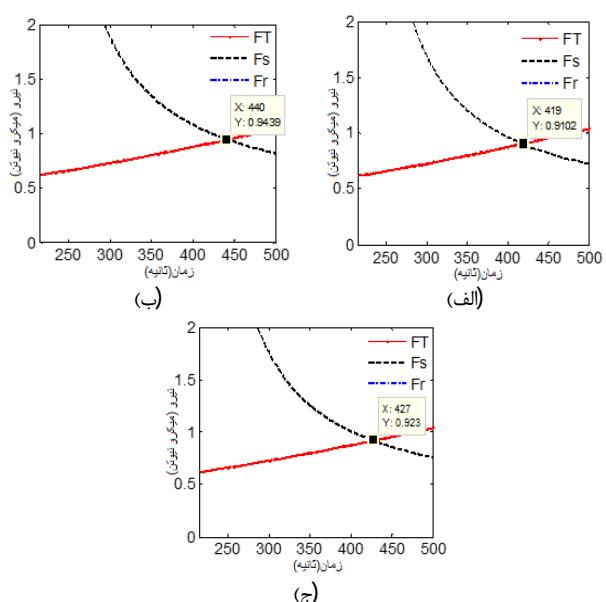


شکل 8 نیروهای منیپولیشن نانوذرات استوانه‌ای مخمر در محیط (الف) آب، (ب) الکل، (ج) پلاسم با استفاده از مدل تماسی جی کا آر

هستند که عبارت‌اند از: آب، الکل و پلاسم. این سه محیط برای همان چهار نوع نانوذرهای که در قسمت قبل (محیط گازی) بررسی شد، در نظر گرفته می‌شود.



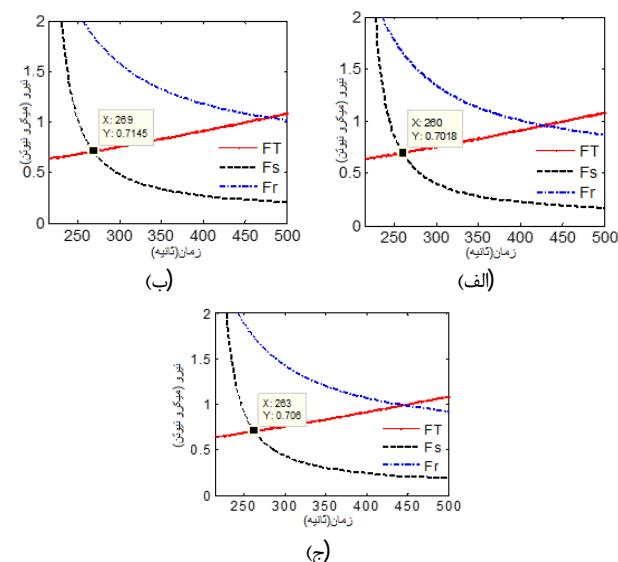
شکل 6 نیروهای منیپولیشن نانوذرات استوانه‌ای (الف) طلا، (ب) دی‌ان‌ای، (ج) مخرز (د) پلاکت در محیط هوا با استفاده از مدل تماسی هرتز



شکل 9 نیروهای منیپولیشن نانوذرات استوانه‌ای پلاکت در محیط (الف) آب، (ب) الکل، (ج) پلاسم با استفاده از مدل تماسی جی کا آر

این نتایج در غالب نمودار بوده و از برخورد منحنی‌ها، به دو مقدار مهم در این عملیات دست می‌یابیم که یکی از آنها زمان بحرانی است، یعنی زمانی که نانوذره با توجه به میزان نیروی اعمالی شروع به حرکت می‌کند و دیگری نیروی بحرانی است که معنی آن این است که وقتی نیروی اعمالی به نانوذره به این مقدار رسید نانوذره شروع به حرکت خواهد کرد.

نیروی اعمالی تبرک بر نانوذره ( $F_{Tb}$ ) و میزان نیروی لازم برای حرکت نانوذره در حالت لغزشی ( $F_{Sb}$ ) و در حالت غلطشی ( $F_{rb}$ ) مشخص می‌شود. برای منیپولیشن نانوذرات استوانه‌ای طلا در محیط آب، الکل و پلاسم، با استفاده



شکل 7 نیروهای منیپولیشن نانوذرات استوانه‌ای طلا در محیط (الف) آب، (ب) الکل، (ج) پلاسم با استفاده از مدل تماسی جی کا آر

شبیه‌سازی عملیات نانومنیپولیشن در محیط مایع همانند شبیه‌سازی عملیات نانومنیپولیشن در محیط گازی می‌باشد.

الگوریتم مورد استفاده برای محاسبه‌ی نیرو و زمان بحرانی در محیط‌های زیستی همانند شکل 5 می‌باشد، با این تفاوت که در قسمت سینماتیک پروب جابه‌جایی ناشی از نیروی درگ و نیروی کشش سطحی نیز وارد شده و همچنین در بحث تئوری تماسی نیز دچار تغییر شده و نیروهای درگ و کشش سطحی وارد شده‌اند. در نهایت آخرین تغییر اعمالی در مقدار چسبندگی بین نانوذره و سطح زیرین می‌باشد که با اعمال این تغییرات در مدل ارائه شده در شکل 5 می‌توان دو مقدار نیرو و زمان بحرانی را برای نانوذرات مختلف در محیط‌های زیستی محاسبه کرد، همچنین در این قسمت

میزان چسبندگی نانوذره‌ی نیز طلا در محیط هوا و آب به ترتیب برابر  $0/1$  و  $0/0248$  می‌باشد. لذا می‌توان گفت تأثیر چسبندگی بر نیروی بحرانی در تغییر محیط  $20$  برابر مقدار تغییر خود نیروی چسبندگی می‌باشد. صحت نتایج به دست آمده را می‌توان با مقایسه‌ی نتایج موجود برای نانوذرات طلا در کارهای قبل [16] تأیید نمود. همچنین با توجه به این‌که با افزایش ضربه نتایج به دست آمده در این مقاله نیز این امر را تأیید نموده و لذا دلیلی بر صحت نتایج می‌باشد.

## 8- فهرست علائم

نیروی چسبندگی نانوذره - سطح	$A_{ps}^{adh}$
سطح تماس نانوذره و صفحه مبنا	$A_s$
شعاع تماسی کروی	$a$
محیط سطح مقطع تیرک	$b$
مدول پانگ تیرک	$E$
مدول پانگ نمونه	$E_s$
نیروی اعمالی به نوک پرور در راستای $y$	$F_y$
نیروی اعمالی به انتهای پرور در راستای $y$	$F_Y$
نیروی اعمالی به نوک پرور در راستای $z$	$F_z$
نیروی اعمالی به انتهای پرور در راستای $z$	$F_Z$
نیروی وارد بر نانوذره در راستای قائم	$F_1$
نیروی اصطکاک نانوذره و صفحه مبنا	$f_s$
نیروی لغزش	$f_s$
مدول برشی تیرک	$G$
ارتفاع سوزن	$H$
مان اینرسی تیرک حول نقطه ابتدایی	$I_p$
سختی طولی تیرک	$K_y$
سختی عمودی تیرک	$K_z$
سختی پیچشی تیرک	$K_\theta$
طول تیرک	$L$
طول قسمتی از تیرک که در مایع فرورفته	$L_1$
گشتاور پیچشی تیرک	$M_\theta$
جرم تیرک	$m$
تعداد تغییرهای فضای حالت	$n$
شعاع نانوذره	$R_p$
گشتاور پیچشی	$T$
ضخامت تیرک	$t$
سرعت پایه سطح	$V_{sub}$
پهنهای تیرک مستطیلی	$w$
موقعیت انتهایی پرور	$Y_c$
مقدار مدنظر مطلوب	$Y_d$
موقعیت انتهایی پرور در راستای $y$	$Y_p$
موقعیت سطح زیرین در راستای $y$	$Y_{sub}$
جا به جایی سطح زیرین در راستای $y$	$y_{st}$
موقعیت ابتدایی پرور در راستای $y$	$y_t$

از مدل تماسی جی کا آر در ادامه‌ی کار مورد بررسی قرار گرفته است. با توجه به برخورد منحنی نیروهای اعمالی تیرک بر نانوذره ( $F_7$ ) با منحنی نیروی لغزشی ( $F_i$ ) قبل از نیروی غلطشی ( $F_r$ ), مود لغزشی قبل از مود غلطشی رخ داده و نیروی بحرانی ( $F_{cr}$ ) برای سه محیط در نظر گرفته شده آب، الکل و پلاسما به ترتیب برابر با  $\mu N 0/7018$  و  $0/7145 \mu N$  و  $0/7060 \mu N$  می‌باشد. زمان بحرانی منیپولیشن ( $T_{cr}$ ) برای سه محیط در نظر گرفته شده آب، الکل و پلاسما به ترتیب برابر با  $0/260$  sec و  $0/269$  sec و  $0/263$  sec می‌باشد. که نتایج بدست آمده برای نانوذرات طلا در شکل 7 نشان داده شده است.

شکل 8 نیز همانند شکل 7 به بررسی عملیات جابه‌جایی نانوذرات پرداخته است، با این تفاوت که در شکل 7 نانوذرات طلا بررسی شده و در شکل 8، نانوذرات مخمر بررسی شده است. همان‌گونه که در شکل 8 مشخص است، نیروی بحرانی ( $F_{cr}$ ) برای سه محیط در نظر گرفته شده یعنی آب، الکل و پلاسما برای نانوذره‌ی استوانه‌ای مخمر به ترتیب برابر است با  $\mu N 0/8179$  و  $0/8302 \mu N$  و  $0/8027 \mu N$ . زمان بحرانی منیپولیشن ( $T_{cr}$ ) نیز برای سه محیط در نظر گرفته شده شامل محیط‌های آب، الکل و پلاسما به ترتیب برابر با  $0/356$  sec و  $0/338$  sec و  $0/348$  sec می‌باشد، که در مقایسه با نانوذرات طلا مقادیر متفاوت است و این تفاوت به دلیل ماهیت نانوذره می‌باشد.

شکل 9 نیروهای اعمالی تیرک بر نانوذره پلاکت ( $F_7$  Error! Bookmark not defined.)، میزان نیروی لازم برای حرکت نانوذره در حالت لغزشی ( $F_i$ ) و در حالت غلطشی ( $F_r$ ) را در محیط آب، الکل و پلاسما با استفاده از مدل تماسی جی کا آر نشان می‌دهد. همان‌گونه که در شکل 9 مشخص است با توجه به برخورد منحنی نیروهای اعمالی تیرک بر نانوذره ( $F_7$ ) با منحنی نیروی لغزشی ( $F_i$ ), نانوذره شروع به لغزش می‌کند. نیروی بحرانی ( $F_{cr}$ ) برای محیط‌های در نظر گرفته شده آب، الکل و پلاسما به ترتیب برابر  $\mu N 0/9102$  و  $0/9439 \mu N$  و  $0/9230$  و زمان بحرانی منیپولیشن ( $T_{cr}$ ) برای سه محیط در نظر گرفته شده به ترتیب برابر با  $0/419$  sec و  $0/427$  sec و  $0/440$  sec می‌باشد، که در مقایسه با نانوذرات طلا و نانوذرات مخمر، نانوذرات پلاکت به زمان بیشتری برای شروع به لغزش نیاز دارد.

## 7- نتیجه‌گیری

در این مقاله با مقایسه‌ی نیرو و زمان بحرانی منیپولیشن برای نانوذرات طلا، مخمر و پلاکت در محیط‌های گازی، آبی، الکلی و پلاسما، نتیجه‌گیری شده است که با تغییر نانوذره در عملیات نانومنیپولیشن به دلیل این که نانوذرات مورد بررسی در میزان چسبندگی با سطح و پرور با هم متفاوت هستند، این امر باعث می‌شود که در زمان شروع به حرکتشان نیز اختلاف وجود داشته باشد. بررسی میزان این تأخیر در زمان به این دلیل اهمیت دارد که با پیدا کردن مقدار این تأخیر می‌توان مقدار زمان نیاز برای جابه‌جایی دقیق نانوذره را محاسبه نموده و نانوذره را به نقطه‌ی مطلوب رساند. از دیگر مواردی که در این مقاله بررسی شده است، بحث تأثیر نانوذرات و همچنین تأثیر تغییر محیط، بر میزان نیروی مورد نیاز برای شروع به حرکت نانوذره می‌باشد. پس از بررسی و تعیین مقدار تغییر نیروی مورد نیاز برای شروع به حرکت نانوذره در محیط‌های مختلف به این نتیجه رسیده شده که مقدار تغییر در نیروی مورد نیاز برای شروع به حرکت نانوذره به میزان چسبندگی نانوذره بستگی دارد؛ چرا که به عنوان مثال برای نانوذرات طلا نیروی بحرانی مورد نیاز در محیط هوا و آب به ترتیب از  $0/7278$  به  $0/7018$  کاهش یافته که

## ۹- مراجع

- [10] A. Tafazzoli, M. Sitti, Dynamic Behavior and Simulation of Nanoparticles Sliding During Nanoprobe-Based Positioning, *Proceeding of The IMECE, ASME International Mechanical Engineering Congress*, November 2004.
- [11] M. Zakeri, *Dynamics Modeling of Nanoparticle Manipulation Based on V Shape Cantilevered AFM in Various Environments*, PhD Thesis, Department of Mechanical Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, 2011. (In Persian)
- [12] M. H. Korayem, M. Noroozi, Kh. Daeinabi, Control of an Atomic Force Microscopy probe During Nano-Manipulation via the Sliding Mode Method, *Scientiairanica B*, Vol. 19, No. 5, pp. 1346-1353, 2012.
- [13] M. H. Korayem, Kh. Daeinabi, Indentation Analysis of Nano-Particle using Nano-Contact Mechanics Models during Nano-Manipulation Based on Atomic Force Microscopy, *Journal of Nanoparticle Research*, Vol. 13, pp.1075-1091, 2011.
- [14] E. omidi, *Simulation of Sliding Mode Controller for Nanoparticle Manipulation via Atomic Force Microscope by Dagger and V-Shaped Cantilevers in Contact Mode*, MSc Thesis, Department of Mechanical Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, 2012. (In Persian)
- [15] M. H. Korayem, H. Khaksar, R. N. Hefz Abad, M. Taheri, Simulation of soft bacteria contact to be applied in nanomanipulation, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 14, pp. 227-234, 2014.
- [16] M. H. Korayem, M. Taheri, M. Zakeri, Sensitivity Analysis of Nanoparticles Manipulation based on Different Friction Models, *Applied Surface Science*, Vol. 258, pp.6713- 6722, 2012.
- [17] M. H. Korayem, M. Zakeri, Sensitivity Analysis of Nanoparticles Pushing Critical Conditions in 2-D Controlled Nanomanipulation Based on AFM, *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, Vol. 41, pp. 714-726, 2008.
- [1] T. Junno, K. Deppert, L. Montelius, L. Samuelson, Controlled Manipulation of Nanoparticles with an Atomic Force Microscope, *Applied Physics Letters*, Vol. 66, No. 26, pp. 3627-3629, 1995.
- [2] R. Resch, Ch. Baur, A. Bugacov, B. E. Koel, P. M. Echternach, A. Madhukar, N. Montoya, A. A. G. Requicha, P. Will, Linking and Manipulation of Gold Multinanoparticle Structures Using Dithiols and Scanning Force Microscopy, *Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 103, pp. 3647-3650, 1999.
- [3] R. Resch, Ch. Baur, A. Bugacov, B. E. Koel, A. Madhukar, A. A. G. Requicha, P. Will, Building and Manipulating Three-Dimensional and Linked Two-Dimensional Structures of Nanoparticles Using Scanning Force Microscopy, *Langmuir*, Vol. 14, No. 23, pp. 6613-6616, 1998.
- [4] J. H. Lu, Nanomanipulation of Extended Single-DNA Molecules on Modified Mica Surfaces Using the Atomic Force Microscopy, *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, Vol. 39, pp. 177-180, 2004.
- [5] J. Hu, Y. Zhang, H. Gao, M. Li, U. Hartmann, Artificial DNA Patterns by Mechanical Nanomanipulation, *Nano Letters*, Vol. 2, No. 1, pp. 55-57, 2002.
- [6] M. Sitti, K. Hirahara, H. Hashimoto, 2-D Micro Particle Assembly using Atomic Force Microscope, *Proceeding of The IEEE, International Conference on Micromechatronics and Human Systems*, pp. 143-148, November 1998.
- [7] M. Sitti, H. Hashimoto, Force Controlled Pushing of Nanoparticles: Modeling and Experiments, *IEEE/ASME Transaction on Mechatronics* 5, pp. 199-211, 2000.
- [8] C. Ritter, M. Heyde, U. D. Schwarz, and K. Rademann, Controlled Translational Manipulation of Small Latex Spheres by Dynamic Force Microscopy, *Langmuir*, Vol. 18, pp. 7798-7803, 2002.
- [9] A. Tafazzoli, M. Sitti, Dynamic Modes of Nano-Particle Motion during Nanoprobe Based Manipulation, *Proceeding of The IEEE, International Conference on Nanotechnology*, August 2004.