مجله مهندسی مکانیک مدرس، فروردین 1395، دوره 16، شماره 1، ص‌ص 144-150

ماهنامه علمی پژوهشی

مهندسی مکانیک مدرس

mme.modares.ac.ir

خواص ساختاری و ارتعاشات نانولوله‌های کربنی تحت جذب فیزیکی مولکول زیستی فلاوین‌مونونوکلئوتید در آب به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

شهرام آجری[1]، رضا انصاری خلخالی[2*]، منصور درویزه[3]

1- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت
2- دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت
3- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت
* رشت، صندوق پستی 3756، r_ansari@guilan.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل
دریافت: 20 شهریور 1394
پذیرش: 06 آذر 1394
ارائه در سایت: 02 دی 1394

کلید واژگان:
ارتعاشات
خواص ساختاری
نانولوله‌ی کربنی
جذب فیزیکی
شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

چکیده

به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به تحلیل خواص ساختاری و ارتعاشات نانولوله‌های کربنی تک و دوجداره تحت جذب فیزیکی (عامل‌دار کردن) مولکول زیستی فلاوین مونو نوکلئوتید (FMN) پرداخته می‌شود و اثرات شرایط مرزی مختلف، درصد وزنی مولکول FMN، شعاع، تعداد جداره بر روی فرکانس طبیعی و تغییرات آن بررسی می‌گردد. با توجه به اینکه فرایند عامل‌دار سازی عموما در محیط‌های آبی صورت می‌پذیرد، دو محیط خلأ و آبی برای شبیه‌سازی در نظر گرفته شده است. در مطالعه‌ی خواص ساختاری، با محاسبه‌ی شعاع ژیراسیون ملاحظه می‌گردد که با افزایش تعداد مولکول‌های FMN، شعاع ژیراسیون به صورتی خطی افزایش می‌یابد. همچنین، ملاحظه می‌گردد که وجود مولکول‌های آب در محیط شبیه‌سازی باعث توزیع گسترده‌تر مولکول‌ها در اطراف نانولوله می‌شود. عامل‌دارسازی نانولوله‌های کربنی فرکانس طبیعی نانولوله‌های کربنی را در محیط خلأ ، وابسته به شرایط مرزی، کاهش می‌دهد. این کاهش برای شرایط مرزی گیردار بسیار قابل توجه‌تر از نانولوله با شرط مرزی ساده و گیردار-آزاد می‌باشد در محیط آبی ملاحظه می‌گردد که برخلاف نانولوله‌ها با شرایط مرزی گیردار و ساده، فرکانس طبیعی نانولوله‌ها با شرایط گیردار-آزاد افزایش می‌یابد که مقدار تغییر فرکانس با افزایش تعداد مولکول‌های FMN افزایش می‌یابد. همچنین مشاهده می‌شود که فرکانس نانولوله تک‌جداره با شعاع بزرگتر کاهش قابل توجه‌تری دارد. همچنین، حساسیت تغییرات میزان تغییر فرکانس با افزایش تعداد مولکول‌های FMN برای نانولوله‌ی دوجداره کمتر از تک‌جداره می‌باشد. همچنین ملاحظه گردید که میزان کاهش فرکانس با حضور مولکول‌های آب به میزان قابل توجهی افزایش می‌یابد در حالی که با افزایش تعداد مولکول‌ها، این تغییرات قابل توجه نمی‌باشد.

The structural properties and vibrational behavior of physisorbed carbon nanotubes with flavin mononucleotide biomolecule in water using molecular dynamics simulation

Shahram Ajori, Reza Ansari Khalkhali*, Mansour Darvizeh

Department of Mechanical Engineering, University of Guilan, Rasht, Iran.
* P.O.B. 3756 Rasht, Iran, r_ansari@guilan.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 11 September 2015
Accepted 27 November 2015
Available Online 23 December 2015

Keywords:
Vibration
Structural properties
carbon nanotube
Physical adsorption
Molecular dynamics simulation

ABSTRACT

Using molecular dynamics simulations, the structural properties and vibrational behavior of single- and double-walled carbon nanotubes (CNTs) under physical adsorption (functionalization) of Flavin Mononucleotide (FMN) biomolecule are analyzed and the effects of different boundary conditions, the weight percentage of FMN, radius and number of walls on the natural frequency are investigated. As the functionalized nanotubes mainly operate in aqueous environment, two different simulation environments, i.e. vacuum and aqueous environments, are considered. Considering the structural properties, increasing the weight percentage of FMN biomolecules results in linearly increasing the gyration radius. Also, it is observed that presence of water molecules expands the distribution of FMN molecules wrapped around CNTs compared to that of FMN molecules in vacuum. It is demonstrated that functionalization reduces the frequency of CNTs, depending on their boundary conditions in vacuum which is more considerable for fully clamped (CC) boundary conditions. Performing the simulations in aqueous environments demonstrates that, in the case of clamped-free (CF) boundary conditions, the frequency increases unlike that of CNTs with fully clamped and fully simply supported boundary conditions. The value of frequency shift increases by raising the weight percentage of FMN biomolecule. Moreover, it is observed that the frequency shifts of SWCNTs with bigger radius are more considerable, whereas the sensitivity of frequency shift to the weight percentage of FMN biomolecule reduces and this is more pronounced as the simulation environment is aqueous.

Please cite this article using:

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

Sh. Ajori, R. Ansari Khalkhali, M. Darvizeh, The structural properties and vibrational behavior of physisorbed carbon nanotubes with flavin mononucleotide biomolecule in water using molecular dynamics simulation, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 16, No. 1, pp. 144-150, 2016 (in Persian)

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]

[DOR: 20.1001.1.10275940.1395.16.1.28.1]

1- مقدمه

نانولوله‌های کربنی به دلیل خواص خارق‌العاده کاربردهای بالقوه‌ی متعدد الکتریکی [1]، نوری [2] و مکانیکی [3-5] قابل توجهی دارند که آن‌ها را از سایر مواد متعارف، مجزا می‌سازد. در این میان، قابلیت برهم‌کنش نانولوله‌های کربنی با سایر مولکول‌های آلی، معدنی و زیستی، بر اهمیت آن‌ها برای کاربردهای مختلف در سیستم‌های نانوالکترمکانیکی و کاربردهای درمانی و دارورسانی افزوده است. با این حال، نیروی ون‌دروالس نسبتا قوی میان نانولوله‌ها منجر به توده‌ای شدن و تشکیل دسته‌های نانولوله‌ای می‌شود که این امر موجب عدم حلالیت و همچنین توزیع غیر یکنواخت نانولوله‌ها در حلال‌های مختلف می‌گردد و کاربردهای نانولوله‌ها را تا حد بسیار زیادی محدود می‌کند. مطالعات بسیار گسترده‌ای به منظور حل این مشکل انجام پذیرفت و در نهایت، محققین مشاهده کردند که عامل‌دارسازی نانولوله‌های کربنی را می‌توان به عنوان مؤثرترین راه عملی برای غلبه بر این مشکل در نظر گرفت [6-10]. ملاحظه گردید که خواص نانولوله‌های عامل‌دار شده متفاوت از خواص ذاتی آن می‌باشد [11-13]. در میان مولکول‌های مختلف، بیومولکول‌ها از آنجایی که امکان استفاده در سیستم‌های نانوالکترومکانیکی سازگار با محیط‌های زیستی مانند رهایش هدفمند دارو، ژن درمانی، بیوسنسورها و سایر کاربردها را دارا می‌باشند، از اهمیت بالایی به عنوان گروه عاملی در عامل‌دارکردن نانولوله‌ها برخوردار می‌باشند [14-17].

فلاوین مونو نوکلئوتیدها (FMN) مولکول‌های نسبتا کوچکی هستند که از مشتقات ویتامین B2 بدست می‌آیند که توانایی ساطع کردن نور فلورسنت سبز را در گستره‌ی وسیعی از شرایط محیطی مختلف دارند. این قابلیت، مولکول‌های FMN را برای به‌کاربردن در نانونشانه‌گذارها و نانوسنسورهای زیستی، بسیار پرکاربرد و پر اهمیت کرده است [18،19].

با توجه به اینکه تاکنون مطالعات نسبتا اندکی بر روی رفتار ارتعاشی نانولوله‌های کربنی عامل‌دار شده، خصوصا با روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی صورت پذیرفته است، این مقاله، به بررسی خواص ساختاری و رفتار ارتعاشی نانولوله‌های تک‌جداره و دوجداره‌ی عامل‌دار شده با مولکول زیستی FMN به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌پردازد. همچنین، اثرات مختلفی از قبیل اثر شرط مرزی مختلف، شعاع نانولوله، درصد وزنی FMN و افزایش تعداد دیواره‌های نانولوله‌ها مورد مطالعه قرار می‌گیرند. از آنجایی که نانولوله‌های عامل‌دار شده اساسا در محیط‌های آبی قرار دارند [20-22]، در این مطالعه اثرات محیطی خلأ و محلول آبی نیز در رفتار ارتعاشی نانولوله‌ها مورد بررسی قرار می‌گیرند.

2- روش شبیه‌سازی اتمی

در این مقاله از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی استفاده شده است که یک شبیه‌سازی قطعی به شمار می‌رود. دینامیک مولکولی توسط همیلتونی سیستم تعریف می‌گردد و بر اساس برهم‌کنش ذرات موجود در سیستم بوسیله‌ی یک تابع میدان نیرویی، مکان ذرات و سرعت آن‌ها در طی زمان‌های مختلف و طی مسیر حرکت آن‌ها با انتگرال‌گیری از معادلات همیلتونی حرکت به دست می‌آیند. تمام شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با استفاده از کد لمپس [23] انجام شده است. به این منظور از تابع میدان نیرویی امبر [24،25] در هنگرد کانونی استفاده شده است. در کنار توصیف دقیق و توانایی شبیه‌سازی پروتئین‌ها و مولکول‌های زیستی، برای تحلیل خواص و رفتار مکانیکی نانومواد و نانوساختارهای مختلف به خصوص در حالتی که ساختار دارای ناخالصی باشد مانند نانوکامپوزیت‌ها و نانولوله‌های عامل‌دار شده و بسیاری شبیه‌سازی‌های مرتبط با پدیده‌های زیستی، در حالتی که پتانسیل‌های تجربی چندجسمی قابل استفاده نباشد، بسیار مناسب است و بر اساس رابطه‌ی (1) بیان می‌گردد:

$$U = \sum_{\text{bonds}} K_r(r - r_{eq}) + \sum_{\text{angles}} K_\theta(\theta - \theta_{eq}) + \sum_{\text{dihedrals}} \frac{v_n}{2}[1 - \cos(n\varphi - \gamma)] + \sum_{\text{i,j>i}} \left\{ \epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6} \right] + \frac{k q_i q_j}{r_{ij}} \right\} \quad (1)$$

که در تحلیل خواص الاستیک نانولوله‌های کربنی و رفتار ارتعاشی و کمانشی آن‌ها از آنجایی که شکست و ایجاد پیوند جدید وجود ندارد، نتایج بسیار قابل قبولی را ارائه می‌کند [11-13].

مطابق با رابطه‌ی (1)، تابع میدان نیرویی امبر، به ترتیب، از مجموع چهار قسمت مجزای کشش پیوندی[1]، خمش زاویه‌ای[2]، پیچش پیوندی[3] و برهم‌کنش‌های غیرپیوندی وان‌دروالس و کولمب تشکیل یافته است. این تابع شامل پارامترهایی می‌باشد که وابسته به شکل ساختار و نوع اتم‌های موجود در آن است و می‌توان جزئیات کامل‌تر را در مرجع ذکر شده و کتب شبیه-سازی های اتمی معتبر یافت.

به منظور حل معادلات نیوتنی حاکم در دمای محیط، از الگوریتم سرعت-ورلت و ترموستات نوز-هوور در گام زمانی یک فمتوثانیه در دمای اتاق استفاده شده است که توسط روابط (2) تا (6) بیان می‌گردند.

$$r_i(t + \mathrm{d}t) = r_i(t) + v_i(t)\mathrm{d}t + \frac{1}{2}[a_i(t) - \zeta(t)v_i(t)] \quad (2)$$

$$v_i\left(t + \frac{\mathrm{d}t}{2}\right) = v_i(t) + \frac{\mathrm{d}t}{2}[a_i(t) - \zeta(t)v_i(t)] \quad (3)$$

$$\zeta\left(t + \frac{\mathrm{d}t}{2}\right) = \zeta(t) + \frac{\mathrm{d}t}{2Q}\left[\sum_i^N m_i v_i^2(t) - g k_B T\right] \quad (4)$$

$$\zeta(t + \mathrm{d}t) = \zeta\left(t + \frac{\mathrm{d}t}{2}\right) + \frac{\mathrm{d}t}{2Q}\left[\sum_i^N m_i v_i^2\left(t + \frac{\mathrm{d}t}{2}\right) - g k_B T\right] \quad (5)$$

$$v_i(t + \mathrm{d}t) = \frac{2}{2 + \zeta(t + \mathrm{d}t)\mathrm{d}t}\left[v_i\left(t + \frac{\mathrm{d}t}{2}\right) + \frac{\mathrm{d}t}{2}a_i(t + \mathrm{d}t)\right] \quad (6)$$

در روابط (2) تا (6) Q از رابطه (7) به‌دست می‌آید:

$$Q = g k_B T \tau^2 \quad (7)$$

که τ زمان واهلش سیستم در ترموستات می‌باشد که به‌طور معمول هم مرتبه با گام زمانی $\mathrm{d}t$ می‌باشد. وظیفه این پارامتر کنترل سرعت است تا تغییرات دمایی را کاهش دهد. در نهایت، مقدار درجه آزادی سیستم نیز از رابطه (8) به‌دست می‌آید:

$$g = 3(N - 1) \quad (8)$$

لازم به ذکر است که مقادیر شتاب بکار رفته در معادلات (2)،(3) و (6) بوسیله‌ی گرادیان تابع میدان نیرویی محاسبه می‌گردد. استفاده از این ترموستات منجر به کاهش قابل توجه نوسانات دمایی در طی شبیه‌سازی می-

1- Bond stretching
2- Angle bending
3- Bond torsion

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1395.16.1.28.1]

شود [26-28].

در ابتدا، پس از کمینه‌سازی انرژی سیستم، به کل سیستم مدت زمان 500 پیکوثانیه اجازه داده می‌شود که به‌وسیله‌ی ترموستات انتخابی به تعادل دمایی و ساختار تعادلی خود برسد. پس از آن، به سیستم اجازه‌ی ارتعاش داده می‌شود [11،12،29-32]. به منظور محاسبه‌ی فرکانس طبیعی نانولوله‌ی عامل‌دار شده، در هنگام واهلش و ارتعاش سیستم، در هر گام زمانی مرکز جرم نانولوله محاسبه شده و ذخیره می‌گردد. ازین رو، می‌توان پاسخ زمانی مرکز جرم نانولوله را بدست آورد. پس از آن، با کمک تبدیل فوریه سریع که در آن پاسخ زمانی نوسانات مرکز جرم نانولوله به همراه گام زمانی، به صورت ورودی به کد تبدیل فوریه سریع داده می‌شود، می‌توان فرکانس طبیعی آن را محاسبه نمود.

3- نتایج و بحث

3-1- مدل شبیه‌سازی

شکل 1، ساختار یک مولکول FMN را نشان می‌دهد.

به منظور انجام شبیه‌سازی‌های مختلف، نانولوله‌های تک جداره‌ی (7,7)، (12,12) و نانولوله‌ی دو جداره‌ی (7,7)@(12،12) با طول تقریبی 100 آنگستروم در نظر گرفته شده‌اند. شکل 2، مدل اولیه‌ی ساختار نانولوله‌ی کربنی عامل‌دار شده با FMN را در محیط خلا و حلال آبی با چگالی $0.5\ \frac{gr}{cm^3}$ نشان می‌دهد.

لازم به ذکر است که در این مطالعه به بررسی شرایط مرزی مختلف از قبیل گیردار، ساده و گیردار-ساده پرداخته می‌شود که در شکل 3، شماتیک این شرایط مرزی نمایش داده شده‌اند.

همچنین باید توجه گردد که هرمولکول FMN به ترتیب، 3.5%، 2% و 1.5% وزنی از نانولوله‌های تک جداره‌ی (7,7)، (12,12) و نانولوله‌ی دو جداره‌ی (7,7)@(12،12) را شامل می‌شود.

3-2- ساختار تعادلی FMN/CNT

از نتایج حاصل از تعادل اولیه شبیه سازی می توان دریافت که مولکول‌های FMN دور نانولوله کربنی می‌پیچند تا سیستم به ساختار تعادلی خود در دمای مورد نظر برسد که نمونه‌ای از آن در شکل 4 برای محیط‌های خلأ و آبی نشان داده شده است.

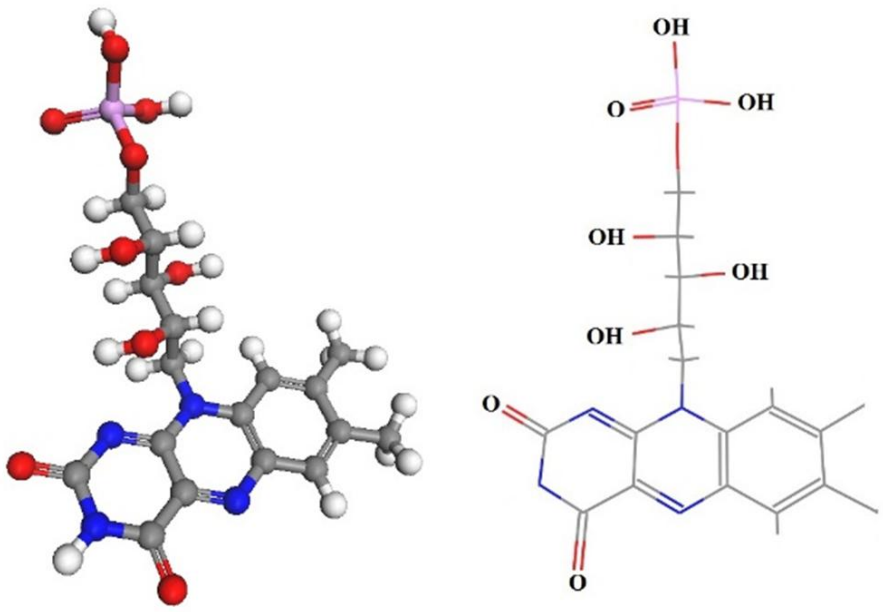


Fig. 1 Schematic representation of FMN biomolecule

شکل 1 شماتیک مولکول FMN

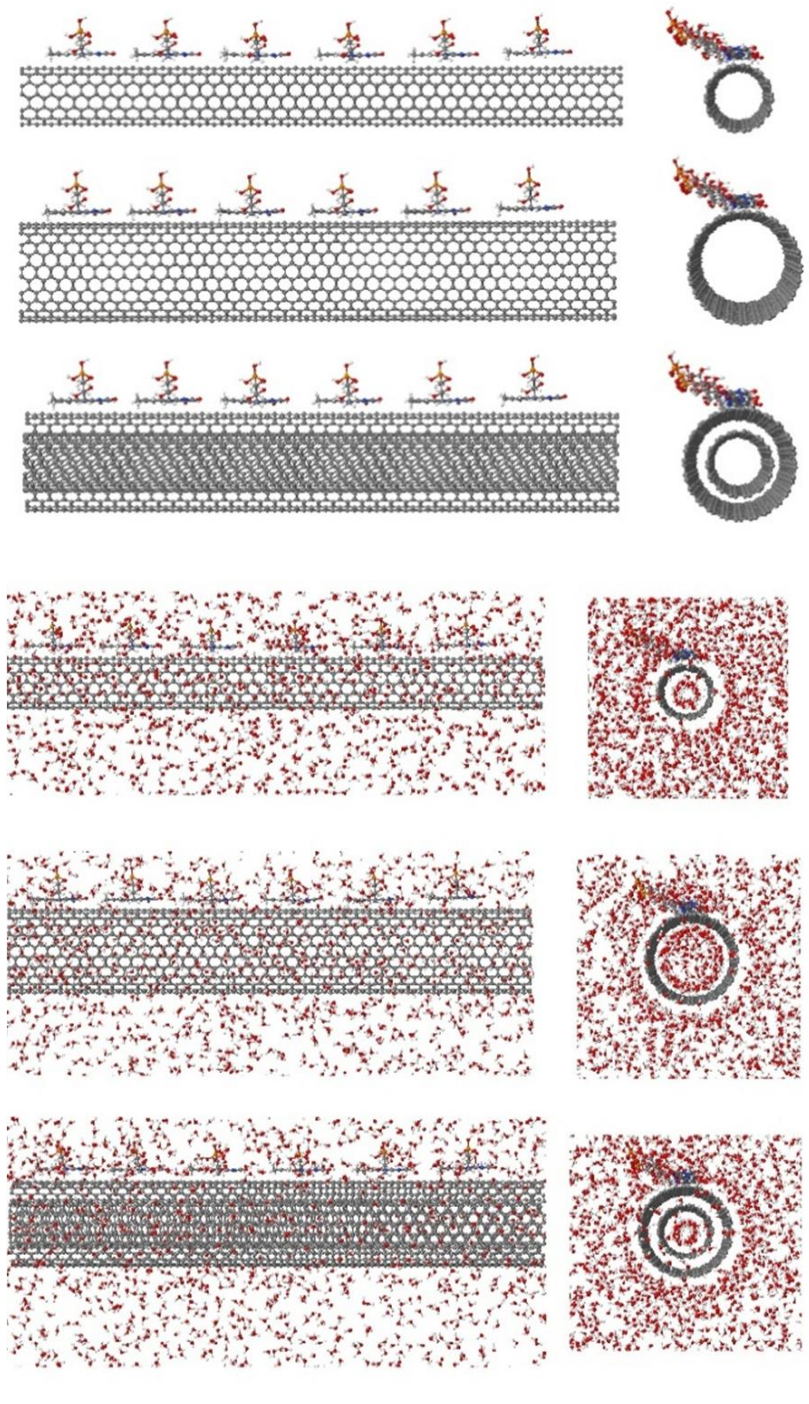


Fig. 2 Samples of initial simulation models, a) vacuum, b) aqueous environments

شکل 2 نمونه‌ی مدل اولیه شبیه‌سازی a) در خلا، b) در محیط آبی

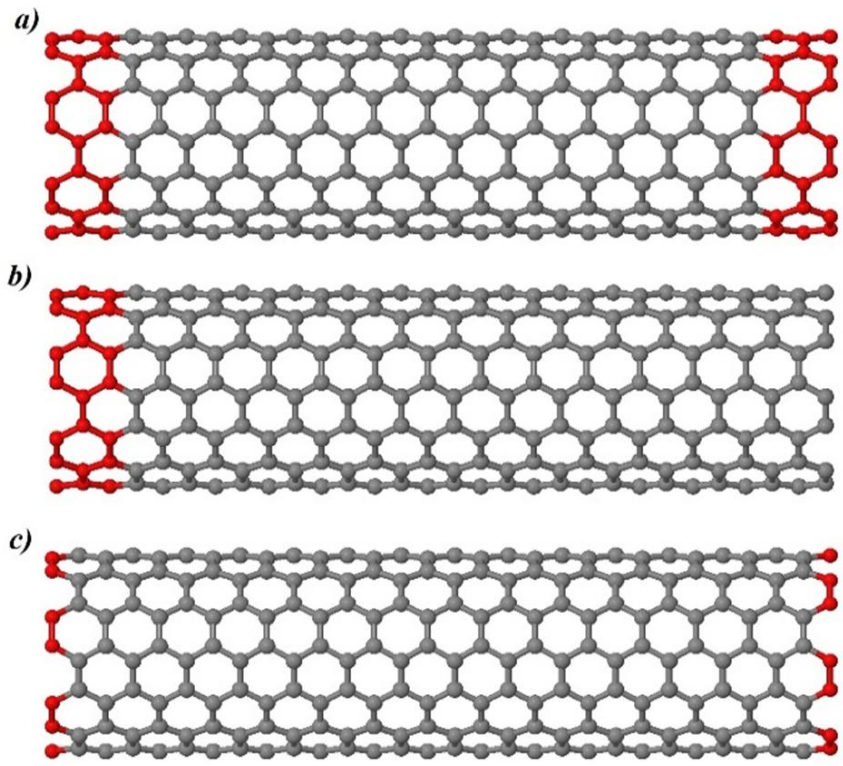


Fig. 3 Schematic representation of different boundary conditions, a) fully clamped, b) Clamped-free, c) fully simply-supported.

شکل 3 شماتیک شرایط مرزی مختلف a) گیردار، b) گیردار-آزاد، c) ساده

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1395.16.1.28.1]

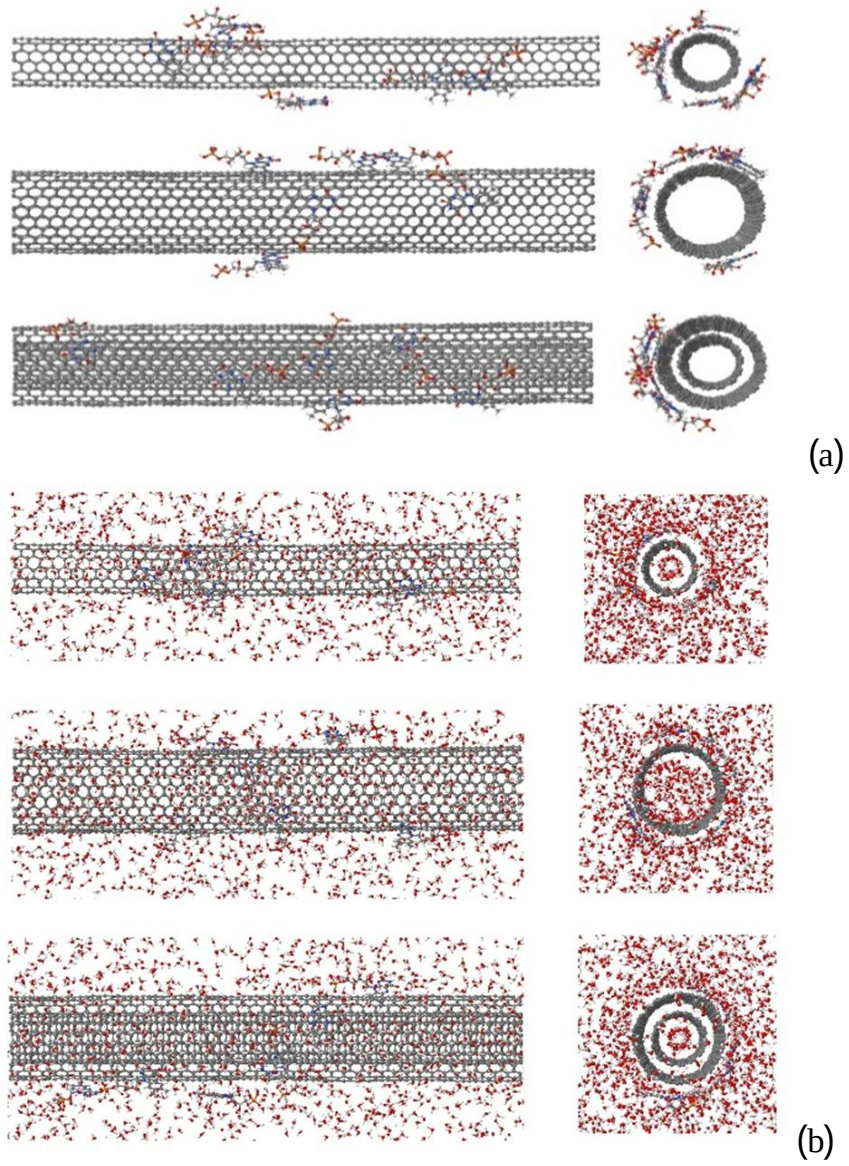


Fig. 4 Samples of equilibrated structure of functionalized CNT with FMN, a) in vacuum, b) in aqueous environment

شکل 4 نمونه‌هایی از ساختار تعادلی نانولوله‌ی عامل‌دار شده با FMN. a) در خلا، b) در محیط آبی

شعاع ژیراسیون به عنوان معیاری برای توصیف توزیع مولکول‌ها به‌کار می‌رود و توسط رابطه‌ی (9) بیان می‌گردد:

$$R_g = \left(\frac{1}{N}\left(\sum_{i=1}^{N}(r_i - r_{cm})^2\right)\right)^{\frac{1}{2}} \quad (9)$$

در رابطه (9)، N تعداد اتم‌های مولکول و r_i و r_{cm} بیان‌گر بردارهای شعاعی هر اتم و مرکز جرم مولکول می‌باشد که در این مطالعه پس از تعادل اولیه (500 پیکوثانیه) برای تمامی مدل‌ها محاسبه شده است. به منظور مطالعه‌ی دقیق‌تر نحوه‌ی توزیع مولکول‌ها برای مدل‌های مختلف در خلأ و محلول آبی و مطالعه‌ی اثر افزایش درصد وزنی و تعداد مولکول‌های FMN بر توزیع آن‌ها در اطراف نانولوله، شکل‌های 5 و 6 ارائه شده‌اند. همان‌طور که در نمودارهای شعاع ژیراسیون نسبت به تعداد مولکول‌های عامل شده به نانولوله های کربنی مشهود است با افزایش تعداد مولکول‌های عامل شده شعاع ژیراسیون به صورت خطی افزایش می یابد.

شعاع نانولوله (7و7) و (12و12) به ترتیب 4.75 و 8.14 آنگستروم می‌باشد، این در حالی است که در میان نانولوله های عاملدار شده کمترین شعاع ژیراسیون وقتی که تعداد مولکول‌های FMN دور نانولوله کربنی کمترین مقدار باشد، رخ می دهد. همان‌طور که در شکل 5 مشاهده می‌گردد. کمترین شعاع ژیراسیون در شبیه‌سازی در محیط خلأ به ترتیب 5.42، 12.51 و 10.25 آنگستروم و بیشترین مقدار شعاع ژیراسیون به ترتیب 22.5، 28.6 و 25.9 آنگستروم برای نانولوله (7و7)، (12و12) و دوجداره است. همچنین ملاحظه می‌گردد که با افزایش تعداد مولکول‌های FMN

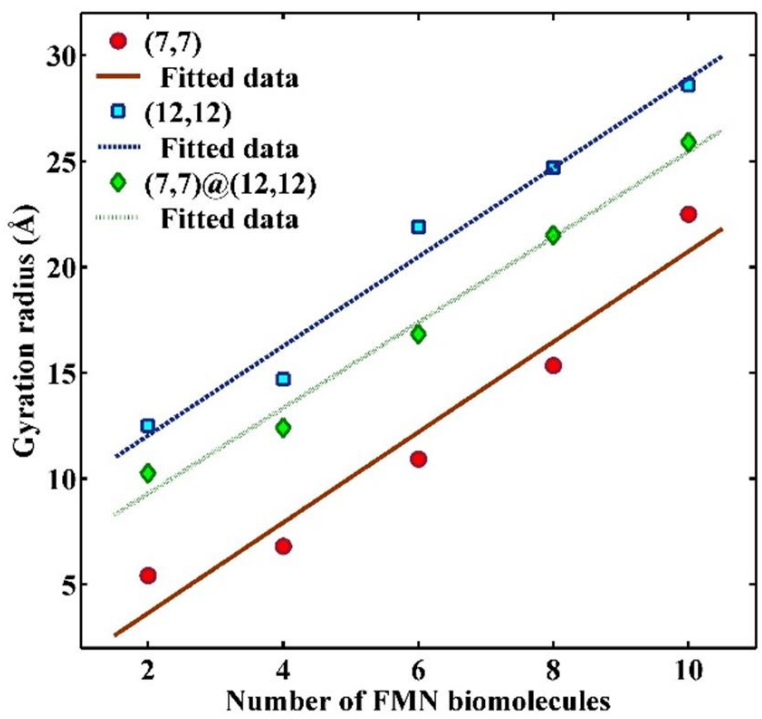


Fig. 5 Variation of gyration radius with number of FMN in vacuum

شکل 5 تغییرات شعاع ژیراسیون با تعداد مولکول‌های FMN در خلأ

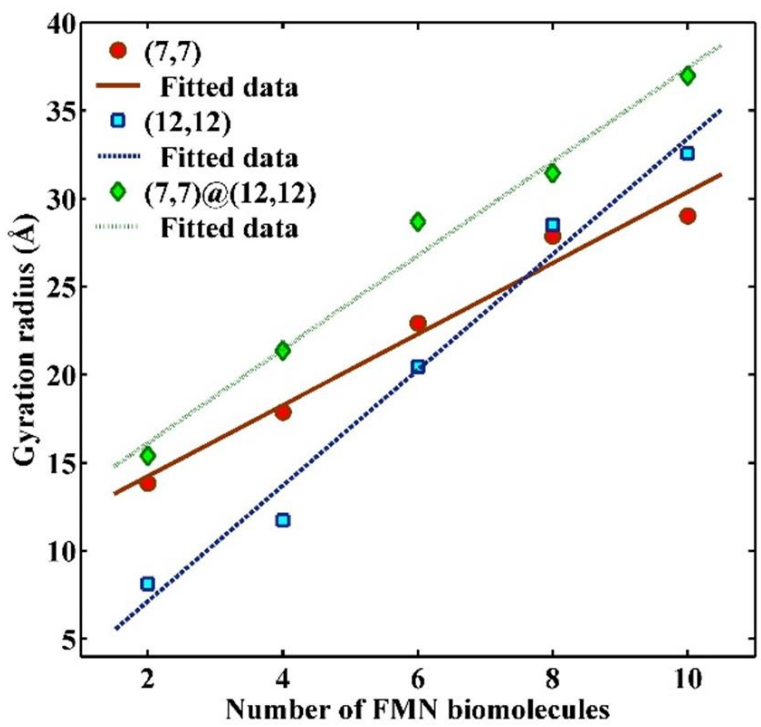


Fig. 6 Variation of gyration radius with number of FMN in aqueous environment

شکل 6 تغییرات شعاع ژیراسیون با تعداد مولکول‌های FMN در محیط آبی

شعاع ژیراسیون افزایش می‌یابد. به عنوان مثال، شعاع ژیراسیون نانولوله های کربنی عاملدار شده با 10 مولکول نسبت به نانولوله کربنی عاملدار شده با 2 مولکول برای نانولوله (7و7)، (12و12) و دوجداره به ترتیب 4.15، 2.29 و 2.53 برابر می شود. همچنین، با دقت در شکل 5 ملاحظه می‌گردد که در محیط خلأ، شعاع ژیراسیون نانولوله‌ی دوجداره بین شعاع ژیراسیون نانولوله-های تک جداره‌ی تشکیل دهنده‌ی آن می‌باشد.

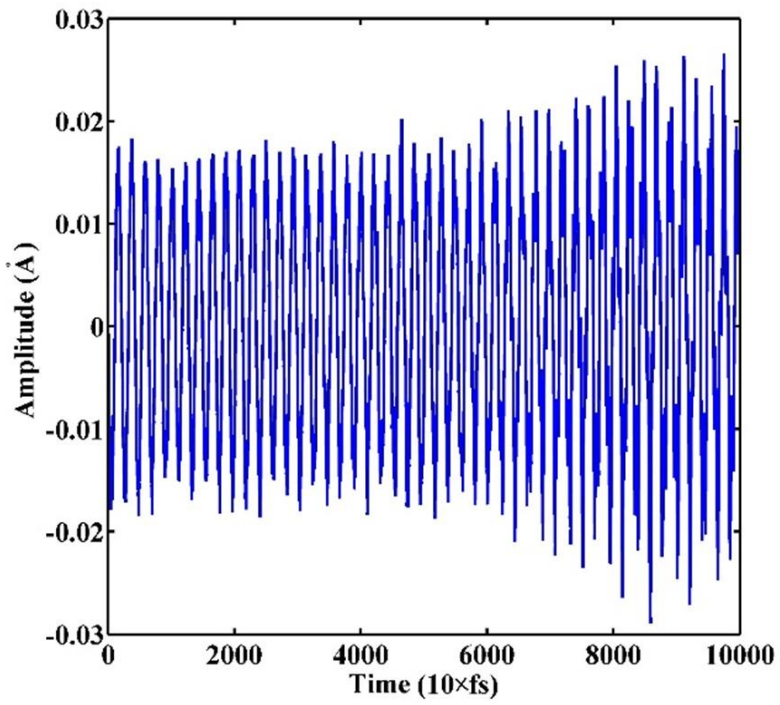
نمودار شعاع ژیراسیون مولکول‌های FMN دور نانولوله های کربنی در محیط آبی در شکل 6 نشان داده شده است. همان‌طور که ملاحظه می‌گردد، نحوه‌ی تغییرات شعاع ژیراسیون با افزایش تعداد مولکول‌های FMN به صورت کیفی مشابه با تغییرات آن در حالت خلا (شکل 5) می‌باشد. با دقت در نتایج بدست آمده، ملاحظه می‌گردد که حضور مولکول‌های آب منجر به افزایش شعاع ژیراسیون مولکول‌های FMN در مقایسه با حالت خلأ می‌باشد. به عنوان مثال، کمترین شعاع ژیراسیون، به ترتیب، 13.84، 8.12 و 15.4 آنگستروم و بیشترین مقدار شعاع ژیراسیون، به ترتیب، 29.03، 32.56 و

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1395.16.1.28.1]

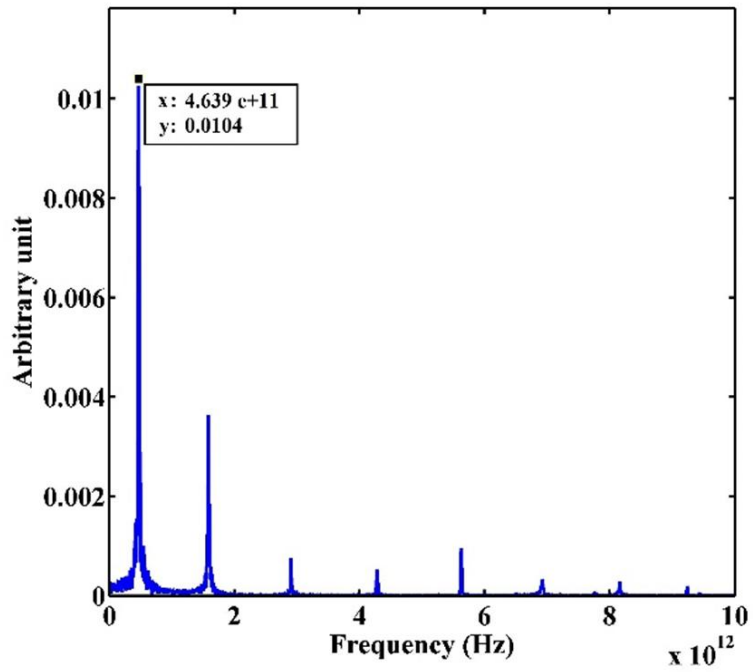
36.98 آنگستروم برای نانولوله (7و7)، (12و12) و دوجداره است. همچنین، ملاحظه می‌گردد که بر خلاف شبیه‌سازی در حالت خلأ ، شعاع ژیراسیون در مورد نانولوله‌ی دوجداره بیشتر از شعاع ژیراسیون در مورد نانولوله‌های تک‌جداره‌ی تشکیل‌دهنده‌ی آن است. همان‌طور که مشاهده می‌گردد عامل‌دار کردن نانولوله های کربنی با مولکول FMN در محیط آبی منجر به توزیع گسترده‌تر مولکول‌های FMN نسبت به حالت خلا شده‌اند.

3-3- اثر شرایط مرزی مختلف بر فرکانس طبیعی نانولوله‌های عامل‌دار شده با FMN

به منظور اعتبارسنجی نتایج بدست آمده در این مطالعه و میدان نیرویی مورد استفاده، شکل 7 که نشان‌گر پاسخ زمانی و نمودار FFT نانولوله‌ی تک‌جداره‌ی (7,7) با شرط مرزی گیردار در محیط خلأ می‌باشد، ارائه گردیده است. همانطور که ملاحظه می‌گردد مقدار این فرکانس برابر 463 گیگاهرتز می‌باشد که همخوانی قابل قبولی با نتایج پیشین دارد [11،12،29-31]. البته لازم به ذکر است که مقادیر فرکانس طبیعی بدست آمده با میدان نیرویی امبر اندکی از نتایج بدست آمده از توابع پتانسیل ترسف یا برنر بالاتر می‌باشند. از آنجایی که برای شبیه‌سازی سایر مولکول‌ها به دلیل وجود اتم‌های مختلف توابعی مانند ترسف و برنر تعریف نشده‌اند، از تابع میدان نیرویی امبر استفاده گردیده است.



(a)



(b)

Fig. 7. A sample of a) Time-history, b) FFT

شکل 7 آ. نمونه‌ای از آ. نمودار پاسخ زمانی، ب. نمودار FFT

به منظور مطالعه‌ی اثرات عامل‌دار کردن نانولوله‌ها در محیط خلا شکل 8 ارائه گردیده است. مقادیر منفی تغییرات بیانگر این است که عامل‌دار کردن غیرکووالانسی نانولوله‌ها باعث کاهش فرکانس در هر سه شرایط مرزی می‌شود. همانطور که در این شکل مشخص است عامل‌دار کردن غیرکووالانسی نانولوله‌ی مورد مطالعه در شرط مرزی CC بیشترین و در CF کمترین تأثیر را در کاهش فرکانس داشته است. همچنین مشهود است که با افزایش تعداد مولکول‌های FMN، مقدار کاهش فرکانس، افزایش می یابد. میزان تغییرات فرکانس طبیعی نانولوله کربنی عاملدار با 10 مولکول FMN نسبت به نانولوله با 2 مولکول به ترتیب 18%، 90.5% و 55% برای شرایط مرزی CC و CF و SS افزایش می یابد.

در شکل 9 تغییرات فرکانس بر حسب تعداد مولکول‌های FMN در محیط آبی نشان داده شده است.

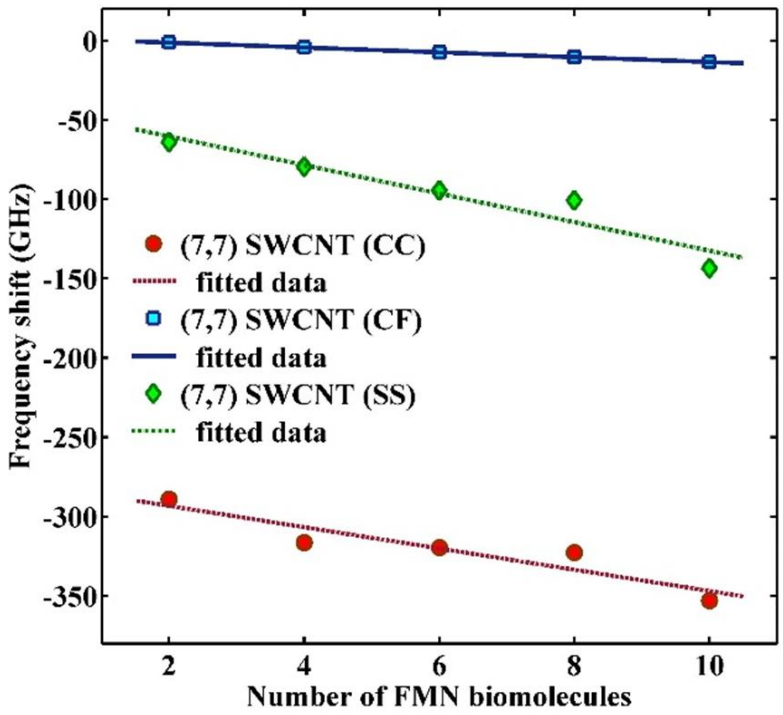


Fig. 8 The effects of different boundary conditions on the variation of frequency shift with number of FMN molecules in vacuum

شکل 8 اثر شرایط مرزی مختلف بر تغییرات شیفت فرکانس با تعداد مولکول‌های FMN در محیط خلأ

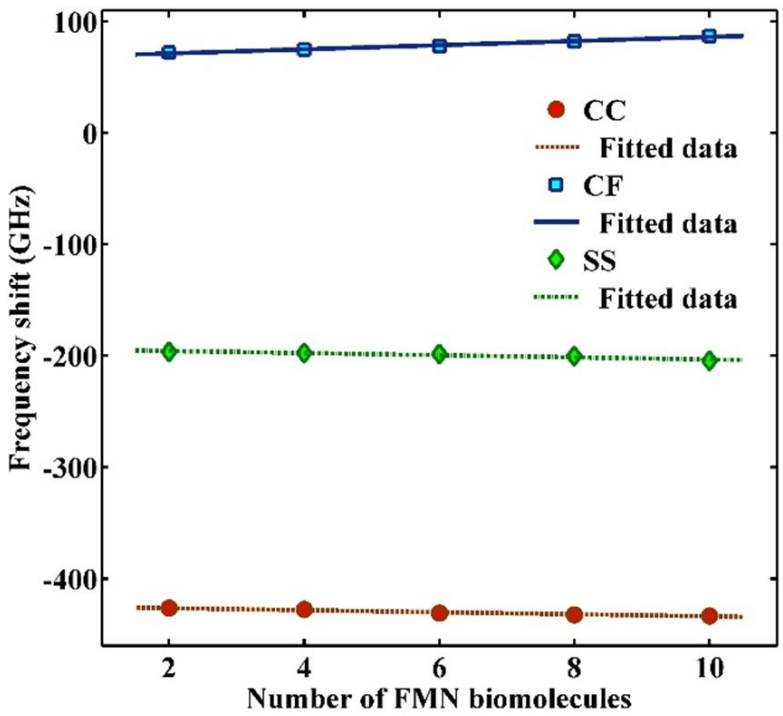


Fig. 9 The effects of different boundary conditions on the variation of frequency shift with number of FMN molecules in aqueous environments

شکل 9 اثر شرایط مرزی مختلف بر تغییرات شیفت فرکانس با تعداد مولکول‌های

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1395.16.1.28.1]

FMN در محیط آبی

همانطور که در شکل مشخص است، در شرایط مرزی CC و SS همانند حالت خلأ شاهد افت فرکانس هستیم. این در حالی است که در شرط مرزی CF فرکانس طبیعی نانولوله‌های عامل‌دار شده در آب بیشتر از نانولوله خالص محاسبه شده است. همان‌طور که در مطالعه‌ی اخیر [31] به صورت کامل ارائه شد، این افزایش فرکانس بدلیل تغییر مود فرکانسی به سمت مود دوم ارتعاشی در حضور آب می‌باشد. همچنین تغییرات فرکانس در محیط آبی به مقدار قابل توجهی نسبت به تغییرات فرکانس طبیعی در محیط خلأ افزایش می‌یابد. با این حال ملاحظه می‌گردد که افزایش تعداد مولکول‌های FMN تغییر قابل توجهی در مقایسه با حالت خلأ ایجاد نمی‌کند. میزان تغییرات فرکانس طبیعی نانولوله کربنی عاملدار با 10 مولکول FMN نسبت به نانولوله با 2 مولکول به ترتیب 2% و 4% افزایش می یابد. همچنین در شرایط مرزی CF فرکانس طبیعی و میزان تغییرات فرکانس طبیعی نانولوله عاملدار با 10 مولکول FMN 1.2 برابر نانولوله با 2 مولکول است.

4-3- اثر شعاع و تعداد جداره بر فرکانس طبیعی نانولوله‌ی کربنی عامل‌دار شده

به منظور مطالعه‌ی اثر شعاع و تعداد جداره بر روی فرکانس طبیعی نانولوله‌ی عامل‌دار شده در شرایط خلأ و محیط آبی شکل‌های 10 و 11 برای نانولوله-های (7و7)، (12و12) و دوجداره با شرط مرزی گیردار آورده شده است. همان‌طور که ملاحظه می‌گردد، تغییرات فرکانس طبیعی نانولوله های عامل-دار شده نسبت به نانولوله های خالص در محیط آبی بسیار قابل توجه‌تر از تغییرات فرکانس طبیعی در خلأ می‌باشند.

این در حالی است که تغییرات فرکانس طبیعی با افزایش تعداد مولکول-های FMN در محیط خلأ بسیار قابل توجه‌تر می‌باشد. در هر دو محیط خلأ و آبی نانولوله با قطر بزرگتر در اثر عامل‌دار کردن افت فرکانس بیشتری دارد. علاوه براین با مقایسه دو شکل 10 و 11 می توان دریافت که حضور مولکول‌های آب نیز بر اثر مولکول‌های FMN در کاهش فرکانس نانولوله‌ها می افزاید. برای مثال در شکل 10 و در شرایط خلأ در نانولوله (7و7)، (12و12) و دوجداره، تغییرات فرکانس طبیعی نانولوله کربنی عامل‌دار با 10

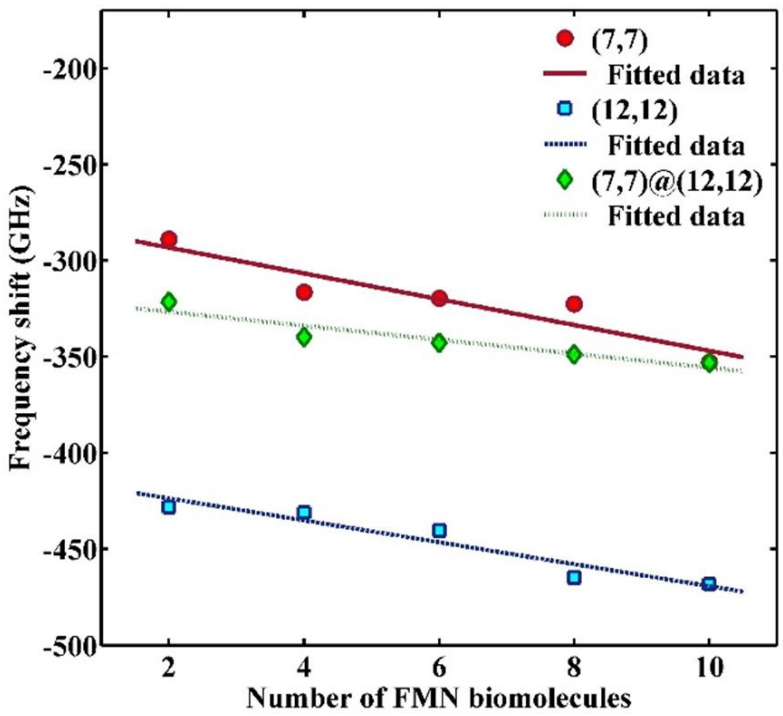


Fig. 10 The effects of radius and number of walls on the variation of frequency shift with number of FMN molecules in vacuum

شکل 10 اثر اندازه شعاع و تعداد جداره بر تغییرات شیفت فرکانس با تعداد مولکول-های FMN در محیط خلأ

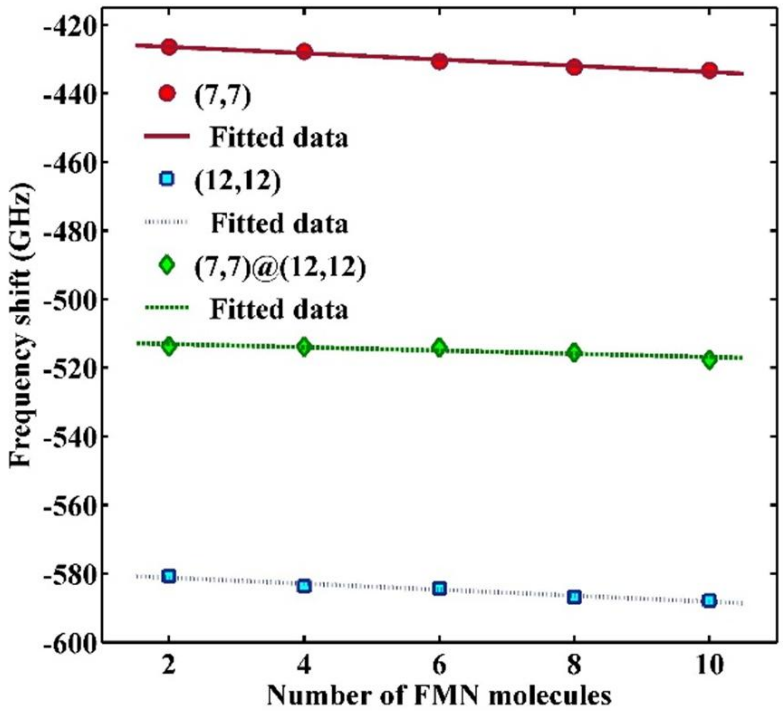


Fig. 11 The effects of radius and number of walls on the variation of frequency shift with number of FMN molecules in aqueous environment

شکل 11 اثر اندازه شعاع و تعداد جداره بر تغییرات شیفت فرکانس با تعداد مولکول-های FMN در محیط آبی

مولکول FMN نسبت به نانولوله با 2 مولکول به ترتیب 18%، 10% و 7.5% افزایش می‌یابد. همچنین مطابق شکل 11، در نانولوله (7و7)، (12و12) و دوجداره، میزان تغییرات فرکانس طبیعی نانولوله کربنی عامل‌دار با 10 مولکول FMN نسبت به نانولوله با 2 مولکول به ترتیب حدودا 1.6%، 1.4% و 0.66% افزایش می‌یابد. همچنین ملاحظه می‌گردد که در هر دو حالت خلا و آبی، میزان کاهش فرکانس نانولوله‌ی دوجداره بین میزان کاهش فرکانس نانولوله‌های تک جداره‌ی سازنده‌ی آن می‌باشد و نیز مقدار تغییرات آن با افزایش تعداد مولکول‌های FMN کمتر از تغییرات نانولوله‌های تک جداره‌ی سازنده‌ی آن است.

4- جمع‌بندی

در این مقاله به تحلیل دینامیک مولکولی ارتعاشات آزاد نانولوله‌های کربنی تک و دوجداره‌ی عامل‌دارشده با مولکول زیستی FMN در محیط خلا و آبی پرداخته شده است. نتایج شبیه‌سازی نشان دادند که مولکول FMN به صورت فیزیکی بر دیواره‌ی نانوله جذب شده و می‌پیچد. با محاسبه‌ی شعاع ژیراسیون ملاحظه می‌گردد که با افزایش تعداد مولکول‌های FMN، شعاع ژیراسیون به صورتی خطی افزایش می‌یابد. همچنین، ملاحظه گردید که وجود مولکول‌های آب در محیط شبیه‌سازی باعث توزیع گسترده‌تر مولکول‌ها در اطراف نانولوله می‌گردد. مشاهده گردید که عامل‌دارسازی نانولوله‌های کربنی با مولکول FMN فرکانس طبیعی نانولوله‌های کربنی را در محیط خلا کاهش می‌دهد که مقدار آن وابسته به شرایط مرزی نانولوله‌ها می‌باشد. این تغییرات برای شرایط مرزی گیردار بسیار قابل توجه‌تر از نانولوله با شرط مرزی ساده و گیردار-آزاد می‌باشد. شبیه‌سازی در محیط آبی نشان می‌دهند که برخلاف فرکانس طبیعی نانولوله‌ها با شرایط مرزی گیردار و ساده، فرکانس طبیعی نانولوله‌ها با شرایط گیردار-آزاد افزایش می‌یابد که در تمامی حالت‌ها مقدار تغییر فرکانس با افزایش تعداد مولکول‌های FMN افزایش می‌یابد. در مطالعه‌ی اثر شعاع و تعداد جداره‌ی نانولوله‌ها، نتایج شبیه‌سازی نشان دادند که مقدار کاهش فرکانس نانولوله تک‌جداره با شعاع بزرگتر بیشتر می‌باشد و تغییرات فرکانس

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1395.16.1.28.1]

نانولوله‌ی دوجداره بین تغییرات فرکانس نانولوله‌های تک جداره‌ی تشکیل دهنده‌ی آن است. همچنین، حساسیت تغییرات میزان تغییر فرکانس با افزایش تعداد مولکول‌های FMN برای نانولوله‌ی دوجداره کمتر از نانولوله‌ی تک‌جداره می‌باشد. شبیه‌سازی‌ها در محلول آبی نشان دادند که میزان کاهش فرکانس با حضور مولکول‌های آب به میزان قابل توجهی افزایش می‌یابد در حالی که با افزایش تعداد نانولوله‌ها تغییرات قابل توجه نمی‌باشد.

5- منابع

[1] A. Bachtold, P. Hadley, T. Nakanishi, C. Dekker, Logic circuits with carbon nanotube transistors, *Science,* Vol. 294, No. 5545, pp. 1317-1320, 2001.

[2] W. Aloui, A. Ltaief, A. Bouazizi, Transparent and conductive multi walled carbon nanotubes flexible electrodes for optoelectronic applications, *Superlattices and Microstructures,* Vol. 64,No.1, pp. 581-589, 2013.

[3] R. H. Baughman, C. Cui, A. A. Zakhidov, Z. Iqbal, J. N. Barisci, G. M. Spinks, et al., Carbon nanotube actuators, *Science,* Vol. 284, No. 5418, pp. 1340-1344, 1999.

[4] X. L. Xie, Y. W. Mai, X. Ping, Dispersion and alignment of carbon nanotubes in polymer matrix: a review, *Materials Science and Engineering: R: Reports,* Vol. 49, No. 4, pp. 89-112, 2005.

[5] R. Andrews, M. C. Weisenberger, Carbon nanotube polymer composites, *Current Opinion in Solid State and Materials Science,* Vol. 8, No. 1, pp. 31-37, 2004.

[6] X. Zhang, T. V. Sreekumar, T. Liu, S. Kumar, Properties and Structure of Nitric Acid Oxidized Single Wall Carbon Nanotube Films, *The Journal of Physics and Chemistry B,* Vol. 108, No. 42, pp. 16435–16440, 2004.

[7] C. A. Dyke, J. M. Tour, Overcoming the insolubility of carbon nanotubes through high degrees of sidewall functionalization, *Chemistry,* Vol. 10, No. 4, pp. 812-817, 2004.

[8] V. Georgakilas, D. Voulgaris, E. Vazquez, M. Prato, D. M. Guldi, A. Kukovecz, H. Kuzmany, Purification of HiPco carbon nanotubes via organic functionalization, *Journal of the American Chemical Society,* Vol. 124, No. 48, pp. 14318-14319, 2002.

[9] Y. Gogotsi, J. A. Libera, A. Güvenç-Yazicioglu, C. M. Megaridis, In situ multiphase fluid experiments in hydrothermal carbon nanotubes, *Applied Physics Letters,* Vol. 79, No. 7, pp. 1021-1023, 2001.

[10] J. L. Bahr, E. T. Mickelson, M. J. Bronikowski, R. E. Smalley, J. M. Tour, Dissolution of small diameter single-wall carbon nanotubes in organic solvents?, *Chemical Communication,* Vol. 2, No. 1, pp. 193-194, 2001.

[11] S. Ajori, R. Ansari, M. Darvizeh, Vibration characteristics of single-and double-walled carbon nanotubes functionalized with amide and amine groups, *Physica B,* Vol. 462, No. 1,pp. 8-14, 2015.

[12] S. Ajori, R. Ansari, Vibrational characteristics of diethyltoluenediamines (DETDA) functionalized carbon nanotubes using molecular dynamics simulations, *Physica B,* Vol. 459,No. 1, pp. 58-61, 2015.

[13] R. Ansari, S. Ajori, S. Rouhi, Structural and elastic properties and stability characteristics of oxygenated carbon nanotubes under physical adsorption of polymers, *Applied Surface Science,* Vol. 332, No.1, pp. 640-647, 2015.

[14] J. Kong, N. R. Franklin, C. Zhou, M. G. Chapline, S. Peng, C. Kyeongjae, H. Dai, Nanotube molecular wires as chemical sensors, *Science,* Vol. 287, No. 5453, pp. 622-625, 2000.

[15] B. F. Erlanger, B. X. Chen, M. Zhu, L. Brus, Binding of an Anti-Fullerene IgG Monoclonal Antibody to Single Wall Carbon Nanotubes, *Nano Letters,* Vol. 1, No. 9, pp. 465-467, 2001.

[16] W. Huang, S. Taylor, K. Fu, Y. Lin, D. Zhang, T. W. Hanks, A. M. Rao, Y. P. Sun, Attaching Proteins to Carbon Nanotubes via Diimide-Activated Amidation, *Nano Letters,* Vol. 2, No. 4, pp. 311-314, 2002.

[17] S. Vardharajula, S. Z. Ali, P. M. Tiwari, E. Eroğlu, K. Vig, V. A. Dennis, S. R. Singh, Functionalized carbon nanotubes: biomedical applications, *International Journal of Nanomedicine*. Vol. 7,No. 1, pp. 5361-5374, 2012.

[18] Z. Gao, C. Zhi, Y. Bando, D. Golberg, T. Serizawa, Noncovalent Functionalization of Boron Nitride Nanotubes in Aqueous Media Opens Application Roads in Nanobiomedicine, *Nanobiomedicine,* Vol. 1, No. 7, pp. 1-14, 2014.

[19] Z. Gao, C. Zhi, Y. Bando, D. Golberg, T. Serizawa, Noncovalent functionalization of disentangled boron nitride nanotubes with flavin mononucleotides for strong and stable visible-light emission in aqueous solution, *ACS Applied Materials and Interfaces,* Vol. 3, No. 3, pp. 627-632, 2011.

[20] H. J. Wang, X. K. Xi, A. Kleinhammes, Y. Wu, Temperature-induced hydrophobic-hydrophilic transition observed by water adsorption, *Science,* Vol. 322, No. 5898, pp. 80-83, 2008.

[21] A. Striolo, A. A. Chialvo, K. E. Gubbins, P. T. Cummings, Water in carbon nanotubes: Adsorption isotherms and thermodynamic properties from molecular simulation, *The Journal of Chemical Physics,* Vol. 122, No. 23, pp. 234712, 2005.

[22] T. W. Tombler, C. Zhou, L. Alexseyev, J. Kong, H. Dai, C. S. Jayanthi, M. Tang, S. Y. Wu, Reversible electromechanical characteristics of carbon nanotubes under local-probe manipulation, *Nature,* Vol. 405, No. 6788, pp. 769-772, 2000.

[23] S.J. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, *Journal of Computational Physics,* Vol. 117, No. 1, pp. 1-19, 1995.

[24] C. Grindon, S. Harris, T. Evans, K. Novik, P. Coveney, C. Laughton, Large-scale molecular dynamics simulation of DNA: implementation and validation of the AMBER98 force field in LAMMPS, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A,* Vol. 362, No. 1820, pp. 1373-1386, 2004.

[25] W. D. Cornell, P. Cieplak, C. I. Bayly, I. R. Gould, K. M. J. Merz, D. M. Ferguson, et al., A second generation force field for the simulation of proteins and nucleic acids, *Journal of the American Chemical Society,* Vol. 117, No. 19, pp. 5179-5197, 1995.

[26] C. L. Zhang, H. S. Shen, Predicting the elastic properties of double-walled carbon nanotubes by molecular dynamics simulation, *Journal of Physics D: Applied Physics,* Vol. 41, No. 5 pp. 055404, 2008.

[27] M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer Simulation of liquids,* New York, Oxford Science Publishing, 1987.

[28] W. G. Hoover, Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions, *Physical Review A,* Vol. 31, No. 3, pp.1695, 1985.

[29] Y. Y. Zhang, C. M. Wang, V. B. C. Tan, Assessment of Timoshenko beam models for vibrational behavior of single-walled carbon nanotubes using molecular dynamics, *Advances in Applied Mathematics and Mechanics,* Vol. 1, No. 1, pp. 89-106, 2009.

[30] R. Ansari, S. Ajori, B. Arash. Vibrations of single- and double-walled carbon nanotubes with layerwise boundary conditions: A molecular dynamics study, *Current Applied Physics,* Vol. 12, No. 3, pp. 707-711, 2012.

[31] R. Ansari, S. Ajori, A molecular dynamics study on the vibration of carbon and boron nitride double-walled hybrid nanotubes, *Applied Physics A,* Vol. 120, No. 4, pp. 1399-1406, 2015.

[32] R. Ansari, S. Ajori, A. Ameri, On the vibrational characteristics of single- and double-walled carbon nanotubes containing ice nanotube in aqueous environment, *Applied Physics A,* Vol. 121, No. 1, pp. 223-232, 2015.

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]

[DOR: 20.1001.1.10275940.1395.16.1.28.1]