



## شبیه‌سازی منیپولیشن نانولوله‌های کربنی و آلوتروپ‌های آن به روش دینامیک مولکولی

محرم حبیب‌نژاد کورایم<sup>1\*</sup>، حسن اصلانی پایان<sup>2</sup>، احمد همایونی<sup>3</sup>، روزبه نوحی حفظ‌آباد<sup>2</sup>

1- استاد، مهندسی مکانیک، قطب علمی مکانیک جامدات تجربی و دینامیک، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

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

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

\* تهران، صندوق پستی 16846-13114، iust.ac.ir، hkorayem@iust.ac.ir

### اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 09 تیر 1395

پذیرش: 10 مرداد 1395

ارائه در سایت: 21 شهریور 1395

کلید واژگان:

منیپولیشن

نانورباتیک

دینامیک مولکولی

آلوتروپ‌های کربنی

اثرات هندسی

### چکیده

در این مقاله به مدل‌سازی و شبیه‌سازی فرآیند منیپولیشن نانوذرات کربنی پرداخته شده است. از آنجایی که در منیپولیشن نانوذرات، هندسه نقش مهمی در رفتار دینامیکی بازی می‌کند؛ بررسی اشکال هندسی مختلف نانوذرات در این فرآیند حائز اهمیت است. به منظور بررسی تأثیرات هندسی، منیپولیشن چهار آلوتروپ کربنی با جرم برابر انجام شد و تأثیر قطر نانولوله‌های کربنی با طول‌های یکسان در این فرآیند مورد مطالعه قرار گرفت. به این منظور از روش دینامیک مولکولی که متناسب با ابعاد سیستم مورد مطالعه است استفاده شد تا درک صحیحی از فرآیند منیپولیشن و دینامیک آن ارائه دهد. در مطالعه‌ی منیپولیشن آلوتروپ‌های کربنی با جرم یکسان مشخص شد که هرچه آلوتروپ از حالت کروی شکل خارج شود، روند منیپولیشن تسهیل می‌گردد و نیروی وارد بر سوزن کاهش خواهد یافت. زیرا در این حالت شعاع انحنای ذره بیشتر شده و تغییرات انرژی پتانسیل در محل تماس ذره و زیرلایه هنگام منیپولیشن کاهش می‌یابد. در فرآیند منیپولیشن نانولوله با قطرهای مختلف، افزایش قطر نانولوله سبب تغییر در نیروی وارد شده بر سوزن و افزایش مقدار آن می‌گردد. مقدار عمق نفوذ در طی فرآیند منیپولیشن برای هر نانولوله استخراج شد، نتایج نشان داد که با افزایش قطر نانولوله، مقدار عمق نفوذ افزایش می‌یابد. از آنجایی که آلوتروپ‌های کربنی به عنوان حامل‌های دارویی کاربرد دارند، نتایج این مطالعه در بهبود فرآیندهای عملی و کاهش هزینه‌های آزمایشگاهی قابل استفاده است.

## Simulation of carbon nanotubes and its allotropes manipulation by molecular dynamics approach

Moharam Habibnejad Korayem<sup>\*</sup>, Hasan Aslani Payan, Ahmad Homayooni, Rouzbeh Nouhi Hefzabad

Robotic Research Laboratory, Center of Excellence in Experimental Solid Mechanics and Dynamics, School of Mechanical Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

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

### ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper

Received 29 June 2016

Accepted 31 July 2016

Available Online 11 September 2016

### Keywords:

Manipulation, Nanorobotics

Molecular Dynamics

Allotropes of carbon

Geometry effects

### ABSTRACT

In this paper, the modeling and simulation of manipulation of carbon nanoparticles have been investigated. The geometry plays a significant role in the dynamic behavior of nanoparticles manipulation and the evaluation of different geometric shapes of nanoparticles in this process is very important. To examine the geometrical effects, the manipulation of four different kinds of nano-carbon allotropes with the same mass has been studied. Furthermore, the manipulation of carbon nanotubes with different diameters has been simulated. For this purpose, the molecular dynamics method was used to improve our knowledge and understanding about the nanomanipulation processes and dynamics. It is found that the acting force on the tip decreases as the nanoparticle shape varies from sphere to cylinder in the manipulation of carbon allotropes with the same mass, further the manipulation is facilitated. In this state, the curvature radius of nanoparticle increases and the potential energy between nanoparticle and substrate reduces. In the manipulation of nanotubes, the results of nanotubes manipulation showed that increasing the diameter of the nanotube caused the force on the probe to increase. The indentation depth was extracted for each nanotube during the manipulation process. The results indicated that by increasing the diameter of the nanotube, the indentation depth increases. According to the application of carbon-based structures and nanotubes as the drug carriers in medicine, the results of this study can be used to improve the experimental projects and reduce the time and cost of them.

### 1- مقدمه

استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی<sup>1</sup> (AFM)، یکی از این روش‌ها در مقیاس نانو است. کنترل فرآیند منیپولیشن نیاز به درک صحیحی از دینامیک رفتار نانوذره در طی این فرآیند دارد. و این مهم مورد توجه بسیاری از پژوهشگران

استفاده‌ی گسترده از نانومیلها و نانولوله‌ها در طراحی و ساخت نانوساختارها، زمینه را برای تحقیق و توسعه بر روی این نانومواد فراهم کرده است. روش‌های مختلفی برای ساخت در این ابعاد وجود دارد که منیپولیشن، با

<sup>1</sup> Atomic Force Microscope

Please cite this article using:

M. Habibnejad Korayem, H. Aslani Payan, A. Homayooni, R. Nouhi Hefzabad, Simulation of carbon nanotubes and its allotropes manipulation by molecular dynamics approach, Modares Mechanical Engineering, Vol. 16, No. 9, pp. 12-18, 2016 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

مولکولی درشت دانه است. کورایم و همکارانش با استفاده از روش دینامیک مولکولی درشت‌دانه<sup>8</sup> (CGMDs) در طی مطالعه‌ای تلاش کردند تا تأثیرات تخریب سوزن را بر روی مقدار خطای موقعیت‌یابی در مینیبولیشن بررسی کنند [9].

با توجه به پیشینه‌ی موضوع و مطالعات انجام شده، مشاهده می‌گردد که اکثر شبیه‌سازی‌های انجام شده بر روی ذرات فلزی و یا در نهایت نانوذرات زیستی در این زمینه انجام شده است. در این مقاله به شبیه‌سازی فرآیند مینیبولیشن نانولوله‌های کربنی با رویکرد دینامیک مولکولی پرداخته می‌شود و نیروی لازم برای مینیبولیشن استخراج می‌گردد. علاوه بر آن تأثیر پارامتر قطر نانولوله مورد بررسی قرار می‌گیرد. در ادامه به منظور بررسی تأثیر هندسه‌ی نانوذرات در مینیبولیشن، مینیبولیشن آلوتروپ‌های کربنی انجام شده است. نتایج این‌گونه مطالعات علاوه بر کاهش هزینه‌های آزمایشگاهی، می‌تواند به عنوان تخمینی در فعالیت‌های آزمایشگاهی استفاده شود.

## 2- مدل‌سازی و شبیه‌سازی

"شکل 1" سیستم مورد مطالعه را نشان می‌دهد. این سیستم شامل سطح مینا، نانوذره و سوزنی می‌باشد که به عنوان مینیبولاتور عمل می‌کند. مدل‌سازی این سیستم به روش دینامیک مولکولی انجام می‌شود. مطابق با قانون دوم نیوتن، برای یک ذره‌ی کروی (مولکول، اتم و...)  $i$  که در حرکت انتقالی توسط نیروی خارجی  $F_i$  قرار دارد، می‌توان میان حرکت ذره و نیروی خارجی اعمالی، معادله‌ی (1) را بیان کرد.

$$F_i = m\ddot{r}_i \quad (1)$$

در این رابطه  $m$  جرم ذره است که مستقل از مکان، سرعت و زمان فرض می‌شود.  $r_i$  نیز بردار موقعیت ذره نسبت به یک دستگاه مرجع ثابت می‌باشد. شتاب نیز از معادله‌ی (2) محاسبه می‌شود. برای  $N$  ذره قانون دوم نیوتن به صورت  $3N$  معادله دیفرانسیل مرتبه دوم معمولی ظاهر می‌گردد.

$$\ddot{r}_i = \frac{d^2 r_i}{dt^2} \quad (2)$$

برای هر اتم و هر بعد از سیستم مختصات مورد استفاده، معادلات حرکت همیلوتونی شامل دو معادله دیفرانسیل مرتبه اول هستند. در مقابل، فرمول‌بندی‌های لاگرانژ و نیوتن یک معادله دیفرانسیل مرتبه دوم دارند. بنابراین در یک سیستم شامل  $N$  اتم، برای محاسبه‌ی مسیرها باید مجموعه‌ای از  $3N$  معادله دیفرانسیل مرتبه دوم (1) به طور معادل، مجموعه‌ای از  $6N$  معادله دیفرانسیل مرتبه اول (3) را حل کرد. نتایج حاصل از هر سه روش یکسان است، اما در موارد مختلف ممکن است یکی از معادلات به دلیل شکل ریاضی ساده‌تر، ترجیح داده شود.

$$\dot{r}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial r_i} = -\frac{\partial U}{\partial r_i} = F_i \quad (3)$$

که در این معادله مقادیر  $H$ ،  $U$  و  $p_i$  به ترتیب همیلوتونین، انرژی پتانسیل و اندازه حرکت می‌باشند.

تمامی مینیبولیشن‌های انجام شده بر روی سطح مینایی از جنس طلا و در دمای 290 کلوین صورت گرفته است. سطح مینا در شبیه‌سازی‌های مینیبولیشن آلوتروپ‌های کربنی، مکعبی با ابعاد  $100 \times 9.3 \times 70$  می‌باشد که طول آن در راستای مینیبولیشن 70 آنگستروم است و مجموعه‌ی آن از 3500 اتم ساخته شده است. همچنین ابعاد سطح مینا برای نانولوله‌ها برابر با  $132 \times 20 \times 110$  است که طول آن در راستای مینیبولیشن 110 آنگستروم است و عرض آن متناسب با ابعاد نانولوله‌ها و با توجه به مقدار شعاع قطع و

بوده است. مرادی و همکارانش به بررسی دینامیکی مینیبولیشن نانولوله بر روی یک سطح مینا الاستیک با استفاده از AFM پرداختند. آن‌ها نشان دادند که مدهای دینامیکی میکرومیله‌ها و نانومیله‌ها متفاوت می‌باشد. غلتش، یک مد غالب در مینیبولیشن میکرومیله می‌باشد، درحالی‌که لغزش در هل دادن نانومیله به عنوان مد دینامیکی غالب مشاهده شده است [1]. برای ساده کردن معادلات سیستم می‌توان از فرض صلب بودن نانومیله استفاده کرد. نکو و همکارانش از این قید در مینیبولیشن نانومیله بهره بردند [2]. از آنجایی که نانومیله‌ها و نانولوله‌ها هندسه‌های استوانه‌ای دارند، با در نظر گرفتن شکلی کروی برای نوک سوزن، می‌توان از مدل‌های تماسی مناسب برای بررسی سطح تماس بین سوزن و نانوذره استفاده کرد [3]. با این کار می‌توان ناحیه‌ی تماس بین نانوذره و سوزن را مورد بررسی قرار داد. نکته‌ی قابل توجه در استفاده از مدل‌های مکانیک تماس، توجه به ابعاد سیستم مورد مطالعه است زیرا در این مدل‌ها از خواص مواد در حالت ماکرو و از تئوری‌های مکانیک محیط پیوسته استفاده می‌شود. کورایم و همکارانش به بررسی مینیبولیشن میکرو/نانوذرات مختلف استوانه‌ای با مدل‌های تماسی بر پایه تئوری‌های هرتر<sup>1</sup>، لاندبرگ<sup>2</sup>، داسون<sup>3</sup>، هوپریچ<sup>4</sup> و نیک‌پور<sup>5</sup> پرداختند [4].

روش مدل‌سازی در هر فرآیندی با توجه به ابعاد آن سیستم و ویژگی‌های ساختاری آن تعیین می‌گردد. در صورتی که ابعاد بسیار کوچک گردد (در ابعادی حدود 100 nm و کمتر از آن) سیستم‌های مورد بررسی دارای خواص فیزیکی پیوسته‌ای نیستند و در آن صورت نیاز است تا رویکردهایی متناسب با ساختار مولکولی و گسسته جهت بررسی این‌گونه سیستم‌ها مورد استفاده قرار گیرند. دینامیک مولکولی یکی از روش‌هایی است که برای مطالعه‌ی سیستم‌های N-ذره‌ای در مقیاس‌های کوچک، کاربرد فراوان دارد [5]. از همین رو مطالعاتی با رویکرد دینامیک مولکولی در مینیبولیشن نانوذرات انجام شده است. محبوبی و همکارانش در مطالعه‌ای به بررسی کیفی فرآیند مینیبولیشن به‌وسیله‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی دوبعدی پرداختند. سیستمی که آن‌ها مورد بررسی قرار دادند شامل یک سوزن، دو نانوذره و یک سطح میناست. تمرکز اصلی آن‌ها در این بررسی بر روی نانوذرات فلزی بود. آن‌ها به‌منظور مطالعه‌ی سیستم ذکرشده که از عناصر واسطه متفاوت تشکیل شده‌است، از دینامیک نوز-هورو<sup>6</sup> و پتانسیل بین‌اتمی ساتن-چن<sup>7</sup> بهره بردند [6]. محبوبی و همکارانش در کاری مشابه به مطالعه‌ی پارامتری بر روی فرآیند مینیبولیشن پرداختند و با توجه به تأثیرات دما، نوع جنس و ابعاد، میزان موفقیت فرآیند مینیبولیشن با استفاده از دینامیک مولکولی صفحه‌ای توسط آنان برآورد شد [7]. از نانولوله‌ها به عنوان سوزن در میکروسکوپ نیروی اتمی نیز استفاده می‌شود. پیشکناری و همکارانش به شبیه‌سازی سیستم مینیبولیشن به روش دینامیک مولکولی پرداخته‌اند. آن‌ها از نوعی پروتئین به عنوان مولکول زیستی، از یک نانولوله کربنی تک دیواره به عنوان سوزن مینیبولیشن و از یک ورقه‌ی گرافن دو لایه به عنوان سطح مینا در این شبیه‌سازی استفاده کرده‌اند [8]. دینامیک مولکولی دارای محدودیت‌هایی است که از مهم‌ترین آن‌ها می‌توان به نیازمند بودن آن به ظرفیت محاسباتی اشاره کرد. یکی از روش‌های بهینه‌سازی و استفاده‌ی حداکثری از ظرفیت‌های محاسباتی، استفاده از روش دینامیک

<sup>1</sup> Hertz

<sup>2</sup> Lundberg

<sup>3</sup> Dowson

<sup>4</sup> Hoeprieh

<sup>5</sup> Nikpur

<sup>6</sup> Nose-Hoover

<sup>7</sup> Sutton-Chen

<sup>8</sup> Coarse Grained Molecular Dynamics

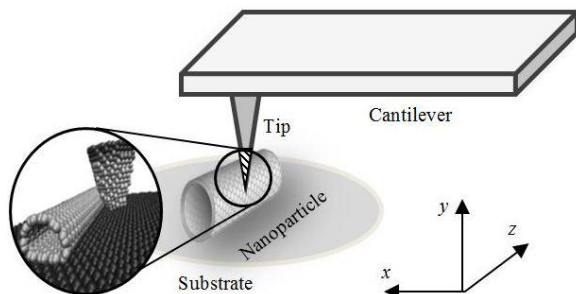


Fig. 1 Simulation setup

شکل 1 مجموعه‌ی شبیه‌سازی

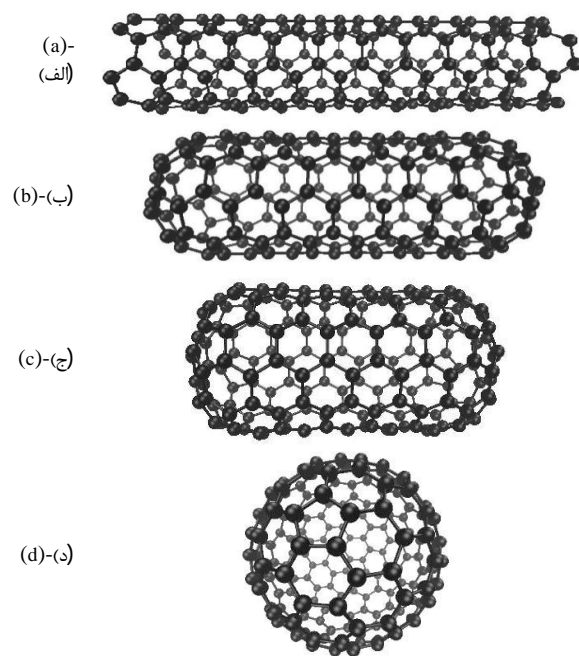


Fig. 2 The four kind of carbon allotropes for manipulation; a- nanotube (4,4), b- CNT (5,5) capped by C60, c- CNT (6,6) capped by fullerene No. 134, d- C180

شکل 2 چهار نوع آلوتروپ کربنی برای منیپولیشن: الف- نانولوله‌ی (4,4)، ب- نانولوله‌ی کربنی (5,5) سرپوش خورده با C60، ج- نانولوله‌ی کربنی (6,6) سرپوش خورده با فلورن شماره‌ی 134، د- C180

جدایش بین یک اتم و همسایه‌های آن است. در این روش انرژی پتانسیل یک اتم از معادله‌ی (4) پیروی می‌کند.

$$E_i = F\alpha \left( \sum_{i \neq j} \rho_{\beta} (r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{\alpha\beta} (r_{ij}) \quad (4)$$

که در این معادله  $F$  انرژی ادغام و تابعی از چگالی الکترونی اتمی ( $\rho$ ) است. عبارت است از پتانسیل جفتی مؤثر،  $\alpha$  و  $\beta$  نیز نوع عناصر  $i$  و  $j$  را مشخص می‌کنند [11]. پتانسیل ترسوف برای استفاده در سیستم‌های کووالانسی چندجزئی توسعه یافته است، و همبستگی‌های دوجسمی و چندجسمی را به شیوه‌ای مؤثر در یک مدل ترکیب می‌کند. ایده اصلی این پتانسیل آن است که در سیستم‌های واقعی، قدرت هر پیوند به محیط موضعی آن بستگی دارد، یعنی اتمی که تعداد زیادی همسایه دارد، پیوندهای ضعیف‌تری نسبت به اتمی با همسایه‌های کمتر تشکیل می‌دهد. شکل تابع پتانسیل ترسوف به صورت معادله‌ی (5) است.

اعمال شرایط دوره‌ای انتخاب شده است. قسمتی از بخش تحتانی سطح مینا به ضخامت 2 آنگستروم به منظور عدم جابجایی مقید شده است تا از حرکت‌های نسبی و اضافی آن جلوگیری شود.

برای شبیه‌سازی اجزایی از سیستم که از جنس سیلیکون می‌باشد، از شبکه‌بندی الماسی استفاده شده است. ثابت شبکه برای اتم‌های سیلیکون در این ساختار برابر با 5.63 آنگستروم است. در تمامی شبیه‌سازی‌ها، سوزن از هندسه‌ی یک مخروط ناقص برخوردار است، قطرهای بزرگ و کوچک این مخروط ناقص به ترتیب 26 و 8 آنگستروم و طول آن 31 آنگستروم است. مجموعه‌ی اتم‌های سوزن در این حالت به تعداد 667 اتم می‌رسند. در فرآیند منیپولیشن انجام شده برای برطرف‌سازی حرکت زردومی نانوذره‌ی هدف، ابتدا نانوذره و سطح مینا به دور از شعاع قطع<sup>1</sup> یکدیگر به پایداری رسیده‌اند و سپس سطح مینا به آرامی به نانوذره نزدیک می‌شود تا در شعاع قطع آن قرار گیرد و جذب سطح مینا شود. به سیستم زمان داده می‌شود تا نانوذره بر روی سطح مینا پدیدار شود، نانوذره همچنان بر روی سطح مینا به مقدار اندکی حرکت زردومی دارد. با اضافه کردن سوزن پدیدار شده در دمای 290 کلوین، سیستم آماده‌ی انجام منیپولیشن می‌شود.

برای جابجایی نانوذره‌ی هدف توسط سوزن، به قسمت بالایی آن با ارتفاع 5 آنگستروم قید سرعت ثابت اعمال می‌شود. فرآیند آزمایشگاهی منیپولیشن در سرعتی حدود  $10^{-5}$  m/s انجام می‌شود. با توجه به توان ابزارهای محاسباتی این کار غیرقابل انجام است. مطالعات انجام شده نشان می‌دهد که در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی از این فرآیند، سرعت 2 m/s می‌تواند دقت خوبی از نتایج را گزارش کند [10]. نویسندگان به منظور افزایش این دقت، از سرعت 0.5 m/s استفاده کرده‌اند. سرعت ثابت 0.005 آنگستروم بر پیکوثانیه سبب جابجایی نانوذره می‌گردد و فرآیند منیپولیشن با روش هل دادن انجام می‌شود.

نانوذرات هدف در این مطالعه شامل نانولوله‌های آرمچیر (20,20) با قطری برابر حدوداً 27.13 آنگستروم و 3280 اتم، (10,10) با قطری 13.5 آنگستروم و 1640 اتم و (5,5) با قطری برابر با 6.7 آنگستروم و 820 اتم هر کدام به طول 10 نانومتر هستند.

پس از انجام منیپولیشن نانولوله‌ها با قطرهای مختلف، به منظور بررسی تأثیر شکل هندسی منیپولیشن چهار نانوذره‌ی کربنی با اشکال هندسی مختلف و جرم برابر مورد مطالعه قرار گرفت. این اشکال شامل نانولوله (4,4) به طول 25.788 و قطر 5.46 آنگستروم، نانولوله (5,5) سرپوش خورده با فلورن C60 به طول 21.694 و قطر 6.78 آنگستروم، نانولوله (6,6) سرپوش خورده با فلورن شماره 134 به طول 17.024 و قطر 8.14 آنگستروم و نیز فلورن C180 به قطر 12.1 آنگستروم بوده که برای بررسی تأثیر تغییر شکل هندسی ساختارهای کربنی، شبیه‌سازی شده است. تعداد اتم‌های این چهار ذره همگی 180 اتم می‌باشد تا تنها تأثیر روند تغییر شکل هندسی از یک نانولوله به یک فلورن بررسی گردد. "شکل 2" هندسه‌ی انواع آلوتروپ‌های مدل شده در این تحقیق را نشان می‌دهد.

برای تعریف برهمکنش میان اتم‌ها از پتانسیل‌های مدل اتم ادغام شده<sup>2</sup> EAM [11]، ترسوف<sup>3</sup> [12] و لنارد-جونز<sup>4</sup> [13] استفاده شده است. مدل اتم ادغام شده یا روش اتم ادغام شده، یک تقریب توصیف انرژی بین اتم‌ها و یک پتانسیل بین اتمی است. در این روش انرژی تابعی از حاصل جمع توابع

<sup>1</sup> Cutoff radius

<sup>2</sup> Embedded Atom Model

<sup>3</sup> Tersoff

<sup>4</sup> Lennard-Jones

با قطر حدوداً 27 آنگستروم دارای دامنه نوسان بیشتری نسبت به دو نانولوله دیگر است. میانگین نیروی موردنیاز برای جابجایی نانولوله (20,20)، 1.1228 nN، برای جابجایی نانولوله (10,10) 0.7186 nN و برای جابجایی نانولوله (5,5) 0.3134 nN است. در نتیجه می‌توان به این جمع‌بندی رسید که با افزایش قطر، میزان نیروی وارد بر سوزن افزایش می‌یابد. این افزایش به دلیل جذب و تشکیل پیوندهای بیشتر نانولوله (20,20) با سطح مینا است که برای شکستن آن‌ها نیروی بیشتری موردنیاز است. "شکل 5" عمق نفوذ و سطح تماس را در منیپولیشن یک نانولوله‌ی کربنی نشان می‌دهد. نتایج بررسی عمق نفوذ در سطح تماس نانولوله‌های (20,20)، (10,10) و نانولوله (5,5) در هنگام منیپولیشن و در حین تماس با سوزن در "شکل 6" آورده شده است.

میانگین عمق نفوذ سطح تماس در منیپولیشن نانولوله (20,20) برابر 3.1 آنگستروم و در نانولوله (10,10) برابر 1.8 آنگستروم و در نانولوله‌ی (5,5) برابر 0.95 آنگستروم می‌باشد که به دلیل انعطاف بیشتر و نیروی منیپولیشن بزرگ‌تر، در نانولوله (20,20) بیشتر است. این معیار را می‌توان در زمانی که از نانولوله به عنوان حامل ذرات دیگر استفاده می‌شود به کار برد. با توجه به میزان قطر و عمق نفوذ نانولوله، می‌توان از نانولوله مناسب برای حمل ذرات با سایزهای مختلف استفاده نمود.

همان‌طور که ذکر شد، به‌منظور بررسی تأثیر هندسه‌ی نانوذره، منیپولیشن بر روی چهار آلوتروپ کربنی (با جرم برابر) انجام شد. "شکل 7" ماکزیمم و میانگین نیروی وارد بر سوزن را برای آن‌ها نشان می‌دهد. "شکل 8" تغییرات نیروی عمودی و افقی وارد بر سوزن را برحسب جابجایی سوزن برای هر یک از نانوذرات نشان می‌دهد. تغییرات نیروی منیپولیشن برای آلوتروپ‌های کربنی نشان می‌دهد که به دلیل یکسان بودن تعداد اتم‌ها با تبدیل هندسه از استوانه به کره، عمق ناحیه‌ی جذب در بستر افزایش می‌یابد (ذره در بستر بیشتر فرو می‌رود) و این امر سبب افزایش نیروی مورد نیاز برای جابجایی ذره در بستر می‌گردد. علاوه بر آن انحنا سطح تماس سوزن و ذره باعث افزایش برهمکنش آن دو و سبب می‌شود. نیروی عمودی بین ذره و سطح مینا افزایش یابد و فرآیند منیپولیشن نیاز به نیروی بیشتری داشته باشد تا بتواند نانوذره را بر روی سطح جابجا کند. برای بررسی کمی‌تر این داده‌ها از مقایسه‌ی ماکزیمم نیروی منیپولیشن و میانگین نیروی آن استفاده شده است (شکل 7).

جدول 1 پارامترهای شبیه‌سازی [15]

اتم	جرم اتمی (amu)	$\epsilon$ (eV)	$\sigma$ (A)	ثابت شبکه	شبکه بندی
کربن	12.0107	0.006843	3.400	3.57	الماسی
طلا	196.97	0.441439	2.282	4.08	FCC
سیلیکون	28.086	0.001734	4.053	5.43	الماسی

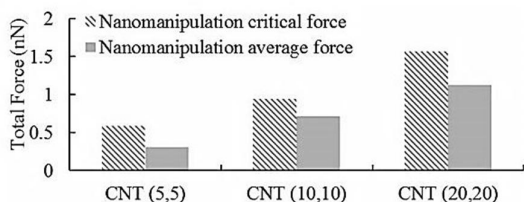


Fig. 3 Manipulation critical and average forces of the nanotubes with various diameters

شکل 3 نیروی بحرانی و میانگین نیروی منیپولیشن برای نانولوله‌ها با قطرهای مختلف

$$E_{\text{Tersoff}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} \quad (5)$$

که در آن  $U_{ij} = f_C(r_{ij})[f_R(r_{ij}) - \gamma_{ij}f_A(r_{ij})]$  است.  $f_R$  و  $f_A$  برترتیب پتانسیل جفتی جاذبه‌ای و دافعه‌ای هستند و  $f_C$  یک تابع قطع است [12].

پتانسیل لنارد-جونز نخستین بار برای مطالعه‌ی خواص ترمودینامیکی گازهای نجیب پیشنهاد شد [13] و از آن به بعد برای مطالعه‌ی سیستم‌های متنوعی به کار رفت. متداول‌ترین شکل این پتانسیل به صورت معادله‌ی (6) است. که در آن  $\sigma$  و  $\epsilon$  پارامترهای لنارد-جونز هستند.

$$U(r) = 4\epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad (6)$$

برای تعریف برهمکنش بین ذرات فلزی از یک جنس، از پتانسیل EAM استفاده می‌شود. در شبیه‌سازی‌های انجام شده، برای تعریف میدان نیروی طلا از پتانسیل EAM و برای تعریف برهمکنش اتم‌های کربن از پتانسیل ترسوف که برای استفاده در سیستم‌های کووالانسی چندجزئی توسعه یافته است، استفاده شده و برهمکنش میان دو ماده‌ی غیر هم‌جنس در شبیه‌سازی‌ها بر مبنای پتانسیل لنارد-جونز 6-12 در نظر گرفته شده است.

مقادیر ضرایب لنارد-جونز مواد استفاده شده در شبیه‌سازی، در جدول 1 آورده شده است.

برای مقدار  $\sigma$  در برهمکنش دو ذره‌ی دلخواه مانند A و B، از میانگین حسابی مقادیر دو جزء خالص استفاده می‌شود و عمق چاه آن  $(\epsilon_{AB})$  نیز از میانگین هندسی محاسبه می‌شود (معادلات (7) و (8)).

$$\sigma_{AB} = (\sigma_{AA} + \sigma_{BB})/2 \quad (7)$$

$$\epsilon_{AB} = \sqrt{\epsilon_{AA} + \epsilon_{BB}} \quad (8)$$

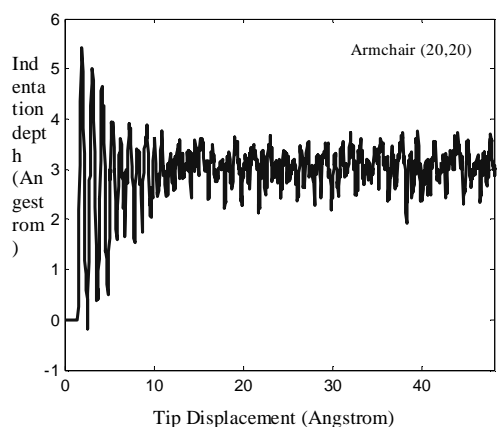
علاوه بر ثابت لنارد-جونز، نوع شبکه‌بندی و ثابت شبکه‌ی هریک از اتم‌ها در جدول 1 آورده شده است. برای کاهش تأثیرات محدودیت ابعادی، شرایط دوره‌ای در باکس شبیه‌سازی اعمال شد. از گام زمانی 0.001 ps و از هنگرد NVT برای تعادل شرایط ترمودینامیکی استفاده شده است. در این هنگرد از الگوریتم نوزه-هاور برای تثبیت دمایی در سیستم استفاده می‌شود به طوری که در این روش منبع دمایی جزئی از سیستم در نظر گرفته می‌شود و انرژی می‌تواند به صورت دینامیکی از منبع به سیستم و برعکس جریان یابد.

شعاع قطع برای برهمکنش‌های غیرپیوندی در این شبیه‌سازی 15 آنگستروم در نظر گرفته شده است. شعاع قطع مناسب، یکی از پارامترهای تأثیرگذار در شبیه‌سازی فرآیند است. در حقیقت برهمکنش‌های ناپیوندی بایستی برای تمام جفت اتم‌های موجود در سیستم محاسبه شود. اما در بسیاری از مدل‌های برهمکنش، عملاً چنین کاری انجام نمی‌شود. پتانسیل لنارد جونز سرعت با فاصله افت می‌کند تا جاییکه در فاصله‌ی  $2.5\sigma$  پتانسیل لنارد-جونز تنها 1% مقدار آن در  $\sigma$  است. بنابراین می‌توان از برهمکنش میان اتم‌هایی که در فاصله‌ی زیادی از هم قرار دارند صرف نظر کرد [14]. با توجه به این موضوع، شعاع قطع 10.13 آنگستروم برای این شبیه‌سازی‌ها کفایت خواهد کرد که نویسندگان برای دقت بیشتر از شعاع قطع 15 آنگستروم استفاده کرده‌اند.

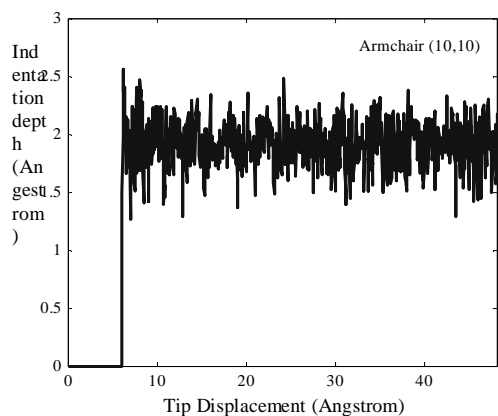
### 3- نتایج شبیه‌سازی و بحث

"شکل 3" مقدار نیروی بحرانی و میانگین نیروی منیپولیشن را برای سه نانولوله‌ی آرمچیر (20,20)، (10,10) و (5,5) نشان می‌دهد و تغییرات مؤلفه‌های نیرو برای این نانولوله‌ها در "شکل 4" نشان داده شده است. مقدار نیروی اولیه برای حرکت نانوذره، بیشتر از مقدار میانگین این پارامتر در طی منیپولیشن است. خروجی نیرو نشان می‌دهد که فرآیند منیپولیشن نانولوله‌ای

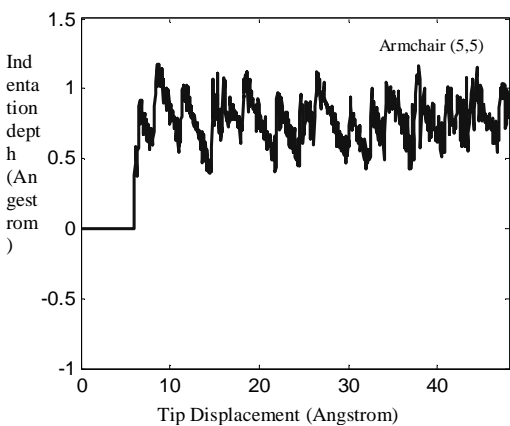
با توجه به این‌که تمامی شرایط در حین انجام فرآیند مینیولیشن یکسان



(a)  
(الف)



(b)  
(ب)

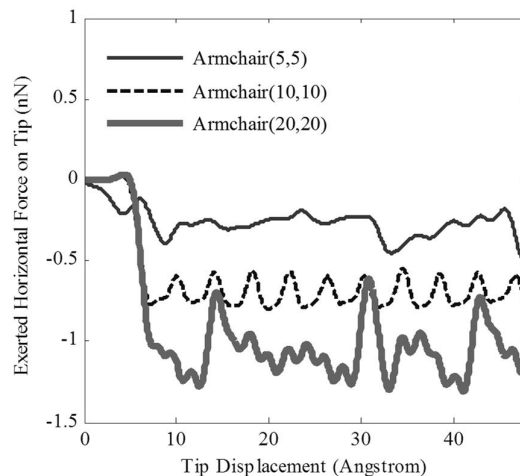


(c)  
(ج)

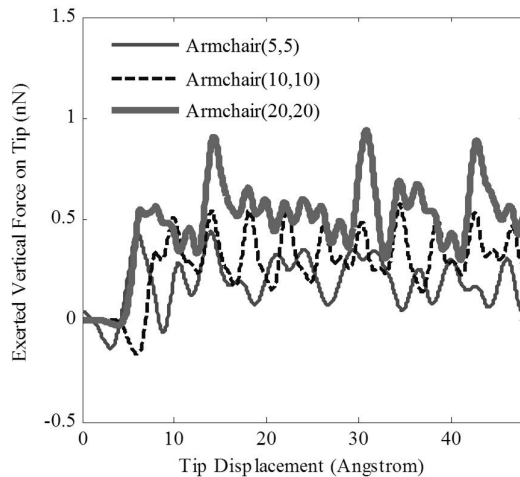
**Fig. 6** Indentation depth of nanotubes versus tip displacements; a- Armchair (20,20), b- Armchair (10,10), c- Armchair (5,5)

شکل 6 عمق نفوذ نفوذ برای نانولوله‌ها با قطرهای مختلف برحسب جایجایی سوزن؛ الف- آرمچیر (20,20)، ب- آرمچیر (10,10)، ج- آرمچیر (5,5)

است، می‌توان تأثیر هندسه را در میزان نیروهای مستخرج شده مشاهده کرد. می‌توان دلیل تفاوت این نیروها را در انحنای سطح تماس میان این چهار



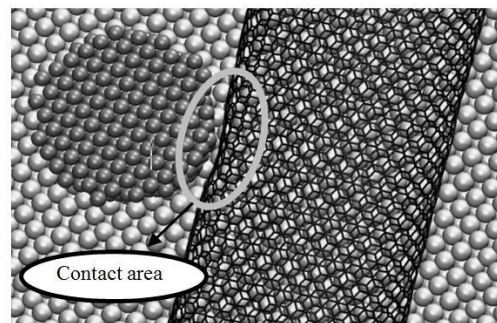
(a)  
(الف)



(b)  
(ب)

**Fig. 4** Manipulation forces of the nanotubes with various diameters versus tip displacement; a- horizontal manipulation force, b- vertical manipulation force

شکل 4 نیروهای مینیولیشن برحسب جایجایی سوزن برای نانولوله‌ها با قطرهای مختلف؛ الف- نیروی افقی مینیولیشن، ب- نیروی عمودی مینیولیشن



**Fig. 5** The indentation depth and contact area in the manipulation process

شکل 5 عمق نفوذ و سطح تماس در فرآیند مینیولیشن

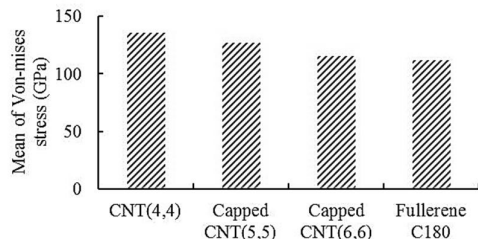


Fig. 9 Von-Mises average stress of the carbon allotropes

شکل 9 میانگین تنش فون میزز آلوتروپ‌های کربنی

$$\sigma_v^2 = \frac{1}{2} \left[ (\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{xx})^2 + 6(\sigma_{yz}^2 + \sigma_{zx}^2 + \sigma_{xy}^2) \right] \quad (9)$$

مقدار سطح تماس در CNT(4,4) کمترین و در C180 بیشترین مقدار را دارد. مشاهده می‌شود که تنش در آلوتروپ‌ها با افزایش سطح تماس کاهش یافته است. "شکل 9" بیانگر این مسئله است که با وجود افزایش نیروی منیپولیشن در فلورن‌ها تنش کاهش خواهد یافت.

#### 4- جمع بندی

با اختراع میکروسکوپ نیروی اتمی و ورود آن به زمینه‌های پزشکی، الکترونیک و مواد، مطالعاتی در این زمینه‌ها شروع شد و سبب پیشرفت‌های چشمگیری در نانو ساختارها و حوزه‌هایی چون MEMS<sup>1</sup> شد. به این ترتیب کاربردهایی چون ساخت سیستم‌های میکرو الکترونیک و همچنین دارورسانی و یا دست‌کاری ژن‌ها با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی توسعه یافت. این کاربردها سبب شده است تا بررسی جایجایی نانو مواد با اشکال هندسی مختلف با استفاده از ابزارهایی چون AFM برای رسیدن و پیشرفت بیشتر در کاربردهای صنعتی و بیوتکنولوژی بیش از پیش مورد نیاز است. در مطالعه‌ی سیستم‌هایی با ابعاد نانو مشکلاتی چون محدودیت‌های شرایط آزمایشگاهی وجود دارد که با استفاده از شبیه‌سازی می‌توان فرایندهای منیپولیشن نانوذرات را مدل‌سازی کرد. دینامیک مولکولی یکی از روش‌هایی است که در آن می‌توان از ویژگی‌های در مقیاس نانو یک سیستم به خواص میکروسکوپی مورد نظر دست پیدا کرد و دینامیک این ذره‌ها به همراه مکانیک آماری ارتباطی بین مفاهیم اتمی و مولکولی از یک‌سو و کمیت‌های قابل اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر از سوی دیگر برقرار می‌کند.

با توجه به آنچه که بیان شد با استفاده از رویکرد دینامیک مولکولی به بررسی فرآیند منیپولیشن نانولوله‌های کربنی و تأثیر هندسه‌ی نانوذره‌ی هدف در فرآیند منیپولیشن به صورت سه‌بعدی پرداخته شد تا گامی در راستای عمق بخشیدن به آگاهی از آنچه در حال رخداد است برداشته شود. با انجام منیپولیشن نانولوله‌ها به صورت سه‌بعدی مشخص شد که افزایش قطر نانولوله سبب افزایش میزان چسبندگی نانولوله به سطح مینا می‌گردد و میزان عمق نفوذ محل تماس نیز افزایش می‌یابد. در نانولوله (20,20) بدلیل افزایش پیوندهای بین اتمی نانولوله و سطح مینا، نیروی منیپولیشن به ترتیب به میزان 0.4042 و 0.8094 نانونیوتن نسبت به نیروی منیپولیشن نانولوله (10,10) و نانولوله (5,5) بیشتر است. همچنین میزان عمق نفوذ نانولوله‌ها در حین تماس با سوزن در طی فرآیند منیپولیشن بررسی شد، میزان این عمق نفوذ می‌تواند در تعیین نانولوله‌ی حامل به منظور جایجایی ذرات دیگر مورد توجه قرار گیرد. به منظور تأثیر هندسه‌ی نانوذرات، فرآیند منیپولیشن

نانوذره و سطح سوزن دانست. زیرا با افزایش انحناى سطح تماس، نیروی عمودی وارد بر ذره بیشتر می‌شود و در نتیجه اتم‌ها با سطح مینا درگیرتر شده و حجم بیشتری از هر اتم از نانوذره در مجاورت اتم‌های سطح مینا قرار می‌گیرد و منیپولیشن سخت‌تر انجام می‌شود. بر مبنای معیار تنش فون-میزز [16] ماکزیمم (معادله‌ی (9)) تنش وارد بر ذرات در "شکل 9" آورده شد.

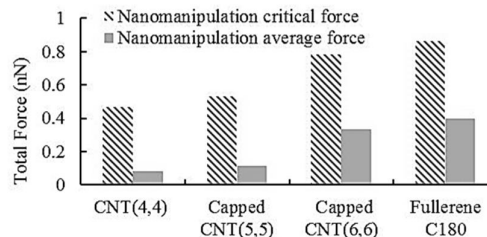
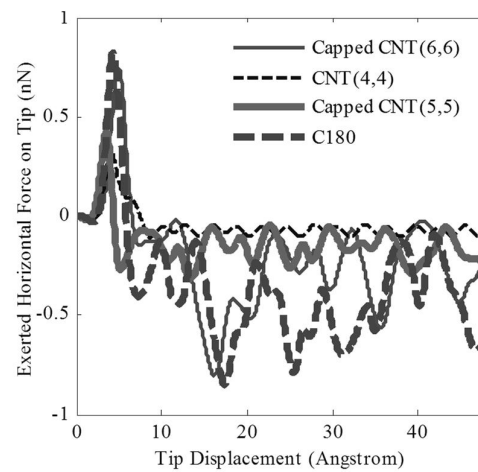
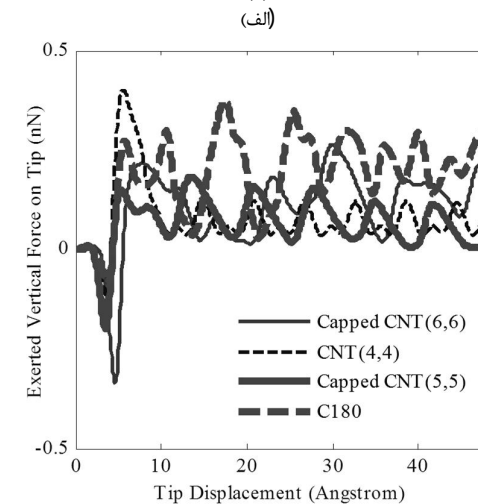


Fig. 7 Manipulation critical and average forces of the carbon allotropes

شکل 7 نیروی بحرانی و میانگین نیروی منیپولیشن برای آلوتروپ‌های کربنی



(الف)



(ب)

Fig. 8 Manipulation forces of the carbon allotropes versus tip displacement; a- horizontal manipulation force, b- vertical manipulation force

شکل 8 نیروی منیپولیشن برای آلوتروپ‌های کربنی برحسب جایجایی سوزن؛ الف-

نیروی افقی منیپولیشن، ب- نیروی عمودی منیپولیشن

<sup>1</sup> Micro Electro Mechanical Systems

- Iranica*, Vol. 17, No. 1, pp. 1-11, 2010.
- [7] S. Mahboobi, A. Meghdari, N. Jalili, F. Amiri, Planar molecular dynamics simulation of metallic nanoparticles manipulation, *Proceeding of 8th IEEE Conference on Nanotechnology*, Texas: IEEE, pp. 163-166, 2008.
- [8] H. N. Pishkenari, S. Mahboobi, M. Mahjour, A. Meghdari, Simulation of Biomaniipulation Using Molecular Dynamics, *Proceeding of International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, Texas: American Society of Mechanical Engineers, pp. 137-143, 2012.
- [9] M. H. Korayem, V. Rahneshein, S. Sadeghzadeh, Coarse-grained molecular dynamics simulation of automatic nanomanipulation process: The effect of tip damage on the positioning errors, *Computational Materials Science*, Vol. 60, No. 1, pp. 201-211, 2012.
- [10] M. Kheirodin, H. N. Pishkenari, S. H. Mahboobi, Molecular dynamics study of bio-manipulation in aqueous media, *Micro & Nano Letters*, Vol. 11, No. 1, pp. 9-14 2016.
- [11] S. Foiles, M. Baskes, M. S. Daw, Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys, *Physical Review B*, Vol. 33, No. 12, pp. 7983-7991, 1986.
- [12] J. Tersoff, Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems, *Physical Review B*, Vol. 39, No. 8, pp. 5566-5568, 1989.
- [13] J. E. Jones, On the determination of molecular fields. II. From the equation of state of a gas, *Proceedings of the Royal Society of London A on Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, London: Royal Society, pp. 463-477, 1924.
- [14] T. Terao, Structural formation and many-body effect of concentrated dendrimer solutions by computer simulations, *Applied Crystallography*, Vol. 40, No. 1, pp. 581-584, 2007.
- [15] *BIOSYM forcefield*, Accessed on 11 August 2016; [https://redmine.scorec.rpi.edu/anonsvn/lammps-cuda/tools/msi2lmp/biosym\\_frc\\_files/cvff.frc](https://redmine.scorec.rpi.edu/anonsvn/lammps-cuda/tools/msi2lmp/biosym_frc_files/cvff.frc)
- [16] R. v. Mises, Mechanik der festen Körper im plastisch-deformablen Zustand, *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse*, Vol. 1913, No. 1, pp. 582-592, 1913.
- نانوذرات فلورن C180 و نانولوله‌ی کربنی (4,4) و دو نانولوله دیگر سرپوش شده (آلوتروپ‌های کربنی) بررسی شد، نتایج نشان داد که هرچه هندسه‌ی نانوذرات کربنی به حالت کروی نزدیک می‌شوند نیروی وارد بر سوزن افزایش می‌یابد. این مهم به دلیل افزایش انحنا سطح تماس ذرات با سوزن است که سبب می‌شود نیروی عمودی بین ذره و سطح مبنا افزایش یابد و فرآیند مینیبولیشن نیاز به نیروی بیشتری داشته باشد تا بتواند نانوذره را بر روی سطح جابجا کند.

## 5- مراجع

- [1] M. Moradi, A. Fereidon, S. Sadeghzadeh, Aspect ratio and dimension effects on nanorod manipulation by atomic force microscope, *Micro & Nano Letters, IET*, Vol. 5, No. 5, pp. 324-327, 2010.
- [2] E. Gnecco, A. Rao, K. Mougín, G. Chandrasekar, E. Meyer, Controlled manipulation of rigid nanorods by atomic force microscopy, *Nanotechnology*, Vol. 21, No. 21, pp. 215702-215076, 2010.
- [3] M. H. Korayem, H. Khaksar, R. N. Hefzabad, M. Taheri, Simulation of soft bacteria contact to be applied in nanomanipulation, *Moades Mechanical Engineering*, Vol. 14, No. 14, pp. 227-234, 2015. (in Persian فارسی)
- [4] M. H. Korayem, H. Khaksar, M. Taheri, Modeling of contact theories for the manipulation of biological micro/nanoparticles in the form of circular crowned rollers based on the atomic force microscope, *Journal of Applied Physics*, Vol. 114, No. 18, pp. 183715-183727, 2013.
- [5] D. Frenkel, B. Smit, Understanding molecular simulation: from algorithms to applications, Second Edition, pp.1-638, Cambridge, Massachusetts: Academic Press, 2001.
- [6] S. Mahboobi, A. Meghdari, N. Jalili, F. Amiri, Qualitative Study of Nanoassembly Process: 2-D Molecular Dynamics Simulations, *Scientia*