ماهنامه علمى يژوهشى



مهندسی مکانیک مدرس

mme modares ac ir

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

# محرم حبيبنژاد کورايم<sup>1\*</sup>، حسن اصلانی پايان<sup>2</sup>، احمد همايونی<sup>3</sup>، روزبه نوحی حفظ آباد<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- دانشجوى دكترا ، مهندسي مكانيك، دانشگاه علم و صنعت ايران، تهران

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

چکیدہ	اطلاعات مقاله
در این مقاله به مدلسازی و شبیهسازی فرآیند منیپولیشن نانوذرات کربنی پرداخته شده است. از آن جایی 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	مقاله پژوهشی کامل دریافت: 09 تیر 1395 پذیرش: 10 مرداد 1395 ارائه در سایت: 21 شهریور 1395
	کلید واژگان: منیپولیشن نانورباتیک
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 داروئی کاربرد دارند، نتایج این مطالعه در بهبود فرآیندهای عملی و کاهش هزینههای آزمایشگاهی قابل استفاده است.	دینامیک مولکولی آلوتروپهای کرینی اثرات هندسی

# 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	ABSTRACT			
Original Research Paper Received 29 June 2016 Accepted 31 July 2016 Available Online 11 September 2016	In this paper, the modeling and simulation of manipulation of carbon nanoparticles have be investigated. The geometry plays a significant role in the dynamic behavior of nanopartic manipulation and the evaluation of different geometric shapes of nanoparticles in this process is v important. To examine the geometrical effects, the manipulation of four different kinds of nano-carb			
Keywords: Manipulation, Nanorobotics Molecular Dynamics Allotropes of carbon Geometry effects	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 نانومیلهها و نانولولهها در طراحی و ساخت نانوساختارها، زمینه را برای تحقیق و توسعه بر روی این نانومواد فراهم کرده است. روش های مختلفی برای ساخت در این ابعاد وجود دارد که منیپولیشن، با

Please cite this article using:

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

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)

S. 15

<sup>1</sup> Atomic Force Microscope

بوده است. مرادی و همکارانش به بررسی دینامیکی منیپولیشن نانولوله بر روى يك سطح مبنا الاستيك با استفاده از AFM پرداختند، آنها نشان دادند که مدهای دینامیکی میکرومیلهها و نانومیلهها متفاوت میباشد. غلتش، یک مد غالب در منیپولیشن میکرومیله می باشد، در حالی که لغزش در هل دادن نانومیله به عنوان مد دینامیکی غالب مشاهده شده است [1]. برای ساده كردن معادلات سیستم می توان از فرض صلب بودن نانومیله استفاده كرد. نكو و همکارانش از این قید در منیپولیشن نانومیله بهره بردند [2]. از آنجایی که نانومیلهها و نانولولهها هندسهای استوانهای دارند، با در نظر گرفتن شکلی کروی برای نوک سوزن، میتوان از مدل های تماسی مناسب برای بررسی سطح تماس بین سوزن و نانوذره استفاده کرد [3]، با این کار می توان ناحیهی تماس بین نانوذره و سوزن را مورد بررسی قرار داد. نکتهی قابل توجه در استفاده از مدل های 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 می شود. کورایم و همکارانش به بررسی منیپولیشن میکرو/نانوذرات مختلف استوانهای با مدلهای تماسی بر پایه تئوریهای هرتز<sup>1</sup>، لاندبر $2^{2}$ ، داسون<sup>3</sup>، موپريچ<sup>4</sup> و نيکپور<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 nm 100 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 منیپولیشن نانوذرات انجام شده است. محبوبی و همکارانش در مطالعهای به بررسى كيفى فرآيند منيپوليشن بهوسيلهى شبيهسازى ديناميك مولكولى دوبعدی پرداختند. سیستمی که آنها مورد بررسی قرار دادند شامل یک سوزن، دو نانوذره و یک سطح مبناست. 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- هوور<sup>6</sup> و پتانسیل بیناتمی ساتن- چن / بهره بردند [6]. محبوبی و همکارانش در کاری مشابه به مطالعهی پارامتری بر روی فرآیند منیپولیشن پرداختند و با توجه به تأثيرات دما، نوع جنس و ابعاد، ميزان موفقيت فرآيند منيپوليشن با استفاده از دینامیک مولکولی صفحهای توسط آنان برآورد شد [7]. از نانولولهها به عنوان سوزن در میکروسکوپ نیروی اتمی نیز استفاده می شود. پیشکناری و همکارانش به شبیهسازی سیستم منیپولیشن به روش دینامیک مولکولی پرداختهاند. آنها از نوعی پروتئین به عنوان مولکول زیستی، از یک نانولوله کربنی تک دیواره به عنوان سوزن منیپولیشن و از یک ورقهی گرافن دو لایه به عنوان سطح مبنا در این شبیهسازی استفاده کردهاند [8]. دینامیک مولکولی دارای محدودیتهایی است که از مهم ترین آنها می توان به نیازمند بودن آن به ظرفیت محاسباتی اشاره کرد. یکی از روشهای بهینهسازی و استفادهی حداکثری از ظرفیتهای محاسباتی، استفاده از روش دینامیک

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 منیپولیشن بررسی کنند [9].

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

# 2- مدلسازی و شبیهسازی

(1)

"شکل 1" سیستم مورد مطالعه را نشان میدهد. این سیستم شامل سطح مبنا، نانوذره و سوزنی میباشد که به عنوان منیپولاتور عمل میکند. مدل-سازی 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<sub>i</sub> قرار دارد، میتوان میان حرکت ذره و نیروی خارجی اعمالی، معادلهی (1) را بیان کرد.

 $F_i = m\ddot{r}_i$ 

در این رابطه m جرم ذره است که مستقل از مکان، سرعت و زمان فرض می شود.  $r_i$  نیز بردار موقعیت ذره نسبت به یک دستگاه مرجع ثابت می باشد. شتاب نیز از معادلهی (2) محاسبه می شود. برای N ذره قانون دوم نیوتن به صورت 3N معادله دیفرانسیل مرتبه دوم معمولی ظاهر می گردد.  $r_i = \frac{d^2 r_i}{c_i}$  (2)

$$=\frac{a^{2}r_{i}}{dt^{2}}$$

برای هر اتم و هر بعد از سیستم مختصات مورد استفاده، معادلات حرکت همیلتونی شامل دو معادله دیفرانسیل مرتبه اول هستند. در مقابل، فرمولیندیهای لاگرانژ و نیوتن یک معادله دیفرانسیل مرتبه دوم دارند. بنابراین در یک سیستم شامل N اتم، برای محاسبهی مسیرها باید مجموعهای از *N* 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.

$$\dot{r}_{i} = \frac{\partial H}{\partial p_{i}} = \frac{p_{i}}{m}, \quad \dot{p}_{i} = -\frac{\partial H}{\partial r_{i}} = -\frac{\partial U}{\partial r_{i}} = F_{i}$$
(3)

که در این معادله مقادیر *U ،*H و <sub>pi</sub> به ترتیب همیلتونین، انرژی پتانسیل و اندازه حرکت میباشند.

تمامی منیپولیشنهای انجام شده بر روی سطح مبنایی از جنس طلا و در دمای 290 کلوین صورت گرفته است، سطح مبنا در شبیهسازیهای منیپولیشن آلوتروپهای کربنی، مکعبی با ابعاد **100 × 3.3 × 70** می باشد که طول آن در راستای منیپولیشن 70 آنگستروم است و مجموعهی آن از 3500 اتم ساخته شده است، همچنین ابعاد سطح مبنا برای نانولولهها برابر با **132 × 20 × 110** است که طول آن در راستای منیپولیشن 110 آنگستروم است و عرض آن متناسب با ابعاد نانولولهها و با توجه به مقدار شعاع قطع و

DOR: 20.1001.1.10275940.1395.16.9.46.5

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Hertz <sup>2</sup> Lundberg

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Dowson

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Hoeprich

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Nikpur <sup>6</sup> Nose-Hoover

<sup>7</sup> Sutton-Chen

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

اعمال شرایط دورهای انتخاب شده است. قسمتی از بخش تحتانی سطح مبنا 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 رندومی نانوذرهی هدف، ابتدا نانوذره و سطح مبنا به دور از شعاع قطع<sup>1</sup> یکدیگر به پایداری رسیدهاند و سپس سطح مبنا به آرامی به نانوذره نزدیک میشود تا در شعاع قطع آن قرار گیرد و جذب سطح مبنا شود. به سیستم زمان داده میشود تا نانوذره بر روی سطح مبنا پایدار شود، نانوذره همچنان بر روی سطح مبنا به مقدار اندکی حرکت رندومی دارد. با اضافه کردن سوزن پایدار شده در دمای 290 کلوین،

برای جابجایی نانوذره ی هدف توسط سوزن، به قسمت بالایی آن با ارتفاع 5 آنگستروم قید سرعت ثابت اعمال می شود. فرآیند آزمایشگاهی منیپولیشن در سرعتی حدود **5 m**<sup>75</sup> **10** انجام می شود. با توجه به توان ابزارهای محاسباتی این کار غیرقابل انجام است. مطالعات انجام شده نشان می دهد که در شبیه سازی های دینامیک مولکولی از این فرآیند، سرعت **2 m/s.** می تواند دقت خوبی از نتایج را گزارش کند [10]. نویسندگان به منظور افزایش این دقت، از سرعت 0.5 **m/s** استفاده کرده اند. سرعت ثابت 0.005 آنگستروم بر پیکوثانیه سبب جابجایی نانوذره می گردد و فرآیند منیپولیشن با روش هل دادن انجام می شود.

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 نانوذره یکربنی 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) سرپوشخورده 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 41.8 آنگستروم و نیز فلورن 1080 به قطر 12.1 آنگستروم بوده که برای بررسی تأثیر تغییر شکل فلورن 1080 به قطر 12.1 آنگستروم بوده که برای بررسی تأثیر تغییر شکل فلورن 1080 به میافتد تا تنها تأثیر روند تغییر شکل هندسی از یک نانولوله به یک فلورن بررسی گردد. "شکل 2" هندسه 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 یکپتانسیل بین اتمی است. در این روش انرژی تابعی از حاصل جمع توابع



**شکل 1** مجموعهی شبیهسازی

Fig. 1 Simulation setup



**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 چ**هار نوع آلوتروپ کربنی برای منیپولیشن؛ الف- نانولولدی (4,4**)،** ب-نانولولدی کربنی (5,5) سرپوشخورده با C60، ج- نانولولدی 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.

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

که در این معادله F انرژی ادغام و تابعی از چگالی الکترونی اتمی ( $\rho$ ) است.  $\phi$  عبارت است از پتانسیل جفتی موثر،  $\alpha$  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.

Cutoff radius

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Embedded Atom Model <sup>3</sup> Tersoff

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Lennard-Jones

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

(5)  $f_R$  ,  $f_A$  ,  $U_{ii} = f_C(r_{ii}) [f_R(r_{ii}) - \gamma_{ii} f_A(r_{ii})]$  است.  $f_A$ بترتیب 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. متداول ترین شکل این پتانسیل به صورت معادلهی (6) است. که در آن  $\sigma$  و arepsilon یارامترهای لنارد-جونز هستند.

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

برای تعریف برهمکنش بین ذرات فلزی از یک جنس، از پتانسیل EAM استفاده می شود. در شبیه سازی های 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 12-6 در نظر گرفته شده است. مقادیر ضرایب لنارد-جونز مواد استفاده شده در شبیه سازی، 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 می شود و عمق چاه آن نیز از میانگین هندسی محاسبه می شود (معادلات (7) و (8)). ( $\varepsilon_{AB}$  $\sigma_{AB} = (\sigma_{AA} + \sigma_{BB})/2$ 

$$\epsilon_{AB} = \sqrt{\epsilon_{AA} + \epsilon_{BB}}$$
(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 می تواند به صورت دینامیکی از منبع به سیستم و برعکس جریان یابد.

شعاع قطع برای برهمکنشهای غیرپیوندی در این شبیهسازی 15 آنگستروم درنظر 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 مدل های برهمکنش، عملا چنین کاری انجام نمی شود. پتانسیل لنارد جونز بسرعت با فاصله افت می کند تا جاییکه در فاصله ی $\sigma$  2.5 $\sigma$  پتانسیل لنارد-جونز تنها 1% مقدار آن در  $\sigma$  است. بنابراین می توان 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- نتايج شبيهسازي 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 منيپوليشن است. خروجي نيرو نشان ميدهد كه فرايند منيپوليشن نانولولهاي

با قطر حدوداً 27 آنگستروم دارای دامنه نوسان بیشتری نسبت به دو نانولوله دیگر است. میانگین نیروی موردنیاز برای جابجایی نانولوله (20,20)، nN 1.1228، برای جابجایی نانولوله (0.10) NN 0.7186 و برای جابجایی نانولوله (5,5) N. 0.3134 nN است. در نتیجه می توان به این جمعبندی رسید که با افزایش قطر، میزان نیروی وارد بر سوزن افزایش می یابد. این افزایش بهدلیل جذب و تشکیل پیوندهای بیشتر نانولوله (20,20) با سطح مبنا است که برای شکستن آنها نیروی بیشتری موردنیاز است. "شکل 5" عمق نفوذ و سطح تماس را در منيپوليشن يک نانولولهي كربني نشان ميدهد. نتايج 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.

ميانگين عمق نفوذ سطح تماس در منيپوليشن 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 بهدلیل 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 می شود به کار برد. با توجه به میزان قطر و عمق نفوذ نانولوله، می توان از نانولوله مناسب برای حمل ذرات با سایزهای مختلف استفاده نمود.

همانطور که ذکر شد، بهمنظور بررسی تأثیر هندسهی نانوذره، منيپوليشن بر روى چهار آلوتروپ كربنى (با جرم برابر) انجام شد. "شكل 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 بهدلیل یکسان بودن تعداد اتمها با تبدیل هندسه از استوانه به کره، عمق ناحیهی جذب در بستر افزایش می یابد (ذره در بستر بیشتر فرو میرود) و این امر سبب افزایش نیروی مورد نیاز برای جابجایی ذره در بستر می گردد. علاوه بر آن انحنا سطح تماس سوزن و ذره باعث افزایش برهمکنش آن دو و سبب می شود. نیروی عمودی بین ذره و سطح مبنا 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 (شكل 7).

حدول 1 بارامترهای شبیه سازی [15]

					, <b>U</b> ,		
Table 1 The simulation parameters [15]							
اتم	جرماتمی(amu)	arepsilon (eV)	σ <b>(</b> A <b>)</b>	شبكەبندى	ثابت شبكه		
كربن	12.0107	0.006843	3.400	الماسى	3.57		
طلا	196.97	0.441439	2.282	FCC	4.08		
سيليكون	28.086	0.001734	4.053	الماسى	5.43		
$ \begin{array}{c} 2 \\ 1.5 \\ 1.5 \\ 1.5 \\ 0 \end{array} \end{array} $ Nanomanipulation critical force Nanomanipulation average fo							
	CNT (5,5)	CNT (	10,10)	CNT (20	,20)		
T: 314	• • • • •	1 1	c	C.1 . 1	1.1		

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

1



با توجه به این که تمامی شرایط در حین انجام فرآیند منیپولیشن یکسان



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



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

**شکل 4** نیروهای منیپولیشن برحسب جابجایی سوزن برای نانولولهها با قطرهای مختلف؛ الف- نیروی افقی منیپولیشن، ب- نیروی عمودی منیپولیشن



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

شكل 5 عمق نفوذ و سطح تماس در فرآيند منيپوليشن

150

0

CNT(4,4)

Mean of Von-mises

نانوذره و سطح سوزن دانست. زیرا با افزایش انحنای سطح تماس، نیروی عمودی وارد بر ذره بیشتر می شود و در نتیجه اتم ها با سطح مبنا در گیرتر شده و حجم بیشتری از هر اتم از نانوذره در مجاورت اتم های سطح مبنا قرار می گیرد و منیپولیشن سخت تر انجام می شود. بر مبنای معیار تنش فون -میزز [16] ماکزیمم (معادلهی (9)) تنش وارده بر ذرات در "شکل 9" آورده شد.







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 جابجایی سوزن؛ الف-نیروی افقی منیپولیشن، ب- نیروی عمودی منیپولیشن

Fig. 9 Von-Mises average stress of the carbon allotropes شکل 9 میانگین تنش فون میزز آلوتروپهای کربنی  $\sigma_{\nu}^{2} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^{2} + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^{2} + (\sigma_{zz} - \sigma_{xx})^{2} \\ + 6(\sigma_{yz}^{2} + \sigma_{zx}^{2} + \sigma_{xy}^{2}) \end{bmatrix}$ (9)

Capped

CNT(5,5)

Capped

CNT(6,6)

Fullerene

C180

مقدار سطح تماس در (۲۹٫۶ کمترین و در CNT 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 منییولیشن در فلورنها تنش کاهش خواهد یافت.

### 4- جمع بندي

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 نانوساختارها و حوزههایی چون <sup>1</sup> MEMS 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 جابجایی 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 نانوذرات را مدلسازی کرد. دینامیک مولکولی یکی از روشهایی است که در آن میتوان از ویژگیهای در مقیاس نانو یک سیستم به خواص میکروسکوپی ارتباطی بین مفاهیم اتمی و مولکولی از یکسو و کمیتهای قابل اندازه گیری مشاهده پذیر 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 ازآنچه 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 سطح مبنا می گردد و میزان عمق نفوذ محل تماس نیز افزایش میابد. در نانولوله (20,02) بدلیل افزایش پیوندهای بین اتمی نانولوله و سطح مبنا، نیروی منیپولیشن به ترتیب به میزان 20402 و 20804 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 جابجایی ذرات دیگر مورد توجه قرار گیرد. به منظور تأثیر هندسهی نانوذرات، فرآیند منیپولیشن

<sup>&</sup>lt;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 Biomanipulation 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. Rahneshin, 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
- [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/lammpscuda/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 منیپولیشن نیاز به نیروی بیشتری داشته باشد تا بتواند نانوذره را بر روی سطح جابجا کند.

### 5- مراجع

- 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. Gneco, A. Rao, K. Mougin, 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, *Modares 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