



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

امین حبیب نژاد کورایم<sup>1</sup>، معین طاهری<sup>2</sup>، محرم حبیب نژاد کورایم<sup>3\*</sup>

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

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

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

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

### اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

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

### چکیده

امروزه یکی از بحث های 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 مطلوب رسانده می شوند. اگر نیروی وارده بیش از حد نیاز باشد، نانوذره پس از ایستادن پروب میکروسکوپ نیروی اتمی همچنان به حرکت خود (غزشی یا غلتشی) ادامه داده و از نقطه ای مطلوب نهایی دور می شود. از طرف دیگر، اگر نیروی وارده کم باشد، به طوری که نتواند بر نیروی اصطکاک ایستایی غلبه کند، نانوذره هیچ حرکتی نخواهد داشت. پس پیدا کردن نیروی بهینه در امر نانومنیپولیشن از اهمیت بالایی برخوردار است. در این مقاله، با استفاده از شبیه سازی دینامیکی نانوذره، معادلات 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 پلاسما محاسبه 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.

## 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.

### 1- مقدمه

تحقیقات گوناگونی با اهداف دست یابی به دقت بیشتر در جابه جایی و اسمبل کردن میکرو/نانوذرات توسط میکروسکوپ نیروی اتمی<sup>1</sup> و اتوماسیون این فرآیند انجام شده است که پیشگامان آن گروه ساموئل سون بودند. آن ها با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی به صورت تجربی به منیپولیشن پرداختند [1].

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 آن ها، 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

1- Atomic Force Microscope (AFM)

حاصل از این روش ها را با هم مقایسه کرده است. از نظر کنترل منیپولیشن نیز وی به طراحی کنترل کننده ی مود لغزشی در راستای محور افقی و عمودی پرداخته است [13,12]. امیدی به بررسی رفتار هندسه های مختلف تیرک شامل مستطیلی، وی شکل و خنجرى پرداخته و با ایجاد معادله ی بین جابه جایی نانوذره با سختی تیرک به استخراج معادلات دینامیکی حاکم پرداخته است [14]. کورایم و همکارانش به توسعه و مدل سازی تئوری های تماسی الاستیک - پلاستیک جهت نانوباکتری های نرم کرووی شکل به منظور کاربرد در منیپولیشن میکرو/نانوذرات زیستی مختلف بر پایه ی میکروسکوپ نیروی اتمی پرداخته اند [15].

با توجه به بررسی ها، این موضوع حاصل شده که در کارهای گذشته، نیرو و زمان بحرانی برای نانوذرات مختلف در محیط های زیستی بررسی نشده است، لذا در این مقاله مقادیر نیرو و زمان بحرانی برای نانوذرات طلا، پلاکت و مخمر در محیط های گاز، آب، الکل و پلاسما محاسبه شده و همچنین این مقادیر برای نانوذرات دی ان ای در محیط گازی محاسبه شده است.

## 2- بررسی سینماتیک منیپولیشن

در این قسمت با استفاده از مدل سازی سینماتیک، معادلات هندسی برای نانوذره و پروب به دست می آید. برای این منظور با در نظر گرفتن تغییر شکل تماسی بین نانوذره - رأس ابزار،  $\delta_t$ ، نانوذره - صفحه ی مبنا،  $\delta_s$  و با توجه به شکل 1، معادلات سینماتیکی حرکت در راستای محورهای  $x$  و  $y$  از معادلات 1 و 2 به دست می آیند [16].

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

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

با دوبار مشتق گیری از معادلات 1 و 2 مقادیر  $\dot{y}_p$  و  $\dot{z}_p$  به صورت معادلات 3 و 4 به دست می آید که شتاب در راستای محورهای  $x$  و  $y$  را نشان می دهد.

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

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

از مقادیر دیگری که در مشتق گیری ظاهر می شوند و دارای مشتق درجه دوم هستند و خود آن ها نیز کوچک هستند، صرف نظر شده است.

## 3- بررسی دینامیک منیپولیشن

در منیپولیشن دقیق نانوذرات توسط میکروسکوپ نیروی اتمی، ابتدا رأس پروب در تماس با نانوذره قرار می گیرد. سپس با شروع حرکت صفحه ی مبنا با سرعت ثابت  $V_{sub}$  و قبل از شروع حرکت نانوذره بر روی صفحه ی مبنا، نانوذره و متقابلاً رأس پروب منیپولاتور با همان سرعت شروع به حرکت می کنند و در نتیجه نیروهای اعمالی بر نانوذره و عکس العمل آن بر رأس پروب شروع به افزایش می کنند. این نیروی عکس العمل موجب خمش و پیچش در تیرک می شود.

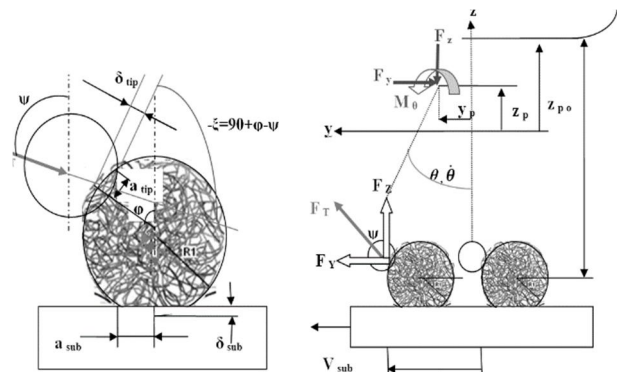
معادلات نیروها و گشتاور وارد بر انتهای تیرک به صورت معادلات 5 تا 7 می باشد [16]:

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

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

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

نیروها و گشتاور فنری تیرک  $(M_\theta, F_z, F_y)$ ، نیروهای عمودی و افقی رأس پروب  $(F_y$  و  $F_z)$  و نیروی اعمالی  $F_T$  ابزار در حرکت افقی نانوذرات، در شکل 2 مشاهده می گردد. نیروها بر زاویه پیچش  $\theta$  ( $z_p$ ) 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 پور نانوذرات طلا را در دمای اتاق و شرایط محیطی روی صفحه مبنایی از جنس میکا حرکت داده اند، که این کار به صورت تجربی انجام شده و توانسته اند چند حرف را با استفاده از منیپولیشن نانوذرات طلا پدید آورند [3,2]. لیو و زانک نیز به بررسی تجربی نانوذرات دی ان ای<sup>1</sup> پرداختند [5,4]. محدودیت این تحقیقات در این است که در هیچ یک از آن ها به بررسی شرایط محیط های بیولوژیکی جهت ذرات مختلف زیستی پرداخته نشده است.

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

ریتر به مدل سازی منیپولیشن نانوذرات پرداخته و به این نتیجه رسیده که نیروی لازم جهت جابه جایی وابسته به اندازه ی 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 می افتد [8]. تفضلی و سیتی به منیپولیشن نانوذرات پرداخته و در آن با به دست آوردن جابه جایی های تیرک و دو بار مشتق گیری از آن به معادلات دینامیکی جابه جایی نانوذرات دست یافته اند [10,9]. ذاکری به منیپولیشن نانوذرات پرداخته و با استفاده از مدل تماسی جی کا آر<sup>2</sup> و اعمال نیروهای چسبندگی و اصطکاکی به شبیه سازی پرداخته است. وی همچنین شبیه سازی نانوذرات طلا برای شرایط بحرانی را نیز انجام داده است. وی به این نتیجه رسیده که نیروی بحرانی در محیط آب نسبت به محیط گازی کاهش می یابد، ولی در رفتار دینامیکی تغییر محسوسی ایجاد نمی شود [11]. در این تحقیقات نیز ذرات و محیط های بیولوژیکی مورد توجه قرار نگرفته اند.

دایی نبی به مدل سازی تراکنشی سوزن با استفاده از مدل های هرتز<sup>3</sup>، ام دی<sup>4</sup>، جی کا آر<sup>5</sup>، دی ام تی<sup>6</sup>، بی سی پی<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

می توان نانوذره را در مسیری مشخص و برای رسیدن به نقطه ی هدف مشخصی جابه جا نمود.

با توجه به معادله ی 17، نیروی بحرانی ( $F_{cr}$ ) برای مدل انتخاب شده در لحظه ی حرکت به دست می آید و زمان آن را نیز  $T_{cr}$  می نامیم. نمودارهای نیروی بحرانی شروع حرکت نانوذره با شبیه سازی معادلات دینامیکی ابزار و نانوذره و با استفاده از پارامترهای هندسی و ماده ای ابزار و نمونه و صفحه ی مبنا، به دست می آیند.

#### 4- مطالعه ی تأثیر محیط های مختلف بر دینامیک منیپولیشن

در این بخش با پرداختن به تأثیر محیط های مختلف بر دینامیک منیپولیشن، به تکمیل فرآیند نانومنپولیشن پرداخته می شود. چرا که در اغلب مواردی که کاربرد بیولوژیکی وجود دارد، محیط مایعاتی به کار می رود که اغلب کاربرد پزشکی دارند، لذا این مهم ایجاد می کند که دینامیک نانومنپولیشن در محیط های زیستی از اهمیت بالایی برخوردار باشند. برای این کار ابتدا باید میزان تأثیر تغییر محیط بر روی عملیات نانومنپولیشن سنجیده شود. بنابراین در ادامه به بررسی تأثیر و نحوه ی ورود به معادلات دینامیکی منیپولیشن پرداخته می شود.

در این قسمت از تئوری جی کا آر استفاده می کنیم که در این تئوری نیروهای مؤثر در تماس یک کره به شعاع  $R$  و سطح برابر با معادله ی 18 خواهد بود:

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

که در آن  $F_1$  نیروهای اعمالی خارجی است. در این معادله باید نیروهای مولکولی اصلی (الکترواستاتیک، آبیوشی 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 می کنیم که مقدار آنها غیرقابل صرف نظر کردن باشد.

همان طور که گفته شد نیروی اعمالی برای محاسبه شعاع تماس و عمق نفوذ در تغییر محیط عوض شده و این نیرو مطابق شکل 3 با نماد  $F_1$  نشان داده شده است.

این نیروها که شامل سه نیرو می باشد، به نیروی اعمالی خارجی اضافه می شود و معادلات 19 تا 22 حاصل می شود.

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

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

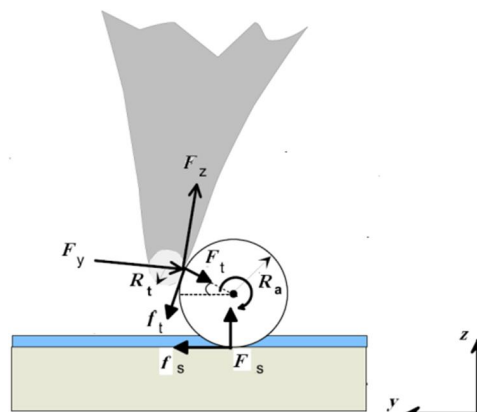
$$\delta = \frac{a^2}{R} - \sqrt{\frac{8\pi\gamma a}{3K}} \quad (21)$$

$$a = \left( \frac{RF_H^{IKR}}{K} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (22)$$

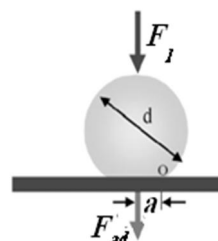
این تنها تأثیر تغییر محیط بر عملیات نانومنپولیشن نیست، بلکه برای شبیه سازی عملیات نانومنپولیشن به بررسی سختی تیرک و به تبع آن به میزان خم شدن تیرک، جهت به دست آوردن زمان و نیروی بحرانی نیاز می باشد. نوع تیرک به کار رفته، در میزان خم شدن تیرک مؤثر می باشد، زیرا وقتی سختی تیرک تغییر می کند، میزان خم شدن و نیروهای وارد بر آن نیز تغییر می یابد. در این مقاله تیرک به شکل مستطیلی در نظر گرفته شده و معادلات سختی تیرک با استفاده از مدل اولیور-برنولی و با توجه به شکل 4 به صورت معادلات 23 تا 25 است [16].

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

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



شکل 2 نیروهای وارده بر نانوذره از طرف پروب



شکل 3 شماتیک تماس بین کره و یک سطح

$$F_y - F_y = m\ddot{y} = m \frac{(y_T'' + y_P'')}{2} \quad (8)$$

$$F_z - F_z = m\ddot{z} = m \frac{(z_T'' + z_P'')}{2} \quad (9)$$

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

با جایگذاری مقادیر شتابها، معادلات نیروهای رأس پروب (معادلات 11 تا 13) برحسب  $\theta$  و  $z_p$ ،  $y_p$  به دست می آیند، که در آن  $F_z$  و  $F_y$  نیروهای وارد بر نانوذره از طریق پروب،  $\psi$  و  $\phi$  به ترتیب زاویه ی نیروی پروب و زاویه ی تماس رأس پروب و نانوذره هستند و در آن مقادیر  $\ddot{z}_T$  و  $\ddot{y}_T$  برابر صفر می باشد.

$$F_z = F_z - m \left[ \frac{H}{2} (-\ddot{\theta} \sin \theta + \dot{\theta}^2 \cos \theta) + \delta_t \cos(\theta + \phi) + \delta_s \cos^2 \theta \right] \quad (11)$$

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

$$F_T = \sqrt{F_y^2 + F_z^2} \quad (13)$$

لذا معادلات 14 و 15 را داریم:

$$\psi = \text{Arctan} \left( \frac{F_y}{F_z} \right) \quad (14)$$

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

بنابراین هنگامی که نانوذره توسط سوزن پروب میکروسکوپ نیروی اتمی بر روی سطح رانده می شود، نیروی اصطکاک میان نانوذره و سطح ( $f_s$ ) را می توان برحسب نیروی برآیند وارد بر نانوذره ( $P_T$ ) و زاویه ی ( $\psi$ ) به صورت معادله ی 16 نوشت:

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

برای آن که نانوذره شروع به لغزش بر روی سطح کند، شرط معادله ی 17 می بایستی 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 شده اند. به این ترتیب با گذر مقدار نیرو از میزان بحرانی آن، فرآیند منیپولیشن آغاز می گردد و با تحلیل های بیشتر

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

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

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

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

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

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

و در آن  $L_1$  میزان فرورفتگی تیرک در سیال است. در این تحقیق فرض شده است که نصف طول تیرک در سیال فرورفته است.

### 5- شبیه‌سازی مینیولیشن نانوذر استوانه‌ای

در این بخش ابتدا مقادیر اولیه و سپس شرایط اولیه لازم در حل مسئله ارائه خواهند شد. الگوریتم شبیه‌سازی مسئله مشابه الگوریتم به‌دست 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 نانوذر است که قبل از حرکت نانوذر بر روی صفحه‌ی مینا می‌باشد. خروجی مقدار نیروی اعمالی  $F_T$  از طرف رأس پروب بر نانوذر است. در این مرحله مقادیر خمش نرمال و پیشش تیرک، با روش‌های نوری یا روش‌های دیگر مستقیماً اندازه‌گیری می‌شود. با افزایش بیشتر نیرو تا رسیدن به حد بحرانی که در آن نانوذر شروع به حرکت می‌کند،  $F_T$  ثابت مانده و نانوذر بر روی صفحه‌ی مینا حرکت می‌کند، که در فاز دوم الگوریتم شبیه‌سازی نشان داده شده است. خروجی این بخش بیان‌گر رفتار دینامیکی و میزان جابه‌جایی نانوذر است.

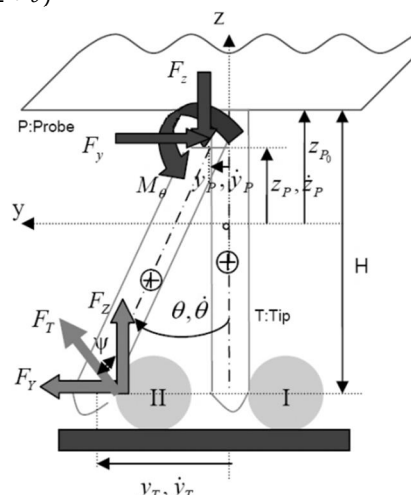
الگوریتم مورد استفاده در این مقاله به منظور به دست آوردن نیرو و زمان بحرانی مطابق شکل 5 می‌باشد.

نیروی اعمالی تیرک بر نانوذر ( $F_T$ ) و میزان نیروی لازم برای حرکت نانوذر در حالت لغزشی ( $F_S$ ) و در حالت غلطشی ( $F_r$ ) در شکل 6 نشان داده شده است. برای مینیولیشن نانوذر استوانه‌ای طلا در محیط هوا از مدل تماسی هرتز استفاده شده است. همان‌گونه که در شکل 6 مشخص است، با توجه به برخورد منحنی نیروهای اعمالی تیرک بر نانوذر ( $F_T$ ) با منحنی نیروی لغزشی ( $F_S$ ) قبل از نیروی غلطشی ( $F_r$ )، مود لغزشی قبل از مود غلطشی رخ داده و نیروی بحرانی ( $F_{cr}$ ) برای چهار نانوذر مختلف یعنی طلا، دی‌ان‌ای، مخمر و پلاکت به ترتیب برابر است با  $0.7278 \mu N$ ،  $0.9279 \mu N$ ،  $1.0010 \mu N$  و  $1.0910 \mu N$ . زمان بحرانی مینیولیشن ( $T_{cr}$ ) برای چهار نانوذر در نظر گرفته شده نیز به ترتیب برابر  $0.277 \text{ sec}$ ،  $0.449 \text{ sec}$ ،  $0.405 \text{ sec}$  و  $0.500 \text{ sec}$  می‌باشد.

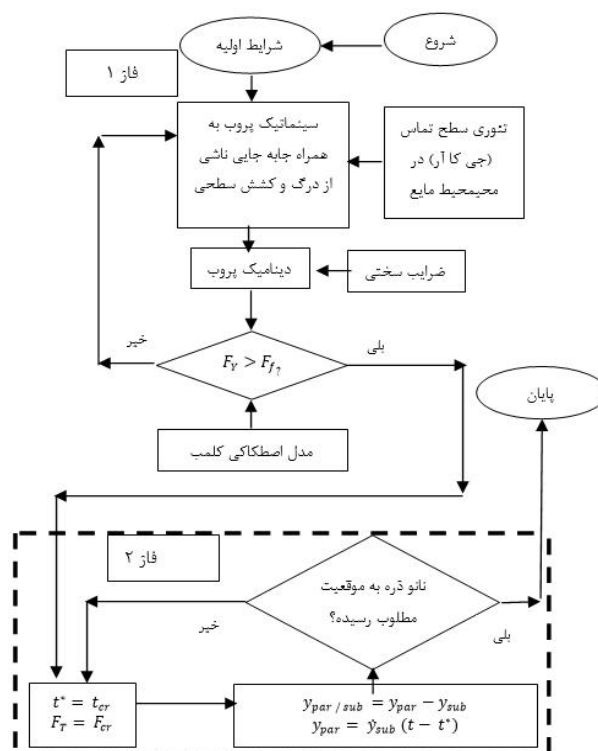
### 6- شبیه‌سازی دینامیک مینیولیشن در محیط‌های زیستی

در بخش‌های قبل به استخراج معادلات حاکم بر عملیات نانومینیولیشن در محیط مایع پرداخته و شبیه‌سازی دینامیک نانوذر 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 دارند. به این منظور در این بخش به شبیه‌سازی دینامیکی نانوذر در محیط‌های بیولوژیکی پرداخته می‌شود. محیط‌های بیولوژیکی مورد بررسی در این بخش شامل سه محیط مختلف

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



شکل 4 مشخصات دینامیکی و هندسی تیرک [17]



شکل 5 الگوریتم فرآیند شبیه‌سازی مینیولیشن نانوذر [16]

که در آن  $E$  مدول الاستیسیته،  $w$  پهنای تیرک،  $L$  طول تیرک و  $t$  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.

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

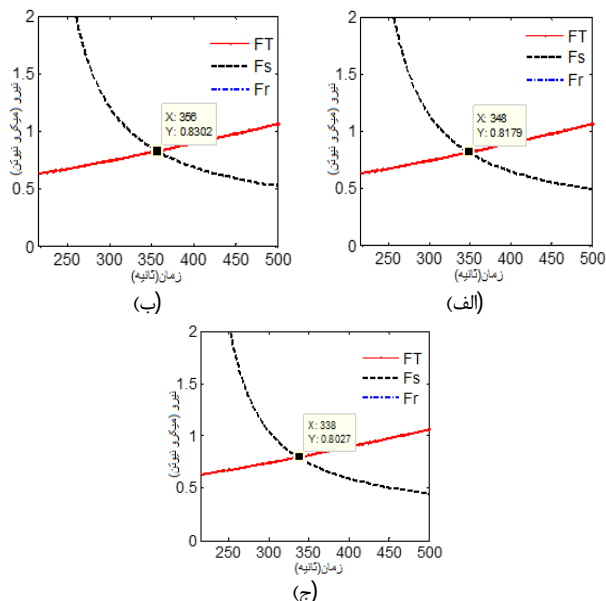
$$F_y = K_y(y_p - \delta_D - \delta_{ST}) \quad (27)$$

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 پروب می‌باشد.

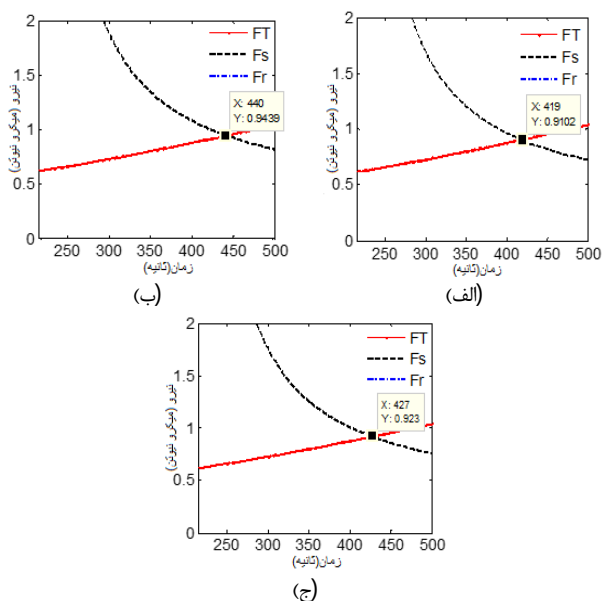
در محیط مایع نیروی دیگری که به معادلات در محیط گازی اضافه می‌شود،

نیز از مدل تماسی جی‌کا آر استفاده شده است.

در ادامه به تحلیل و بررسی خروجی‌های به‌دست آمده از شبیه‌سازی نانوذرات مختلف در محیط‌های مختلف پرداخته می‌شود.



شکل 8 نیروهای منیپولیشن نانوذرات استوانه‌ای مخمر در محیط الف) آب، ب) الکل، ج) پلاسما با استفاده از مدل تماسی جی‌کا آر

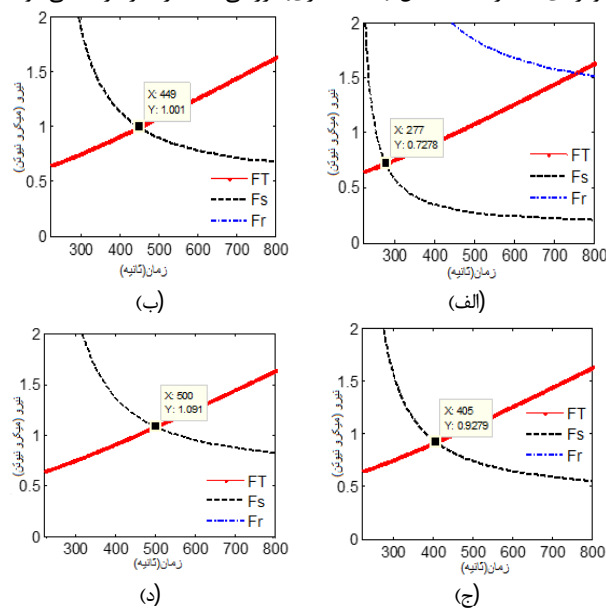


شکل 9 نیروهای منیپولیشن نانوذرات استوانه‌ای پلاکت در محیط الف) آب، ب) الکل، ج) پلاسما با استفاده از مدل تماسی جی‌کا آر

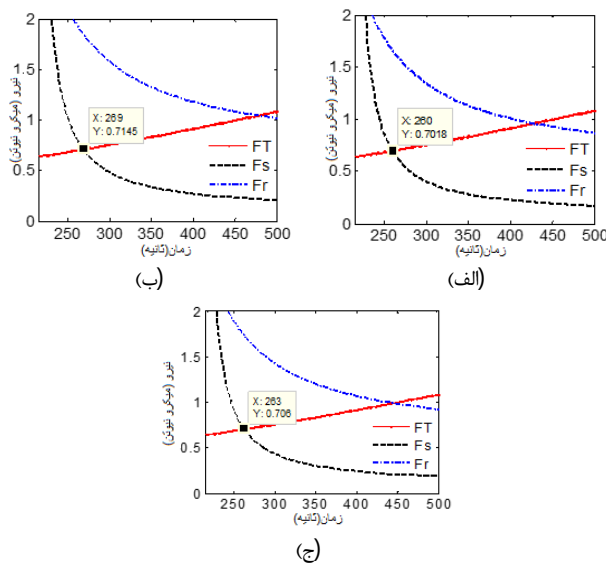
این نتایج در غالب نمودار بوده و از برخورد منحنی‌ها، به دو مقدار مهم در این عملیات دست می‌یابیم که یکی از آنها زمان بحرانی است، یعنی زمانی که نانوذره با توجه به میزان نیروی اعمالی شروع به حرکت می‌کند و دیگری نیروی بحرانی است که معنی آن این است که وقتی نیروی اعمالی به نانوذره به این مقدار رسید نانوذره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

نیروی اعمالی تیرک بر نانوذره ( $F_T$ ) و میزان نیروی لازم برای حرکت نانوذره در حالت لغزشی ( $F_s$ ) و در حالت غلطشی ( $F_r$ ) مشخص می‌شود. برای منیپولیشن نانوذرات استوانه‌ای طلا در محیط آب، الکل و پلاسما، با استفاده

هستند که عبارت‌اند از: آب، الکل و پلاسما. 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) مخمر، د) پلاکت در محیط هوا با استفاده از مدل تماسی هرترز



شکل 7 نیروهای منیپولیشن نانوذرات استوانه‌ای طلا در محیط الف) آب، ب) الکل، ج) پلاسما با استفاده از مدل تماسی جی‌کا آر

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

الگوریتم مورد استفاده برای محاسبه 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 نانوذره ی نیز طلا در محیط هوا و آب به ترتیب برابر 0/1 و 0/0248 می باشد. لذا می توان گفت تأثیر چسبندگی بر نیروی بحرانی در تغییر محیط 20 برابر مقدار تغییر خود نیروی چسبندگی می باشد. صحت نتایج به دست آمده را می توان با مقایسه ی نتایج موجود برای نانوذرات طلا در کارهای قبل [16] تأیید نمود. همچنین با توجه به این که با افزایش ضریب چسبندگی، انتظار می رود که نیرو و زمان بحرانی منیپولیشن نیز افزایش یابد، که نتایج به دست آمده در این مقاله نیز این امر را تأیید نموده و لذا دلیلی بر صحت نتایج می باشد.

## 8- فهرست علائم

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

از مدل تماسی جی کا آر در ادامه ی کار مورد بررسی قرار گرفته است. با توجه به برخورد منحنی نیروهای اعمالی تیرک بر نانوذره ( $F_T$ ) با منحنی نیروی لغزشی ( $F_s$ ) 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  $0/7018 \mu N$ ،  $0/7145 \mu N$  و  $0/7060 \mu N$  می باشد. زمان بحرانی منیپولیشن ( $T_{cr}$ ) برای سه محیط در نظر گرفته شده ی آب، الکل و پلاسما به ترتیب برابر با  $0/260 \text{ sec}$ ،  $0/269 \text{ sec}$  و  $0/263 \text{ sec}$  می باشد. که نتایج بدست آمده برای نانوذرات طلا در شکل 7 نشان داده شده است.

شکل 8 نیز همانند شکل 7 به بررسی عملیات جابه جایی نانوذرات پرداخته است، با این تفاوت که در شکل 7 نانوذرات طلا بررسی شده و در شکل 8، نانوذرات مخمر بررسی شده است. همان گونه که در شکل 8 مشخص است، نیروی بحرانی ( $F_{cr}$ ) برای سه محیط در نظر گرفته شده یعنی آب، الکل و پلاسما برای نانوذره ی استوانه ای مخمر به ترتیب برابر است با  $0/8179 \mu N$ ،  $0/8302 \mu N$  و  $0/8027 \mu N$ . زمان بحرانی منیپولیشن ( $T_{cr}$ ) نیز برای سه محیط در نظر گرفته شده شامل محیط های آب، الکل و پلاسما به ترتیب برابر با  $0/348 \text{ sec}$ ،  $0/356 \text{ sec}$  و  $0/338 \text{ sec}$  می باشد، که در مقایسه با نانوذرات طلا مقادیر متفاوت است و این تفاوت به دلیل ماهیت نانوذره می باشد.

شکل 9 نیروهای اعمالی تیرک بر نانوذره پلاکت ( $F_T$  Error! Bookmark not defined.) میزان نیروی لازم برای حرکت نانوذره در حالت لغزشی ( $F_s$ ) و در حالت غلطشی ( $F_r$ ) را در محیط آب، الکل و پلاسما با استفاده از مدل تماسی جی کا آر نشان می دهد.

همان گونه که در شکل 9 مشخص است با توجه به برخورد منحنی نیروهای اعمالی تیرک بر نانوذره ( $F_T$ ) با منحنی نیروی لغزشی ( $F_s$ )، نانوذره شروع به لغزش می کند. نیروی بحرانی ( $F_{cr}$ ) برای محیط های در نظر گرفته شده ی آب، الکل و پلاسما به ترتیب برابر با  $0/9102 \mu N$ ،  $0/9439 \mu N$  و  $0/9230 \mu N$  و زمان بحرانی منیپولیشن ( $T_{cr}$ ) برای سه محیط در نظر گرفته شده به ترتیب برابر با  $0/419 \text{ sec}$ ،  $0/440 \text{ sec}$  و  $0/427 \text{ sec}$  می باشد، که در مقایسه با نانوذرات طلا و نانوذرات مخمر، نانوذرات پلاکت به زمان بیشتری برای شروع به لغزش نیاز دارند.

## 7- نتیجه گیری

در این مقاله با مقایسه ی نیرو و زمان بحرانی منیپولیشن برای نانوذرات طلا، مخمر و پلاکت در محیط های گازی، آبی، الکلی و پلاسما، نتیجه گیری شده است که با تغییر نانوذره در عملیات نانومنیپولیشن به دلیل این که نانوذرات مورد بررسی در میزان چسبندگی با سطح و پروب با هم متفاوت هستند، این امر باعث می شود که در زمان شروع به حرکت شان نیز اختلاف وجود داشته باشد. بررسی میزان این تأخیر در زمان به این دلیل اهمیت دارد که با پیدا کردن مقدار این تأخیر می توان مقدار زمان مورد نیاز برای جابه جایی دقیق نانوذره را محاسبه نموده و نانوذره را به نقطه ی 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 می باشد. پس از بررسی و تعیین مقدار تغییر نیروی مورد نیاز برای شروع به حرکت نانوذره در محیط های 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

## 9- 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, *Scienticalranica 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, C. 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.