# مدلسازی دینامیکی نانومنیپولیشن دو بعدی نانوذره با استفاده از میکروسکوپ اتمی (AFM) در محیط مایع و بررسی پارامترهای هیدرودینامیکی و هندسی در آن

دكتر محرم حبيب نژاد كورايم ٰ، دكتر منيژه ذاكرى ٰ، على متقى ّ

## خلاصه

**مقدمه:** مدلسازی منیپولیشن ذره با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی در محیط هوا انجام گردید و رفتار دینامیکی ذره و انتهای پروب مورد مطالعه قرار گرفت. در این مقاله منیپولیشن نانوذرات در محیط مایع با استفاده از پروب Atomic force microscope (AFM) مدلسازی شد و با نتایج محیط گاز مقایسه گردید.

**روشها:** در این تحقیق با استفاده از آنالیز تئوریک نیروها در محیط مایع و دینامیک راندن نانوذره، منیپولیشن نانوذرهی مصنوعی مورد بررسی قرار گرفت. در این حالت نیروهای هیدرودینامیکی و کشش سطحی در محیط مایع محاسبه شد و در مدل به کار گرفته شد. مسأله برای یک ذرهی کروی از جنس طلا بر روی زیر ساختی از سیلیکون در زیر آب شبیه سازی گردید.

**یافتهها:** نتایج نشان داد که نیرو و زمان بحرانی برای شروع حرکت ذره در محیط آب در حالت لغزشی و غلتشی در حدود ۷ درصد بود و ۳ درصد نسبت به محیط هوا تأخیر داشت. علاوه بر آن با تغییر موقعیت تماس کانتیلور با سطح مایع، میزان مقادیر بحرانی در حدود ۹ درصد در لغزش و ۱۰/۵ درصد در غلتش تأخیر نسبت به هوا را نشان داد.

**نتیجه گیری:** تمامی این نتایج نشان از تأخیر اندکی در زمان حرکت و کاهش شیب تغییرات نیرو در محیط مایع نسبت به محیط هوا دارد.

**واژگان کلیدی:** میکروسکوپ اتمی، نانومنیپولیشن، محیط مایع، نیروهای هیدرودینامیکی

#### مقدمه

نانورباتیک علم استفاده از منیپولیشن کنترل شده برای تولید محصولات جدید می باشد. در این پروسه برای جابجایی کنترل شده ینمونه در محیط گاز و مایع، استفاده از پروب Atomic force microscope (AFM) به دلیل قابلیتهای زیاد آن اهمیت ویژهای دارد و مدلسازی پروسه، نقش عمدهای در کاربرد دقیق این ابزار دارد. یکی از شاخه های اصلی تحقیقات نانو در علوم پزشکی است و نمونههای بیولوژیکی در حالت واقعی در محیط مایع قرار دارند. همچنین چسبندگی

سطح در محیط مایع به دلیل حذف اثر رطوبتی فضای هوا کاهش می یابد و شرایط جدیدی حاکم می گردد. تحقیقات تجربی منیپولیشن در محیط مایع نشان داده است که این محیط جهت کاهش احتمال تخریب نمونه مناسبتر از محیط هوا است.

تلاشهای زیادی برای مدلسازی راندن ذرات و کنترل آن در محیط هوا انجام شده است ولی در حال حاضر تحقیقات در محیط مایع به صورت تجربی هستند. اولین مدل ارائه شده در جابجایی نانوذرات توسط Falvo صورت گرفت که در آن نیروهای ناشی

**نویسندهی مسؤول**: دکتر حبیب نژاد کورایم

Email: hkorayem@iust.ac.ir

<sup>ٔ</sup> استاد، قطب علمی مکانیک جامدات تجربی و دینامیک، دانشکدهی مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

<sup>&</sup>lt;sup>۲</sup> د کتری، گروه مهندسی مکانیک، دانشکدهی مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

<sup>&</sup>lt;sup>۳</sup> کارشناس ارشد، گروه مهندسی مکانیک، دانشکدهی مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران.

از تغییر مقیاس در نظر گرفته نشد. اولین مدلی که در آن نیروهای سطحی در نظر گرفته شدهاند توسط Sitti و همکاران ارائه گردید (۱). در این تحقیق از تئوری تماسی JKR) Johnson-Kendall-Robert) استفادہ شک و کنترل از راه دور جابجایی نـانوذرات، در آن طراحـی شد. Tafazzoli و Sitti مدل كامل ترى را براى جابجايي نانوذرات ارائه کردند و سعی نمودند نانومنیپولیشن در زمان واقعی را شبیهسازی کنند (۲). حبیب نژاد کـورایم و همکاران به بررسی مدل دینامیکی منیولیشن با استفاده از AFM پرداختند و در محیط گاز مـدلسـازی دینامیکی و حساسیت مدل نسبت به پارامترهای مختلف را بررسیی کردنید (۳). در محیط میایع، Resch و همکاران برای اولین بار منیولیشن ذرات طلا را در محيط آب انجام دادند (۴). Frank و همكاران از AFM در شرایط یونی و PHهای مختلف جهت بررسی نیروی چسبندگی و بین مولکولی استفاده نمودنـد (۵). Jones و همکاران به بررسی نیروهای وارد بـر کـانتیلور غوطـــهور در آب پرداختنـــد و مقـــادیر نیروهـــای هیدرودینامیکی وارد بر کانتیلور را در حرکت عمودی ابزار محاسبه کردند (۶). Gauthier و همکاران نشان دادنـد کـه در میکرومنیپولیشـن، چسـبندگی و نیروهـای سطحي موجود در محيط گاز ايجاد مزاحمت ميكنند اما در محیط مایع این نیروها تأثیر کمتری خواهند داشت و در ادامهی تحقیقات سعی نمودند تغییرات احتمالی را در ورود به محیط مایع را بررسی کنند و نیروهای هیدرودینامیکی و سطحی را بررسی نمودند (۸–۷).

در این تحقیق با توجه به اهمیت مدلسازی منیپولیشن در محیط مایع، نیروهای هیدرودینامیکی وارده از طرف سیال بر کانتیلور و ذره، استخراج و مدل جدید منیپولیشن در محیط مایع ارائه و شبیه سازی شده است.

در ادامه، ابتـدا نیروهـای سـطحی و هیـدرودینامیکی در محیط مایع بررسی شدند و سـپس جابجـایی نـانوذرهی کروی در محیط مایع و با اسـتفاده از AFM مـدلسـازی گردید. در نهایت شبیه سازی پروسه منیپولیشن در محیط مایع انجام و با محیط هوا مقایسه شد.

نیروهای محیط مایع شامل نیروهای سطحی واندروالس، الکترواستاتیکی، استریک، حلال پوشی، هیدریشن، کشش سطحی و اثرات هیدرودینامیکی ناشی از حرکت سیال میباشند.

نیروی واندروالس می تواند به شکل دافعه و یا جاذبه باشد. که مقدار آن با توجه به هندسهی اجسام و فواصل آنها تغییر مییابد.

نیروی الکترواستاتیکی، نیروی برهمکنش سطوح است. هنگامی که جسم در مایع فرو میرود، باردار می گردد و یونهای موجود در مایع با بار مخالف سطح را می پوشانند که به آن لایه ی استرن یا هلمولتز می گویند. در درون مایع هنگام نزدیک شدن دو جسم، لایه ی استرن نیروی دافعه ایجاد می کند که به آن نیروی الکترواستاتیک دو لایه می گویند. با توجه به شرایط پتانسیل و شارژ سطوح، مقدار این نیرو از روابط متفاوتی به دست می آید.

اثر سوم بین مولکولی به نیروی استریک (Steric) معروف می باشد و بین دو سطح پوشیده شده از پلیمرهای با زنجیرههای بلند اتفاق می افتد. منشأ این پدیده، افزایش آنتروپی زنجیرهی پلیمری سطوح هنگام نزدیک شدن به یکدیگر است.

نیـروی برهمکنشـی دیگـر، نیـروی حـلال پوشـی (Solvation) است. به طور معمول ساختار سیال نزدیک دیواره، متفاوت از حالات آن در حجم پیوسته است. در منطقهای تا قطر چند مولکول مایع، نیروی نوسانی دافعه

و جاذبه ایجاد می گردد. وقتی دو سطح به یک ایگر نزدیک می گردند، لایه ها یکی پس از دیگری از هم جدا می شوند و تغییرات نوسانی بین مولکول ها به صورت نمایی کاهش می یابد. این پدیده بین سطوح آب دوست (هیدروفیل) در محلول های آبی به صورت نمایی و دافعه است و با نام نیروی هیدریشن (Hydration) شناخته می شود (۹).

یکی از مهمترین شرایط چسبندگی دو سطح میزان رطوبت محیط است. مایعاتی از قبیل آب که بر روی سطوح دچار میعان میگردند، هنگام نزدیکی دو جسم به یکدیگر آنها را به هم میچسباند و جاذبهای بین آنها ایجاد میکنند و نیروی مویینگی ایجاد میگردد. پارامترهایی از قبیل شرایط محیطی، سختی سطوح و میزان آبدوستی نیز در میزان این نیرو مؤثر است. لازم است ذکر شود که نیروی مویینگی برای اجسامی که در داخل محیط مایع قرار گرفتهاند، حذف میشود.

کشش سطحی مایعات پدیده ی دیگری است که در مدل سازی نقش اساسی دارد. کشش سطحی مایع موجب ایجاد پیوندهایی بین مولکول های مایع می گردد تا از تبخیر آن ها جلوگیری شود. در سطح مایع، مولکول ها به صورت نسبی توسط همسایگان خویش احاطه شدهاند و تعداد آن ها برای مولکول درون سیال بیشتر است. برای این که مولکول ها از داخل مایع به سطح آورده شوند، می باید مقداری کار انجام داد. به همین دلیل انرژی سطحی آ را می توان به عنوان انرژی سطحی مایعات همیشه مثبت است و علت آن است که انرژی آزاد گیبس در غیاب کشش سطحی باعث تبخیر سیال مایع می گردد. در مدل حاضر هنگامی که کانتیلور پروب درون سیال قرار گیرد، کانتیلور با سطح مایع در

سطح مقطع کانتیلور در تماس است. هنگام حرکت کانتیلور به منظور حرکت دادن ذره، این نیروی کششی مقاوم باعث اعمال نیرو و تغییر شکل کانتیلور میگردد. با توجه به میزان کشش اگر این نیرو باعث تغییر مساحت Ad بسیار کوچک گردد، کار نیروی کشش سطحی برابر است با:

$$\mathbf{dw} = \mathbf{\gamma}_{\mathbf{i}} \, \mathbf{dA} \tag{1}$$

و مقدار نیرو از مشتق کار به دست میآید:

$$\mathbf{F} = -\frac{\mathrm{d}\mathbf{w}}{\mathrm{d}\mathbf{x}} = -\gamma_{\mathbf{r}} \mathbf{b} \tag{(7)}$$

که علامت منفی به دلیل مقاومت نیرو در برابر حرکت خواهد بود و b برابر محیط مقطع کانتیلور در تماس با مایع است.

علاوه بر نیروهای سطحی بین مولکولی، در محیط مایع نیروهایی نیز بر اثر وزن مایع و حرکت آن ایجاد می شوند که به عنوان نیروهای هیدرودینامیکی تعریف می شوند. نیروهای هیدرودینامیکی بر اساس قوانین بقای جرم، ممنتوم و انرژی محاسبه می گردد. از آن جا که کانتیلور در درون سیال حرکت نسبی دارد، نیروی درگ بر بدنهی آن وارد می گردد. اگر فرض شود که جریان دارای رینولدز بسیار کمتر از یک است، اثرات اینرسی قابل صرف نظر است. در نتیجهی نیروی ناشی از فشار و ویسکوزیته در نیروی درگ وارد بر جسم مؤثر هستند. حال فرض می شود سیال از بالا و پایین کانتیلور عبور کند و هر دو وجه کانتیلور در معرض



است و با توجه به ضخامت بسیار کم مقطع کانتیلور جریان سیال را یک بعدی فرض میکنیم. بـرای جریـان در سطح فوقانی کانتیلور خواهیم داشت:

$$\begin{split} & \frac{\partial p}{\partial x} = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \Longrightarrow \\ & y = 0 \to u = 0 , \quad y = H \to u = U \\ & u(y) = \frac{1}{2\mu} (\frac{\partial p}{\partial x}) y^2 + \frac{1}{2\mu H} (2\mu U - (\frac{\partial p}{\partial x}) H^2) y \end{split}$$
 ( $\Upsilon$ )

$$Q_{total} = Q_{top} + Q_{below}$$

$$Q_{below} = \frac{1}{2}hU, Q_{top} = \int_{0}^{H} u. dy \quad (f)$$

$$Q_{total} = U(H + h) \rightarrow$$

$$Q_{top} = U(H + h) - \frac{1}{2}hU$$
solutions of the end of th

$$\left(\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{x}}\right) = \frac{3\mu^{-1}\mathbf{h}}{\mathbf{h}^{2}} - \frac{6\mu\mathbf{h}}{\mathbf{h}^{3}}\left(\mathbf{H} - \frac{\mathbf{h}}{2}\right) \qquad (a)$$

$$F_{\nu-top} = wL \left(\frac{3\mu^2 U}{H^2} - \frac{6\mu U}{H^2}(H - \frac{h}{2})\left(y + \frac{\frac{2\mu U}{\partial p}}{H} - H^2\right)\right)$$

$$sac_{\mu\nu} = wL \left(\frac{3\mu^2 U}{H^2} - \frac{6\mu U}{H^2}(H - \frac{h}{2})\right)\left(y + \frac{\partial p}{\partial x}\right)$$

$$sac_{\mu\nu} = wL \left(y + \frac{\partial p}{\partial x}\right)$$

$$sac_{\mu\nu} = \frac{\partial p}{\partial x}$$

$$H^2 = \frac{\partial p}{\partial x}$$

## روشها

برای جابجایی نانوذره توسط پروب AFM ابتدا سوزن پروب در تماس با ذرهی هدف قرار گرفت. سپس، سطح زیرین به همراه ذره شروع به حرکت کرد (فاز چسبندگی). حرکت ذره باعث افزایش نیروی وارده بر ذره (P<sub>T</sub>) شد. برای مدلسازی پروسه در محیط مایع، فرض شد که نیمی از کانتیلور درون آب قرار دارد و دو

نیروی مقاوم درگ و کشش سطحی از جانب سیال بر آن وارد می شود.این نیروها در مدل سازی اعمال شدند تا تغییرات نیروی عکس العمل بین ذره و ابزار بررسی شود. در شکل ۲ برهم کنش های بین ذره با سوزن پروب و صفحهی مبنا نمایش داده شده اند.



شکل ۲. دیاگرام آزاد نیروهای وارد بر نانوذره (۳)

مشخصات هندسمی کانتیلور و تغییر شکل آن در منیپولیشن، در شکل ۳ نمایش داده شده است.



Substrate

شکل ۳. مشخصات هندسی کانتیلور و ذره (۳) معادلات سینماتیکی و دینامیکی منیپولیشن از دیاگرام آزاد شکل ۴ استخراج شدند. نیروهای برهمکنش وارده از کانتیلور و ذره بر سوزن پروب AFM در شکل ۴ نمایش داده شدهاند.





با توجه به این که علاوه بر نیروی خارجی ناشی از حرکت نانوذره، نیروهای درگ و کشش سطحی محیط مایع نیز در تغییر شکل کانتیلور تأثیر میگذارند، تغییر شکل کانتیلور در راستای y با استفاده از اصل برهمکنش نیروها به دست آمد:

$$y_{p} = \delta_{1} + \delta_{2} + \delta_{3} = \frac{F_{y}}{K_{y}} + \delta_{Drag} + \delta_{Surf}$$
 (A)

که سیس<sup>8</sup> تغییر شکل تیر ناشی از کشش سطحی سیال با فرض بار متمرکز در میانهی تیر و **gand<sup>8</sup> تغ**ییر شکل ناشی از بار گستردهی درگ بر نیمی از کانتیلور است.  $F_{y}$  نیروی عکس العمل در جهت y و  $v^{k}$  ضریب فنریت در جهت y است. بنابراین نیروی  $F_{y}$  برابر بود با:

$$(\mathbf{1} \cdot \mathbf{)}$$

$$\mathbf{y}_{p} = \mathbf{y}_{sub} + \left(\mathbf{R}_{p} - \boldsymbol{\delta}_{t}\right) \sin \phi - \operatorname{Hsin} \theta$$
(11)

 $\begin{aligned} \mathbf{z}_{p} &= \mathbf{z}_{sub} + \left(\mathbf{R}_{p} - \boldsymbol{\delta}_{t}\right) \cos \phi + \left(\mathbf{R}_{p} - \boldsymbol{\delta}_{s}\right) + \operatorname{Hcos} \theta \\ & \text{integration} \\ \text{integra$ 

 $\sum P_{Y} = m \left(\frac{y_{T} + y_{P}}{2}\right)$   $\rightarrow P_{Y} = F_{y} + \frac{m}{2} (H\dot{\theta}^{2} \sin \theta) \qquad (17)$   $\sum P_{Z} = m \left(\frac{z_{T} + z_{P}}{2}\right)$   $\rightarrow P_{Z} = F_{z} - \frac{m}{2} (H\dot{\theta}^{2} \cos \theta) \qquad (17)$ 

در نهایت مقادیر P<sub>T</sub> و  $\Psi$  از روابط زیـر بـه دسـت آمدند:

$$P_{\rm T} = \sqrt{{P_{\rm Y}}^2 + {P_{\rm Z}}^2}, \quad \psi = \tan^{-1}(\frac{P_{\rm Y}}{P_{\rm Z}})$$
 (14)

برای تعیین دینامیک حرکت ذره توسط سوزن پروب، محاسبه ینیرو و زمان بحرانی که بیانگر نیروی مورد نیاز و لحظه ی شروع حرکت نسبی ذره بر صفحه هستند، از اهمیت ویژه برخوردار است. از مدل اصطکاکی شرایط لازم برای لغزش یا غلتش ذره به شکل زیر به دست میآید (۳۲-۲). لغزش ذره روی صفحه ی مبنا:

$$f_{s} \succ \mu_{s}F_{s} + \tau_{s}A_{s} \implies P_{T} \succ \frac{\tau_{s}A_{s}}{\sin\psi - \mu_{s}\cos\psi}$$
(10)

غلتش ذره روی صفحهی مبنا:  

$$P_{T} \succ \frac{\tau_{rs}A_{s} + \tau_{rt}A_{t}}{R(\sin\psi + \cos\xi) + \mu_{rt}\sin\xi - \mu_{rs}\cos\psi}$$
 (18)  
در لحظهای که نیروی ابزار  $\mathbf{P}_{T}$  از نیروی اصطکاکی  
لغزشی یا غلتشی تجاوز کرد، ذره با رفتار دینامیکی  
مربوطه شروع به حرکت کرد.  
برای شبیهسازی این مدل از ذرهای با شعاع ۵۰  
نانومتر که روی صفحهی مبنا قرار گرفته است، استفاده  
گردید. صفحهی مبنا با سرعت ۱۰۰ نانومتر بر ثانیه  
شروع به حرکت کرد. در شبیهسازی محیط مایع از آب



شکل ۵. زمان و نیروی بحرانی حرکت ذره در حالات لغزشی و غلتشی در آب خالص

نتایج نشان داد که در آب خالص در مقایسه با محیط هوا، مقادیر برای لغزش به میزان ۷ درصد و برای غلتش ۳ درصد افزایش یافت و حرکت با تأخیر انجام شد.

در ادامهی تأثیر تغییرات شعاع ذره میزان زمان و نیروی بحرانی لغزشی و غلتشی مورد بررسی قرار گرفت و مقادیر بحرانی برای ذراتی با شعاع ۵۰ نانومتر تا ۱ میکرومتر به دست آمد که نمودار این تغییرات در شکل ۶ و ۷ ارائه شده است.



شکل ۶. نیروی بحرانی حرکت ذره بر حسب شعاع نانوذره

در نمودارها مشاهده می شود که رفتار دینامیکی ذرهای با شعاع بیشتر از ۴۸۰ نانومتر در شروع حرکت از نوع حرکت غلتشی بود. در محیط هوا این مقدار در خالص به عنوان سیال استفاده شد. نیمی از کانتیلور داخل مایع فرض شد و شرایط محیط مایع با فرض آب خالص در دمای ۲۵ درجهی سانتی گراد مدلسازی شد. همچنین در زمان شروع حرکت (0=t) پارامترهای هندسی و دینامیکی مدل مشابه تحقیقات قبلی این گروه در نظر گرفته شدند.

برای شبیهسازی از هندسه و خواص مکانیکی کانتیلور مطابق جداول ۱ و ۲ استفاده شد. انرژی چسبندگی بین نانوذره/پروب و نانوذره و سطح در هوا 2.2J/m<sup>2</sup> بود.

| جدول ۱. خواص هندسی پروب |       |       |       |        |  |  |
|-------------------------|-------|-------|-------|--------|--|--|
| L(µm)                   | w(µm) | t(µm) | H(µm) | Rt(nm) |  |  |
| 470                     | ۴۸    | ١     | ١٢    | ۲.     |  |  |
|                         |       |       |       |        |  |  |

| جدول ۲– خواص مکانیکی پروب |      |         |                |  |  |
|---------------------------|------|---------|----------------|--|--|
| E (GPa)                   | V    | G (GPa) | $\rho(Kg/m^3)$ |  |  |
| 189                       | ٠.۲٧ | 99.0F   | 244.           |  |  |

#### يافتهها

با افزایش نیروی وارده از طرف ابزار بر ذره، Fr، بر نیروی چسبندگی ذره/صفحهی مبنا غلبه شد و ذره با نیروی بحرانی Pr در لحظهی ع<sup>t</sup> شروع به حرکت کرد. در محیط هوا، نانوذرهی ۵۰ نانومتری با نیروی ۱۹۶۰ میکرونیوتن و در لحظهی ۲۱۴ ثانیه شروع به لغزش کرد. در آب خالص مطابق شکل ۵ مشاهده شد که نانوذره در لحظهی ۲۲۷۷ ثانیه و با نیروی بحرانی ۱۹۷۰ میکرونیوتن با غلبه بر اصطکاک لغزشی به حرکت درآمد. اما زمان غلبه بر اصطکاک غلتشی در لحظهی ۱۹۳۸ ثانیه و با نیروی ۱۹۳۴ میکرونیوتن بود که بیانگر حرکت لغزشی ذره روی سطح است.

شعاع بالای ۵۴۰ نانومتر بود که نشان میدهد احتمال حرکت غلتشی در محیط مایع با افزایش شعاع نانوذره به میزان ۱۱ درصد افزایش یافت.



شکل ۷. زمان بحرانی حرکت ذره بر حسب شعاع نانوذره

در شبیه سازی نمودارهای قبل، نتایج با فرض قرار داشتن نیمی از کانتیلور در محیط مایع استخراج شده اند. با توجه به این که موقعیت تماسی کانتیلور با سطح مایع بر مقادیر تغییر شکل های آن مؤثر است، مقادیر بحرانی در حالت قرار داشتن محل تماس کانتیلور /مایع در ۵ نقطه از راستای طول کانتیلور (صفر، ۵۵، ۱۱۰، ۱۶۵ و ۲۲۰ میکرون) نیز محاسبه شدند که نتایج در نمودارهای شکل ۸ و ۹ ارائه شدند.



شکل ۸ نمودار تغییرات نیرو و زمان بحرانی حرکت لغزشی ذره نسبت به موقعیت تماس کانتیلور با مایع

در شکل های ۸ و ۹، هنگامی که کل کانتیلور درون آب فرض شود (۰ میکرون)، تغییرات مقادیر

بحرانی نسبت به هوا در حدود ۲ درصد است. اما در حالتی کے تنہا سوزن و لبہی تیر وارد آب شود (۲۲۰ میکرون)، تغییراتی در حدود ۹ درصد در مقادیر لغزش و ۱۰/۵ درصد در مقادیر غلتشی مشاهده میشود. این نتایج نشان میدهند کـه کشـش سطحی در مقایسه با نیروی درگ تـأثیر بیشـتری بـر منیپولیشن داشت. به طوری که در حالت غوط هوری کامل، هنگامی که کشش سطحی به صفر رسید و کانتیلور تنها تحت اثر نیروی درگ قرار داشت، تغییر محسوسی در زمان و نیروی بحرانی مشاهده نشد. در حالتی کـه سـوزن و رأس پـروب داخـل مـايع قـرار داشتند و تأثیر کشش سطحی به ماکزیمم مقدار خود رسید، میزان تغییرات زمان و نیروی لغزشی و غلتشی بیشتر بود. به بیان دیگر تأثیر نیروهای هیدرودینامیکی بر منیپولیشن کمتر از تأثیر نیروی کشش سطحی بـر کانتیلور بود و نیروی درگ در عمل بسیار ناچیز بود.



شکل ۹. نمودار تغییرات نیرو و زمان بحرانی حرکت غلتشی ذره در موقعیتهای مختلف تماس کانتیلور با مایع

بحث

در این تحقیق، منیپولیشن نانوذرات با استفاده از میکروسکوپ اتمی (AFM) برای حالت راندن نانوذره در محیط مایع مدلسازی شد. طبق نتایج به دست آمده از شبیهسازی در آب خالص، تغییر مقادیر نیرو و

زمان لازم برای شروع حرکت ذره به میزان ۳ تا ۷ درصد نسبت به هوا تأخیر داشت که مشابه با نتایج موجود است (۴). علت این پدیده وجود نیروهای مقاوم در برابر حرکت کانتیلور یعنی نیروی درگ و کشش سطحی سیال میباشد. با مقایسه ی مقادیر نیروهای مقاوم در مقایسه با نیروهای فشاری وارده از پروب بر ذره، تغییرات اندک مقادیر نسبت به حالت هوا قابل توجیه است. این نتیجه در تحقیقات تجربی نیز گزارش شده است (۶).

به علاوه در مقایسه ی تأثیر دو نیروی کشش سطحي و نيروي درگ بر منيپوليشن، مشاهده شـد كـه تأثیر کشش سطحی بیشتر از نیروی درگ بود. علت این یدیدہ این است کے میزان نیے وی درگ با توجہ بہ رینولدز بسیار کم و سرعت پایین کانتیلور چندین مرتب از میزان نیروی کشش سطحی کمتر بود. همچنین هنگامی که بدنهی کانتیلور به طور کامل خـارج از مـایع قرار داشت (۲۲۰ میکرون)، تمرکز کشـش سـطحی بـر ابتدای پروب با بازوی گشتاور ماکزیمم بوجود آمـد کـه موجب تغییر شکل بیشتری شد. در مقابل، هنگامی که کل کانتیلور داخل مایع قرار گرفت، اثر کشش سطحی با بازوی گشتاور صفر از بین رفت و فقط نیروی درگ بـر منييوليشن تأثير داشت كه با توجـه بـه نيـروى كـم آن، تغييرات به وجود آمده ناچيز بود. با توجه به موارد مذکور می توان گفت که همان طور که در تحقیق Resch اشاره شد (۴)، نتایج درون آب تغییر چندانی

نسبت به محیط هوا ندارد. اما به دلیل تأخیر اندک ایجاد شده در زمان حرکت و کاهش شیب تغییرات نیرو میتوان گفت که منیبولیشن در محیط مایع دارای مزایایی نسبت به محیط هوا است.

البته در این تحقیق با فرض نانوذرهای از جنس طلا و نیز عدم وجود نمک و ذرات یون در محیط مایع، از سایر اثرات بین مولکولی در بر همکنش صرف نظر شده است. اما نتایج تجربی موجود اثبات میکنند که تأثیر کاهش نوسانات در محیط مایع را میتوان به عنوان مزیت منیپولیشن در این محیط برشمرد (۸).

در تحقیقات آینده می توان منیپولیشین ذرات نیرم و بیولوژیکی با اشکال متفاوت جینس های مختلف را در محیط واقعی با بررسی تأثیرات شرایط محیط سیال به لحاظ وجود نمکها و میزان یونیزاسیون آنها درون مایع که موجب تغییر نیروهای بین مولکولی موجود در محیط مایع می شود، بررسی نمود. همچنین با توجه به وابستگی نیروی درگ سیال به بعضی پارامترهای سیال نظیر ویسکوزیته و دانسیته، بررسی تغییرات این پارامترها نیز از اهمیت برخوردار هستند. در پایان لازم به یادآوری است که پیشرفت منیپولیشن در ابعاد نانو در محیط سیال نظیر روش های مبارزه با سرطان، رهایش دارو، تولید نانورباتهای درمان گر و بسیاری دیگر از محصولات مفید در این زمینه خواهد داشت که لزوم شناخت بیشتر محیط و خواص آن را نشان می دهد.

# References

- 1. Sitti M, Hashimoto H. Force controlled pushing of nanoparticles: modeling and experiments. Proceedings of IEEE/ASME International Conference. 1999.
- 2. Tafazzoli A, Sitti M. Dynamic Behavior and Simulation of Nanoparticle Sliding During Nanoprobe-Based Positioning. Proceedings of International Mechanical Engineering Congress

and Exposition. 2004 November 13 – 19; Anaheim, California; 2004. p. 965-72.

**3.** Habibnejad\_Korayem M, Zakeri M. Sensitivity analysis of nanoparticles pushing critical conditions in 2-D controlled nanomanipulation based on AFM. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology 2009; 41(7-8): 714-26.

- **4.** Resch R, Lewis D, Meltzer S, Montoya N, Koel BE, Madhukar A, et al. Manipulation of gold nanoparticles in liquid environments using scanning force microscopy. Ultramicroscopy 2000; 82(1-4): 135-9.
- **5.** Frank BP. Intermolecular Forces of Marine Adhesive Molecules. [PhD Thesis]. New York, NY: Rensselaer Polytechnic Institute; 2001.
- **6.** Jones RE, Hart DP. Force interactions between substrates and SPM cantilevers immersed in fluids. Tribology International 2005; 38(3):

355-61.

- **7.** Gauthier M, Regnier S, Rougeot P, Chaillet N. Forces analysis for micromanipulations in dry and liquid media. Journal of Micromechatronics 2006; 3(3-4): 389-413.
- 8. Gauthier M, Nourine M. Capillary Force Disturbances on a Partially Submerged Cylindrical Micromanipulator. IEEE Transactions on Robotics 2007; 23(3): 600-4.
- **9.** Israelachvili JN. Intermolecular and surface forces. 2<sup>nd</sup> ed. New York, NY: Academic Press; 2007.

مجله دانشکده پزشکی اصفهان – سال ۲۹ / شماره ۱۷۴ / ویژه نامه (مهندسی پزشکی) ۱۳۹۰

# Dynamic Modeling of 2D Nano-Manipulation based on Atomic Force Microscopy in Liquid Medium and Studying the Hydrodynamic and Geometric Parameters of the Model

Moharram Habibnejad Korayem PhD<sup>1</sup>, Maneezheh Zakeri PhD<sup>2</sup>, Ali Motaghi MSc<sup>2</sup>

# Abstract

**Background:** Dynamic behaviors of probe tip and nanoparticles have been investigated by modeling the manipulation of nanoparticles in the air using atomic force microscopy (AFM) as a nano manipulator. This study evaluated the manipulation of submerged nanoparticles in liquid environment.

**Methods:** The artificial nanoparticle manipulation was analyzed by theoretical analysis of forces in liquids and dynamics of spherical nanoparticle pushing. Hydrodynamic drag force and surface tension of the liquid were then calculated and used in the new dynamic modeling. The problem was simulated for a gold nanoparticle on a silicon substrate in water.

**Findings:** The results showed that the required manipulation force and time for nanoparticle sliding and rolling increased by respectively 7% and 3% in water as compared to the air. Moreover, for various submerged lengths of the cantilever in water, the critical values related to sliding and rolling were delayed for 9% and 10.5%, respectively.

**Conclusion:** The required critical force and time for the manipulation in water showed a little increase over the existing values for air.

Keywords: Nano-manipulation, Atomic force microscopy, Liquid medium

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Professor, Center of Excellence in Experimental Solid Mechanics and Dynamics, School of Mechanical Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Department of Mechanical Engineering, School of Mechanical Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

Corresponding Author: Moharram Habibnejad Korayem PhD, Email: hkorayem@iust.ac.ir