



بررسی هندسه‌های مختلف نانوذره‌ی طلا در جابه‌جایی فاز دوم منیپولیشن سه‌بعدی با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی

معین طاهری

دانشیار، مهندسی ساخت و تولید، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اراک، اراک

اراک، صندوق پستی ۳۸۴۸۱۷۷۵۸۴، m-taheri@araku.ac.ir

اطلاعات مقاله

چکیده

مقاله پژوهشی

دریافت: ۳۰ آذر ۱۴۰۱

داوری اولیه: ۸ دی ۱۴۰۱

پذیرش: ۴ اسفند ۱۴۰۱

کلیدواژگان:

نانوذره‌ی طلا

میکروسکوپ نیروی اتمی

منیپولیشن سه‌بعدی

فاز دوم

هندسه‌ی نانوذره

خواص شیمیایی پرکاربرد، رسانایی قابل توجه و خواص دارویی فلز طلا، سبب کاربرد این ماده در اکثر صنایع ساخت و تولید، الکترونیکی، هوافضا و پزشکی شده است. لذا شناخت ساختاری این فلز، توانایی مونتاژ آن در ابعاد اتمی و بهبود خواص این فلز گران‌بها در علوم نانو مورد توجه قرار گرفته است. به همین علت، امروزه محققان در طی فرایند منیپولیشن و با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی، سعی در شناخت نانوذره‌ی طلا برای کاربردی ساختن مطالعات صورت گرفته، داشته‌اند. در این مقاله با هدف بررسی نانوذره‌ی طلا در فاز دوم منیپولیشن، کاوش سطح به‌صورت تجربی توسط میکروسکوپ نیروی اتمی صورت پذیرفته است. شبیه‌سازی‌های صورت گرفته در محیط سه‌بعدی انجام شده است. از پارامترهای مهم مورد بررسی در این تحقیق، هندسه‌های مختلف نانوذره‌ی طلا شامل هندسه‌ی کروی، استوانه‌ای و استوانه‌ای پخ‌خورده و همچنین نتایج حاصل از شبیه‌سازی با مدل‌های تماسی با هندسه‌های مختلف در فاز دوم منیپولیشن بررسی شده است. مطالعات در دو راستای x و y انجام شده است. جابه‌جایی نانوذره‌ی طلا، با ترسیم نمودارهای نیرو، شتاب و سرعت بررسی شده است و در نهایت با بررسی نمودارهای حاصل با در نظر گرفتن مدل تماسی هرتز، بیشترین جابه‌جایی برای شبیه‌سازی فرایند هندسه‌ی کروی و کمترین مقدار برای مدل تماسی با هندسه‌ی استوانه‌ای پخ‌خورده محاسبه شده است. همچنین میزان جابه‌جایی در راستای محور x برای استوانه و استوانه‌ای پخ‌خورده به‌ترتیب حدود $2/5$ و $3/6$ برابر جابه‌جایی در راستای محور y بوده است.

Investigation of different geometry of gold nanoparticles in the displacement of the second phase of three-dimensional manipulation using an AFM

Moein Taheri

Department of Manufacturing, Faculty of Engineering, Arak University, Arak, Iran.
P.O.B. 3848177584, Arak, Iran, m-taheri@araku.ac.ir

Article Information

Original Research Paper
Received: 21 December 2022
First Decision: 29 December 2022
Accepted: 23 February 2023

Keywords:

Gold Nanoparticles
AFM
Three-Dimensional Manipulation
Second Phase
Nanoparticle Geometry

Abstract

The widely used chemical properties, significant conductivity, and medicinal properties of gold have led to the use of this material in most manufacturing, electronic, aerospace, and medical industries. Therefore, understanding the structure of this metal, the ability to assemble it in atomic dimensions, and improving the properties of this precious metal have been considered in nanoscience. For this reason, today researchers have tried to identify gold nanoparticles during the manipulation process and use an atomic force microscope to make the studies practical. In this article, to investigate the gold nanoparticle in the second phase of manipulation, the surface is explored experimentally by an atomic force microscope. The simulations have been done in a 3D environment. Among the important parameters investigated in this research, different geometries of gold nanoparticles, including spherical, cylindrical, and crowned rollers geometries, as well as the results of simulation with contact models with different geometries in the second phase of manipulation have been investigated. Studies have been carried out in two directions, x and y . The displacement of the gold nanoparticle has been investigated by drawing force, acceleration, and velocity diagrams, and finally, by examining the resulting diagrams considering the Hertz contact model, the maximum displacement has been calculated for simulating the process of spherical geometry and the lowest value for the contact model with crowned rollers geometry. Also, the amount of displacement along the x -axis for the cylinder and crowned rollers was about 3.5 and 3.6 times the displacement along the y -axis, respectively.

Please cite this article using:

M. Taheri, Investigation of different geometry of gold nanoparticles in the displacement of the second phase of three-dimensional manipulation using an AFM, Iranian Journal of Manufacturing Engineering, Vol. 9, No. 8, pp. 1- 11, 2022 (in Persian). <https://www.doi.org/10.22034/IJME.2023.377684.1729>

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

۱- مقدمه

نانوذره‌ی طلا با دارا بودن خواص شیمیایی و فیزیکی خود نظیر فلزات مهم در صنایع ساخت و تولید، الکتریکی، هوافضا و پزشکی می‌باشد. از جمله پیشرفت‌های قابل ملاحظه در این مورد، می‌توان به کاربرد پزشکی این ذره در تشخیص و درمان سرطان اشاره نمود؛ لذا استفاده از این ذره، لزوم شناخت ساختار آن را فراهم می‌آورد.

توانایی جابه‌جایی و قرار دادن این ذره در طی فرایند منیپولیشن مورد بررسی قرار گرفته است. تمامی روند منیپولیشن با ابزاری به نام میکروسکوپ نیروی اتمی انجام می‌شود. فرایند منیپولیشن با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی شامل دو فاز می‌باشد.

در فاز نخست به بررسی استاتیکی فرایند تا قبل از حرکت نانوذره‌ی هدف و در فاز دوم به مطالعات دینامیکی و بررسی ذره‌ی هدف در حین حرکت پرداخته می‌شود. مطالعات اخیر در این حوزه به بررسی پارامترهای تماسی، اصطکاکی و هندسی این ذره در فاز نخست منیپولیشن پرداخته و نیرو و زمان بحرانی را تحت این عوامل محاسبه کرده است. به‌منظور رسیدن به اهداف صنعتی و پزشکی در این حوزه باید عوامل مؤثر بر فرایند جابه‌جایی در فاز دوم نیز مورد تحلیل قرار گیرد.

اسپرلینگ و همکاران [۱] مروری بر کاربردهای مختلف نانوذره‌ی طلا داشته‌اند. بدین منظور مکانیسم و ویژگی‌های نانوذره‌ی طلا را برای استفاده در هر یک از کاربردها مورد بررسی قرار داده‌اند. گاش و همکاران [۲] کاربرد نانوذرات طلا را در حوزه‌ی پزشکی و به‌عنوان حامل‌های غیرسمی برای موارد دارویی و انتقال ژن بررسی و به علل استفاده از این ذره در این حوزه اشاره کرده‌اند. دریدن و همکاران [۳] اطلاعاتی در مورد طراحی، سنتز، عملکرد و کاربردهای نانوذره‌ی طلا در پزشکی ارائه نمودند به بررسی کاربردهای آن در دستیابی به بهبود سلامت بیمار پرداخته‌اند. ساردار و همکاران [۴] پیشرفت‌های اخیر در استفاده از نانوذرات طلا را مورد تحلیل قرار داده‌اند. آن‌ها به برخی از این کاربردها مانند، استفاده از طلا به‌عنوان یک نانوذره‌ی کاتالیزوری، ساخت شبکه‌ها و فیلم‌های طلای محافظت شده و سایر موارد اشاره نموده‌اند. همچنین سنتز، الکتروشیمی و خواص نوری نانوذرات طلا را مورد تحلیل قرار داده‌اند.

استاندر و همکاران [۵] به ارائه مزایای بی‌شماری نانوذره‌ی طلا نسبت به نانومواد مختلف پرداخته‌اند. آن‌ها بیان نموده‌اند که تولید نانوذرات طلا با اندازه‌ها و شکل‌های بی‌شمار، امکان اصلاح سطح ذرات نانو طلا، زیست‌سازگاری خوب و الگوهای توزیع

زیستی قابل کنترل، از جمله این مزایا می‌باشد. همچنین آن‌ها پیشرفت‌های اخیر را در درمان سرطان با استفاده از نانوذره‌ی طلا ارائه داده‌اند. سینگه و همکاران [۶] پیشرفت‌های اخیر در کاربرد نانوذرات طلا در درمان سرطان با تشخیص تومور، تحویل دارو، تصویربرداری، درمان نوری، فوتودینامیک و محدودیت‌های آن‌ها را ارائه داده‌اند. همچنین مزایای این ذره را نسبت سطح به حجم بالا، تشدید پلاسما، شیمی سطح و چند عاملی شدن، سنتز آسان و طبیعت پایدار، ماهیت غیرسمی و غیرایمنی‌زایی نانوذرات طلا، نفوذپذیری، اثر ماندگاری بالا با امکان نفوذ و تجمع آسان داروها در محل‌های تومور معرفی نموده‌اند. ژانگ و همکاران [۷] با توجه به کاربرد فراوان نانوذره‌ی طلا در علوم زیستی و دارویی به بررسی پارامتر شیمی سطح این ذره به‌منظور عملی کردن این کاربردها پرداخته‌اند. این مطالعه بدان دلیل است که شیمی سطح می‌تواند دقیقاً خواص سطحی نانوذرات طلا را برای رفع نیازهای کاربردها کنترل و تنظیم کند.

کورایم و طاهری [۸] تأثیر نیروی چسبندگی در مدل‌های تماس مختلف را بر عمق فرورفتگی و زاویه تماس بین سوزن و صفحه مینا برای میکرو/نانوذره‌ی بیولوژیکی مورد بررسی قرار داده‌اند. ذرات هدف شامل میکرو/نانوذرات زیستی دی‌ان‌ای، مخمر، پلاکت و نانوباکتری است. همچنین تغییر شکل ذرات زیستی مورد مطالعه با نانوذرات طلا مقایسه شده‌اند. کورایم و همکاران [۹] به استخراج معادلات منیپولیشن حاکم بر ذره و شبیه‌سازی آن پرداخته‌اند. آن‌ها برای تعیین نیروی بحرانی و زمان بحرانی فاز اول منیپولیشن، نانوذرات طلا، مخمر و پلاکت را در محیط‌های گاز، مایع، الکل و پلاسما بررسی نموده‌اند. از نکات مهم این تحقیق کنترل کاوشگر میکروسکوپ نیروی اتمی در محیط‌های آب، الکل و پلاسما با استفاده از روش کنترل حالت لغزشی بوده است. طاهری [۱۰] با استفاده از مدل اصطکاکی اچ‌کا به مدل‌سازی و شبیه‌سازی دینامیک سه‌بعدی نانوذره‌ی طلا پرداخته است. هدف از این تحقیق محاسبه نیرو و زمان بحرانی جابه‌جایی بوده است. نتایج به‌دست آمده نشان‌دهنده شروع به حرکت غلتشی ذره‌ی مورد بررسی حول محور x قبل از غلتش حول محور y و همچنین لغزش در راستای محور y قبل از لغزش در راستای محور x است. طاهری [۱۱] به توسعه مدل‌های تماسی هرتز، جی‌کآر، بی‌سی‌پی و دی‌ام‌تی در شبیه‌سازی سه‌بعدی نانوذره‌ی طلا پرداخته است. هدف از این تحقیق به‌دست آوردن نیرو و زمان بحرانی در منیپولیشن نانوذره‌ی طلا بوده است. همچنین بررسی محتمل‌ترین مد حرکتی در طی فرایند منیپولیشن نیز مورد بررسی قرار گرفته است.

ونگ-تانگ-ژو-ژو به بررسی عمق فرورفتگی در هنگام تماس برای هندسه‌ی کروی و بیضوی در مکانیک تماس پرداخته‌اند. با مقایسه‌ی هندسه‌های کروی و بیضوی، عمق فرورفتگی برای هندسه کروی بیشتر از هندسه بیضوی بوده است که دلیل آن وجود خروج از مرکز در مدل‌های تماس بیضوی است که در هندسه کروی وجود ندارد. همچنین بر اساس کار تجربی موجود، جنگ-وانگ مناسب‌ترین مدل برای اعمال در نقطه تماس ذره-صفحه مینا است. همچنین عمق فرورفتگی برای چهار ماده و با در نظر گرفتن مکانیک‌های تماس محاسبه و با یکدیگر مقایسه شده‌اند. طاهری و میرزالو [۱۹] بافت سرطانی سینه را توسط میکروسکوپ نیروی اتمی و در طی فرایند نانومنیپولیشن مورد کاوش قرار داده‌اند. در شبیه‌سازی‌های انجام شده، مدل‌های تماسی هرتز، پی‌تی و سی‌اس در نظر گرفته شده‌اند و پس از محاسبه نیرو و زمان بحرانی، مقدار مدول یانگ بافت سرطانی سینه نیز محاسبه شده است.

بطحایی و طاهری [۱۹] به بررسی پارامترهای محیطی و ابعادی بر روی نیرو و زمان بحرانی فرایند منیپولیشن نانوذرات با استفاده از تئوری مکانیک تماس دی‌ام‌تی پرداخته‌اند. فریدونی و همکاران [۲۰] به بررسی میزان اثرگذاری پارامترهای مختلف بر نیرو در فاز دوم نانومنیپولیشن دوبعدی پرداخته‌اند. خلیلی و همکاران [۲۱] به بررسی منیپولیشن نانوذرات دی‌ان‌ای با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی بر اساس روش اجزای محدود با استفاده از نظریه‌های مکانیک تماس پرداخته‌اند.

طاهری [۲۲] کاربرد میکروسکوپ نیروی اتمی در استخراج نیروی بحرانی و زمان بحرانی منیپولیشن دوبعدی برای بافت سرطان معده با مدل‌های مختلف اصطکاکی را مورد مطالعه قرار داده است. کورایم و همکاران [۲۳] تغییر شکل نانوذرات طلا تحت تأثیر منیپولیشن سه‌بعدی و اثر زاویه‌ای بر مبنای مکانیک تماس با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی را بررسی نموده‌اند. همان‌طور که در مطالعه پژوهش‌های گذشته مشاهده شد، کاربردهای مختلف نانوذره طلا در صنایع مختلف و به‌ویژه ساخت و تولید و پزشکی، از اهمیت بالایی برخوردار می‌باشد. لذا تحقیقاتی در حوزه نانو و به‌خصوص در فاز اول نانومنیپولیشن درباره این ذره انجام شده و پارامترهای مختلفی از جمله نیروهای تماسی، پارامترهای هندسی تیرک و سایر موارد برای به‌دست آوردن نیرو و زمان بحرانی در فاز اول مورد تحلیل قرار گرفته‌اند؛ بنابراین در این مقاله، به‌منظور بررسی هدفمند و برای رسیدن به جابه‌جایی نانوذره طلا حین منیپولیشن، فاز دوم مورد بررسی قرار گرفته است. شبیه‌سازی‌های صورت گرفته در محیط

غفرانی و همکاران [۱۲] محیطی مجازی برای مشاهده روند فرایند منیپولیشن ارائه داده‌اند. بدین منظور تصاویر ثبت شده از میکروسکوپ نیروی اتمی پردازش شده و شبیه‌سازی‌های لازم جهت به‌دست آوردن نیرو و زمان بحرانی انجام شده است. همچنین هندسه‌های مختلف تیرک میکروسکوپ نیروی اتمی در این شبیه‌سازی استفاده شده است. طاهری [۱۳] با استفاده از آنالیز حساسیت سوئل به بررسی اثر پارامترهای محیطی بر نیرو و زمان بحرانی لغزشی و غلتشی در طی فرایند منیپولیشن پرداخته است. پارامترهای مورد بررسی شامل مدول الاستیسیته تیرک، نسبت پواسون تیرک، مدول الاستیسیته ذره، نسبت پواسون ذره، انرژی سطحی و کار چسبندگی بوده است. در نهایت نیز فاکتور مدول الاستیسیته تیرک اثرگذارترین فاکتور بر نیروهای بحرانی، نسبت پواسون تیرک دومین فاکتور اثرگذار بر نیروهای بحرانی و فاکتورهای انرژی سطحی و کار چسبندگی، کم‌اثرترین فاکتور بر نیروهای بحرانی محاسبه شده‌اند. همچنین فاکتور نسبت پواسون تیرک اثرگذارترین فاکتور بر زمان‌های بحرانی منیپولیشن سه‌بعدی در بازه‌های مورد بررسی بوده است. صادق‌زاده و کورایم [۱۴] مکانیسم منیپولیشن خودکار با توسعه دینامیک مولکولی کلاسیک به درشت دانه را مورد بررسی قرار داده‌اند. فرایند با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی مدل‌سازی و تخریب سوزن به‌عنوان مهم‌ترین عامل در خطای فرایند ارائه شده است. طاهری [۱۵] با استفاده از مدل‌های اصطکاکی لاگره، اچ‌کا و کولمب، به شبیه‌سازی فرایند منیپولیشن بافت سرطانی روده پرداخته است. شبیه‌سازی صورت گرفته به‌صورت سه‌بعدی بوده و در نهایت مطلوب‌ترین مقدار برای نیرو و زمان بحرانی با توجه به مدل‌های اصطکاکی تعیین شده است.

کورایم و همکاران [۱۶] با استفاده از مدل تماسی جی‌کار به بررسی منیپولیشن دی‌ان‌ای پرداخته‌اند. مطالعات انجام شده در محیط هوا و مایع بوده و نیروی اعمالی برای تغییر شکل دی‌ان‌ای با نانوذره طلا مقایسه شده و نیروی کمتری نسبت به ذره‌ی طلا برای تغییر شکل محاسبه شده است. کورایم و خاکسار [۱۷] مدل‌سازی دینامیکی و شبیه‌سازی نانوذرات مکعبی و بیضوی را در منیپولیشن بر اساس میکروسکوپ نیروی اتمی مورد تحقیق قرار داده‌اند. با استفاده از تئوری‌های هرتز، جی‌کار، جماری و همچنین رابطه تقریبی ضربه هانتر، اثرات ضربه در حرکت نیز در نظر گرفته شده است. در نهایت نتایج پس از ۳ ثانیه و تحت نیروهای ثابت، خطی، مرتبه دوم و سینوسی برای نانوذره بیضوی و مکعبی محاسبه شده است. کورایم و همکاران [۱۸] با استفاده از چهار مدل تماس شامل هرتز، جماری، جنگ-وانگ و

- استفاده از سه هندسه‌ی مختلف کروی، استوانه‌ای و استوانه‌ای پخ‌خورده، به‌منظور نزدیک شدن به هندسه واقعی.

۲- مدل‌سازی

در این بخش مطالعات جامعی در خصوص معادله تماسی مدل هرترز با در نظر گرفتن هندسه‌های مختلف کروی، استوانه‌ای و استوانه‌ای پخ‌خورده و همچنین معادلات منیپولیشن سه‌بعدی نانوذره طلا صورت گرفته است. شکل ۱ فرآیند کلی کار را نشان می‌دهد.

سه‌بعدی و با در نظر گرفتن هندسه‌های مختلف برای نانوذره طلا انجام شده است. تصاویر ثبت شده توسط میکروسکوپ نیروی اتمی نیز در این تحقیق ارائه شده است. در نهایت نیز نمودارهای جابه‌جایی با در نظر گرفتن هندسه‌های کروی، استوانه‌ای و استوانه‌ای پخ‌خورده مورد تحلیل قرار گرفته‌اند. از نوآوری‌های اصلی این پژوهش نسبت به کارهای گذشته می‌توان به موارد ذیل اشاره نمود:

- مطالعه تجربی بر روی نانوذره طلا جهت بررسی و تخمین شکل و ابعاد نانوذره.
- بررسی فاز دوم نانومنیپولیشن به‌صورت سه‌بعدی برای نانوذره طلا جهت دقیق‌تر شدن نتایج.

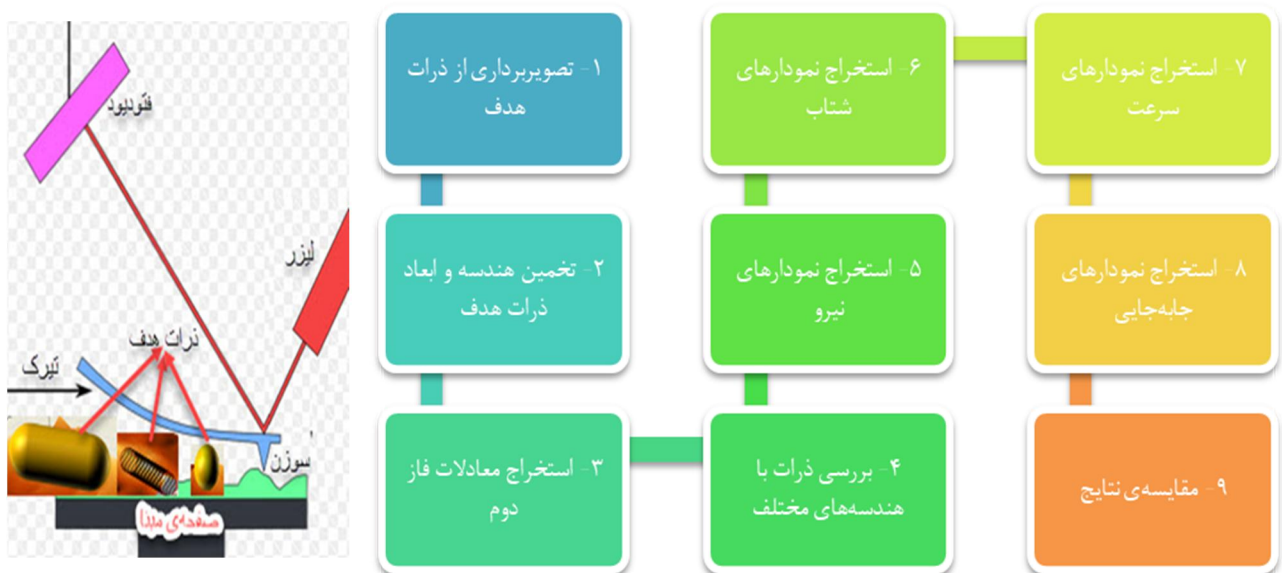


Fig. 1 General work process

شکل ۱ فرآیند کلی کار

۲-۱- فاز دوم منیپولیشن سه‌بعدی

فرآیند منیپولیشن بدین‌صورت می‌باشد که با استفاده از ابزاری به نام میکروسکوپ نیروی اتمی جابه‌جایی و دست‌کاری در ابعاد میکرو/نانو انجام می‌شود. میکروسکوپ نیروی اتمی از دو بخش اصلی تیرک و سوزن تشکیل شده است. ذرات هدف نیز بر روی صفحه مبنا قرار می‌گیرند.

در شروع حرکت نوک سوزن در مدهای تماسی، غیر تماسی و یا ضربه‌ای قرار گرفته و بین سوزن-ذره و همچنین ذره-صفحه مبنا تماس برقرار می‌شود. نیروی لازم بر تیرک وارد شده و روند افزایش نیرو تا زمان غلبه بر نیروهای مقاوم ادامه می‌یابد. در لحظه‌ای که ذره شروع به حرکت می‌کند، هدف فاز اول

حاصل شده و نیرو و زمان بحرانی ثبت می‌شوند. در ادامه و با قرار گرفتن ذره در فاز دوم منیپولیشن، پارامترهای مؤثر بر حرکت تا رسیدن به هدف مورد بررسی قرار می‌گیرند.

معادلات ۱ تا ۳ نشان‌دهنده روابط حاکم بر نیرو در منیپولیشن سه‌بعدی می‌باشند [۲۴]. F_x ، F_y و F_z به ترتیب نیروهای وارده از طرف تیرک به انتهای سوزن در راستاهای محورهای x ، y و z بوده و M_x و M_y گشتاورهای وارده از طرف تیرک به انتهای سوزن را نمایش داده است. همچنین F_x ، F_y و F_z نیروهای وارده از طرف ذره هدف به نوک سوزن را در راستاهای محورهای x ، y و z نشان داده است.

شکل ۲ نیز نشان‌دهنده پارامترهای استفاده شده در معادلات می‌باشد و پارامترهای هندسی و نیروهای وارده در مینیولیشن سه‌بعدی نانوذره‌ی استوانه‌ای طلا در آن نمایش داده شده است.

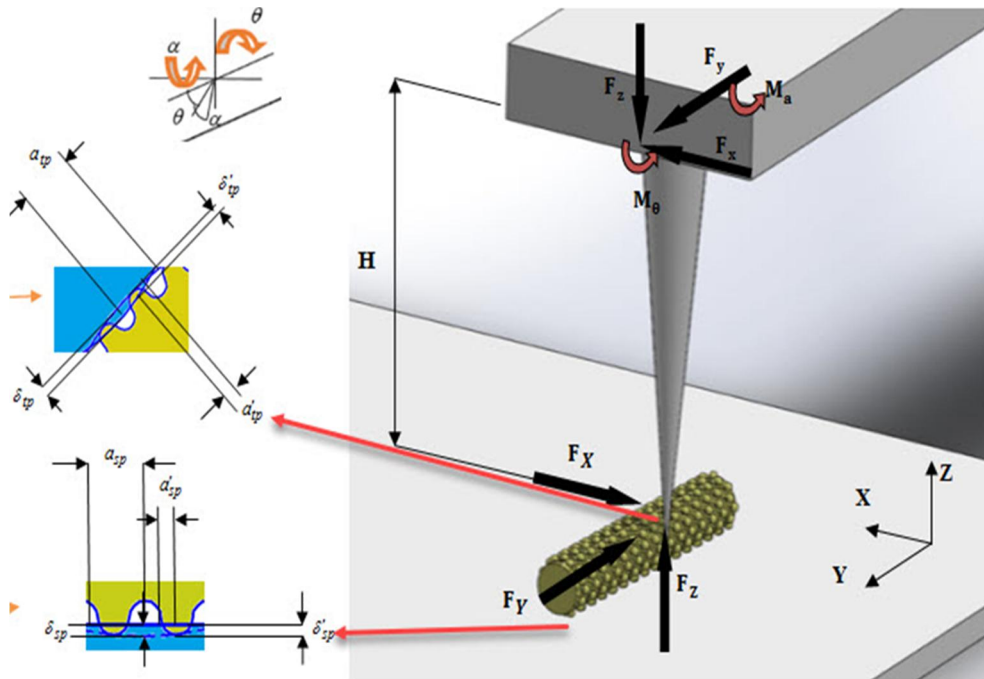


Fig. 2 Geometrical parameters of gold nanoparticle 3D manipulation

شکل ۲ پارامترهای هندسی مینیولیشن سه‌بعدی نانوذره‌ی طلا

$$F_X = F_x + m \times \left(\ddot{x}_s - \ddot{\delta}_t \cos \varphi \cos \psi + \frac{H \ddot{\alpha} \cos \alpha - H \dot{\alpha}^2 \sin \alpha}{2} \right) \quad (1)$$

$$F_Z = F_z \cos^2 \alpha + m \cos^2 \alpha \times \left(\frac{\ddot{z}_s - \ddot{\delta}_t \sin \varphi - \ddot{\delta}_s + \frac{-H \ddot{\alpha} \sin \alpha \cos \theta - H(\dot{\theta}^2 + \dot{\alpha}^2) \cos \alpha \cos \theta}{2}}{-\frac{H \ddot{\theta} \cos \alpha \sin \theta}{2}} \right) + \left(\frac{I_p \ddot{\alpha} + M_\alpha}{H} \right) \sin \theta + F_x \sin \alpha \cos \alpha \quad (2)$$

$$F_Y = F_y \sin^2 \theta + m \sin^2 \theta \times \left(\frac{\ddot{y}_s - \ddot{\delta}_t \cos \varphi \sin \psi - \ddot{\delta}_s}{+\frac{-H \ddot{\theta} \cos \theta + H \dot{\theta}^2 \sin \theta}{2}} \right) + \left(\frac{I_p \ddot{\theta} + M_\theta}{H} \right) \cos \theta - F_z \sin \theta \cos \theta \quad (3)$$

۲-۲-۱- ذرات کروی

معادلات تماسی برای ذرات کروی بدون در نظر گرفتن ناحیه تماس، به صورت معادلات ۴ تا ۶ ارائه می‌شوند [۲۵] که به ترتیب نیروی تماسی، شعاع تماسی و عمق نفوذ تماس می‌باشند.

$$F_{(adh)Hertz} = 0 \quad (4)$$

$$a_{Hertz} = \left(\frac{\bar{R}F}{K} \right)^{1/3} \quad (5)$$

۲-۲-۲- مدل تماسی هرتز

در مقیاس نانو، تماس ذرات در دو ناحیه تماس بین ذره و سوزن و تماس بین ذره و صفحه‌ی مبنا صورت می‌پذیرد. مدل هرتز، اولین مدل تماسی در نظر گرفته شده برای ذرات نانو بوده که از فرضیات ساده‌ای استفاده کرده است. در این بخش معادلات این مدل در هندسه‌های کروی، استوانه‌ای و استوانه‌ای پخ‌خورده ارائه شده است.

$$F_{(adh)Hertz} = 0 \quad (16)$$

$$a_{Hertz} = \left(\frac{(R_p \times R_t)[P_z \cos \varphi + P_y \sin \varphi]}{(R_p + R_t)K} \right)^{1/3} \quad (17)$$

$$\delta_{Hertz} = \frac{a^2(R_p + R_t)}{2(R_p \times R_t)} \left\{ 2 \ln \left(4 \frac{R_p \times R_t}{R_p + R_t} \right) / a - 1 \right\} \quad (18)$$

روابط تماسی برای تماس ذره و صفحه مینا نیز به صورت معادلات ۱۹ تا ۲۱ بازنویسی شده‌اند.

$$F_{(adh)Hertz} = 0 \quad (19)$$

$$a_{Hertz} = \frac{4PR}{\pi E^*} \quad (20)$$

$$\delta_{Hertz} = \frac{a^2 R_p}{2} \left\{ 2 \ln(4R_p/a) - 1 \right\} \quad (21)$$

۲-۲-۳- ذرات استوانه‌ای یخ‌خورده

هندسه این ذرات به صورت مجموع هندسه کروی و استوانه‌ای در نظر گرفته می‌شود. معادله عمق نفوذ به صورت رابطه ۲۲ محاسبه خواهد شد [۲۷].

$$\delta_{Hertz} = \frac{P - 2(\pi \kappa E' \left[\frac{2\epsilon R}{9} \left(\frac{\delta_c}{\zeta} \right)^3 \right]^{1/2})}{2C\pi E'} \times \left\{ \ln \frac{8CR\pi E'}{P - 2(\pi \kappa E' \left[\frac{2\epsilon R}{9} \left(\frac{\delta_c}{\zeta} \right)^3 \right]^{1/2})} - 1 \right\} s \quad (22)$$

۲-۳- نتایج تجربی

در این پژوهش ابتدا با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی تصاویری از صفحه‌ی مینا و نانوذرات طلای موجود بر روی آن به صورت تجربی استخراج شده است. با توجه به تصاویر به دست آمده از میکروسکوپ نیروی اتمی، شکل‌های مختلفی برای بررسی نانوذره‌ی طلا در نظر گرفته شده است. همچنین با استفاده از این تصاویر، ابعاد هندسی برای شکل‌های مختلف تخمین زده شده است. سپس با استفاده از هندسه‌های مختلف، نتایج فاز دوم منیپولیشن، با استفاده از مدل‌های تماسی توسعه‌یافته، مورد بررسی قرار گرفته است.

در شکل ۳ تصاویر ثبت شده توسط میکروسکوپ نیروی اتمی، هنگام کاوش سطح نانوذره‌ی طلا آورده شده است. هندسه نانوذره‌ی طلا با توجه به شکل ۳، به صورت کروی، استوانه‌ای و

$$\delta_{Hertz} = \frac{a_{Hertz}^2}{R} \quad (6)$$

با در نظر گرفتن تماس بین ذره-سوزن معادلات ۴ تا ۶ به صورت زیر بازنویسی خواهند شد. در معادلات ۷ تا ۹ نیروی اعمالی و شعاع برآیند به صورت $F = P_z \cos \varphi + P_y \sin \varphi$ و $\bar{R} = \frac{R_p \times R_t}{R_p + R_t}$ در نظر گرفته خواهند شد.

$$F_{(adh)Hertz} = 0 \quad (7)$$

$$a_{Hertz} = \left(\frac{(R_p \times R_t)[P_z \cos \varphi + P_y \sin \varphi]}{(R_p + R_t)K} \right)^{1/3} \quad (8)$$

$$\delta_{Hertz} = \frac{a_{Hertz}^2 (R_p + R_t)}{R_p \times R_t} \quad (9)$$

با اعمال فرض تماس بین ذره و صفحه مینا و در نظر گرفتن نیرو و شعاع معادل ذره به صورت $F = P_z$ و $\bar{R} = R_p$ معادلات ۱۰ تا ۱۲ ارائه شده‌اند.

$$F_{(adh)Hertz} = 0 \quad (10)$$

$$a_{Hertz} = \frac{4PR}{\pi E^*} \quad (11)$$

$$\delta_{Hertz} = \frac{a_{Hertz}^2}{R_p} \quad (12)$$

۲-۲-۲- ذرات استوانه‌ای

با تغییر هندسه نانوذره به هندسه استوانه‌ای معادلات تماسی به صورت روابط ۱۳ تا ۱۵ بازنویسی شده‌اند. پارامترهای δ_{Hertz} عمق نفوذ، شعاع تماس، شعاع ذره، نیروی اعمال شده خارجی، طول استوانه، E^* مدول الاستیسیته مؤثر $\frac{1}{E^*} = \frac{m_t}{2} \left(\frac{1-\nu_1^2}{E_1} + \frac{1-\nu_2^2}{E_2} \right)$ و ν_1 و ν_2 نسبت‌های پواسون دو سطح در تماس تعریف شده‌اند [۲۶].

$$F_{(adh)Hertz} = 0 \quad (13)$$

$$a_{Hertz} = \left(\frac{\bar{R}F}{K} \right)^{1/3} \quad (14)$$

$$\delta_{Hertz} = \frac{a^2}{2R} \left\{ 2 \ln(4R/a) - 1 \right\} \quad (15)$$

معادلات تماسی هرگز برای ذرات استوانه‌ای، در تماس ذره-سوزن میکروسکوپ نیروی اتمی به صورت روابط ۱۶ تا ۱۸ در نظر گرفته می‌شوند.

تخمین زده شده، موجود خواهد بود. از جمله این تفاوت‌های عملکردی می‌توان به وجود ناهمواری‌هایی بر روی سطوح که موجب تغییرات نیروی اصطکاکی و یا تغییراتی در نیروی چسبندگی می‌گردد، اشاره نمود.

استوانه‌ای پخ‌خورده در نظر گرفته شده است. شایان ذکر است که در واقعیت، شکل نانوذرات به‌صورت شکل‌های غیرهندسی می‌باشد که به‌دلیل عدم موجود بودن تئوری‌های تماسی برای آن‌ها، از هندسه‌های تخمینی در این مقاله استفاده شده است. لذا در کارهای تجربی مسلماً اختلافاتی با توجه به تئوری‌های تماسی

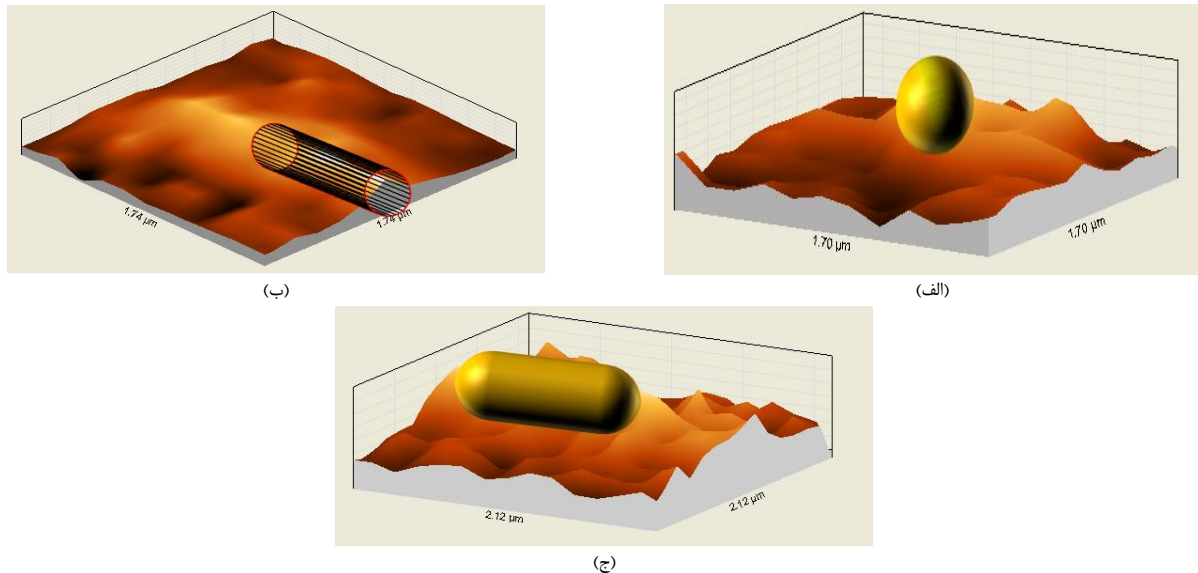


Fig. 3 Different geometries considered for the gold nanoparticle (a) spherical (b) cylindrical (c) crowned roller

شکل ۳ هندسه‌های مختلف در نظر گرفته شده برای نانوذره‌ی طلا (الف) کروی (ب) استوانه‌ای (ج) استوانه‌ای پخ‌خورده

۳- نتایج و بحث

در شکل ۵، بررسی جابه‌جایی در راستای Y صورت پذیرفته است. روند افزایشی پارامترهای نیرو، شتاب، سرعت و جابه‌جایی نیز در این راستا نمایش داده شده است. همانند راستای X ، در این راستا هم میزان جابه‌جایی برای هندسه کروی بیش‌ترین مقدار را دربرگرفته است.

در شکل ۶، مقایسه بین جابه‌جایی در دو راستای X و Y ، برای سه هندسه کروی، استوانه‌ای و استوانه‌ای پخ‌خورده صورت گرفته است. همان‌طور که مشاهده می‌شود برای هندسه کروی، جابه‌جایی در دو راستا یکسان می‌باشد که این امر ناشی از تقارن کره و شکل یکسان آن نسبت به دو محور X و Y است. همچنین مقدار جابه‌جایی در راستای Y برخلاف راستای X برای هندسه‌های استوانه‌ای و استوانه‌ای پخ‌خورده، میزان کمتری می‌باشد که دلیل این امر را می‌توان ناشی از تخت بودن سطح تماس در این راستا و در نتیجه افزایش نیروهای مقاوم اصطکاکی و چسبندگی بین ذرات هدف و صفحه مینا دانست که موجب جابه‌جایی کمتر در این راستا می‌گردد. برای استوانه در راستای محور X جابه‌جایی حدود $3/5$ برابر بیشتر از جابه‌جایی در راستای محور Y بوده است و برای استوانه‌ای پخ‌خورده، در

همان‌طور که پیش‌ازین اشاره شده است، منیپولیشن در دو فاز انجام می‌گیرد. فاز اول قبل از شروع حرکت و به‌منظور محاسبه‌ی نیرو و زمان بحرانی و فاز دوم به‌منظور بررسی حرکت ذره می‌باشد. در این پژوهش، فاز دوم منیپولیشن در نظر گرفته شده و جابه‌جایی ذره به‌صورت سه‌بعدی مطالعه شده است؛ لذا بررسی‌های صورت گرفته در هر دو راستای X و Y انجام شده است.

در شکل ۴ نتایج حاصل از شبیه‌سازی برای نیروی وارده در راستای X ، با در نظر گرفتن هندسه‌های مختلف برای نانوذره‌ی طلا ترسیم شده است. هدف از این مقاله بررسی جابه‌جایی ذره در فاز دوم نانومنیپولیشن می‌باشد، لذا بعد از شبیه‌سازی نیرو، به بررسی شتاب، سرعت و در نهایت جابه‌جایی در راستای X پرداخته شده است. در تمامی نمودارهای شکل ۴ روند افزایشی پارامترها با افزایش زمان مشاهده شده است. همچنین میزان جابه‌جایی در راستای X برای هندسه کروی بیش‌ترین مقدار و برای هندسه استوانه‌ای پخ‌خورده کمترین میزان را نمایش داده است.

راستای محور X جابه‌جایی حدود ۳/۶ برابر بیشتر از جابه‌جایی در راستای محور Y بوده است.

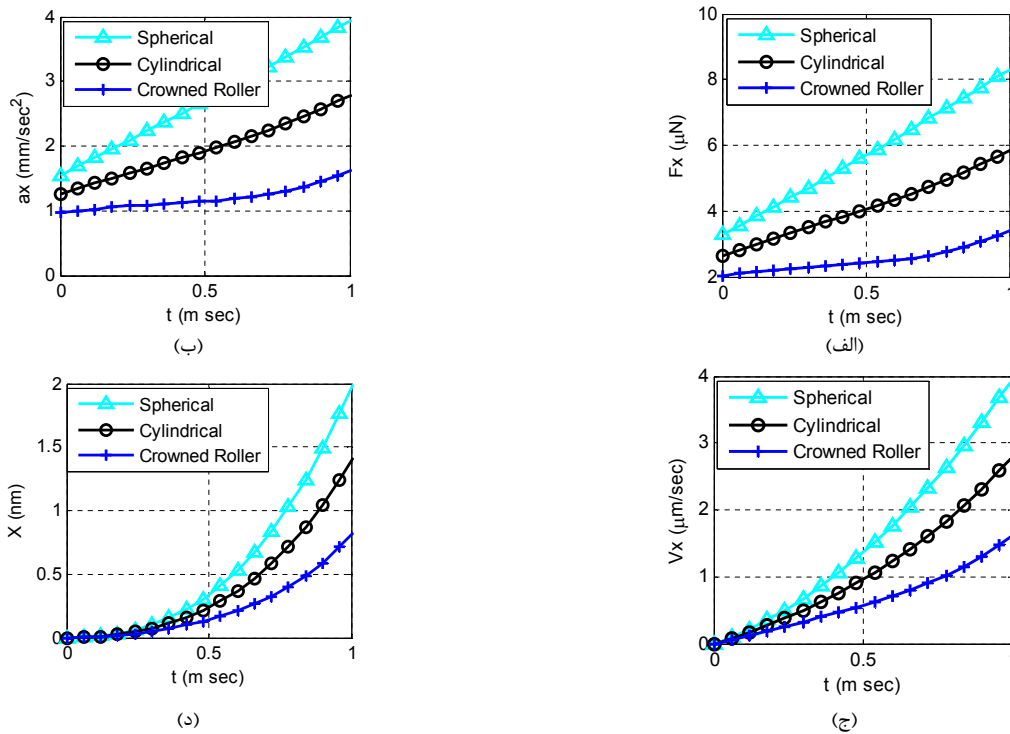


Fig. 4 The results of the second phase of gold nanoparticle manipulation against x axis (a) Force, (b) Acceleration, (c) Velocity, (d) Position

شکل ۴ نتایج فاز دوم مینیولیشن نانوذره‌ی طلا در راستای محور X (الف) نیرو، (ب) شتاب، (ج) سرعت، (د) موقعیت

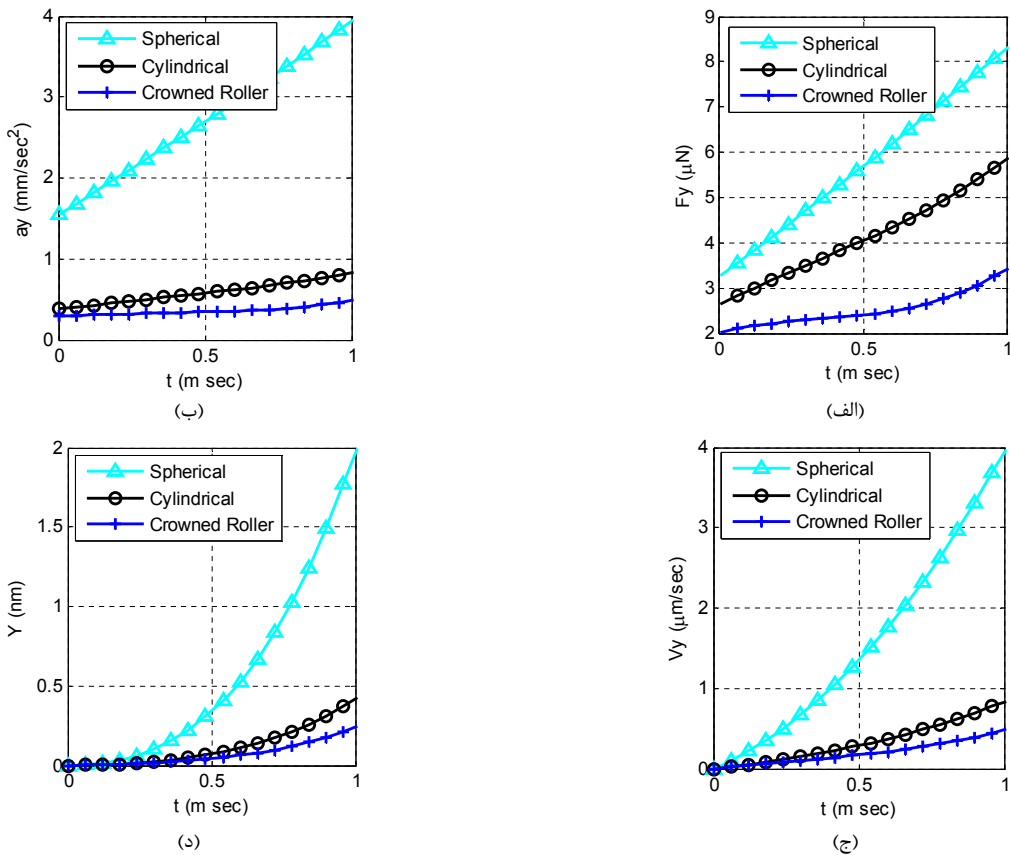


Fig. 5 The results of the second phase of gold nanoparticle manipulation against y axis (a) Force, (b) Acceleration, (c) Velocity, (d) Position

شکل ۵ نتایج فاز دوم مینیولیشن نانوذره‌ی طلا در راستای محور Y (الف) نیرو، (ب) شتاب، (ج) سرعت، (د) موقعیت

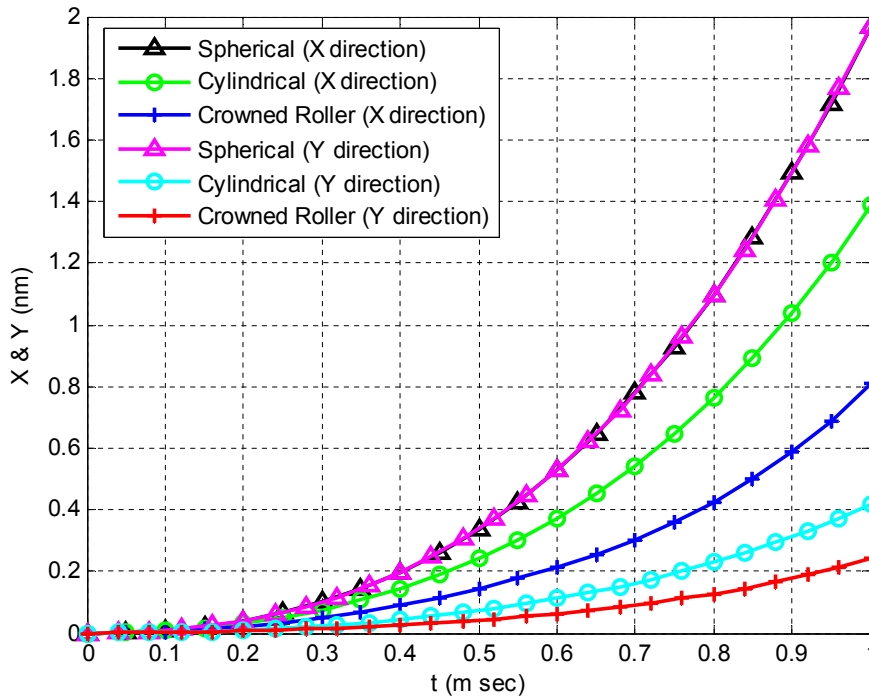


Fig. 6 Comparison of displacement in two x and y axes for different geometries

شکل ۶ مقایسه‌ی جابه‌جایی در دو راستای محورهای X و Y برای هندسه‌های مختلف

۴- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در این مقاله نانوذره‌ی طلا با توجه به گستردگی کاربرد در صنایع مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. لذا این ذره در طی فرایند نانومنیپولیشن و با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی مورد کاوش قرار گرفته است. از اهداف مورد توجه این تحقیق می‌توان، به بررسی نانوذره در فاز دوم منیپولیشن و پس از شروع حرکت اشاره نمود. همچنین هندسه‌های مختلفی همچون کروی، استوانه‌ای و استوانه‌ای پخ‌خورده برای نانوذره‌ی طلا در نظر گرفته شده است. نمودارهای نیرو، شتاب، سرعت و در نهایت جابه‌جایی با توجه به پارامتر هندسه برای نانوذره‌ی طلا ترسیم شده است. بررسی‌های صورت گرفته بر روی این نمودارها نشان‌دهنده جابه‌جایی بیشتر نانوذره‌ی طلا در هر دو راستای X و Y با در نظر گرفتن هندسه کروی بوده است. پارامترهای مختلفی همچون هندسه تیرک میکروسکوپ نیروی اتمی، نیروهای مقاوم چسبندگی و اصطکاک و سایر پارامترها بر این جابه‌جایی تأثیر می‌گذارند؛ لذا به منظور رسیدن به نتایج واقعی پیشنهاد می‌گردد که در تحقیقات آتی، پارامترهای دیگر نیز مورد بررسی قرار گیرند. به‌عنوان مثال می‌توان در پژوهش‌های آتی به بررسی اثرات اصطکاک و تحلیل حساسیت مدل‌های مختلف اصطکاکی پرداخت و یا مدل‌های تماسی مختلف و اثرات پارامترهای مؤثر بر آن‌ها را مورد بررسی و مطالعه قرار داد.

۵- فهرست علائم

شعاع تماسی در مدل تماسی هرتز	a_{Hertz}
مدول یانگ	E
مدول الاستیسیته مؤثر	E^*
نیروی اعمالی در مدل تماسی هرتز	F_{adh}
نیروی اعمالی انتهای سوزن در راستای X	F_X
نیروی اعمالی نوک سوزن در راستای X	F_X
نیروی اعمالی انتهای سوزن در راستای Y	F_Y
نیروی اعمالی نوک سوزن در راستای Y	F_Y
نیروی اعمالی انتهای سوزن در راستای Z	F_Z
نیروی اعمالی نوک سوزن در راستای Z	F_Z
ارتفاع سوزن	H
ممان اینرسی تیرک حول نقطه‌ی ابتدایی	I_p
گشتاور پیچشی تیرک حول محور Y	M_α
گشتاور پیچشی تیرک حول محور Z	M_θ
جرم	m
شعاع سلول	R_p
شعاع سوزن	R_t
موقعیت صفحه مینا در راستای X	x_S
موقعیت صفحه مینا در راستای Y	y_S
موقعیت صفحه مینا در راستای Z	z_S

علائم یونانی

ϕ	زاویه سوزن
Ψ	زاویه نیروی سوزن
θ	زاویه پیچش
δ_s	عمق نفوذ نانوذره در صفحه مینا
δ_t	عمق نفوذ نانوذره در سوزن
ν	نسبت پواسون

۶- مراجع

- [11] M. Taheri, Using of spherical contact models in 3d manipulation modeling of Au nanoparticles using atomic force microscopy to calculate the critical force and time, *Journal of Mechanical Engineering*, Vol. 48, No. 2, pp. 175-184, 2018. (in Persian)
- [12] M. Ghofrani, M. H. Korayem, A.K. Hoshiar, Modeling and Simulation of Cylindrical Nanoparticles Movement Using Various AFM Cantilever Types in Virtual Reality Environment, *Journal of Mechanical Engineering*, Vol. 47, No. 3, pp. 179-186, 2017. (in Persian)
- [13] M. Taheri, The effect of environmental factors on critical force and time of 3D nanomanipulation using Sobol statistical sensitivity analysis method, *Journal of Mechanical Engineering*, Vol. 49, No. 2, pp. 159-168, 2019. (in Persian)
- [14] S. Sadeghzadeh, M. H. Korayem, Modeling and Control of Deformation of Tip of AFM Nano-robot in the Automatic Nano-manipulation Operations, *Journal of Mechanical Engineering*, Vol. 47, No. 1, pp. 169-178, 2017. (in Persian)
- [15] M. Taheri, Investigation of the effect of different friction models on experimental extraction of 3D nanomanipulation force and critical time of colon cancer tissue, *Amirkabir Journal of Mechanical Engineering*, Vol. 54, No. 4, pp. 4-4, 2022. doi: 10.22060/mej.2021.20300.7210. (in Persian)
- [16] M. H. Korayem, Z. Rastegar, M. Taheri, Application of Johnson-Kendall-Roberts model in nanomanipulation of biological cell: air and liquid environment, *Micro & Nano Letters*, Vol. 7, No. 6, pp. 576-580, 2012. doi: 10.1049/mnl.2012.0292.
- [17] M. H. Korayem, H. Khaksar, Nanomanipulation of elliptic and cubic nanoparticles with consideration of the impact theories, *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 90, pp. 101-113, 2021. doi: 10.1016/j.apm.2020.08.059.
- [18] M. H. Korayem, P. Panahi, H. Khaksar, Studying and simulation of ellipsoidal contact models for application in AFM nanomanipulation, *Micron*, Vol. 140, pp. 102960, 2021. doi: 10.1016/j.micron.2020.102960.
- [19] M. Taheri, S. H. Bathaee, An Examination of Environmental and Dimensional Parameters on Force and Critical Time of the Manipulation Process Using the Mechanical Theory of DMT Contact, *Iranian Journal of Manufacturing Engineering*, Vol. 7, No. 9, pp. 1-9, 2020. (in Persian)
- [20] F. Fereiduni, M. Taheri, M. Modabberifar, Investigation of the effect of different parameters on force in the second phase of two-dimensional nanomanipulation, *Iranian Journal of Manufacturing Engineering*, Vol. 8, No. 2, pp. 23-31, 2021. (in Persian)
- [21] M. Khalili, M. Taheri, S. H. Bathaee, F. Shakeri, Study of DNA nanoparticle manipulation using atomic force microscopy based on finite element method using theories of contact mechanics. *Mechanics of Advanced and Smart Materials Journal*, Vol. 16, No. 10, pp. 275-282, 2017. doi: 10.1007/s13369-015-1730-x.
- [1] R. A. Sperling, P. R. Gil, F. Zhang, M. Zanella, W. J. Parak, Biological applications of gold nanoparticles, *Chemical Society Reviews*, Vol. 37, No. 9, pp. 1896-1908, 2008. doi:10.1039/b712170a.
- [2] P. Ghosh, G. Han, M. De, C. K. Kim, V. M. Rotello, Gold nanoparticles in delivery applications, *Advanced Drug Delivery Reviews*, Vol. 60, No. 11, pp. 1307-1315, 2008. doi: 10.1016/j.addr.2008.03.016.
- [3] E. C. Dreaden, A. M. Alkilany, X. Huang, C. J. Murphy, M. A. El-Sayed, The golden age: gold nanoparticles for biomedicine, *Chemical Society Reviews*, Vol. 41, No. 7, pp. 2740-2779, 2012. doi: 10.1039/c1cs15237h.
- [4] R. Sardar, A. M. Funston, P. Mulvaney, R. W. Murray, Gold Nanoparticles: Past, Present, and Future, *Langmuir*, Vol. 25, No. 24, pp. 13840-13851, 2009. doi: 10.1021/la9019475.
- [5] K. Sztandera, M. Gorzkiewicz, B. Klajnert-Maculewicz, Gold Nanoparticles in Cancer Treatment, *Molecular Pharmaceutics*, Vol. 16, No. 1, pp. 1-23, 2018. doi: 10.1021/acs.molpharmaceut.8b00810.
- [6] P. Singh, S. Pandit, V. R. Mokkapatil, A. Garg, V. Ravikumar, I. Mijakovic, Gold Nanoparticles in Diagnostics and Therapeutics for Human Cancer, *International Journal of Molecular Sciences*, Vol. 19, No. 7, pp. 1-16, 1979. doi: 10.3390/ijms19071979.
- [7] J. Zhang, L. Mou, X. Jiang, Surface chemistry of gold nanoparticles for health-related applications, *Chemical Science*, Vol. 11, pp. 923-936, 2020. doi: 10.1016/j.arabjc.2022.104179.
- [8] M. H. Korayem, M. Taheri, Modeling of various contact theories for the manipulation of different biological micro/nanoparticles based on AFM, *Journal of Nanoparticle Research*, Vol. 16, No. 1, pp. 1-18, 2013. doi: 10.1007/s11051-013-2156-6.
- [9] A. H. Korayem, M. H. Korayem, M. Taheri, Robust Controlled Manipulation of Nanoparticles Using the AFM Nanorobot Probe, *Arabian Journal for Science and Engineering*, Vol. 40, No. 9, pp. 2685-2699, 2015. doi: 10.1007/s13369-015-1730-x.
- [10] M. Taheri, 3D Modeling of Gold Nanoparticle Manipulation in Air Using HK Friction Model, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 16, No. 10, pp. 275-282, 2017. doi: 20.1001.1.10275940.1395.16.10.35.6. (in Persian)

- [25] H. Hertz, Über die Berührung fester elastischer Körper, *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, Vol. 92, pp. 156-171, 1881.
- [26] F. Jin, X. Guo, Non-slipping adhesive contact of a rigid cylinder on an elastic power-law graded half-space, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 47 pp. 1508–1521, 2010. doi: 10.1016/j.ijsolstr.2010.02.010.
- [27] 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. 183715:1-13, 2013. doi: 10.1063/1.4829919.
- [28] B. Zarei, S. Bathaee, M. Taheri, M. Momeni, Second phase of nanomanipulation of particles by atomic force microscopy using Coulomb, HK, and LuGre Friction Models, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 19, No. 1, pp. 181-190, 2019. doi: 20.1001.1.10275940.1397.19.1.25.5. (in Persian)
- Vol. 1, No. 2, pp. 155-174, 2022. doi: 10.52547/masm.1.2.155. (in Persian)
- [22] M. Taheri, Application of atomic force microscopy in critical force and critical time extraction of 2D manipulation for gastric cancer tissue with different friction models, *Nanoscale*, Vol. 9, No. 1, pp. 136-145, 2022. doi: 20.1001.1.24235628.1401.9.1.14.0. (in Persian)
- [23] M. H. Korayem, M. Taheri, H. Khaksar, S. H. Bathaee, Using Micro/Nano Scale Contact Models in 3D Manipulation of Deformation of Au Particles Under Angular Effect, *Iranian Journal of Manufacturing Engineering*, Vol. 7, No. 5, pp. 33-43, 2020. (in Persian)
- [24] M. Taheri, M. Mirzalu, Experimental Extraction of Young's Modulus of MCF-7 Breast Cancer Cell Using Spherical Contact Models, *Amirkabir Journal of Mechanical Engineering*, Vol. 53, No. 12, pp. 5769-5784, 2022. doi: 10.22060/mej.2021.19993.7149. (in Persian)