دانشکده مهندسی مکانیک

مدلسازی دینامیکی نانومانیپولیشن دوبعدی بر پایهٔ میکروسکوپ نیروی اتمی

منیژه ذاکری

پایان نامه برای دریافت درجهٔ کارشناسی ارشد در رشته

مهندسی مکانیک -بیومکانیک

استاد راهنما: پروفسور محرم حبیب نژاد کورایم

خرداد ماه ۸۵

قدر دانی و تشکر

سپاس فراوان خدای بزرگ و مهربانی را که به من آموخت در زندگی لذتی بالاتر از تحصیل علم و عظمتی برتر از کسب دانش نخواهم یافت و به من توانایی آنرا بخشید که رهرو این طریق باشم.

امروز که توانسته ام گامی در راستای پیشرفت علمی خود بردارم، این موفقیت را مرهون عزیزان و دوستانی هستم که از نخستین روزهای تحصیلم ، مشوق و معلم من بوده اند و بایستی مراتب سپاس و امتنان خود را به حضور گرانقدرشان تقدیم نمایم.

از استاد گرانقدرجناب آقای پروفسور محرم حبیب نژاد کورایم که در تمام مدت این مقطع تحصیلی از راهنمائیهای ارزندۀ ایشان برخوردار بوده ام که همواره از با حوصلۀ بسیار مشوق و راهنمای من در انجام این پژوهش بوده و از نظرات و راهنمائیهای پر بها و بی دریغ ایشان بهرل فراوان برده ام، بی نهایت ممنون و سپاسگذارم.

از کلیه کارکنان محترم دانشکدۀ مکانیک بویژه خانمها سعادت، شیرازی و حیدری بجهت مساعدتها و همکاریهای بی دریغشان در طول دوران تحصیلم صمیمانه سپاسگذارم. همچنین از تمام دوستان عزیزی که در طول مدت تحصیل انجام پایان نامه به نحوی مرا یاری داده اند خصوصا آقای رضائی تشکر می کنم.

و در نهایت عشق و سپاس بی پایان خود را تقدیم همسر عزیز و مادر فداکار و سایر اعضای خانواده ام می کنم که همواره با صبر و دلسوزی فراوان، مشوق و حامی من در این راه بوده اند.

تقدیم به خانواده عزیزم

که همواره مشوق من در این راه بوده اند.

چکیده

نانورباتیک یا مانیپولیشن توسط نانوربات مبحث جدیدی است که در خصوص مانیپولیت کنترل شده اجسامی با اندازه نانومتری بحث می کند و مربوط به عکس العملهای موجود بین اجسامی در ابعاد اتمی و مولکولی است. مبحث نانورباتیک شامل دو گروه نانورباتهای مشابه با رباتهای در دنیای ماکرو و میکروسکوپ های روبشی میله ای می شود. میکروسکوپ های روبشی میله ای گروه گسترده ای از میکروسکوپ ها هستند که در سال ۱۹۸۲ جهت تصویربرداری از سطوح اجسامی در اندازه های نانومتری ساخته شدند و ابزار اصلی آنها پروب نوک تیزی است که در آنها از خواص مختلف فیزیکی بین اتمها و مولکولهای راس پروب و نمونه استفاده می کند. میکروسکوپ نیروی اتمی و میکروسکوپ روبشی تونلی پیشرفته ترین و کاربردی ترین روشهای میکروسکوپ های روبشی میله ای هستند. میکروسکوپ نیروی اتمی بر پایه تشخیص نیروهای جاذبه یا دافعه بین سطوح کار می کند و از آن می توان برای نانو ذرات غیر رسانا نیز استفاده نمود که این امر خصوصا موجب کاربرد گسترده آن در نانوذرات بیولوژیکی گشته است. بلافاصله پس از اختراع SPM ها ثابت شد که این ابزارها به عنوان نانومانیپولاتور هم قابل استفاده اند. در حال حاضر ساخت و مونتاژ در مقیاس نانو با استفاده از روشهای شیمیائی بطور خاص و یا میکروسکوپ های روبشی میله ای که تنها ابزار دسترسی به دنیای نانو هستند انجام می گیرد. پروب میکروسکوپ به عنوان نانو مانیپولاتور ساده برای جابجایی نانوذرات به شکل کشیدن یا راندن روی سطح، بریدن و تشریح، لمس کردن، نانولیتوگرافی/ دندانه گذاری، بلندکردن اجسام و جابجائی بکار گرفته شده است. در ورود از دنیای ماکرو به دنیای نانو، پدیده اصلی کوچک شدن اندازه اجسام است و تاثیر این تغییر طول به عنوان تاثیر مقیاس تعریف شده است که موجب تغییراتی در خواص فیزیکی و هندسی می شود. با در نظر گرفتن مسائل مربوط به تغییر مقیاس، رباتیک بر پایه فیزیک در مقیاس نانو و کنترل هوشمند در نانومانیپولیشن ضروری است. مکانیک و دینامیک در مقیاس نانو هنوز بطور کامل شناخته نشده است و فهم آن در جابجائی موثر و دقیق نانوذرات با استفاده از مانیپولاتور AFM بسیار حائز اهمیت است. جهت بررسی مکانیک و دینامیک مانیپولیشن توسط نانوربات AFM، به درک و فهم عکس العملهای تماس فیزیکی راس پروب با نمونه و نمونه با صفحه مبنا، و تغییرشکلهای کانتیلور AFM نیاز داریم.

در این پایان نامه، دینامیک نانومانیپولاتور AFM در نانومانیپولیشن و مونتاژ ذرات، و حساسیت آن نسبت به تغییرات پارامترهای مختلف در راندن ذرات شبیه سازی شده است و موقعیت مکانی دقیق راس پروب و در نتیجه نانوذرات در هر لحظه از نانومانیپولیشن بدست آمده است که اساس کنترل دقیق جابجائی و مونتاژ ذرات و ابزارها در مقیاس نانو است. همچنین رفتار دینامیکی ذره در شرایط مختلف بررسی شده است. معادلات سینماتیکی و دینامیکی حرکت پروب و ذره بر اساس نمودار آزاد مساله بدست آمده و شرایط اولیه بر اساس سرعت ثابت صفحه مبنا، هندسه و مواد کانتیلور، پروب و ذره تعیین شده اند. نهایتا شبیه سازی معادلات با استفاده از کدنویسی توسط نرم افزار Mathematica5 انجام شده که توسط نتایج تحقیقات موجود، کاملا تایید شد.

فهرست

صفحه

فصل اول: مقدمه ۱

۱-۱- شرح موضوع ۲

۱-۲- تاریخچه ۷

۱-۳- اهمیت موضوع ۱۴

۱-۴- مطالب پایان نامه ۱۷

فصل دوم: فیزیک در دنیای نانو / میکرو ۱۸

۲-۱- مقدمه ۱۹

۲-۲- تاثیر تغییر مقیاس ۲۰

۲-۳- چسبندگی ۲۱

۲-۳-۱- بررسی نیروهای بین مولکولی ۲۳

۲-۳-۱-۱- نیروهای واندروال ۲۴

۲-۳-۱-۲- نیروهای موئینگی ۲۵

۲-۳-۱-۳- نیروهای الکترواستاتیکی ۲۶

۲-۳-۲- نیروهای تماس و فرورفتگی ناشی از آن ۲۷

۲-۳-۲-۱- مدل هرتز ۲۸

۲-۳-۲-۲- مدل DMT ۳۰

۲-۳-۲-۳- مدل JKR ۳۰

۲-۳-۲-۴- مدل MD ۳۱

۲-۳-۲-۵- محدوده کاربرد مدلهای مکانیک تماس ۳۱

۲-۳-۳- اصطکاک درمقیاس نانو ۳۲

فصل سوم : سیستم نانورباتهای بر پایه SPM ها ۳۴

۳-۱- مقدمه ۳۵

۳-۲- سیستم SPM ها ۳۵

۳-۲-۱- سیستم کارکرد STM ۳۸

۳-۲-۲- سیستم میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) ۴۰

۳-۲-۲-۱- مدهای کاری میکروسکوپ نیروی اتمی ۴۳

۳-۲-۲-۲- مدلسازی سیستم AFM ۴۶

فهرست

۳-۲-۳- سایر میکروسکوپ های اسکنر میله ای ۴۸

فصل چهارم: میکروسکوپ نیروی اتمی به عنوان نانوربات یا نانومانیپولاتور ۵۰
۴-۱- مقدمه ۵۱
۴-۲- اجزای اصلی SPM ها ۵۲
۴-۲-۱- میکرو/نانوسنسورها ۵۳
۴-۲-۱-۱- سنسورهای بینائی در دنیای میکرو/نانو ۵۴
۴-۲-۱-۲- سنسورهای نیرو ۵۵
۴-۲-۲-مانیپولاتورها به عنوان ابزار جابجائی ۵۶
۴-۲-۳- میکرو/ نانومحرکها ۵۶
۴-۲-۴- کنترل ۵۶
۴-۲-۵- سیستم رابط بین دستگاه ـ انسان ۵۷
۴-۳- نانومانیپولیشن و مونتاژ بر پایه میکروسکوپ نیروی اتمی ۵۷
۴-۳-۱- AFM به عنوان نانوربات ۵۹
۴-۳-۱-۱- حرکت ۵۹
۴-۳-۱-۲- سنسور ۶۰
۴-۳-۱-۳- پنجه ۶۰
۴-۳-۱-۴- فیکسچر ۶۱
۴-۳-۱-۵- فرایند مانیپولیشن ۶۱
۴-۳-۱-۶- برنامه ریزی و رهگیری ۶۱
۴-۳-۱-۷- کاربرد در مونتاژ ۶۲
۴-۳-۲- نانومانیپولاتورها ۶۲
۴-۳-۲-۱- نانومانیپولیشن بر اساس نقطه شروع ۶۳
۴-۳-۲-۲- نانومانیپولیشن بر اساس روش و مراحل ساخت ۶۳
۴-۳-۲-۳- نانومانیپولیشن بر اساس نوع عکس العملها ۶۴
۴-۳-۲-۴- **نانومانیپولیشن بر اساس نحوه عملکرد سیستم** ۶۴
۴-۳-۳- شکل‌دهی نانوذرات ۶۵
۴-۳-۳-۱- کشیدن و راندن ۶۶
۴-۳-۳-۲- بلند نمودن و جابجا کردن ۶۷

فهرست

۳-۳-۳-۴- حرکت انعطاف پذیر ۶۷
۴-۳-۴- اتصال و نشاندن ۶۷
۵-۳-۴- اهمیت نانومانیپولیشن در مونتاژ ۶۷

فصل پنجم: کاربردهای میکروسکوپ نیروی اتمی AFM ۷۰
۱-۵- مقدمه ۷۱
۲-۵- کاربردهایAFM در علوم بیولوژیکی ۷۳
۱-۲-۵- کاربرد میکروسکوپ نیروی اتمی در پزشکی ۷۵
۲-۲-۵- جعبه ابزار بیومکانیک ۸۰
۳-۵-کاربردهای AFMدر مترولوژی مولکولیAFM ۸۴

فصل ششم: مدلسازی رفتار دینامیکی نانوذرات در مانیپولیشن بر پایه AFM ۸۵
۱-۶- مقدمه ۸۶
۲-۶- مدل فیزیکی مانیپولیشن صفحه ای ذرات نانویی ۸۸
۱ -۲-۶- مراحل نانومانیپولیشن ۸۸
۲-۲-۶- تعریف مساله ۸۹
۳-۲-۶- نیروی تماسی و فرورفتگی ۹۰
۴-۲-۶- نیروی اصطکاک در راندن ذرات نانومتری ۹۲
۵-۲-۶- مدلسازی نیروهای اصطکاکی و عمودی در راندن ذرات ۹۳
۳-۶- مدل دینامیکی راندن نانوذرات توسط نانوربات بر پایهٔ AFM ۹۵
۴-۶- مدلسازی جابجائی ذره ۱۰۱

فصل هفتم: شبیه سازی دینامیکی راندن نانوذرات توسط مانیپولاتور نانوربات AFM ۱۰۲
۱-۷- مقدمه ۱۰۳
۲-۷- داده های مساله ۱۰۴
۳-۷- شرایط اولیه ۱۰۵
۴-۷- نتایج شبیه سازی سینماتیک و دینامیک ذره ۱۰۵
۵-۷- توسعهٔ مدل ۱۱۱

فهرست

فصل هشتم: نتیجه گیری ۱۱۸
۱-۸- نتیجه گیری ۱۱۹
۲-۸- کارهای آینده ۱۲۰

ماخذ ۱۲۲
پیوستها ۱۳۰
پیوست ۱- تحقیقات اصطکاک در مقیاس نانو ۱۳۱
پیوست ۲- روشهای کنترل جریان الکترونی در STM ۱۳۴
پیوست ۳- ۱- خلاصه تحقیقات بیولوژیکی با استفاده از AFM ۱۳۶
پیوست ۳- ۲- نانوتکنولوژی در پزشکی ۱۳۸

پارامترها

t	زمان
H	طول پروب، ثابت Hamaker
L	طول کانتیلور
W	عرض کانتیلور
t = Thick	ضخامت کانتیلور
E	مدول الاستیسیته
G	مدول برشی
R_{tip}	شعاع راس پروب
R_P	شعاع ذره
V_{sub}	سرعت اولیه صفحه مبنا
ϕ_0	زاویه تغییر شکل اولیه کانتیلور
Δ	جابجائی پایه در جهت z از موقعیت اولیه
z_0	موقعیت z پایه ابزار در حالت تماس اولیهٔ پروب/ سطح
φ	زاویهٔ تماس راس پروب و ذره
K_c	ضریب فنریت نرمال کانتیلور
M_θ ،F_y ،F_z	نیروها و گشتاور فنری کانتیلور
F_Y و F_Z	نیروهای عمودی و افقی راس پروب
F_T	نیروی اعمالی راس پروب در حرکت افقی نانوذرات
ψ	زاویهٔ نیروی پروب و ذره
ζ	بردار تغییر شکل کانتیلور
Y_{par}	جابجائی ذره
Y_{sub}	جابجائ صفحه مبنا
$Y_{par/sub}$	جابجائی نسبی ذره نسبت به صفحه مبنا
f	فرکانس
m_c, b_c, k_c	ثابت نیرو، ثابت میرائی، جرم کانتیلور
b_i و $k_i(z,\zeta)$	سختی و میرائی فصل مشترک پروب با سطح تماس
a_0	فاصله بین مولکولی
P	بار عمودی

δ	عمق تماس
a	شعاع تماسی
A	سطح تماس مشترک
R'	شعاع معادل سطح تماس
K	مدول الاستیک موثر یا کاهش یافته تماسی
m	ثابت مربوط به هندسه راس پروب
ω	انرژی چسبندگی دو سطح
γ_t و γ_s	انرژی سطحی راس پروب، نمونه
γ_L	انرژی سطحی مایع
τ	استحکام برشی لغزشی یا شدت برش دو سطح در تماس
τ_r	استحکام برشی دورانی
μ	ضریب اصطکاک لغزشی
μ_r	ضریب اصطکاک دورانی
f_t و f_s	نیروی اصطکاک لغزشی روی راس پروب و صفحه مبنا
F_{vdw}	نیروی واندر وال
F_{cap}	نیروی موئینگی
F_{el}	نیروی الکترواستاتیکی
u	تابع پله‌ای،
ρ, r_1	شعاعهای انحنای هلال آب
e	ضخامت لایه سیال
σ	طـــول شکست هلال، فاصله بین اتمی ($\sigma = 0.4125nm$)
L_L	ضخامت لایه آب
P/P_s	نسبت رطوبت
γ_{SLS}	انرژی سطحی در فصل مشترک جامد ـ مایع ـ جامد
ε_o	پرمابلیته
λ	پارامتری بدون بعد است
U	اختلاف ولتاژ
h*	آستانه معینی از فاصله بین راس پروب و ذرات
$\phi s,t$	تابع کار راس پروب و نمونه
m_e	جرم یک الکترون
h	ثابت پلانک، فاصله بین راس پروب و سطح
V_{bias}	ولتاژ DC اعمال شده بین راس پروب و نمونه

فصل اول

مقدمه

۱-۱- شرح موضوع

نانورباتیک مبحث جدیدی است که در خصوص مانیپولیت کنترل شده اجسامی با اندازه نانومتری بحث می کند و مربوط به عکس العملهای موجود بین اجسامی در ابعاد اتمی و مولکولی است که گاهی نیز رباتیک مولکولی نامیده می شود[۱-۱۰]. نانورباتیک در حوزه مبحث نانوتکنولوژی قرار می گیرد که عبارت از مطالعه پدیده ها و ساختارهائی در محدوده نانومتر است. یک اتم قطری در حدود چند آنگستروم دارد (1A°=0.1nm) و اندازه یک مولکول چند نانومتر است. تحقیقات نانوتکنولوژی در راستای دو مسیر همگرا حرکت می کنند که عبارت از تکنیکهای ساخت از بالا به پائین[۱] و از پائین به بالا[۲] هستند و هر دو روش به نانورباتیک وابسته اند. روش ساخت از بالا به پائین که دقیقا به مانیپولاتور وابسته است، مستلزم برداشتن و کنار گذاشتن مقادیر کوچکی از ماده توسط مانیپولاتور نانوربات بوده و در محدوده نانولیتوگرافی قرار می گیرد. روش پائین به بالا، با قرار دادن اتمها و مولکول ها در موقعیت مکانی مورد نظر اقدام به ساختن ساختارهای نانو/میکرونی می شود و به دو طریق انجام می گیرد:

۱) خودمونتاژی

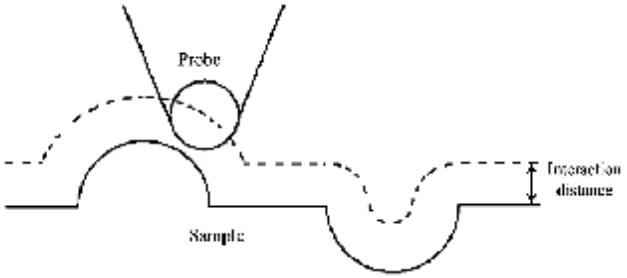
۲) استفاده از مانیپولاتور نانوربات

در روش خود مونتاژی از تغییرات طبیعی بر اساس شیمی سنتی و فرایند بالک استفاده می شود و در روش دوم اجزایی در ابعاد نانومتری با استفاده مستقیم از نیرو، میدانهای الکتریکی، مغناطیسی، و غیره بصورت کنترل شده در محل مورد نظر قرار می گیرند. تحقیقات در خصوص نانو ربات ها خود به دو حوزه تقسیم شده است. حوزه اول صرف طراحی و شبیه سازی ریاضی رباتهایی در ابعاد نانومتر می شود. برای مثال می توان به نانوربات Drexler اشاره نمود که از اجزای مکانیکی مختلفی چون نانو دنده ها استفاده می کند. مساله اصلی در این مسیر چگونگی ساخت این قطعات است که بایستی با روشهای ساخت از بالا به پائین و از پائین به بالا انجام پذیرد و پیشرفت آزمایشگاهی کمی متوجه ساختن آنها است. حوزه دوم مانیپولیشن

[1] Top-Down
[2] Bottom-Up

اجسامی در ابعاد نانو توسط ابزار ماکروسکوپی است که کارهای انجام شده در این مسیر متمرکز شده است و بحث اصلی آن درخصوص استفاده از میکروسکوپ های روبشی میله ای[3] یا SPM ها به عنوان نانو ربات است[۱-۱۲].

میکروسکوپ های روبشی میله ای گروه گسترده ای از میکروسکوپ ها هستند که در سال ۱۹۸۲ جهت تصویربرداری از سطوح اجسامی در اندازه های نانومتری ساخته شدند و ابزار اصلی آنها پروب نوک تیزی است که از خواص مختلف فیزیکی بین اتمها و مولکولهای راس پروب و نمونه مورد نظر، جهت اهداف مورد نظر استفاده می کند و نمایش شماتیک اصول پایه آنها در شکل ۱-۱ مشاهده می گردد.



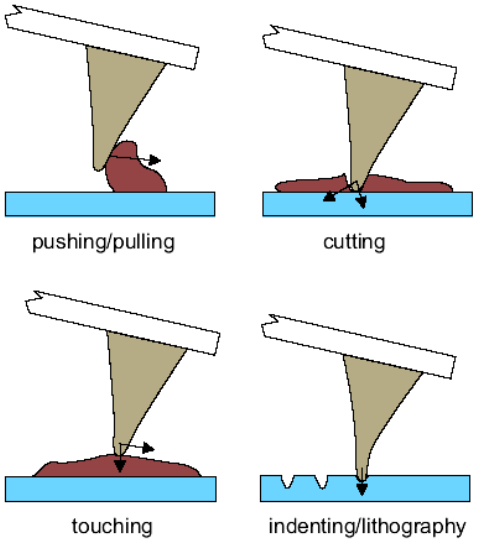
شکل۱-۱- نمایش شماتیک اصول پایه تمام میکروسکوپ های اسکنر پروبی. هندسه پروب و فاصله اولیه نمونه و پروب، دقت میکروسکوپ و کیفیت تصویر را تعیین می کند[۲].

در میکروسکوپ های روبشی میله ای، سطح نمونه ها توسط پروب و در امتداد خطوط موازی اسکن می گردد و عکس العمل های موجود بین راس پروب و نمونه، در بخشی بنام حوزه نزدیک[4] اندازه گیری شده و مقادیر آنها در هر موقعیتی بررسی میگردد.

میکروسکوپ نیروی اتمی یا AFM و میکروسکوپ روبشی تونلی یا STM پیشرفته ترین و کاربردی ترین روشهای SPM هستند. میکروسکوپ نیروی اتمی که میکروسکوپ اسکنر نیرویی[5] یا SFM نیز به آن اطلاق می شود، بر پایه تشخیص نیروهای جاذبه یا دافعه بین سطوح کار می کند و در میکروسکوپ روبشی تونلی از اثر تونلی الکترونها استفاده می شود. از اینرو برخلاف STM که فقط برای اجسام رسانا و نیمه رسانا کاربرد دارد، از AFM می توان برای نانو ذرات غیر رسانا نیز استفاده نمود که این امر خصوصا موجب کاربرد گسترده

[3] Scanning Probe Microscopy
[4] Near – Field
[5] Scanning Force Microscopy

آن در نانو ذرات بیولوژیکی گشته است بطوریکه برخلاف سایر تکنیکهای میکروسکوپی و برخی تکنیکهای آزمایشگاهی، اولین کارهای تحقیقاتی درخصوص نمونه های بیولوژیکی که در آنها از AFM استفاده شده، تنها دو سال پس از اختراع AFM منتشر شد [۲-۴]. گرچه هدف اصلی در اختراع SPM ها تصویربرداری بود، ولی اخیراً پروب SPM به عنوان نانو مانیپولاتور ساده برای جابجایی نانوذرات با کشیدن یا راندن روی سطوح[۲۹-۴۶]، بریدن و تشریح [۴۷-۴۹]، لمس کردن [۱۷ و ۱۸]، نانولیتوگرافی/ دندانه گذاری، بلندکردن اجسام و جابجائی بکار گرفته شده است. در شکل ۲-۱ خلاصه ای از کاربردهای AFM در نانومانیپولیشن اجسام ارائه شده است.



شکل ۲-۱- کاربردهای AFM در نانومانیپولیشن اجسام: الف) راندن/کشیدن، ب) بریدن، ج) لمس کردن، د) نانو لیتوگرافی/ دندانه گذاری[۱۷].

از روشهای فوق در مطالعات مختلف استفاده می شود. به عنوان نمونه استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی برای راندن / کشیدن اجسام، در تعیین خواص اصطکاکی و چسبندگی[۶][۱۳-۱۸]، جابجائی ذرات و مونتاژ دو بعدی اجسام نانومتری کاربرد دارد و از لمس کردن برای تعیین مکانیک تماس [۱۷،۱۸] و اصطکاک [۱۳،۱۴] استفاده شده است.

[6] Tribological

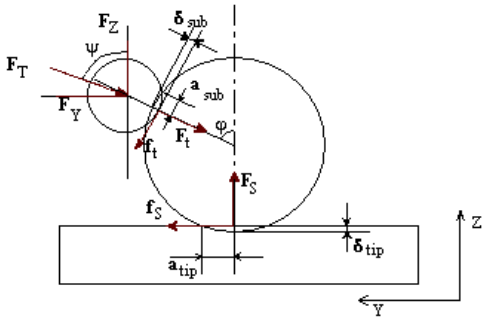
در ورود از دنیای ماکرو به دنیای نانو، پدیده اصلی کوچک شدن اندازه اجسام است و تاثیر این تغییر طول به عنوان تاثیر مقیاس تعریف شده است که موجب تغییراتی در خواص فیزیکی و هندسی می شود. با در نظر گرفتن مسائل مربوط به تغییر مقیاس، رباتیک بر پایه فیزیک درمقیاس نانو و کنترل هوشمند نانو مانیپولیشن ضروری میگردد [۱۸-۲۵]. در این مقیاس، نیروهای جرمی در مقایسه با نیروهای چسبندگی و تماسی ناچیز شده و خواص ماده تغییر می یابد. یعنی اجسام ظریف تر و تغییر شکل پذیرتر می گردند. از اینرو مکانیک متفاوتی بنام مکانیک میکرو / نانویی توسط محققان مطرح شده است و یکی از بحث های اصلی این حوزه جدید مکانیک تماس است. برای فهم پدیده تماس سطوح در مقیاس میکرو / نانو، دستگاههای نیروی سطحی و اخیراً AFM بکار گرفته شده اند. در مطالعه تماس / تغییرشکل[۷] بر پایه AFM، مدلهای مکانیکی مختلف هرتز ، DMT ، JKR وMD ارائه شده اند که در بخش دوم جزئیات و کاربردهای مدلها مورد بررسی بیشتر قرار خواهد گرفت [۱۷ و ۱۸]. از دیگر مسائل مطرح در نانومانیپولیشن، اصطکاک ناشی از چسبندگی دو جسم و تغییر شکل تماسی بین راس پروب و نمونه (یا نمونه و صفحه مبنا) است که مدل آن در مقیاس نانومتر توسط Falvo، و Sitti و همکاران ارائه شده است[۱۳، ۱۴ و ۱۷]. میکروسکوپهای روبشی میله ای کاربرد گسترده ای در علوم و فنون مختلف یافته اند که در حالت کلی به دو مجموعهٔ علوم بیولوژیکی و مترولوژی تقسیم بندی شده است [۳] و در فصل پنجم به تفصیل مورد بررسی قرار می گیرند.

در حال حاضر تکنولوژی کاربرد STM و AFM در تصویر برداری سه بعدی از سطوح اجسام با دقت اتمی فراهم شده است ولی تکنولوژی استفاده از آن برای اهداف مانیپولیشن، ساخت (تولید) و مونتاژ در مقیاس نانو / میکرو در ابتدای راه است. مکانیک و دینامیک در مقیاس نانو هنوز بطور کامل شناخته نشده است و فهم آن در جابجائی موثر و دقیق نانو ذرات با استفاده از مانیپولاتور نانو ربات بسیار حائز اهمیت است. از طرفی عکس العملهای راس ابزار با نمونه، مکانیک مجهول و بسیار پیچیده ای دارد. جهت بررسی مکانیک و دینامیک مانیپولاتور نانوربات AFM، نیاز به درک و فهم عکس العملهای سطح تماس راس پروب با نمونه، و نمونه با صفحه مبنا، و نیز تغییرشکلهای کانتیلور AFM داریم [۵۱- ۶۰].

[7] Indentation

در این پایان نامه شبیه سازی نانومانیپولاتور AFM و رفتار دینامیکی ذرات در نانومانیپولیشن به شکل راندن و مونتاژ ذرات، و حساسیت آن نسبت به تغییرات پارامترهای مختلف مساله مد نظر است تا بتوان موقعیت دقیق مکانی راس پروب و در نتیجه نانوذرات را در هر لحظه از نانو مانیپولیشن بدست آورد. این امر اساس کنترل دقیق ابزارها، و جابجائی و مونتاژ ذرات در مقیاس نانو است.

برای شبیه سازی عکس العملها و دینامیک نانومانیپولاتور AFM نیاز به مدلسازی دقیق نیروهای بین پروب / نانوذرات و نانوذره / صفحه مبنا داریم. مدل اولیه برای جابجائی ذره در شکل ۳-۱ مشاهده می گردد که در آن نیروی اصطکاک چسبندگی بین پروب / ذره و ذره / سطح مبنا به ترتیب f_t و f_s نامیده شده اند.



شکل۳-۱- تغییر شکل تماسی و نیروهای وارد بر نانوذره در نانومانیپولیشن.

نیروهای تماسی با F_t و F_s نشان داده شده اند که موجب تغییر شکل تماسی δ می گردند و به علت اهمیت مقادیر تغییر شکلها در مقیاس نانومتری، این مقادیر بایستی در مدلسازی دینامیکی ذره اعمال گردند. این تحقیقات خصوصاً برای مانیپولیشن از راه دور سطوح تغییر شکل پذیر همچون اجسام بیولوژیکی اهمیت ویژه ای دارد[۵۲ و ۵۴]. معادلات سینماتیکی و دینامیکی حرکت پروب و ذره بر اساس نمودار آزاد مساله بدست آمده و شرایط اولیه بر اساس سرعت ثابت و مشخص صفحه مبنا، هندسه و مواد کانتیلور، پروب، و ذره تعیین شده اند. تحلیل معادلات با استفاده از برنامه نویسی در نرم افزار Mathematica5 انجام می شود.

۲-۱- تاریخچه

تولد نانوتکنولوژی مصادف با سخنرانی Feynman برنده جایزه نوبل فیزیک در سال ۱۹۵۹ با عنوان "آن پائین فضای بسیاری است[۸]"بود. او در سخنرانی خود به بررسی بعد رشد نیافته علم مواد پرداخت و اظهار

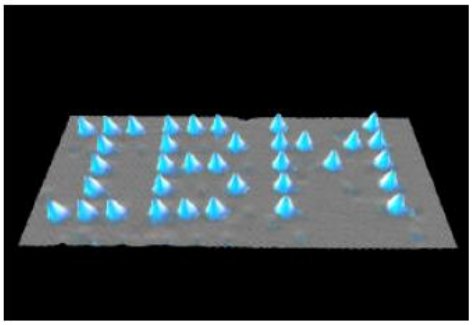
[8] There's Plenty of Room at the Bottom

داشت: "اصول فیزیک تا آنجا که من توانائی درکش را دارم، برخلاف امکان ساختن اتم به اتم اجسام حرفی نمی زند". در آن سخنرانی پیشنهاد استفاده از ماشین ابزارهای موجود برای ساختن ماشین ابزارهای کوچکتر که خود برای ساختن ماشین ابزارهای کوچکتر و کوچکتر تا اندازه های اتمی به کار خواهند رفت، ارائه شده بود. Feynman به وضوح از پتانسیل کاربردهای پزشکی تکنولوژی جدیدی که پیشنهاد داده بود، آگاهی داشت. وی پس از تشریح عقایدش با یک همکار، نخستین پروژه مشهورش را در نانوپزشکی جهت مراقبت از بیماریهای قلبی ارائه داد [۱ و ۷]. Marvin Minesky پدر هوشهای مصنوعی در دهه ۸۰-۷۰ تفکرات باروری داشت که می توانست اندیشه های Feynman را قوت بخشد. بینش پنهان Feynman پس از دو دهه توسط Drexler به حوزه تحقیقاتی بسیار جدی تبدیل شد. Drexler در اواسط دهه ۷۰، Minesky را به عنوان استاد راهنمای پایان نامه اش انتخاب کرد و در اوائل دهه ۸۰ به درجه استادی در رشته کامپیوتر نائل شد و اولین مقاله علمی در زمینه نانوتکنولوژی مولکولی (MNT) را در سال ۱۹۸۱ ارائه نمود. در مقاله وی پیش بینی شده بود که امکان ساخت نانو ابزارهایی از اجزای بیولوژیکی وجود دارد که می تواند سلولهای انسان زنده را بررسی نموده و در ترمیم داخلی آنها دخالت کند. این موضوع یک دهه بعد در کتاب تکنیکال Drexler که اساس سیستمهای ماشینهای مولکولی و ساخت مولکولی را بیان می کرد و سپس در کتاب Freitas در زمینه نانورباتهای پزشکی پیگیری شد [۲۷].

میکروسکوپ اسکنر تونلی[9] یا STM، اولین ابزار ساخته شده در گروه SPM ها است که در سال ۱۹۸۲ توسط Binning و Roher در آزمایشگاه IBM زوریخ ساخته شد و آنها چهار سال بعد برنده جایزه نوبل شدند. در این ابزار از اثر کوانتوم مکانیکی به نام جریان تونلی استفاده می شود که موجب جریان الکترونها در طول فاصله بین راس پروب[10] و نمونه می گردد. ابزارهای مختلفی مشابه STM ساخته شده اند که در آنها از خواص فیزیکی دیگری غیر از پدیده تونلی استفاده شده است و عمومی ترین مورد این ابزارها، میکروسکوپ نیروی اتمی[11] یا AFM است که اساس کار آن بر پایه نیروهای بین اتمی است و در سال ۱۹۸۶ توسط

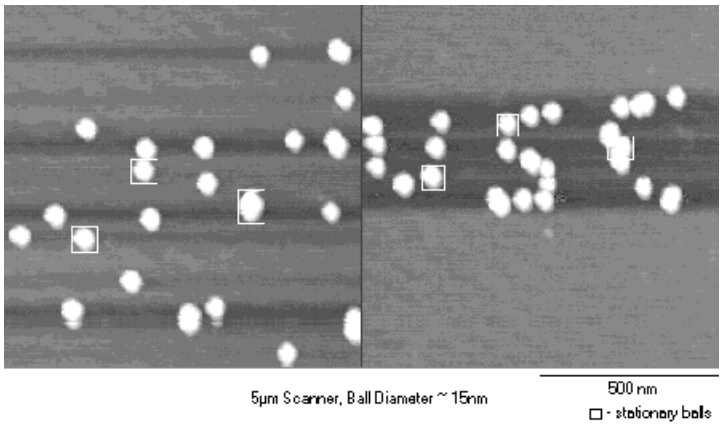
[9] Scanning Tunneling Microscope
[10] Tip
[11] Atomic Force Microscopy

Binning & Quate & Gerber ساخته شد [۱ و ۳]. اگرچه از SPM ها، اصولا بـرای تـصویربرداری اسـتفاده می شود ولی بلافاصله پس از اختراع آنها مشاهده شد که از آنها می توان برای ایجاد تغییراتی در سطح نمونه ها استفاده نمود. یکی از اثبات های اولیه در ۱۹۸۷ توسط Backer و همکارانش در آزمایشگاه Bell، زمانیکـه انها به دنبال راهی برای ایجاد ساختمان ژرمانیومی بر روی سطحی از جنس ژرمانیوم بودند، انجام شد. گـروه Eigler در آزمایشگاه IBM نشان دادند که از STM می توان برای مانیپولیت اتمها استفاده نمود. نمونه بسیار معروف کار آنها نوشتن عبارت IBM با اتمهای گزنون بر روی صفحه نیکلی است کـه در شـکل ۴-۱ مـشاهده می شود[۳۱ و ۳۲]:



شکل ۴-۱- نوشتن عبارت IBM با اتمهای گزنون بر روی صفحه نیکلی توسط گروه Eigler در آزمایشگاه IBM [۱]

این مانیپولیشن، توسط STM و در شرایط محیطی با خلا بسیار بالا و دمای پائین (~4K) انجام گرفته اسـت. ساختن اجسام نانویی توسط اتمهـا تحـت چنـین شـرایطی، خیلـی قابـل اسـتفاده و کـاربردی نیـست. روش جایگزین دیگر که پیشگامان آن گـروه Samuelson بودنـد در دانـشگاه Lund بـا اسـتفاده از مولکولهـایی در اندازه بزرگتر و توسط AFM انجام شد که در آن مولکولهای کلوئیدی در شرایط محیطی مونتاژ شـدند. گـروه Baur نیز به مدت چندین سال در آزمایشگاه USC که آزمایشگاه رباتیک مولکـولی اسـت ایـن روش را مـورد بررسی قرار داده اند که نمونه ای از کار آنها در شکل ۵-۱ مشاهده میگردد.



شکل ۵-۱- جابجائی ذرات کلوئیدی طلا با قطر 5-30nm توسط گروه Baur در آزمایشگاه USC[۱].

آنها ذرات کلوئیدی طلا (با قطر ۵-۳۰ نانومتر) را در دمای اتاق، شرایط محیطی، و روی صفحه مبنایی[۱۲] از جنس میکا حرکت دادند. در سمت چپ شکل طرح اتفاقی اولیه نشان داده شده و در سمت راست کلمه "USC" که با این روش نوشته شده، مشاهده می شود[۲۹]. Miyazaki و همکارانش مونتاژ ذرات کروی پلاستیکی با قطری حدود دو میکرومتر را برای ساخت هرمی سه بعدی، بر اساس استفاده از دو پروب پیشنهاد نمودند ولی به علت نیروهای چسبندگی، در قرار دادن آخرین ذره فوقانی با مشکل مواجه شدند. Tanikawa و همکارانش برای حرکت دادن ذرات کروی ۲ میکرومتری شیشه در حالت سه بعدی، دست دو انگشتی میکرومتری شبیه قاشق چینی را ارائه کردند. از پروب میکروسکوپهای اسکنر میله ای، D. Eigler ، C. Baur برای نانومانیپولیشن ذرات، D.Schafer و M. Sitti برای راندن ذرات، و Stark برای بریدن و تشریح کروموزوم استفاده نموده اند[۵۷ و ۵۹].

از زمان کشف SPM ها، AFM ابزار اصلی مد تماسی بوده و برای مانیپولیت ساختمان ماکرومولکولهای بیولوژیکی و بیومولکولهای منفرد نیز مورد استفاده قرار گرفته است و در این زمینه منحصر به فرد است. زیرا نه تنها امکان تصویر برداری از مو لکولهای منفرد را دارا بلکه امکان مانیپولیت و دستکاری آنها را نیز بوجود می آورد. از زمان اختراع AFM پیشرفت های جالبی نیز در تصویر برداری از مولکولهای زیستی بوجود آمده است. این پیشرفت ها با تلاش آزمایشگاههای بیشماری در زمینه های مختلفی چون بهینه سازی ابزارسازی توسط Hansma و همکاران ،Putman و همکاران، Viani و همکارانش، Humphris و همکاران، بهینه سازی

[12] Substrate

پروب های AFM توسط Walters و همکاران, Cheung و همکاران و Schmitt و همکاران، بهینه سازی روشهای آماده سازی نمونه توسط Muller، Wagner، و شرایط فیلتر تصاویر توسط Muller و سایر محققان، بدست آمده اند. این ابزار خصوصیات ویژه ای دارد که در تحقیقات بیولوژیکی بسیار مفید هستند. اولاً مشاهده ساختمان های بیولوژیکی در محیط طبیعی توسط آنها امکان پذیر می گردد، دوما AFM دارای نسبت بالای سیگنال به نویز است که امکان مشاهده پروتئینهای منفرد را با دقتی بالاتر از 1nm بوجود می آورد، سوماً تغییرات ناشی از انطباقات بیومولکولهای منفرد را می توان مستقیماً مشاهده نمود. برای مثال هم اکنون می توان کارکرد پروتئین ها را مشاهده نمود که این کار توسط محققان از جمله Grandbois , Kasas ، و Viani انجام شده است.

نهایتا محققان بسیاری از جمله Schoenenberger و Hoh، Thalhammer ، و Fotiadis، در چند سال گذشته به این نتیجه رسیده اند که ترکیبی از تصویر برداری و مانیپولیشن توسط AFM، امکان ایجاد تغییرات دقیق و کنترل شده در سیستمهای بیو لوژیکی را از یک سلول تا حد مولکولهای منفرد فراهم می کند. از کاربردهای AFM در تصویر برداری و نانومانیپولیشن می توان به جدا سازی کروموزوم DNA برای بررسی ژنتیکی، قطع زنجیره آنتی بادی- آنتی ژن، تشریح غشاهای بیو لوژیکی، تشریح نانویی ترکیبات پروتئین، و جایگذاری کنترل شده انواع پروتئین ها می توان اشاره کرد. با کاربرد فناوریهای نانو، اطلاعات جدیدی در خصوص ساختمان، عملکرد و نحوه جایگیری بیو مولکولها بدست می آید. اولین مانیپولیشن کنترل شده بیو مولکولها توسط Hansma و همکارانش و بوسیله AFM، بر روی مواد ژنتیکی انجام شد. در این تحقیق، ابتدا DNA را جدا کردند و روی سطحی از جنس میکا نشاندند[۱۳] و سپس تشریح نمودند. این عمل توسط Henderson، و نیز Vesenka و همکاران در هوا، و توسط Hansma و همکاران و با افزایش نیروی اعمالی به پروب AFM تا حدود ۵ نانو نیوتن و در پروپانول، تکرار شد که به این ترتیب برای اولین بار کالبد شکافی در مقیاس نانومتر انجام شد. AFM را می توان برای کالبد شکافی دقیق و جدا سازی منظم

[13] Absorbed