

## Study of DNA nanoparticle manipulation using atomic force microscopy based on finite element method using theories of contact mechanics

Mohammad Khalili <sup>a\*, e</sup>, Moein Taheri <sup>b, e</sup>, Seyed Hasan Bathaee <sup>c</sup>, Faezeh Shakeri <sup>d</sup>

<sup>a</sup> Assistant Professor, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Arak University, Arak, Iran

<sup>b</sup> Associate Professor, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Arak University, Arak, Iran

<sup>c</sup> MSc. Student, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

<sup>d</sup> Bachelor Student, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Arak University, Arak, Iran


<sup>e</sup> Institute of Advanced Technology, Arak University, Arak, PO Box 38156-8-8349, Iran

### Original Article

Use your device to scan  
and read the article online



**Citation:** Khalili M, Taheri M, Bathaee S H, Shakeri F. 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*. 2022; 1(2):155-174.

 <https://10.52547/masm.1.2.155>

### KEYWORDS

Manipulation process,  
Atomic force microscope,  
DNA particle,  
Finite element method,  
Contact mechanics theories.

### ABSTRACT

Nanoparticle manipulation is a process in which particles are moved on a micro/ nanoscale scale using an atomic force microscope and has a wide range of applications from component production to the medical world. In this study, using the theories of contact mechanics of Hertz, JKR, DMT and BSP, as well as using the structure of the DNA biological cell using the Elman method using ABAQUS software to study the amount of displacement, acceleration, force, stress and velocity in time The DNA molecule is discussed on a base sheet and the factors that affect them. The results show that in the deformation between the target particles and the spherical tip of the needle, the Hertz model showed the least and the JKR model showed the highest deformation and penetration depth. By increasing the angle of the needle tip with the z-axis, the amount of penetration depth and deformation created between the particle and the base plate is reduced. Also, the graph of changes in each of the studied parameters of the effective factors per 20  $\mu\text{m}$  of displacement and 20 milliseconds of time for the DNA manipulation process has been calculated.

### Extended Abstract

#### 1. Introduction

Manipulation and related technology can be used to observe, evaluate, and move different materials in nanoscale, such as atoms, molecules, and even cells, bacteria, and viruses. Micro/nano robotics or manipulation of nanoparticles by atomic force microscopy is one of the important strategies for controlled displacement of atoms and molecules and their assembly to make micro/nanometer tools [1, 2]. The various stages of nanomanipulation are as follows: first, the base plate and the particles on it are imaged, then the tip is contacted with the target nanoparticle for nanomanipulation. In the displacement phase, the nanoparticle is stopped by the tip on the base plate and the base plate moves at a constant speed [3-6]. Atomic force microscope is a powerful nanotechnology imaging tool. The properties of nanomaterials such as topography, traction, adhesion, friction, electrical and magnetic properties are among the capabilities of atomic force microscopy in the field of nanotechnology [7]. Atomic force microscope is used to make nanostructured samples consisting of colloidal nanoparticles. In the process of precise manipulation, the atomic force microscope is used only as a tool for moving nanoparticles [8]. Viruses are nanoscale infectious agents. Genomic materials using atomic force microscopy in recent years have gained unprecedented knowledge of tensile properties and structural stability [9]. Techniques that make it possible to manipulate biological specimens and minimize damage to them. The use of microscopes is an atomic force. In general, the

\* Corresponding author. Tel.: 09397874885

E-mail address: m-khalili@araku.ac.ir

DOI: <https://10.52547/masm.1.2.155>

Received: September 06, 2021; Received in revised form: September 26, 2021; Accepted: January 15, 2022

2022 Published by Arak University Press. All rights reserved.



manipulation of biological particles using an external force has advantages and disadvantages [10]. Adhesion between micro or nanoparticles is a major concern in nanoscale control. Ideally, this adhesion force should be reduced or eliminated. The adhesion force deals directly with the chemical structure of the body surface [11]. Young's modulus is one of the important mechanical properties that plays an important role in the deformation of particles under pressure or tension. The modulus of elasticity of DNA is also considered as a particle whose deformation in laboratory displacements can have an important effect on the results of experiments [12, 13]. Arai et al. Performed experiments in electron microscopy, including electron transfer microscopy, scanning electron microscopy, and bio-scanning electron microscope, for three-dimensional, real-time nanomanipulation, nanostructure, and nanomontage [14].

## 2. modeling

In the modeling section, first the theories of contact mechanics are described, then the structure and mechanical properties of the sample used in this research are investigated. The finite element method used by Abaqus software is also described. In general, modeling is done in three parts.

- ❖ Contact theories
- ❖ Kinematic and dynamic modeling
- ❖ Finite Element Method

## 3. Results

Figure 9 shows the displacement of the worlds in terms of time. The force exerted by the atomic force microscope tip is called the critical force. When the critical force has reached its required level, the cell starts moving on the base plate. In this diagram, the horizontal axis is the time in seconds and the vertical axis is the displacement in micrometers. At the initial moment, there are no displacement coordinates at the point of origin, but after less than 0.005 seconds, the critical force is reached and the cell begins to move on the base plane. Gradually, the amount of movement has increased. The changes in the acceleration of the DNA cell are shown on the base screen in Figure 10. The acceleration of the DNA particle has fluctuated a lot, due to the unevenness of the adhesion on the base plate. Critical time is the length of time that a diurnal particle changes from static to dynamic. Before the critical force overcame the adhesion and friction forces, the acceleration value was zero, but after the critical force was overcome, the particle started to move at a very high acceleration. The forces of force and critical time, which are the main factors of manipulation in the dimensions of micro and nanoparticles, can be understood in Figure 11. Critical force is the amount of force that causes a particle to move on a base plane. This force must overcome the sum of the forces of friction and adhesion without damaging the particle and cause the particle to move on the base plate. Figure 12 is a diagram of the stress applied to the DNA particle on the base plane. The stress applied to the particle, which is directly related to the amount of force, is ascending and increasing throughout the displacement. It was also the criterion used for Phonemes stress calculations. Figure 13 shows the changes in the velocity of the DNA cell on the base screen. The maximum speed value is obtained at 0.008 seconds with a value of 1.4 mm/s. After that, the speed has decreased to a time of 0.01 seconds and has reached 0.9 mm/s. At the final moment of the graph equal to 0.02 seconds, the magnitude of the speed has reached 0.8 mm / s. The force changes in displacement for a DNA cell are shown on the base plate in Figure 14. Unlike time-based graphs, in this figure, values of force are applied to the particle from the initial moment of particle displacement on the base plane. The displacement of the target particle on the base plane is highly dependent on the time factor and the displacement, and this factor strongly influences the rate of change of environmental factors. The amount of stress change of a DNA cell on the base plane in terms of displacement is shown in Figure 15.

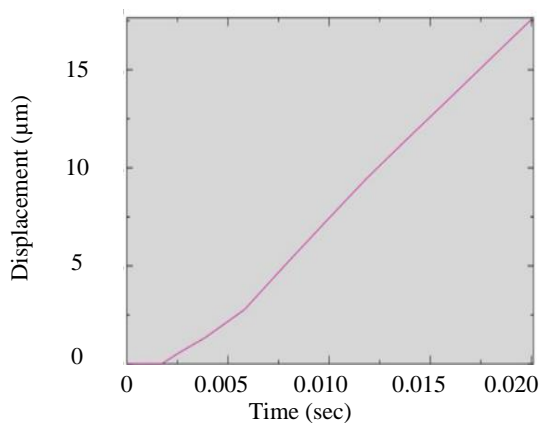


Figure 9. Moving data on the base screen over time

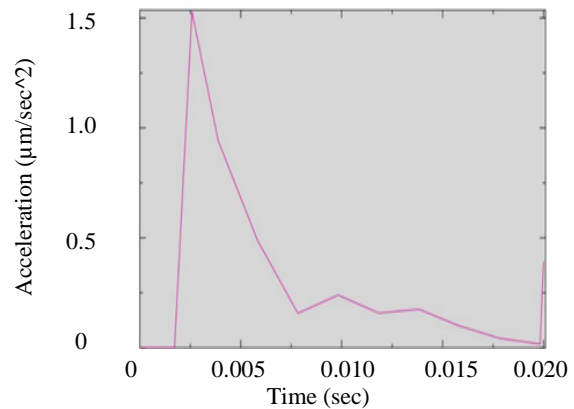


Figure 10. Acceleration of the data on the base plane over time

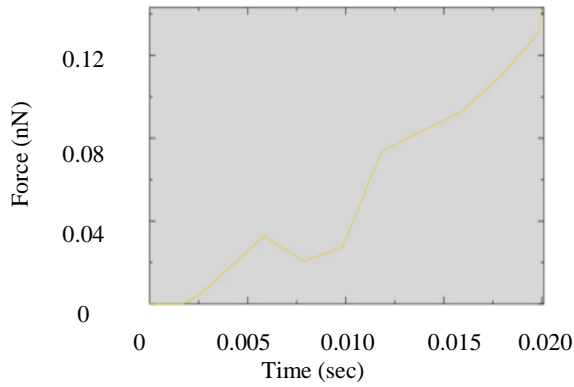


Figure 11. The force of DNA on the base plane in terms of time

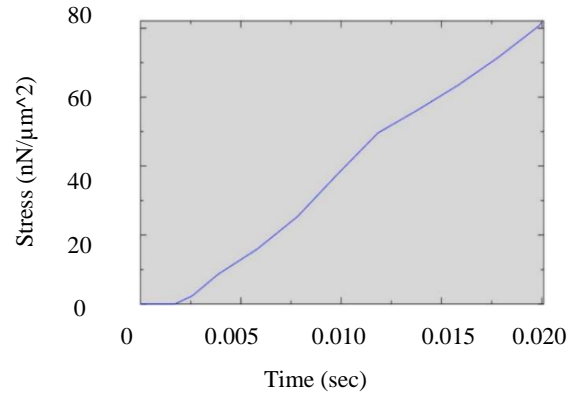


Figure 12. Dynamic stress on the base plane over time

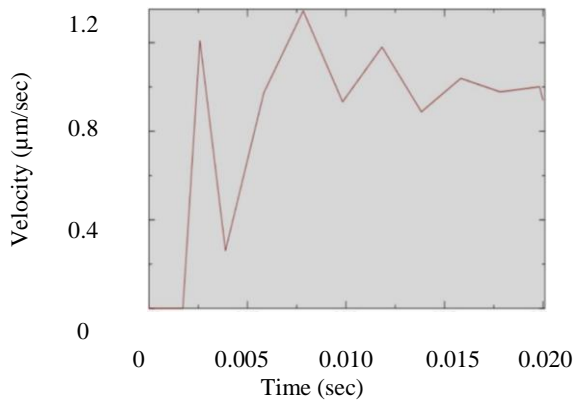


Fig.13. The velocity of the DNA on the base plane over time

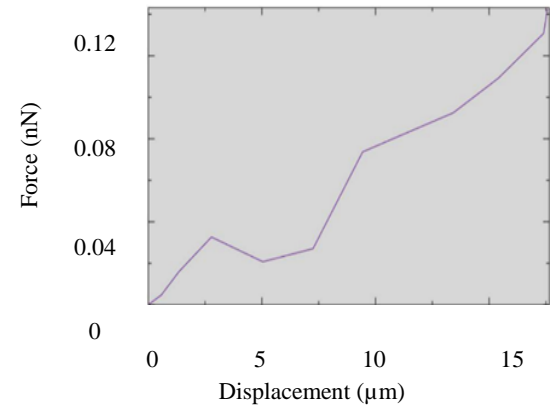


Fig. 14. Dynamic force on the base plane in terms of displacement

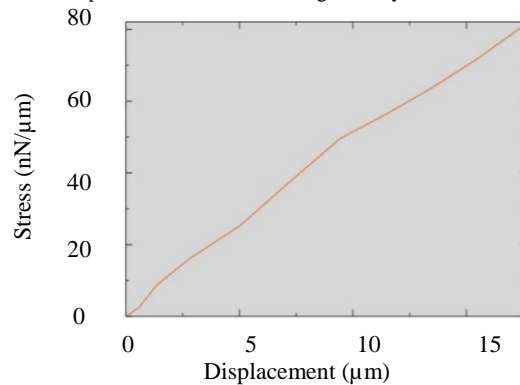


Figure 15. DNA stress on the base plane in terms of displacement

#### 4. Conclusion

In this paper, the process of manipulating a DNA cell was examined using an atomic force microscope. Atomic force microscopy, in addition to analyzing the surface of particles at very small nanoscale/micro scales, also analyzes force and mechanical properties. Two modelings for this process; Contact mechanics and kinematics are used. In the section on contact theory, the forces of adhesion and the radius and depth of penetration of the two main factors of this process, namely the tip beam of the atomic force microscope and the DNA cell, have been studied. Then the position of the particle on the base plane in the y and z directions is obtained and its velocity and acceleration equations are extracted, and assuming the atomic force microscope beam as a spring, the forces in both directions are also obtained. Then, using the finite element method, which is one of the most accurate computational sciences, along with programming the modelings in Fortran language and inserting them into the subroutine of Abaqus software, the mechanical properties of this cell on a base plate are obtained. Also, the main result for a particle with a spherical geometry and according to its material, which is one of the main structures of the human body, that is, the DNA, has two general characteristics.

- ❖ Very low resistance to force applied by the tip of a microscope atomic force
- ❖ Very high penetration depth and contact radius under loading conditions

To further optimize and streamline this process, further research suggests the development of a new contact model based on the mechanics of the continuous environment, the thermodynamic properties of the cell, the biological environment, and the complex shapes of the biological cells. The molecular dynamics method can also be very effective in simulating the moment of contact between a biological cell and a needle of an atomic force microscope.



## مطالعه منیپولیشن نانوذره دی‌ان‌ای با بهره‌گیری از میکروسکوپ نیروی اتمی بر پایه‌ی روش المان محدود با استفاده از تئوری‌های مکانیک تماس

محمد خلیلی الف<sup>۱\*</sup>، معین طاهری ب<sup>۲</sup>، سید حسن بطحائی ج<sup>۳</sup>، فائزه شاکری د<sup>۴</sup>

الف<sup>\*</sup> استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اراک، اراک، ایران، [m-khalili@araku.ac.ir](mailto:m-khalili@araku.ac.ir)

ب<sup>۲</sup> دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اراک، اراک، ایران، [m-taheri@araku.ac.ir](mailto:m-taheri@araku.ac.ir)

ج<sup>۳</sup> دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مهندسی ساخت و تولید، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران، [h.bathae@modares.ac.ir](mailto:h.bathae@modares.ac.ir)

د<sup>۴</sup> دانشجوی کارشناسی، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اراک، اراک، ایران، [faeze.shakeri79@gmail.com](mailto:faeze.shakeri79@gmail.com)

پژوهشکده فناوری‌های نوین، دانشگاه اراک، اراک، ایران، صندوق پستی ۳۸۱۵۶-۸-۸۳۴۹

چکیده	واژگان کلیدی
<p>منیپولیشن نانو ذرات فرآیندی است که در طی آن با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی ذرات در مقیاس میکرو/نانو جابه‌جا می‌شوند و گستره‌ی کاربردی بسیار زیادی از تولید قطعات تا دنیای پزشکی دارد. در این مطالعه با استفاده از تئوری‌های مکانیک تماس هر تیز، جی‌کار، دی‌ام‌تی و بی‌سی‌پی و همچنین استفاده از ساختار سلول زیستی دی‌ان‌ای با بهره‌گیری از روش المان محدود به کمک نرم‌افزار آباکوس به مطالعه میزان جابه‌جایی، شتاب، نیرو، تنش و سرعت بر حسب زمان و جابه‌جایی مولکول دی‌ان‌ای بر روی یک صفحه‌ی مینا و عوامل مؤثر بر آن‌ها پرداخته شده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که در تغییر شکل صورت گرفته بین ذرات هدف و نوک کروی سوزن، مدل هر تیز کمترین و مدل جی‌کار بیشترین تغییر شکل و عمق نفوذ را نشان داده‌اند. با افزایش زاویه‌ی نوک سوزن با محور Z، میزان عمق نفوذ و تغییر شکل ایجاد شده بین ذره و صفحه‌ی مینا کاهش یافته است. همچنین نمودار تغییرات هر یک از پارامترهای مورد مطالعه به ازای ۲۰ میکرومتر جابه‌جایی و ۲۰ میلی‌ثانیه زمان برای فرآیند منیپولیشن دی‌ان‌ای محاسبه شده است.</p>	<p>فرآیند منیپولیشن، میکروسکوپ نیروی اتمی، دی‌ان‌ای، روش المان محدود، تئوری‌های مکانیک تماس.</p> <p>تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۶/۱۵ تاریخ بازنگری: ۱۴۰۰/۰۷/۰۴ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۱۰/۲۵</p>

### ۱- مقدمه

از منیپولیشن<sup>۱</sup> و فناوری مربوط به آن در جهت مشاهده، ارزیابی و جابه‌جایی مواد مختلف در اندازه‌های نانو مانند اتم‌ها، مولکول‌ها و حتی سلول‌ها، باکتری‌ها و ویروس‌ها می‌توان استفاده نمود. میکرو/نانو رباتیک یا منیپولیشن نانوذرات توسط میکروسکوپ نیروی اتمی<sup>۲</sup> یکی از راهکارهای مهم برای جابه‌جایی کنترل‌شده اتم‌ها و مولکول‌ها و مونتاژ آن‌ها جهت ساخت ابزارهای میکرو/نانومتری می‌باشد [۱ و ۲]. مراحل مختلف نانومنیپولیشن بدین ترتیب است که ابتدا از صفحه‌ی مینا و ذرات روی آن تصویربرداری می‌شود، سپس جهت انجام نانومنیپولیشن نوک سوزن در تماس با نانوذره‌ی هدف قرار می‌گیرد. در مرحله‌ی جابه‌جایی، نانوذره توسط نوک سوزن روی صفحه‌ی مینا متوقف شده و صفحه‌ی مینا با سرعت ثابت حرکت می‌کند [۳-۶]. ابزار قدرتمند تصویربرداری نانو تکنولوژی میکروسکوپ نیروی اتمی است. خواص نانو مواد مانند توپوگرافی، کشش، چسبندگی، اصطکاک، خواص الکتریکی و مغناطیسی از توانایی‌های میکروسکوپ نیروی اتمی در عرصه فناوری نانو است [۷]. میکروسکوپ

<sup>1</sup> Manipulation

<sup>2</sup> Atomic Force Microscopy (AFM)

نیروی اتمی برای ساخت نمونه‌های نانوساختار متشکل از نانوذرات کلئیدی به کار می‌رود. در فرآیند مینیولیشن دقیق میکروسکوپ نیروی اتمی تنها به‌عنوان یک ابزار برای جابه‌جایی نانوذرات مورد استفاده قرار می‌گیرد [۸]. ویروس‌ها از عوامل عفونی در مقیاس نانو هستند، مواد ژنومیک<sup>۳</sup> با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی در سال‌های اخیر دانش بی‌سابقه‌ای را نسبت به خواص کششی و پایداری ساختاری به دست آورده‌اند [۹]. از تکنیک‌هایی که امکان مینیولیشن نمونه‌های بیولوژیک<sup>۴</sup> را ایجاد می‌کند و آسیب رساندن به آن‌ها را به کمترین میزان و یا به صفر می‌رساند. استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی است. به‌صورت کلی مینیولیشن ذرات بیولوژیکی با استفاده از یک نیروی خارجی دارای مزایا و معایب است [۱۰]. چسبندگی بین میکرو یا نانوذرات دغدغه اصلی در زمینه‌ی کنترل در مقیاس نانو است. ایده‌آل‌ترین حالت ممکن کاهش یا از بین بردن این نیروی چسبندگی می‌باشد. نیروی چسبندگی به‌طور مستقیم با ساختار شیمیایی سطح جسم سروکار دارد [۱۱]. مدول یانگ یکی از خواص مهم مکانیکی است که در تغییر شکل ذرات تحت فشار یا کشش نقش مهمی ایفا می‌نماید. مدول الاستیسیته‌ی دی‌ان‌ای<sup>۵</sup> نیز، به‌عنوان ذره‌ای که تغییر شکل آن در جابه‌جایی‌های آزمایشگاهی می‌تواند تأثیر مهمی در نتایج آزمایش‌ها داشته باشد، مورد توجه محققین قرار گرفته است [۱۲ و ۱۳]. آرائی و همکاران آزمایش‌هایی را با انواع میکروسکوپ الکترونی<sup>۶</sup> از جمله میکروسکوپ انتقال الکترونی<sup>۷</sup>، میکروسکوپ الکترونی روبشی<sup>۸</sup>، میکروسکوپ الکترونی روبشی زیستی<sup>۹</sup>، برای نانومینیولیشن، نانوساخت و نانومونتاژ سه‌بعدی و در زمان واقعی ارائه کرده‌اند [۱۴].

کوریام و همکارانش به استفاده از مدل‌های مختلف اصطکاکی شامل کولمب<sup>۱۰</sup>، اچ‌کا<sup>۱۱</sup> و لاگره<sup>۱۲</sup> در مینیولیشن دوبعدی پرداخته و تأثیر پارامترهای مختلف بر نیرو و زمان بحرانی مینیولیشن با استفاده از این مدل‌ها را بررسی نموده‌اند [۱۵]. کوریام و همکارانش به استفاده از مدل تماسی جی‌کآر<sup>۱۳</sup> در مینیولیشن ذرات بیولوژیکی دی‌ان‌ای در محیط‌های هوا و مایع پرداخته‌اند [۱۶]. کوریام و همکارانش همچنین مدل‌های تماسی را برای ذرات به شکل استوانه‌ی پخ خورده جهت استفاده در مینیولیشن دوبعدی ذرات بیولوژیکی با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی توسعه داده‌اند [۱۷]. همچنین کوریام و طاهری تئوری‌های تماسی کروی را جهت استفاده در مینیولیشن دوبعدی ذرات بیولوژیکی با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی توسعه داده‌اند [۱۸]. کوریام و همکارانش همچنین به مینیولیشن دوبعدی نانوذرات استوانه‌ای زبر بر روی سطوح صاف [۱۹] و زبر [۲۰] با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی و آنالیز حساسیت تأثیر پارامترهای مختلف بر میزان نیرو و زمان بحرانی نانومینیولیشن پرداخته‌اند [۲۱]. کوریام و طاهری به بررسی مینیولیشن دوبعدی ذرات به شکل استوانه پخ خورده نیز پرداخته‌اند [۲۲]. دزائی و همکارانش به بررسی روش‌های موجود برای مینیولیشن سلول‌های بیولوژیکی پرداخته‌اند. از آنجا که مینیولیشن زیستی شامل طیف گسترده‌ای از رشته‌ها، از زیست‌شناسی گرفته تا مهندسی است، آن‌ها بر روی برخی از روش‌های کلیدی تمرکز نموده‌اند که منجر به یک سیستم مینیولیشن زیستی کارآمد شود. برخی از روش‌های کلیدی مورد بحث در این مقاله برای مینیولیشن سلول به استفاده از مغناطیس، رویکردهای مبتنی بر سیستم‌های میکروالکترومکانیکی، اپتیک، میدان الکتریکی و روش‌های مکانیکی مربوط می‌شوند [۲۳]. آلونسو و گلدمن با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی نمونه‌های بیولوژیکی بدون پوشش را بررسی نموده‌اند [۲۴]. طاهری و میرزالیو به استخراج تجربی مدول یانگ سلول سرطانی MCF-7 با استفاده از مدل‌های تماسی کروی پرداخته‌اند [۲۵]. طاهری به بررسی تأثیر مدل‌های اصطکاکی مختلف بر استخراج تجربی نیرو و زمان بحرانی نانومینیولیشن سه‌بعدی بافت سرطانی روده‌ی بزرگ پرداخته است [۲۶]. فریدونی و همکارانش به بررسی میزان اثرگذاری پارامترهای مختلف بر نیرو در فاز دوم نانومینیولیشن دوبعدی پرداخته‌اند [۲۷]. با توسعه‌ی مدل تماسی هرتز، چادوری و همکاران

<sup>3</sup> Genomic

<sup>4</sup> Biologic

<sup>5</sup> Deoxyribonucleic acid (DNA)

<sup>6</sup> EM

<sup>7</sup> TEM

<sup>8</sup> SEM

<sup>9</sup> E-SEM

<sup>10</sup> Coulomb

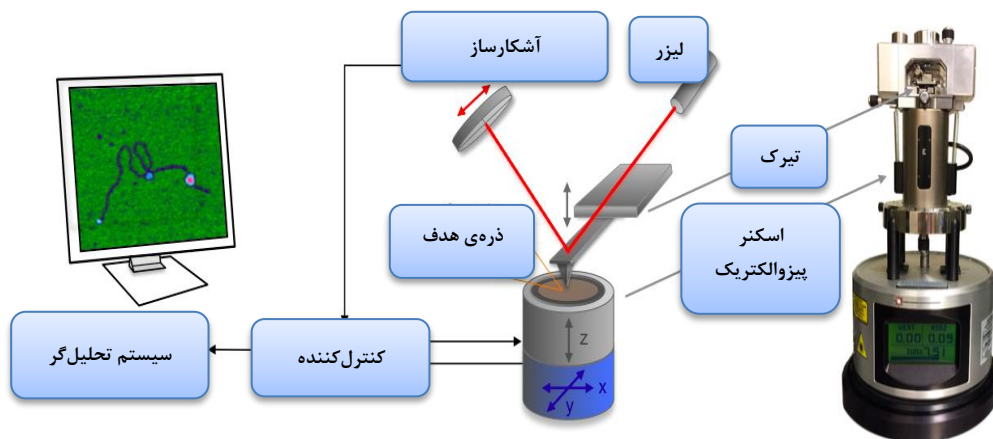
<sup>11</sup> HK

<sup>12</sup> LuGre

<sup>13</sup> JKR

یک فرمول کلی برای تغییر شکل یک غلتک استوانه‌ای تاج‌دار فشرده شده بین دو صفحه‌ی تخت را به دست آورده‌اند [۲۸]. کورایم و همکاران هم‌چنین در پژوهشی دیگر تغییر شکل نانوذرات طلا تحت تأثیر مینیپولیشن سه‌بعدی و اثر زاویه‌ای بر مبنای مکانیک تماس با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی را بررسی نموده‌اند [۲۹]. از مدل‌های تماسی تعمیم‌یافته پس از تئوری هرتز [۳۰] می‌توان به جی‌کار [۳۱] و دی‌ام‌تی<sup>۱۴</sup> [۳۲] اشاره کرد که در این مدل‌ها با در نظر گرفتن نیروی چسبندگی نواقص تئوری هرتز تا حدود بسیار زیادی اصلاح شده است. زارعی و همکارانش به بررسی فاز دوم مینیپولیشن با استفاده از مدل‌های اصطکاکی کولمب، اچ‌کا و لاگره پرداخته‌اند. نتایج نشان داده است که بیشترین مقدار جابه‌جایی و سرعت بر اساس مدل اصطکاکی لاگره و کمترین میزان بر اساس مدل اصطکاکی کولمب است [۳۳]. طاهری و بطحائی با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی و بر مبنای تئوری تماسی هرتز و جی‌کار به استخراج مدول یانگ سلول سرطانی معده پرداخته‌اند [۳۴].

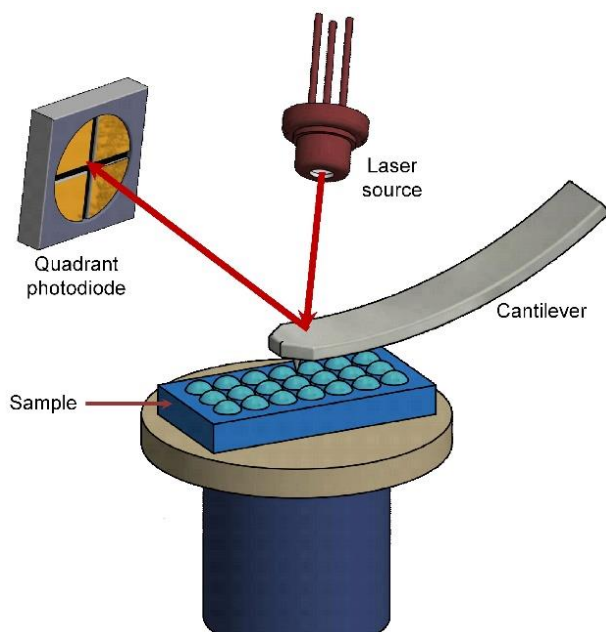
در این مقاله با استفاده از سه بخش مدل‌سازی بررسی تئوری‌های تماسی، مدل‌سازی سینماتیکی-دینامیکی و روش المان محدود با استفاده از نرم‌افزار آباکوس به مطالعه پارامترهای محیطی سلول زیستی دی‌ان‌ای بر روی صفحه‌ی مینا پرداخته شده است. روابط و فرمولاسیون مکانیک تماس، سینماتیک، دینامیک و هم‌چنین خواص مکانیکی ذره‌ی هدف، خواص مکانیکی و ابعادی میکروسکوپ نیروی اتمی و هم‌چنین روش المان محدود از مقادیر اولیه و ضروری برای این تحقیق بوده است. بر این مبنای میزان تغییرات هر یک از پارامترها به تفصیل آمده است، که در بخش شبیه‌سازی شرح داده شده است. در شکل ۱ شماتیک کلی فرآیند مینیپولیشن مبتنی بر میکروسکوپ نیروی اتمی نشان داده شده است. اجزای اصلی این فرآیند عبارت‌اند از تیرک، سوزن، اسکنر پیزوالکتریک، منبع لیزر، آشکارساز، نمونه، کنترل‌کننده و سیستم رایانه.



شکل ۱- شماتیک فرآیند نانومینیپولیشن مبتنی بر میکروسکوپ نیروی اتمی

شکل ۲ سازوکار میکروسکوپ نیروی اتمی را نمایش می‌دهد. نحوه‌ی عملکرد دستگاه میکروسکوپ نیروی اتمی به این صورت است که سطح نمونه را توسط یک سوزن تیز، به طول ۲ میکرون و غالباً قطر نوک کمتر از ۱۰ نانومتر آنالیز می‌کند. معمولاً سوزنی از جنس الماس در انتهای آزاد تیرک به طول حدود ۱۰۰ تا ۴۵۰ میکرون که نوک آن از تک اتم الماس می‌باشد قرار دارد. نیروهای بین سوزن و سطح نمونه باعث خم شدن یا انحراف تیرک شده و یک آشکارساز میزان انحراف تیرک را درحالی‌که سوزن سطح نمونه را روبش می‌کند یا نمونه در زیر سوزن روبش می‌شود اندازه‌گیری می‌کند. یک اشعه لیزری به پشت تیرک به سمت یک آشکارساز نوری حساس به موقعیت منعکس می‌شود. با خم شدن تیرک محل اشعه لیزر روی آشکارساز تغییر کرده و آشکارساز نوری می‌تواند جابجایی به کوچکی ۱۰ آنگستروم را اندازه‌گیری کند.

<sup>14</sup> DMT



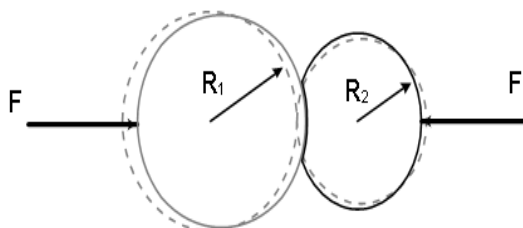
شکل ۲- مکانیزم عملکرد میکروسکوپ نیروی اتمی

## ۲- مدل سازی ریاضی

در بخش مدل سازی ابتدا به تشریح تئوری های مکانیک تماس پرداخته شده است، سپس ساختار و خواص مکانیکی نمونه ی مورد استفاده در این پژوهش مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین روش المان محدود که با استفاده از نرم افزار آباکوس مورد استفاده قرار گرفته است نیز بیان شده است. به طور کلی مدل سازی در سه بخش صورت گرفته است.

- تئوری های تماس
- مدل سازی سینماتیکی و دینامیکی
- روش المان محدود

تماس اولیه ی دو کره در یک نقطه و یا در امتداد یک خط رخ می دهد، که در شکل ۳ نمایش داده شده است.



شکل ۳- تماس دو کره

## ۲-۱- مدل های مکانیک تماس

### ۲-۱-۱- تئوری هرتز

تئوری هرتز نیروهای چسبندگی را در نظر نمی گیرد. در واقع اگر نیروهای سطحی موجود باشند مدل تماسی هرتز کارایی خود را برای بارگذاری های کم از دست می دهد، در منیپولیشن نانوذرات زیستی نیروهای چسبندگی نقش بسیار مهمی را ایفا

می‌کنند، از این رو مدل تماسی هر تیز، مدل بسیار مناسبی برای این منظور نمی‌باشد. روابط ۱ تا ۳ شامل نیروی چسبندگی، شعاع تماس و عمق نفوذ تئوری هر تیز در زیر آمده است [۳۰].

$$F_{(adh)Hertz} = 0 \quad (۱)$$

$$a_{Hertz} = \frac{4PR}{\pi E^*} \quad (۲)$$

$$\delta_{Hertz} = \frac{a^2}{2R} \left\{ 2 \ln \left( \frac{4R}{a} \right) - 1 \right\} \quad (۳)$$

در این روابط،  $F_{adh}$  نیروی چسبندگی،  $a_{Hertz}$  شعاع تماس،  $P$  نیروی بارگذاری،  $R$  شعاع ذره،  $E^*$  مدول الاستیسیته مؤثر ذره و  $\delta_{Hertz}$  عمق نفوذ است.

#### ۲-۱-۲- تئوری جی‌کآر

در مدل تماسی پیشنهادی جانسون و همکارانش نیروهای چسبندگی تنها در ناحیه تماس در نظر گرفته می‌شود و هر چه که از ناحیه تماس دورتر شویم، نیروهای چسبندگی به سمت صفر میل خواهند کرد. کارایی این مدل زمانی است که میزان نیروهای سطحی در مقابل میزان نیروی خارجی اعمال شده بیشتر باشد. نیروی چسبندگی، شعاع تماس و عمق نفوذ تئوری جی‌کآر از معادله‌ی ۴ تا ۶ بیان شده است [۳۱].

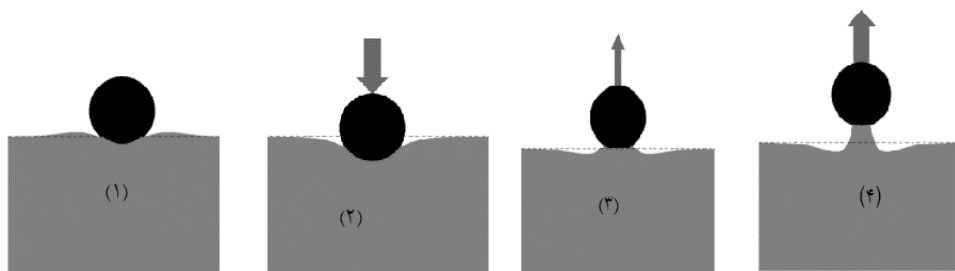
$$F_{(adh)JKR} = \left( \frac{\pi E^* a^2}{4R} - \sqrt{2\pi E^* \omega} \right) \quad (۴)$$

$$a_{JKR} = \left( \frac{2R^2 \omega}{\pi E^*} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (۵)$$

$$\delta_{JKR} = \left( \frac{a_{JKR}^2}{R} - \sqrt{\frac{8\pi \omega a_{JKR}}{3K}} \right) \quad (۶)$$

در این معادلات،  $F_{adh}$  نیروی چسبندگی،  $a_{JKR}$  شعاع تماس،  $\omega$  کار نیروی چسبندگی،  $R$  شعاع ذره،  $E^*$  مدول الاستیسیته مؤثر ذره و  $\delta_{JKR}$  عمق نفوذ است.

در شکل ۴ نیروی چسبندگی بر طبق مدل جی‌کآر به صورت شماتیک نشان داده شده است. مطابق شکل در مرحله ۲ عمق نفوذ به علت اعمال نیرو در حال افزایش می‌باشد و در مرحله ۳ به علت نیروی کششی کاهش می‌یابد. در مرحله ۳ و ۴ سطح مینا به صورت برآمده می‌باشد.



شکل ۴- شماتیک نیروی چسبندگی بر طبق مدل جی‌کآر و مراحل تغییر شکل ذره از سطح مینا

#### ۲-۱-۳- تئوری دی‌ام‌تی

این مدل توسط درزاگوییین- توپوروف ارائه شد، در این مدل فرض می‌شود که پروفیل سطح تغییر شکل یافته از مدل هر تیز پیروی می‌کند. معادلات نیروی چسبندگی، شعاع تماس و عمق نفوذ تئوری دی‌ام‌تی به شکل زیر است [۳۲].

$$F_{(adh)DMT} = 2\pi R\omega \quad (7)$$

$$a_{DMT} = \left[ \frac{R(F_{adh} + 2\pi R\omega)}{K} \right]^{\frac{1}{3}} \quad (8)$$

$$\delta_{DMT} = \frac{a_{DMT}^2}{R} \quad (9)$$

در این معادلات،  $F_{adh}$  نیروی چسبندگی،  $a_{DMT}$  شعاع تماس،  $\omega$  کار نیروی چسبندگی،  $R$  شعاع ذره،  $K$  ضریبی از مدول الاستیسیته مؤثر و  $\delta_{Hertz}$  عمق نفوذ است.

#### ۲-۱-۴- تئوری بی‌سی‌بی

تئوری تماسی بی‌سی‌بی یک مدل نیمه تجربی است. تئوری هرگز نیروهای سطحی را در نظر نگرفته است، نظریه‌ی دی‌ام‌تی یک گسست شدید در شیب تماسی را پیش‌بینی می‌کند و در نظریه‌ی جی‌ک‌آر پیش‌بینی هیچ نیروی جاذبه‌ای قبل از تماس نشده است. مدل بی‌سی‌بی نماینده‌ی رفتار ترکیبات بسیاری از مواد سوزن- نمونه می‌باشد. معادلات مدل نیمه‌تجربی بی‌سی‌بی در زیر آمده است.

$$F_{(adh)BCP} = \left( \frac{3\pi\omega K a_{BCP}^3}{2} \right)^{\frac{1}{2}} + \pi\omega R \quad (10)$$

$$a_{BCP} = \frac{R}{K} \left[ F_{adh} + \frac{7}{4}\pi\omega R + \left( \frac{33}{16}(\pi\omega R)^2 + \frac{3}{2}(\pi\omega R F_{adh}) \right)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{3}} \quad (11)$$

$$\delta_{BCP} = \frac{a_{BCP}^2}{R} - \left( \frac{\pi^2\omega^2 R}{K^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (12)$$

در این روابط،  $F_{adh}$  نیروی چسبندگی،  $a_{BCP}$  شعاع تماس،  $\omega$  کار نیروی چسبندگی،  $R$  شعاع ذره،  $K$  ضریبی از مدول الاستیسیته مؤثر و  $\delta_{BCP}$  عمق نفوذ است.

#### ۲-۲- مدل‌سازی سینماتیک و دینامیک

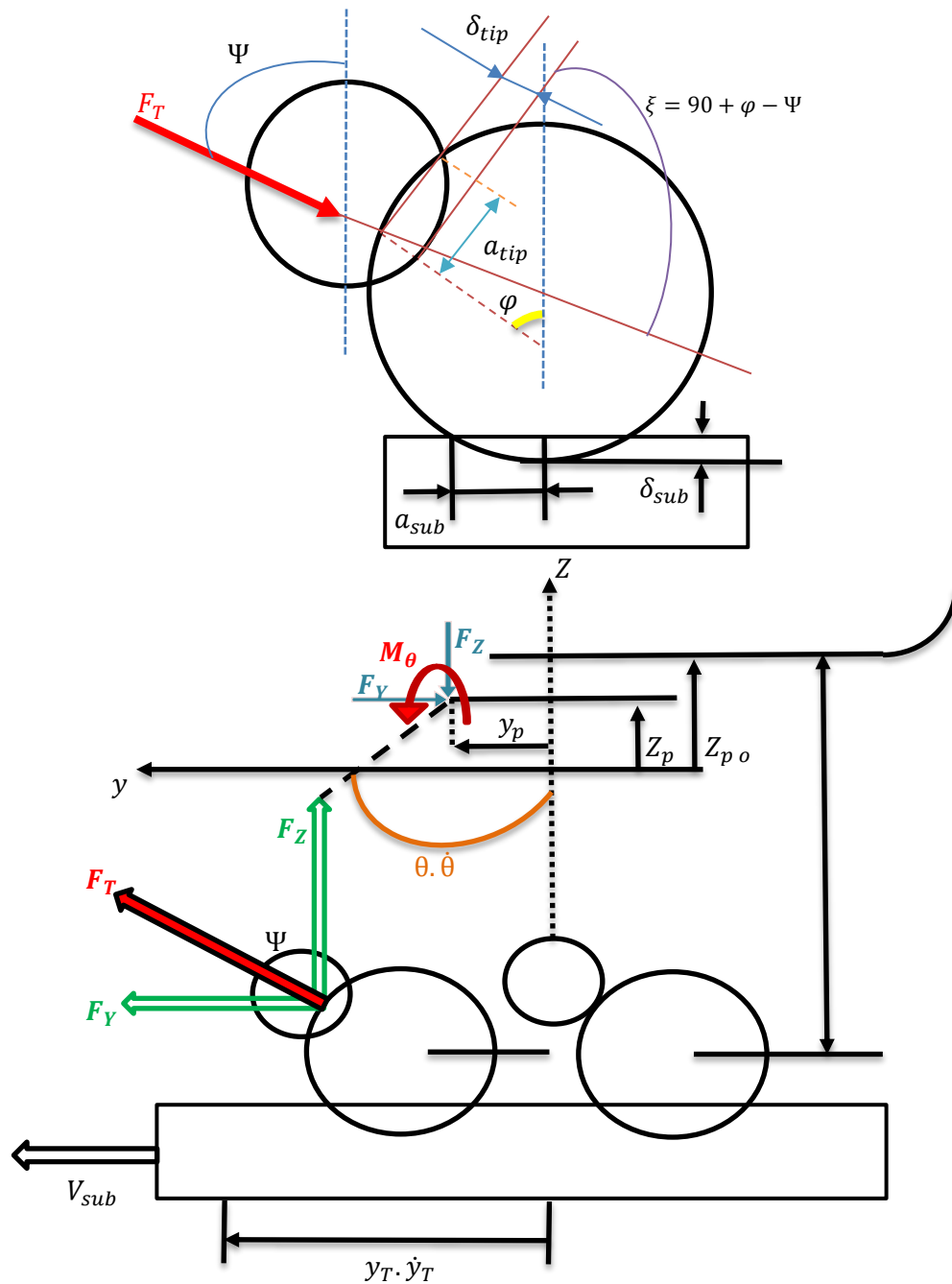
برای انجام منیپولیشن، سطح مبنا با سرعت ثابتی حرکت می‌کند که در این صورت پس از برخورد نوک سوزن به نانوذره مورد نظر، سوزن مانند یک تیر یکسر گیردار در نظر گرفته می‌شود و تا یک مقدار بحرانی تیر خم می‌شود و سپس نانوذره روی سطح جابجا می‌شود. از طرفی چون سرعت حرکت سطح مبنا ثابت است، شتاب ذره و نوک سوزن نیز صفر شده است. در شکل ۵ دیاگرام ذره بر روی سطح مبنا نشان داده شده است.

با توجه به شکل ۵ برای مختصات  $Y$  می‌توان معادله زیر را نوشت:

$$Y_{SUB} = y_p + H\sin\theta - (R_p - \delta_t + R_T)\sin\theta \quad (13)$$

که مطابق با شکل ۵  $y_p$  جابجایی بالای سوزن و  $H\sin\theta$  جابجایی پایین نوک سوزن در راستای  $Y$  می‌باشد. برای به دست آوردن معادلات سرعت و شتاب نانوذره از  $R_T$  شعاع نوک سوزن به دلیل کوچک بودن صرف‌نظر می‌گردد. چون سرعت در این مدل‌سازی ثابت فرض شده است پس،  $\dot{y}_{sub} = \dot{\theta} = 0$  است. همچنین مقدار  $H$  نیز ثابت است. در نتیجه معادله موقعیت نانوذره به‌صورت زیر است:

$$y_p = Y_{SUB} - H\sin\theta + (R_p - \delta_t)\sin\theta \quad (14)$$



شکل ۵- دیاگرام آزاد نانوذره بر روی سطح مبنا

مقادیر  $\delta_t$  و  $\theta$  متغیر می‌باشند. برای به دست آوردن معادله سرعت از رابطه‌ی ۱۴ مشتق‌گیری شده است و معادله سرعت نانوذره به دست آمده است.

$$\dot{y}_P = \dot{y}_{sub} - H\dot{\theta} \cos \theta + R_p\dot{\theta} \cos \theta - \delta_t \sin \theta - \delta_t \dot{\theta} \cos \theta \tag{15}$$

از عبارت  $\delta_t \dot{\theta} \cos \theta$  و  $R_p\dot{\theta} \cos \theta$  به دلیل کوچک بودن صرف‌نظر شده است و معادله ۱۶ بدین صورت مرتب درآمده است.

$$\dot{y}_P = \dot{y}_{sub} - H\dot{\theta} \cos \theta - \delta_t \sin \theta \tag{16}$$

از معادله (۱۶) مجدداً مشتق گرفته شده است و رابطه‌ی شتاب نانوذره در معادله ۱۷ نمایش داده شده است.

$$\ddot{y}_p = \ddot{y}_{sub} - H[\ddot{\theta} \cos \theta - \dot{\theta}^2 \sin \theta] - \ddot{\delta}_t \sin \theta - 2\dot{\delta}_t \dot{\theta} \cos \theta - \delta_t[\ddot{\theta} \cos \theta - \dot{\theta}^2 \sin \theta] \quad (17)$$

مقادیر  $\delta_t \dot{\theta}^2 \sin \theta$  و  $2\dot{\delta}_t \dot{\theta} \cos \theta$  نیز به دلیل بسیار ناچیز بودن قابل صرف نظر کردن می‌باشند. با توجه به فرضیات گفته شده معادله شتاب نانوذره نیز به صورت زیر ساده می‌شود.

$$\ddot{y}_p = H\dot{\theta}^2 \sin \theta - H\ddot{\theta} \cos \theta - \ddot{\delta}_t \sin \theta \quad (18)$$

در راستای z نیز مشابه حالت قبل برای موقعیت نانوذره معادله ۱۹ به دست آمده است.

$$z_p = z_{sub} + H \cos \theta + (R_p - \delta_t) \cos \theta + (R_p - \delta_s) \quad (19)$$

با یک بار مشتق گیری و ساده سازی معادله سرعت در رابطه ی ۲۰ به دست آمده است.

$$\dot{z}_p = \dot{z}_{sub} - H\dot{\theta} \sin \theta - \dot{\delta}_t \cos \theta + \delta_t \dot{\theta} \sin \theta - \dot{\delta}_s \quad (20)$$

همچنین برای محاسبه معادله شتاب در راستای z از رابطه ی ۲۰ دوباره مشتق گرفته شده است و معادله شتاب نانوذره در راستای z در رابطه ی ۲۱ نمایش داده شده است.

$$\ddot{z}_p = \ddot{z}_{sub} - H[\ddot{\theta} \sin \theta + \dot{\theta}^2 \cos \theta] - \ddot{\delta}_t \cos \theta + 2\dot{\delta}_t \dot{\theta} \sin \theta + \delta_t[\ddot{\theta} \sin \theta + \dot{\theta}^2 \cos \theta] - \ddot{\delta}_s \quad (21)$$

با اعمال فرض های در نظر گرفته شده در راستای Y برای راستای z معادله ساده شده شتاب برای نانوذره در راستای z به شکل زیر درآمده و در رابطه ی ۲۲ نشان داده شده است.

$$\ddot{z}_p = \ddot{z}_{sub} - H\dot{\theta}^2 \cos \theta - H\ddot{\theta} \sin \theta - \ddot{\delta}_t \cos \theta - \ddot{\delta}_s \quad (22)$$

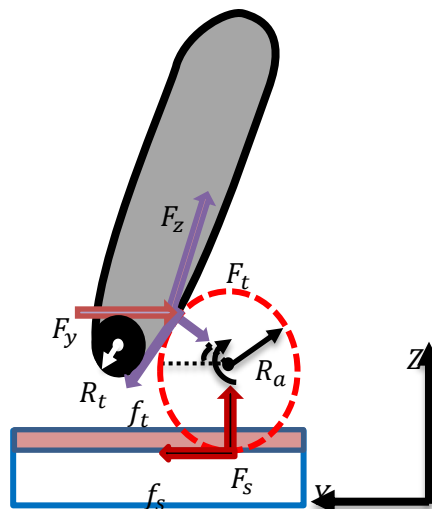
برای محاسبات معادلات دینامیکی نانوذره تیرک میکروسکوپ نیروی اتمی را به صورت یک فنر در نظر گرفته و معادلات گشتاوری فنری وارد بر تیرک را به دست می آوریم. معادلات در راستای y و z نمایش داده شده است.

$$F_y = k_y y_p \quad (23)$$

$$F_z = k_z z_p \quad (24)$$

$$M_\theta = k_\theta \times \theta \quad (25)$$

در شکل ۶ دیاگرام آزاد عکس العمل نیروها بین سوزن و نانوذره نمایش داده شده است.



شکل ۶ - دیاگرام آزاد

با استفاده از قانون دوم نیوتون و شکل ۶ معادلات نیرو برای نانوذره در رابطه‌های ۲۶ و ۲۷ آمده است.

$$F_Y - F_y = m\ddot{y} = m \frac{(\ddot{y}_T + \ddot{y}_p)}{2} \quad (26)$$

$$F_Z - F_z = m\ddot{z} = m \frac{(\ddot{z}_T + \ddot{z}_p)}{2} \quad (27)$$

در معادلات به دست آمده  $\ddot{y}_T$  و  $\ddot{y}_p$  به ترتیب شتاب ابتدا و انتهای سوزن می‌باشند. با جایگزین کردن روابط سینماتیکی به دست آمده در روابط دینامیکی، در نهایت نیرو نانوذره در راستای  $y$  و  $z$  به شرح زیر است:

$$F_Y = F_y - m \left[ \frac{H}{2} (-\ddot{\theta} \cos \theta + \dot{\theta}^2 \sin \theta) - \delta_t \sin \theta \right] \quad (28)$$

$$F_Z = F_z - m \left[ \frac{H}{2} (-\ddot{\theta} \sin \theta + \dot{\theta}^2 \cos \theta) + \delta_t \cos(\theta + \phi) + \delta_s \cos^2 \theta \right] \quad (29)$$

و در نهایت برآیند نیروها در محل تماس سوزن و نانوذره در معادله ۳۰ به دست آمده است.

$$F_T = \sqrt{F_Y^2 + F_Z^2} \quad (30)$$

برای زاویه نیروی سوزن با توجه به روابط ۲۸ و ۲۹ رابطه‌ی ۳۱ به دست آمده است.

$$\psi = \tan^{-1} \left( \frac{F_Y}{F_Z} \right) \quad (31)$$

بنابراین هنگامی که نانوذره توسط سوزن بر روی سطح رانده می‌شود، نیروی اصطکاک میان نانوذره و سطح را به صورت زیر می‌توان برحسب برآیند نیروی وارد بر نانوذره محاسبه کرد.

$$f_s = F_Y = F_T \sin \psi \quad (32)$$

برای آن که نانوذره شروع به لغزش بر روی سطح مبنا کند، شرط معادله زیر می‌بایستی برآورده گردد:

$$f_s > \mu_s F_s + \tau_s A_s \quad (33)$$

در جابه‌جایی نانوذرات در مقیاس نانو برخلاف مقیاس ماکرو، ابتدا حرکت لغزشی و سپس حرکت غلتشی صورت می‌گیرد. شرط لازم برای ایجاد حرکت لغزشی و غلتشی نانوذره بر روی سطح مبنا در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱- شرط لازم برای حرکت لغزشی و غلتشی نانوذره بر روی سطح مبنا

شرط لازم برای لغزش	شرط لازم برای غلتش
$F_s > \frac{\tau_s A_s}{\sin \psi - \mu_s \cos \psi}$	$F_r > \frac{\tau_s A_s + \tau_r A_t}{R(\sin \psi + \cos \zeta) + \mu_r \sin \zeta - \mu_r \cos \psi}$

در معادلات جدول ۱ ضریب اصطکاک نانوذره  $\mu_s$  و تنش برشی  $\tau_s$  بر روی سطح و سوزن برابر با یکدیگر و ثابت فرض شده‌اند. به این ترتیب با گذر مقدار نیرو از میزان بحرانی آن، فرآیند منیپولیشن آغاز می‌گردد. برای محاسبه  $A_s$  سطح مؤثر تماس از تئوری جی‌کآر استفاده شده است.

## ۲-۳- بررسی سلول دی‌ان‌ای

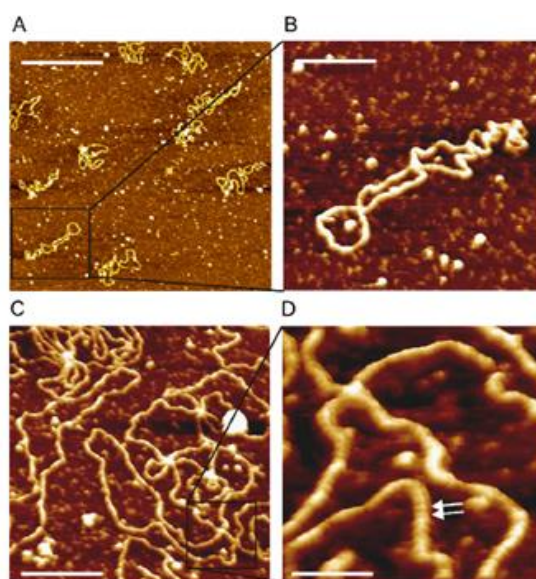
### ۲-۳-۱- بررسی مشخصات ساختاری دی‌ان‌ای

سلول اسید دی‌اکسی‌ریبونوکلئیک<sup>۱۵</sup> یا دی‌ان‌ای، یک اسید نوکلئیک<sup>۱۶</sup> است که ساختارهای ژنتیکی را در بر گرفته و در توسعه و عملکرد همه‌ی ارگانیسم‌های زنده‌ی شناخته شده استفاده می‌شود. اجزای دی‌ان‌ای که این اطلاعات ژنتیکی را حمل می‌کنند،

<sup>15</sup> Deoxyribonucleic acid

<sup>16</sup> Nucleic acid

ژن نامیده می‌شوند. اما رشته‌های دیگر دی‌ان‌ای اهداف ساختاری دارند یا در تنظیم استفاده از اطلاعات ژنتیک شرکت می‌کنند. دی‌ان‌ای از دو پلیمر<sup>۱۷</sup> بلند دارای واحدهای ساده به نام نوکلئوتید<sup>۱۸</sup> تشکیل می‌شود. شکل ۷ تصویر توپوگرافیک<sup>۱۹</sup> از ساختار دی‌ان‌ای را نشان می‌دهد. در تصاویر توپوگرافیک ساختارهای ریز دی‌ان‌ای با ارتفاع  $0.66 \pm 1.82$  نانومتر مشاهده شده است.



شکل ۷- تصویر توپوگرافیک دی‌ان‌ای روی سطح میکا در محلول بافر

## ۲-۳-۱- بررسی خواص مکانیکی دی‌ان‌ای

مدول یانگ یکی از خواص مهم مکانیکی است که در تغییر شکل ذرات تحت فشار یا کشش نقش مهمی ایفا می‌نماید. مدول یانگ با استفاده از مدل تماسی هرتز که سختی تماس را با خصوصیات الاستیک نمونه مرتبط می‌سازد، در بازه‌ی ۰/۱ تا ۰/۳ گیگاپاسکال قرار دارد. خواص مکانیکی ذره‌ی دی‌ان‌ای در جدول ۲ آمده است.

جدول ۲- خواص مکانیکی ذره‌ی دی‌ان‌ای

مدول یانگ (MPa)	ضریب پواسون	چگالی (Ton/mm <sup>3</sup> )	کار چسبندگی (J/m <sup>2</sup> )	DNA
100	0/35	$1/7 \times 10^{-9}$	$16 \times 10^{-4}$	

## ۲-۴- روش المان محدود

در این مقاله مدل‌سازی المان محدود با استفاده از نرم‌افزار آباکوس صورت گرفته است و فرضیات زیر در مدل‌سازی المان محدود لحاظ شده است:

- مسئله متقارن محوری است.
- رفتار سوزن میکروسکوپ نیروی اتمی الاستیک است.
- سلول همگن، یکسان و تراکم ناپذیر است.

در ماژول پارت برای ترسیم سلول یک ذره‌ی کروی به صورت توپر<sup>۲۰</sup> و تغییر شکل‌پذیر در فضای سه‌بعدی در نظر گرفته شده است. سوزن<sup>۲۱</sup> میکروسکوپ نیروی اتمی نیز به صورت صلب<sup>۲۲</sup> و پوسته‌ای<sup>۲۳</sup> در فضای سه‌بعدی رسم شده است. همچنین صفحه‌ی

<sup>17</sup> Polymer

<sup>18</sup> Nucleotides

<sup>19</sup> Topographic

<sup>20</sup> Solid

<sup>21</sup> Prob

<sup>22</sup> Rigid

<sup>23</sup> Shell

مینا مانند سوزن در این بخش طراحی شده است. پس از طراحی، خواص مکانیکی و هندسی ذره و میکروسکوپ نیروی اتمی وارد شده است. خواص دی‌ان‌ای در جدول ۲ آمده است. همچنین خواص هندسی و مکانیکی میکروسکوپ نیروی اتمی در جدول‌های ۳ و ۴ آمده است.

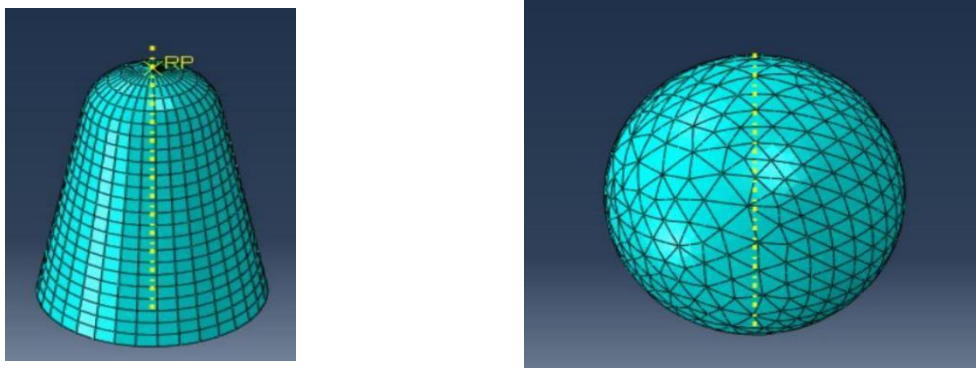
جدول ۳- خواص هندسی میکروسکوپ نیروی اتمی

$L (\mu m)$	$W (\mu m)$	$t (\mu m)$	$H (\mu m)$
225	48	1	12

جدول ۴- خواص مکانیکی میکروسکوپ نیروی اتمی

$E (GPa)$	$\nu$	$\rho (kg/m^3)$
169	0/27	2330

پس از طراحی و ایجاد خواص اجزاء، موقعیت آن‌ها نسبت به یکدیگر و نسبت به یک دستگاه مختصات واحد در بخش مونتاژ<sup>۲۴</sup> صورت گرفته است. در بخش تحلیل چون هدف تغییر شکل سلول است از تحلیل دینامیکی<sup>۲۵</sup> بهره‌گیری شده است. اساس کار این تحلیل گر مبتنی بر تکرار است و با مکانیزم کاهش به افزایش دقت حل مسئله افزایش یافته است. مدل‌سازی نیروهایی که به ذره وارد شده است در دو دسته‌ی نیروی کنترلی و جابه‌جایی کنترلی قرار می‌گیرد. در حالت نیروی کنترلی مقدار نیرو مشخص است اما مقدار جابه‌جایی محل نیروی اعمالی به ذره مشخص نیست، در حالی که جابه‌جایی کنترلی دقیقاً عکس حالت اول است. سپس در مرحله‌ی بعد تولید شبکه یا مش‌بندی صورت گرفته است. به منظور افزایش دقت تعداد مش‌های سلول به مراتب بیشتر از سوزن و صفحه در نظر گرفته شده است. مش‌بندی نانوذره دی‌ان‌ای و سوزن در شکل ۸ نمایش داده شده است.



شکل ۸- نحوه مش‌بندی نانوذره و سوزن

### ۳- شبیه‌سازی

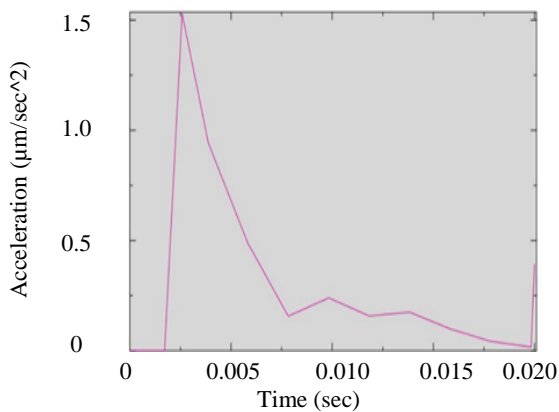
این بخش با استفاده از برنامه‌نویسی مدل‌های مکانیک تماس و مدل‌سازی سینماتیکی و دینامیکی در ساپروتین آباکوس به دست آمده است. ساپروتین جامع‌ترین روش تعیین رفتار مکانیکی مواد مختلف جهت استفاده در حلگر عددی آباکوس است که از طریق آن می‌توان رفتار الاستیک و پلاستیک، وابسته به زمان و آسیب یک ماده را به نرم‌افزار معرفی کرد. در این قسمت به شبیه‌سازی دی‌ان‌ای توسط سوزن میکروسکوپ نیروی اتمی بر روی صفحه‌ی مینا پرداخته شده است. نمودارهای جابه‌جایی، شتاب، نیرو، تنش و سرعت برحسب زمان و همچنین نمودارهای نیرو و تنش برحسب جابه‌جایی از نتایج به‌دست‌آمده در این بخش شبیه‌سازی است. تمامی این نتایج برای یک سلول دی‌ان‌ای با هندسه‌ی کروی انجام گرفته است.

شکل ۹ نشان‌دهنده‌ی جابه‌جایی دی‌ان‌ای برحسب زمان است. نیروی وارده از طرف سوزن میکروسکوپ نیروی اتمی، نیروی بحرانی نام دارد. هنگامی که نیروی بحرانی به حد لازم خود رسیده باشد، سلول بر روی صفحه‌ی مینا شروع به حرکت می‌کند. در این نمودار محور افقی، زمان برحسب ثانیه و محور عمودی جابه‌جایی برحسب میکرومتر است. در لحظه‌ی ابتدایی، در نقطه‌ی مبدأ مختصات جابه‌جایی وجود ندارد، اما پس از گذشت کمتر از ۰/۰۰۵ ثانیه، میزان نیروی بحرانی به حد لازم رسیده و سلول

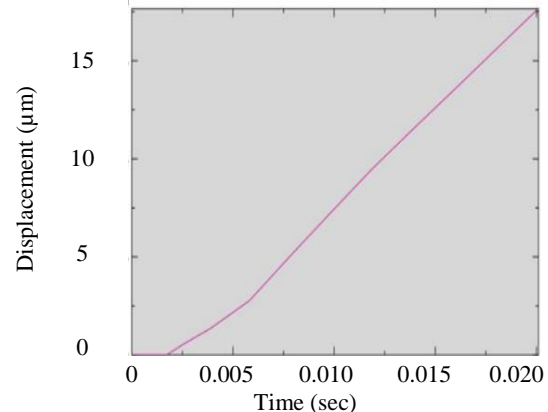
<sup>24</sup> Assembly

<sup>25</sup> Dynamic - Implicit

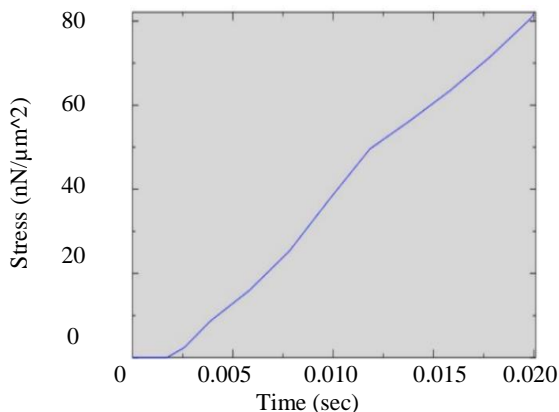
بر روی صفحه‌ی مبنا شروع به حرکت کرده است. با گذشت تدریجی زمان میزان جابه‌جایی بیش‌تر شده است. تغییرات شتاب سلول دی‌ان‌ای بر روی صفحه‌ی مبنا در شکل ۱۰ نمایش داده شده است. شتاب ذره‌ی دی‌ان‌ای دارای نوسانات بسیار زیادی بوده است، دلیل این امر ناپیکنواختی میزان چسبندگی بر روی صفحه‌ی مبنا بوده است. زمان بحرانی به مدت‌زمانی گفته می‌شود که ذره‌ی دی‌ان‌ای از حالت استاتیکی به دینامیکی تغییر پیدا کند. تا قبل از غلبه نیروی بحرانی بر نیروهای چسبندگی و اصطکاکی مقدار شتاب صفر بوده است، اما پس از غلبه‌ی نیروی بحرانی ذره با شتاب بسیار بالایی شروع به حرکت کرده است. فاکتورهای نیرو و زمان بحرانی که از اساسی‌ترین عوامل منیپولیشن در ابعاد میکرو و نانو ذرات است در شکل ۱۱ قابل‌درک می‌باشد. نیروی بحرانی مقدار نیرویی است که موجب می‌شود ذره بر روی صفحه‌ی مبنا شروع به حرکت کند. این نیرو باید بدون رساندن آسیب به ذره بر مجموع نیروهای اصطکاک و چسبندگی غلبه کرده و باعث حرکت ذره بر روی صفحه‌ی مبنا شود. شکل ۱۲ نمودار تنش واردشده بر ذره‌ی دی‌ان‌ای بر روی صفحه‌ی مبنا است. تنش واردشده بر روی ذره که رابطه‌ی مستقیم با میزان نیرو دارد، در تمام طول جابه‌جایی به‌صورت صعودی بوده و افزایش یافته است. همچنین معیار استفاده‌شده برای محاسبات تنش فون میسر بوده است. نمودار شکل ۱۳ تغییرات سرعت سلول دی‌ان‌ای بر روی صفحه‌ی مبنا را نشان داده است. بیشینه مقدار سرعت در  $0/008$  ثانیه با مقدار  $1/4$  میلی‌متر بر ثانیه به‌دست آمده است. پس‌از آن تا مدت‌زمان  $0/01$  ثانیه میزان سرعت کاهش یافته است و به مقدار  $0/9$  میلی‌متر بر ثانیه رسیده است. در لحظه‌ی پایانی نمودار برابر با  $0/02$  ثانیه بزرگی سرعت به  $0/8$  میلی‌متر بر ثانیه رسیده است. تغییرات نیرو برحسب جابه‌جایی برای یک سلول دی‌ان‌ای بر روی صفحه‌ی مبنا در شکل ۱۴ نشان داده شده است. برخلاف نمودارهای برحسب زمان در این شکل از لحظه‌ی آغازین جابه‌جایی ذره بر روی صفحه‌ی مبنا مقادیر نیرو بر روی ذره اعمال شده است. جابه‌جایی ذره هدف بر روی صفحه‌ی مبنا به فاکتور زمان و جابه‌جایی بسیار وابسته است و این عامل به‌شدت بر روی میزان تغییرات عوامل محیطی تأثیرگذار است. میزان تغییرات تنش یک سلول دی‌ان‌ای بر روی صفحه‌ی مبنا برحسب جابه‌جایی در شکل ۱۵ نشان داده شده است.



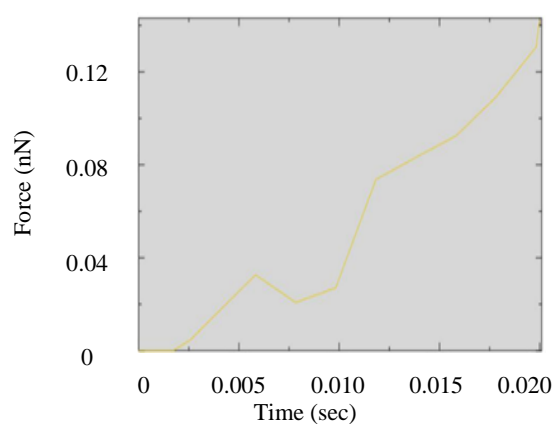
شکل ۱۰- شتاب دی‌ان‌ای بر روی صفحه‌ی مبنا برحسب زمان



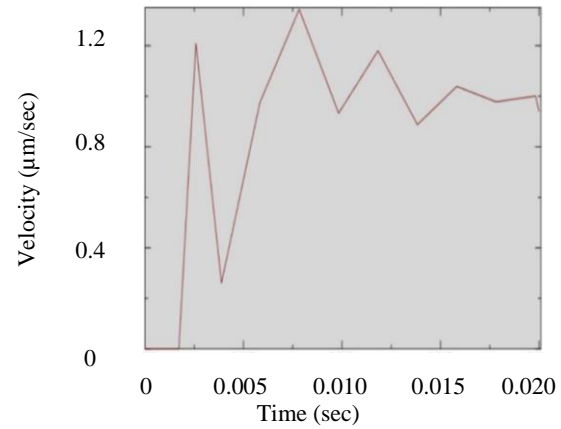
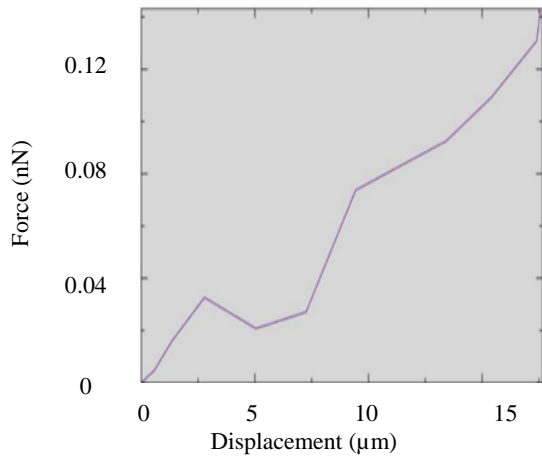
شکل ۹- جابه‌جایی دی‌ان‌ای بر روی صفحه‌ی مبنا برحسب زمان



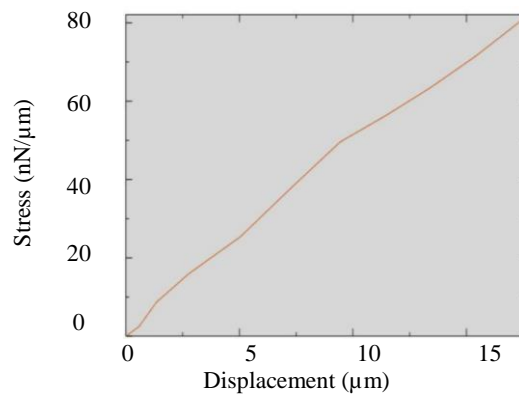
شکل ۱۲- تنش دی‌ان‌ای بر روی صفحه‌ی مبنا برحسب زمان



شکل ۱۱- نیرو دی‌ان‌ای بر روی صفحه‌ی مبنا برحسب زمان

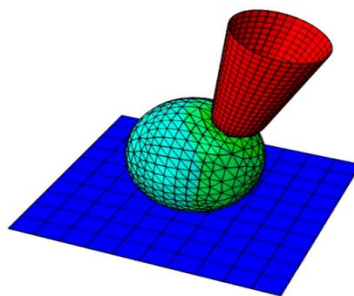


شکل ۱۳- سرعت دی‌ان‌ای بر روی صفحه‌ی مینا برحسب زمان / شکل ۱۴- نیرو دی‌ان‌ای بر روی صفحه‌ی مینا برحسب جابه‌جایی

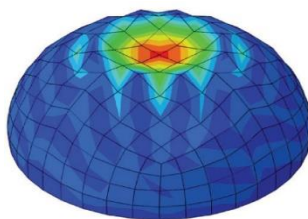


شکل ۱۵- تنش دی‌ان‌ای بر روی صفحه‌ی مینا برحسب جابه‌جایی

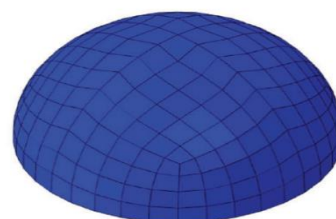
شکل ۱۶ ذره‌ی دی‌ان‌ای با هندسه‌ی کروی بر روی صفحه‌ی مینا را نشان می‌دهد، که سوزن میکروسکوپ نیروی اتمی با اعمال نیرو بر روی آن باعث جابه‌جایی ذره هدف شده است. در قسمت نقطه‌ی اتصال سوزن با ذره افزایش نیرو و در نتیجه تنش ایجاد شده است. در این نقطه فرورفتگی نیز ایجاد شده است. بیش‌ترین مقدار تنش و اعمال نیرو بر روی سوزن و پس‌از آن نقطه‌ی اتصال بر روی ذره هدف است و پس‌از آن دیگر قسمت‌های ذره کروی و بر روی صفحه‌ی مینا هیچ نیرویی اعمال نشده است.



شکل ۱۶- کانتور ذره کروی بر روی صفحه‌ی مینا با اعمال سوزن



ب



الف

شکل ۱۷- ذره دی‌ان‌ای در حالت الف) قبل از بارگذاری ب) بعد از بارگذاری

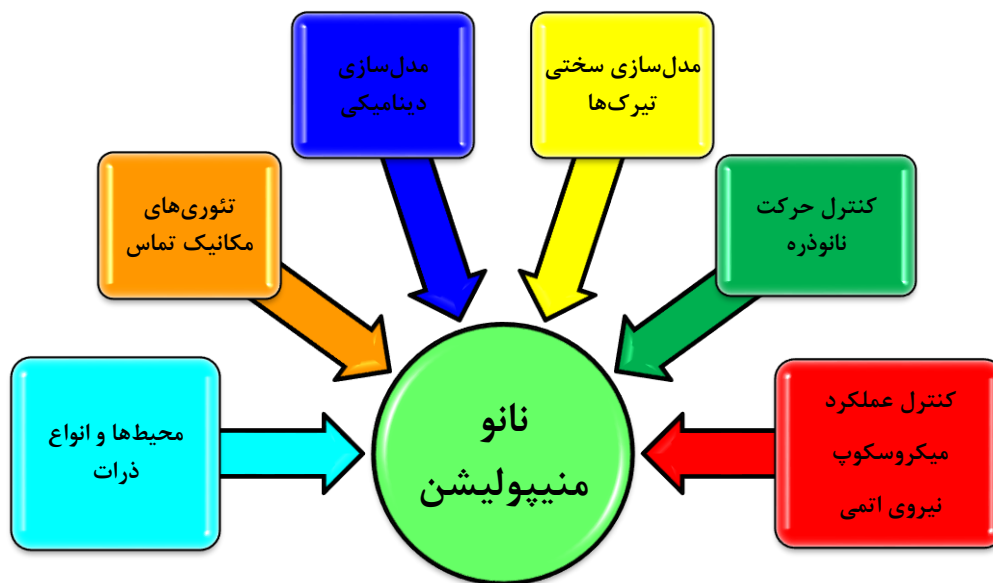
#### ۴- نتیجه‌گیری و جمع‌بندی

در این مقاله فرآیند منیپولیشن یک سلول دی‌ان‌ای با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی مورد بررسی قرار گرفت. میکروسکوپ نیروی اتمی علاوه بر آنالیز سطح ذرات در مقیاس‌های بسیار کوچک نانو/میکرو به آنالیز نیرویی و خواص مکانیکی نیز می‌پردازد. برای این فرآیند دو مدل‌سازی؛ مکانیک تماس و سینماتیکی-دینامیکی مورد استفاده قرار گرفته است. در بخش تئوری تماس به بررسی نیروهای چسبندگی و شعاع و عمق نفوذ دو عامل اصلی این فرآیند یعنی سوزن تیرک میکروسکوپ نیروی اتمی و سلول دی‌ان‌ای پرداخته شده است و مبنای محاسبات و مطالعه این پژوهش تئوری مکانیک تماس جی‌کآر است. سپس موقعیت ذره بر روی صفحه مینا در راستای  $y$  و  $z$  به دست آمده و معادلات سرعت و شتاب آن استخراج شده و با فرض تیرک میکروسکوپ نیروی اتمی به‌عنوان یک فنر، نیروها در دو راستا نیز به دست آمده است. سپس با بهره‌گیری از روش المان محدود که یکی از دقیق‌ترین علوم محاسباتی می‌باشد همگام با برنامه‌نویسی مدل‌سازی‌ها به زبان فرترن و وارد کردن آن‌ها در سابروتین نرم‌افزار آباکوس خواص مکانیکی این سلول بر روی یک صفحه مینا به دست آمده است.

همچنین نتیجه اصلی برای یک ذره‌ی با هندسه‌ی کروی و با توجه به جنس آن که یکی از ساختار اصلی بدن انسان است، یعنی دی‌ان‌ای دارای دو شاخصه کلی است.

- مقاومت بسیار کم در برابر اعمال نیرو از جانب سوزن تیرک میکروسکوپ نیروی اتمی
- عمق نفوذ و شعاع تماس بسیار بالا در شرایط بارگذاری

برای بهینه‌سازی و بازدهی هرچه بیشتر این فرآیند در پژوهش‌های بعدی ایجاد یک مدل تماسی جدید بر اساس مکانیک محیط پیوسته، خواص ترمودینامیکی سلول، محیط بیولوژیک و اشکال پیچیده‌ی سلول‌های بیولوژیک پیشنهاد می‌شود. همچنین برای شبیه‌سازی لحظه‌ی تماس سلول بیولوژیک و سوزن میکروسکوپ نیروی اتمی استفاده از روش دینامیک مولکولی می‌تواند بسیار مؤثر واقع گردد، که با استفاده از نتایج این پژوهش به دست آمده است. در شکل ۱۸ به صورت شماتیک نمای کلی مطالعه انجام‌شده و در حال انجام را در حوزه‌ی نانو منیپولیشن نمایش داده شده است.



شکل ۱۸- شماتیک کلی فرآیند منیپولیشن و عوامل تأثیرگذار بر آن

## ۵- فهرست علائم لاتین و یونانی

عنوان	علامت اختصاری
فاصله سوزن تا سر تیرک	$d$
مدول الاستیسیته	$E$
نیروی بحرانی	$F_{cr}$
نیروی نرمال وارده از سطح به نانو ذره	$f_s$
نیروی برآیند وارد بر ذره	$F_T$
نیروی جانبی	$F_y$
نیروی جانبی وارد بر سوزن از طرف ذره	$F_Y$
نیروی نرمال	$F_z$
نیروی نرمال وارد بر سوزن از طرف ذره	$F_Z$
مدول برشی	$G$
طول سوزن	$H$
طول تیرک	$l$
گشتاور پیچشی	$M_\theta$
شعاع نانو ذره	$R_p$
ضخامت	$t$
زمان بحرانی	$T_{cr}$
موقعیت عرضی سطح	$y_{sub}$
موقعیت عرضی ذره	$y_p$
موقعیت عمودی ذره	$z_p$
موقعیت عمودی سطح	$z_{sub}$
عمق نفوذ محل تماس سطح و ذره	$\delta_s$
جا بجایی طولی	$\delta_x$
جا بجایی نرمال	$\delta_z$
زاویه تیرک	$\theta$
ضریب اصطکاک ایستایی بین صفحه مبنا و ذره	$\mu_s$
ضریب پواسون	$\nu$
نصف زاویه سر تیرک	$\alpha$
عمق نفوذ محل تماس سوزن و ذره	$\delta_t$
جا بجایی جانبی	$\delta_y$
زاویه ی تماس ذره	$\phi$
زاویه ی نیروی پروب	$\psi$

## ۶- مراجع

- [1] Sitti M. Survey of Nanomanipulation Systems. Proceeding of the IEEE Nanotechnology Conference, 2001; 75-80.
- [2] Moradi M. Fereidon A H. and Sadeghzadeh S. Dynamic Modeling for Nanomanipulation of Polystyrene Nanorod by Atomic Force Microscope. Scientia Iranica. 2011; 3: 808-815.
- [3] Korayem M H. and Zakeri M. Sensitivity Analysis of Nanoparticles Pushing Critical Conditions in 2-D Controlled Nanomanipulation Based on AFM. Journal Advanced Manufacturing Technology. 2009; 41: 714-726.
- [4] Binnig G. Quate C F. and Gerber C. Atomic Force Microscope. Physical Review Letters. 1986; 56: 930-933.
- [5] Binnig G. Gerber C. Stoll E. Albrecht T R. and Quate C F. Atomic Resolution with Atomic Force Microscope. Europhysics Letters. 1987; 3: 1281-1286.

- [6] Junno T. Deppert K. Montelius L. and Samuelson L. Controlled Manipulation of Nanoparticles with an Atomic Force Microscope. *Applied Physics Letters*, 1995; 66: 3627-3629.
- [7] Falvo M R. and Superfine R. Mechanics and Friction at the Nanometer Scale. *Journal of Nanoparticle Research*. 2000; 2: 237-248.
- [8] Guduru P R. Biologically Inspired Nano-Contact Mechanics. Brown University Providence RI DIV of Engineering. 2009; 1-18.
- [9] Kiselyova O I. Yaminsky I V. Karpova O V. Rodionova N P. Kozlovsky S V. Arkhipenko M V. and Atabekov J G. AFM Study of Potato Virus X Disassembly Induced by Movement Protein. *Journal of Molecular Biology*, 2003; 332(2): 321-325.
- [10] Kasas S. Longo G. and Dietler G. Mechanical Properties of Biological Specimens Explored by Atomic Force Microscopy, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2013; 1-12.
- [11] Ferreira O D S. Gelinck E. de Graaf D. and Fischer H. Adhesion Experiments Using an AFM—Parameters of Influence. *Applied Surface Science*. 2010; 257(1): 48-55.
- [12] Dimitriadis E K. Horkay F. Maresca J. Kachar B. and Chadwick R S. Determination of Elastic Moduli of Thin Layers of Soft Material Using the Atomic Force Microscope. *Biophysical Journal*. 2002; 82: 2798-2810.
- [13] Van Vliet K J. Bao G. and Suresh S. The Biomechanics Toolbox: Experimental Approaches for Living Cells and Biomolecules. *Acta Materialia*. 2003; 51: 5881-5905.
- [14] Arai F. Ando D. and Fukuda T. Micromanipulation based on Micro Physics, Strategy based on Attractive Force Reduction and Stress Measurement. in *Proceeding IEEE/RSJ*. 1995; 2: 236–241.
- [15] Korayem M H. Taheri M. and Zakeri M. Simulation of Two-Dimensional Nanomanipulation of Particles by Atomic Force Microscope Based on Coulomb and HK Friction Models. *Proceeding International Congress on Nanoscience and Nanotechnology*. Shiraz-Iran. 2010.
- [16] Korayem M H. Rastegar Z. and Taheri M. Application of Johnson–Kendall–Roberts Model in Nanomanipulation of Biological Cell: Air and Liquid Environment. *Micro and Nano Letters* 2012; 7(6): 576-580.
- [17] Korayem M H. Khaksar H. and Taheri M. 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*. 2013; 114: 130- 143.
- [18] Korayem M H. and Taheri M. Modeling of various contact theories for the manipulation of different biological micro/nanoparticles based on AFM. *Journal of Nanoparticle Research*. 2014; 16(1): 1-18.
- [19] Korayem M H. Taheri M. Khaksar H. and Hefzabad R N. Modelling of Cylindrical Contact Theories of Hertz and JKR for the Manipulation of Biological Micro/Nanoparticles. *International Journal of Nanoscience and Nanotechnology*. 2019; 15(4): 229-237.
- [20] Korayem M H. Hezaveh H B. and Taheri M. Dynamic Modeling and Simulation of Rough Cylindrical Micro/Nanoparticle Manipulation with Atomic Force Microscopy. *Microscopy and Microanalysis*. 2014; 20(6): 1692-1707.
- [21] Korayem M H. Sensitivity Analysis of the Critical Conditions of AFM-Based Biomanipulation of Cylindrical Biological Particles in Various Biological Mediums by Means of the Sobol Method. *International Journal of Nanoscience and Nanotechnology*. 2016; 12(3): 149-166.
- [22] Korayem M H. and Taheri. M. Simulating the Manipulation of Various Biological Micro/Nanoparticles by Considering a Crowned Roller Geometry. *Arabian Journal for Science and Engineering*. 2016; 41(11): 4449-4462.
- [23] Desai J. Pillarisetti A. and Brooks A D. Engineering approaches to Biomanipulation. *Annual Review of Biomedical Engineering*. 2007; 9: 35–53.
- [24] Alonso J L. Goldman W H. Feeling the Forces: Atomic Force Microscopy in Cell Biology. *Life Science*. 2003; 72: 2553–2560.
- [25] Taheri M. and Mirzaluo M. Experimental Extraction of Young's Modulus of MCF-7 Breast Cancer Cell Using Spherical Contact Models. *Amirkabir Journal of Mechanical Engineering*. 2022; 53(12): 10-10.

- [26] Taheri M. 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*. 2022; 54(4): 3-3.
- [27] Fereiduni F. Taheri M. and Modabberifar M. Investigation of the Effect of Different Parameters on Force in the Second Phase of Two-Dimensional Nanomanipulation. *Iranian Journal of Manufacturing Engineering*. 2021; 8(2): 23-31.
- [28] Chaudhury MK. Weaver T. Hui C Y. and Kramer E J. Adhesive Contact of Cylindrical Lens and a Flat Sheet, *Journal of Applied Physics*. 1996; 8(1): 30-37.
- [29] Korayem M H. Taheri M. Khaksar H. Bathaee S H. Using Micro/Nano Scale Contact Models in 3D Manipulation of Deformation of Au Particles Under Angular Effect. *Iranian Journal of Manufacturing Engineering*. 2020; 7(5): 33- 43.
- [30] Hertz H. Über die Berührung Fester Elastischer Körper. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 1881; 92:156-171.
- [31] Johnson K L. Kendall K. and Roberts A K. Surface Energy and the Contact of Elastic Solid. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical*. 1971; 324: 301–313.
- [32] Derjaguin B V. Muller V M. and Toporov Y P. Effect of Contact Deformations on the Adhesion of Particles. *Journal of Colloid Interface Science*. 1975; 53: 314–326.
- [33] Zarei B. Bathaee S H. Taheri M. and Momeni M. Second Phase of Nanomanipulation of Particles by Atomic Force Microscopy Using Coulomb, HK, and LuGre Friction Models. *Modares Mechanical Engineering*. 2019; 19(1):181-190.
- [34] Taheri M. Bathaee S H. Determination of the Young Modulus of Gastric Cancer Tissue Experimentally Using Atomic Force Microscopy. *Modares Mechanical Engineering*. 2020; 20(12): 2709-2720.