

ماهنامه علمى پژوهشى

مهندسی مکانیک مدرس





مدل سازی دینامیکی جابجایی نانو/میکروذرات در تماس چندنقطهای بر پایه مدل رامپ منده داکری *، حواد فرحی *

- 1 استادیار، مهندسی مکاترونیک، دانشگاه تبریز، تبریز
- 2- كارشناس ارشد، مهندسی مكاترونیک، دانشگاه تبریز، تبریز
- * تبريز، صندوق پستى 5166614761، m.zakeri@tabrizu.ac.ir

چکیده

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل دریافت: 10 خرداد 1395 پذیرش: 20 تیر 1395 ارائه در سایت: 24 مرداد 1395 ک*لید واژگان:* مدل سازی دینامیکی راندن نانو/میکرو ذره سطح زبر تماس چندنقطهای

در این مقاله رفتار دینامیکی نانوذره بر روی سطح زبر در حین راندن بر پایه میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM)، با استفاده از مدل تماس چند نقطهای مدلسازی و شبیهسازی شد. ابتدا یک مدل تماس چندنقطهای برای دو سطح با هندسه زبری متفاوت شامل پروفیل زبری ششوجهی و چهاروجهی، از ترکیب مدل تماس تکنقطهای رامپ با مدلهای تماسی JKR و شوارتز استخراج گردید و معادلات مربوط به سطح تماس واقعی و نیروی چسبندگی برای تماس چندنقطهای سطوح زبر ارائه شد. سپس رفتار دینامیکی نانو/میکرو ذره کروی در راندن روی سطح زبر، با استفاده از مدل تماس چندنقطهای جدید، مدلسازی شد. بهعلاوه، شبیهسازی دینامیکی نانو/میکرو ذراتی با شعاعهای 60، 400 و 500 نانومتر در جابجایی بر روی سطوح زبر مختلف، با فرض تماس چندنقطهای، تکنقطهای، و سطح صاف اجرا و تحلیل شد. نتایج شبیهسازیها نشان دادند که استفاده از مدل تماس چندنقطهای خصوصا در شعاعهای زبری کوچک، تأثیر عمدهای در تعیین نیروی بحرانی حرکت دارد. بهعلاوه، فرض سطح صاف و یا تماس تکنقطهای منجر به ایجاد خطای قابل توجهی در تخمین نیروی بحرانی می شود. نشان داده شد که پروفیل زبری سطح و توزیع زبری عوامل بسیار مؤثری در تعیین تعداد نقاط تماسی بوده و موجب تغییر مقدار نیروی بحرانی پیش بینی شده می شوند. در کل، نیروی بحرانی پافته است. امده از مدل تماس چندنقطهای در مقایسه با مقادیر به دست آمده از مدل های سطح صاف و تماس تکنقطهای، به ترتیب کاهش و و افزایش یافته است.

Dynamic modeling of nano/microparticles displacement with multi-point contact based on the Rumpf model

Manizhe Zakeri*, Javad Faraji

School of Engineering Emerging Technologies, University of Tabriz, Tabriz, Iran * P.O.B. 5166614761. Tabriz, Iran, m.zakeri@tabrizu.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper Received 30 May 2016 Accepted 10 July 2016 Available Online 14 August 2016

Keywords: Dynamic modeling pushing nano/micro particles rough surface multipoint contact

ARSTRACT

In this paper, dynamic behavior of a nano particle on a rough surface in pushing based on the atomic force microscopy (AFM) was modeled and simulated by using the multipoint contact model. First, a multipoint contact model was extracted for two different roughness profiles of rough surfaces including the hexagonal and tetrahedral by combination of the Rumpf singular point contact model with JKR and Schwarz contact models, and the equations of the real contact area and adhesion force were proposed for multipoint contact of rough surfaces. Then, the dynamic behavior of particles in pushing on the rough substrate was modeled by using the new multipoint contact model. Additionally, simulation of the particles dynamics with radii of 50, 400 and 500 nm in moving on the different rough substrates was performed and analyzed, by assuming multipoint, singular point contacts, and flat surface contacts. Results showed that the multipoint contact model, especially in small radiuses of roughness has an essential impact on determination the critical force. Moreover, assumptions of the flatness or the singular point contact leads to a considerable error in estimating the critical force. Results showed profiles of rough surface and roughness distribution are very important factors in determining the numbers of the contact points, and changing the estimated amount of the critical force. In general, the obtained critical force based on the new multi-point contact model in comparison with those based on the flat surface and the singular point contact models, was decreased and increased, respectively.

1- مقدمه

جابجایی نانو/میکرو ذرات با استفاده از پروب میکروسکوپهای روبشی میلهای (SPM) از جمله اهداف کلان سالهای اخیر بوده است. مدلسازی

دینامیکی، ابزار اساسی در فهم پروسه نانو/میکرو جابجایی است و نانو/میکرو ذرات می توانند در هر لحظه مسیریابی بشوند که این امر ما را قادر بهقرار دادن آنها در موقعیت موردنظر برای ساخت و مونتاژ در مقیاسهای نانو/میکرومتری می کند. مطالعات گستردهای در زمینه جابجایی نانو/میکرو

¹ Scanning probe microscopy

ذرات کروی با هدف استفاده از SPM و خصوصا نوع مکانیکی آن که میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) است، انجام می گردد. با این حال تحقیقات کمی در خصوص مدل سازی و کاربردهای آن در پیش بینی مسیر حرکت نانوذره یا انتهای سوزن ابزار انجام شده است [1].

مدل اولیه برای جابجایی دوبعدی نانو/میکرو ذرات به شکل راندن توسط فالوو ارائه شده است. در این مدل از تئوری تماسی هرتز² اسـتفاده شـده و از نیروی چسبندگی ناشی از انرژی سطحی مواد صرفنظر گشته است [2]. سیتی و هاشیموتو با استفاده از تئوری تماسی 3 JKR و مدل جرم و فنر مدلی ارائه نموده و از آن برای جابجایی کنترل شده ذره به صورت نیمه اتوماتیک استفاده نموده و مسیر حرکت ذره را با استفاده از دادههای بینایی سیستم کنترل کردهاند [3]. کیم و همکارانش به مدلسازی مکانیکی پروسههای راندن/کشیدن و برداشتن/موقعیت دهی ذرات در مقیاس نانو پرداختهاند، اما آنها مدل کامل را بررسی نکردهاند [4]. تفضلی و سیتی مدل دینامیکی نسبتاً کاملی از پروسه راندن نانو/میکرو ذرات با استفاده از تئوری JKR ارائه داده و رفتار دینامیکی نانو/میکرو ذرات را روی صفحه مبنای صاف بررسی کردهاند. آنها سعی کردهاند با شبیهسازی، نیرو و زمان واقعی جابجایی را در هرلحظه از پروسه تعیین کنند [5]. طاهری جابجایی نانوذرات بیولوژیکی را توسط AFM بهصورت سهبعدی مدلسازی کرد و نشان داد که در نانوذرات مورد بررسے شروع حرکت غلتشے حول محور x قبل از غلتش حول محورهای y و z اتفاق می افتد [6]. با توجه به اهمیت زبری سطح و تأثیر آن بر چسبندگی سطوح، کورایم و ذاکری به توسعه مدل دینامیکی جابجایی نانو/میکرو ذرات صاف بر روی سطوح زبر در تماس تکنقطهای پرداختهاند [7]. ذاکری و فرجی به مدل سازی راندن نانو/میکرو ذرات زبر در سطوح صاف پرداخته و نشان دادهاند که وجود زبری بر روی ذرات نیز سبب کاهش مقدار نیروی بحرانی در شروع حرکت ذره میشود [8]. آلدوسین و همکارانش به بررسی تجربی منیپولیشن دوبعدی تک ذره طلا به شکل 20 وجهی پرداختند. آنها نیروهای اطراف نانوذره شامل چسبندگی، اصطکاک و نیـرو خـارجی را به صورت بلادرنگ بررسی کردند و تأثیر تغییر این نیروها بر حرکت نانوذره را مورد مطالعه قرار دادند [9]. آنچه موجب تفاوت تحلیل دینامیکی سیستم در مقیاس نانو نسبت به مقیاس ماکرو می گردد، اهمیت یافتن نیروهای سطحی و همچنین تغییر شکل سطوح تماسی در مقیاس میکرو/نانو است که در مدل سازی سیستمهایی در مقیاس میکرو/نانو از اهمیت بالایی برخوردارند [11,10,1]. در مطالعه تماس/تغییر شکل، مدلهای مکانیکی مختلف هرتز، ارائه شدهاند و مدل تحلیلی تغییر شکل الاستیک 4 DMT ،JKR تماس چسبنده بین کره و سطح صاف در محدوده مشخص JKR و DMT توسط شوار تز ارائه شده است [12,11]. اما در حال حاضر ثابت شده که نیروهای برهم کنش و خصوصاً نیروهای جدایش یا چسبندگی ذره/سطح برای یک هندسه بسیار ساده یعنی کره اصفحه در مواد نرم بسیار کمتر از مقادیر پیشبینی شده با تئوری های تماسی DMT ,JKR و MD در سطوح صاف ایدهآل است. عموماً زبری سطوح و حضور برآمدگی ها به عنوان پاسخ این اختلاف بین تئوری و آزمایشها مطرح شده که موجب کاهش سطح تماس واقعى و افزايش فاصله بين سطوح اجسام مىشود [24-13]. پس از تحقيقات اولیه فولر و همکارانش [13]، تئوریهای مختلفی ارائه شدهاند که بیان ریاضی

نیروی چسبندگی را با استفاده از خواص مشخصه زبری ارائه می کنند. این خواص یا مستقیماً اندازه گیری شده و یا از پروفیل سطح استخراج می شوند. خواص مشخصه عبارت از مقدار متوسط ارتفاع و انحراف ⁶ rms پروفیل آن، شعاع انحنای قله برآمدگی، ارتفاع برآمدگیها و فاصله بین آنها یا طول موج زبری، نسبت سطح صاف در مقابل سطح زبر و یا حتی طیف کامل ارتفاع سطح می باشند. مدل ها و روشهای تئوری مختلفی بر پایه استفاده از برآمدگیهای نیمه کروی با توزیع ارتفاع گاوسین، rms زبری سطح و طول موج مشخصه و تحلیل آن ارائه شده اند. با این حال در تحقیقات کمی از مقادیر اندازه گیری شده واقعی زبری برای پیشبینی نیروی چسبندگی بین سطوح غیر ایده آل استفاده شده است. البته، در برخی پژوهشها نیروهای طور مدل سازی شده اند آل استفاده از مدل های تماسی JKR و یا JMT و یا DMT و یا JKR و یا میکروانانو را در سطوح با توزیع زبری مدل سازی کرده و نشان دادند که زبری میکروانانو را در سطوح با توزیع زبری مدل سازی کرده و نشان دادند که زبری سطوح در مقیاس نانومتری تأثیر زیادی بر رفتار اصطکاکی دارد [25].

در مجموع، تحقیقات کمی در زمینه مدلسازی جابجایی ذره روی سطح زبر با در نظر گرفتن تاثیر زبری سطوح و پروفیل زبری انجام شده است. تحقیقات حاضر با فرض سطح صاف و یا تماس تکنقطه ای انجام شدهاند. لذا در این مقاله به عنوان کار جدید، مدل سازی دینامیکی راندن نانوذره روی صفحه مبنای زبر با فرض تماس چندنقطهای ارائه خواهد شد. بدین منظور جهت تعیین تعداد نقاط تماسی به صورت تابعی از پارامترهای سطح زبر و شعاع ذره، و نیروی چسبندگی سطوح، مدل تماس چندنقطهای بین ذره کروی صاف و سطح زبر استخراج خواهد گردید. جهت مدلسازی نیروهای چسبندگی و سطح تماس واقعی از پروفیل زبری شـشوجهـی و چهـاروجهی براساس تئوری رامپ [15] استفاده خواهد شد. سپس، تئوری تماسی JKR جهت کاربرد در تماس چندنقطهای توسعه داده خواهد شد. برای اعمال نیروهای کوتاه -برد و دور -برد نیروهای چسبندگی در سطوح زبر و مدلسازی تغییر شکلهای تماسی سطوح، از تئوری تماسی شوارتز استفاده خواهد شد [12]. طبق مدلهای تماسی سطوح زبر، مساحت سطح تماس از مجموع نقاط تماسی بین دو سطح در تماس تشکیل میشود که بهعنوان سطح واقعی تماس تعریف می شود. سطح واقعی تماس بستگی به اندازه شعاع قله و توزیع برآمدگیهای روی سطح زبر دارد. همچنین، زبری سطح موجب افزایش یا کاهش چسبندگی ذرات به سطوح بسته به مقیاس زبری، محل قرارگیری ذره و اندازه و هندسه ذره می شود. در ادامه این مقاله، ابتدا تئوری های موردنیاز جهت مدلسازی راندن ذره کروی بر سطح زبر با فرض تماس چندنقطهای شامل تئوریهای مکانیک تماس، چسبندگی سطوح زبر، تماس چندنقطهای و اصطکاک در مقیاس میکرو/نانو ارائه خواهد شد. در ادامه مدل دینامیکی راندن نانو/میکرو ذرات بر روی صفحه مبنای ناهموار با در نظر گرفتن تغییر شکلهای میکروتیرک و عکسالعملهای نانو/میکرو ذره در سطوح تماسی ارائه خواهد شد و نهایتا رفتار دینامیکی ذره درحرکت بر روی سطح زبر

2- مدل سازی جابجایی نانو /میکرو ذره به روش راندن

برای مدلسازی رفتار دینامیکی ذره و استخراج نیرو بحرانی در لحظه شروع حرکت ذره روی سطح، نیاز به تعریف کامل هندسه و نیروهای عمل کننده در این مسئله میباشد. بعلاوه در تعریف هندسه مسئله، تغییر شکل سطوح

Atomic force microscopy

Hert

Johnson-Kendall-Roberts

Derjaguin- Muller -Toporov Maugis-Dugdale

⁵ Maugis-

⁶ root mean square

تماسی بایستی لحاظ گردد. نیروهای موجود شامل نیروهای تماسی و اصطکاک و نیروهای ابزار بوده و بایستی با استفاده از تئوریهای مکانیک تماس و اصطکاک در مقیاس میکرو/نانو استخراج شوند که در ادامه به آن می پردازیم.

1-2- چسبندگی و مکانیک تماس در مقیاس میکرو/نانو

نیروی چسبندگی به مقاومت در برابر جدایش دو سطح در تماس که در خلاف جهت هم کشیده می شوند، گفته می شود. چسبندگی سطوح کاملا وابسته به کار چسبندگی W و درنتیجه انرژی سطحی γ بوده و معادلات اولیه توسط تابور ارائه شده است. نقطه شروع تحلیل او معادله زیر است: $W=2\gamma$

برای مطالعه مکانیک تماس/تغییر شکل در مقیاس نانو/میکرومتری، استفاده از مدلهای تماسی هرتز، JKR و DMT پیشنهاد شدهاند [10], ساده ترین قانون نیرو برای تخمین عکسالعملهای واقعی بین کره اصفحه توسط هرتز مدل شده که مکانیک تغییر شکل تماسی بین کره با سطح صاف را بدون در نظر گرفتن چسبندگی ارائه نمود. با افزودن چسبندگی به مدل هرتز، مدلهای پیشرفته مکانیک تماس بهدست می آیند. یکی از این مدلها، مدل JKR است. در این مدل نیروهای جاذبه فقط در داخل سطح تماس عمل می کنند و نیروهای چسبندگی در فواصل بینهایت نزدیک را در برمی گیرد. تئوری معروف JKR استفاده از بار ظاهری هرتز را ارائه می کند که به به بهارت دیگر، بار معادل در غیاب نیروهای چسبندگی است که موجب به بهارت دیگر، بار معادل در غیاب نیروهای چسبندگی است که موجب به فزایش سطح تماسی می شود. تئوری JKR به شکل معادلات (2) تا (4) بیان می شود:

$$F_{(adh)JKR} = -\frac{3}{2}\pi\gamma R \tag{2}$$

$$\delta = \frac{a_{\text{JKR}}^2}{R} - \sqrt{\frac{8\pi \gamma a_{\text{JKR}}}{3K}}$$
 (3)

$$a_{\text{JKR}} = \left[\frac{R}{K} \left(\sqrt{F_{(\text{adh})\text{JKR}}} + \sqrt{F - F_{(\text{adh})\text{JKR}}}\right)^2\right]^{1/3}$$
 (4)

که در آن F نیروی عمودی اعمال شده خارجی و F نیروی جداسازی دو سطح است. K مدول الاستیک مؤثر است که مقدار آن از رابطه جداسازی دو سطح است. E_2 و E_1 مـدول یانـگ و v_1 و v_2 ضرایب پواسـون دو سطح در تماس است. v_3 شعاع تماسی و v_3 عمق تماس می باشد.

$$\frac{1}{K} = \frac{3}{4} \left(\frac{1 - \vartheta_1^2}{E_1} + \frac{1 - \vartheta_2^2}{E_2} \right) \tag{5}$$

2-2- تئوریهای چسبندگی در سطوح زبر

اغلب سطوح مهندسی صرفنظر از روش آمادهسازی دارای برآمدگیهایی در سطح هستند. باودن و تابور در سال 1956 مدعی شدند که سطح تماس واقعی بین ذره و سطح زیرین از سطح تماس ظاهری خیلی کوچکتر میباشد و در حالت تئوری، نیروی اصطکاک متناسب با سطح تماس واقعی است. در تحقیقات بعدی، فولر و تابور تأثیر زبری سطح نمونه بر چسبندگی را با استفاده از مدل تماسی JKR بررسی نمودند [13]. آنها پارامتر بدون بعدی را محاسبه نمودند که به معنی کاهش چسبندگی به علت زبری سطح بود. اولین مدل برای زبری سطوح در سال 1966، توسط گرینوود و همکارانش ارائه شد که در آن برآمدگیهای سطح زبر باکرههای مستقل و بر اساس خواص آماری سطوح تقریب زده شده بود [14]. اولین مدل ساده برای توصیف تأثیر زبری سطوح بر میزان نیروی چسبندگی توسط رامپ ارائهشده توصیف تأثیر زبری سطوح بر میزان نیروی چسبندگی توسط رامپ ارائهشده است. او مدل همیکر را تغییر داد تا اثر ارتفاع برآمدگی را بر نیروهای

چسبندگی اعمال کند. مدل رامپ بر پایه تماس بین یک برآمدگی منفرد نیمه کروی روی صفحه و یک ذره کروی است (شکل 1). مرکز ذره با شعاع بزرگتر در بالای مرکز برآمدگی است و سیستم بدون تغییر شکل فرض شده است. ذره کروی با شعاع R در بالای برآمدگی به شعاع r و به مرکز R قرارگرفته و در امتداد محور R بر هم نیرو وارد می کنند. نیروی عکسالعملی مؤثر در این مدل از مجموع دو عبارت که برهم کنشهای وندروالس دو سطح در تماس هستند، به دست می آید. رامپ از تقریب درجاگوین برای برهم کنش بین دو سطح استفاده نموده و معادله R0 را به دست آورد.

$$F_{\rm adh} = \frac{A_H R}{6D_0^2} \left[\frac{r}{r+R} + \frac{1}{(1+r/D_0)^2} \right]$$
 (6)

که در آن r شعاع برآمدگی، A_H ثابت همیکر و D_0 کمترین فاصله بین کره و برآمدگی (معادل فاصله بیناتمی) است. عبارت اول و دوم داخل براکت در معادله بهترتیب مقادیر نیروی وندروالس تماسی بین ذره و برآمدگی و نیروی برهم کنش غیرتماسی بین ذره و صفحه مبنای صاف را بیان می کند که ذره در فاصلهای معادل شعاع برآمدگی r از صفحه مبنا قرار دارند [15]. رابینوویچ و همکارانش رابطه بین شعاع زبری r و ریشه میانگین مربعات یا rms را مشخص كردند [17,16]. كوپر و همكارانش مدلى جهت تعيين نیروی چسبندگی در تماس ذره کروی زبر با سطح صاف ارائه دادند که در آن از پراکندگی همگن برآمدگیهای نیمه کروی که مرکز آن روی ذره کروی قرار دارد، استفاده شده است. در مدل مذکور نیروی چسبندگی کل برابر مجموع چسبندگی تماسی در یک برآمدگی ضربدر تعداد برآمدگیهای تماسی موجود در سطح مشترک دو جسم و نیروی غیر تماسی بین کره و سطح میباشد [18]. جورج، هندسه سطحی با توزیع زبری ششوجهی پوشیده از برآمدگیهای کروی به شعاع یکسان را جهت تخمین پروفیل سطوح زبر واقعى پيشنهادكرده است [19]. تحقيقات تجربي مختلفي نيز جهت اندازه گیری نیروی چسبندگی و مقایسه مدلهای موجود انجام می گیرد [20]. بیچ و همکارانش به اندازه گیری مستقیم نیروهای چسبندگی بین ذرات دارویی (بکلومتازون، لاکتوز و ...) با هندسه منظم و سطوح زیرین پلیمری با استفاده از AFM پرداختهاند. این اندازه گیریها نشان دادند که زبری سطوح تماسی، عامل مهمی است که نیروهای چسبندگی اندازهگیری شده در آزمایش را تحت تأثیر قرار میدهد [21]. فتاح تأثیر تغییرات زبریهای با شعاع بسیار کوچک از 0 تا 10 نانومتر را بر نیروی چسبندگی ذرات کروی از روشی مشابه با روش رامپ استفاده و بررسی کرده است [24]. آنها نشان دادند که در زبری بسیار کم، عبارت غیرتماسی چسبندگی نیروی وندروالس بین سطح دو ذره غالب است که با افزایش شعاع زبری، این نیرو کاهش می یابد و نیروی چسبندگی تماسی بین ذره با برآمدگی سطح زبر، افزایش می یابد. یکی از خاصیتهای اساسی سطوح زبر، توزیع قابل توجه نیروی جدایش است [23,14,13]. در قسمتهای قبل الگوهای موجود جهت بررسی چسبندگی سطوحی با زبری مشخص که در آنها از پوشش سطح با ذرات کروی استفاده شده بود، مرور شد. رابینوویچ از برآمدگیهای کروی به شعاع یکسان و با پوشش قله-دره را جهت تخمین هندسه پروفیل سطوح زبر واقعی استفاده کرده است [16] که با تکرار آن در راستای محور عمود بر صفحه، پروفیل مربعی به دست میآید. همچنین، جهت تخمین دقیق تری از پروفیل سطوح واقعی، هندسه سطحی با توزیع زبری ششوجهی پوشیده از برآمدگیهای کروی به شعاع یکسان جهت تخمین از سطوح زبر واقعی پیشنهاد شده بود [19].

3-2- مدلسازی مکانیک تماس کره/سطح زبر در تماس چندنقطهای

چنان که ذکر شد در مدل رامپ نیروی چسبندگی بین ذره کروی اسطح زبر برای تماس تک نقطهای مطالعه شده است. در حالت واقعی وقتی شعاع ذره بزرگتر از اندازه شعاع قله برآمدگیهای سطح زبر باشد، تعداد نقاط تماسی ذره / سطح زبر، در منطقه تماسی بیش از یک نقطه خواهد بود که این امر موجب تغییر نیروی چسبندگی بهدست آمده در مقایسه با مدل های موجود می گردد. از این رو جهت تعیین نیروی موردنیاز برای جدا کردن ذره از سطح زبر، تعداد نقاط تماسی باید مشخص شود. در ادامه با فـرض مشـخص بـودن سطح تماس ظاهری مطابق تئوریهای موجود در مکانیک تماس، تعداد نقاط موجود در منطقه تماسی براساس هندسه توزیع زبری استخراج خواهد شد.

2-3-1 مدلسازی هندسی تماس چندنقطهای برای پروفیل سطح زبر با توزیع ششوجهی و چهاروجهی

در "شکل 2" نمای فوقانی پروفیل زبری با توزیع ششوجهی و چهاروجهی مشاهده میشود. هندسه تماس ذره کروی با پروفیلهای زبری ششوجهی و چهاروجهی به صورت فشرده و دارای طول موج $\lambda=2r$ است. براساس هندسه پروفیل ششوجهی، با فرض توزیع زبری فشرده و طول موج $\lambda=2r$ و تعداد برآمدگیهای در تماس N بهصورت معادله (7) به دست میآید:

$$N = 1 + \sum_{i=1}^{i \le \frac{a}{n}} \frac{360}{\arccos(1 - \frac{1}{2i^2})}$$
 (7)

که در آن a شعاع تماسی ذره با صفحه مبنا، n فاصله مرکز برآمدگیها از یکدیگر بوده و زاویه برحسب درجه است. معادله بهدست آمده مشابه معادله موجود برای تماس کره زبر با سطح صاف است [18].

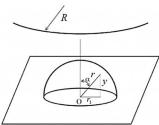


Fig. 1 Geometry of the Rumpf model for contact of a particles of radii R along the y- axis with spherical roughness of radius r that its center is on the substrate [15]

شکل 1 هندسه مدل رامپ برای تماس ذره کروی به شعاع R در امتداد محور y با زبری کروی به شعاع r که مرکز آن روی صفحه قرار گرفته است [15]

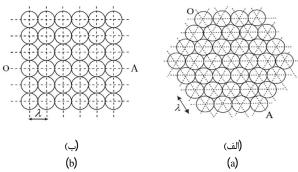


Fig. 2 Top view of roughness profiles, (a) hexahedron roughness profile, (b) tetrahedron roughness profile شكل 2 نماى فوقانى پروفيل زبرى، (الف) پروفيل زبرى ششوجهى، (ب) پروفيل

2-3-2- مدلسازی نیروی چسبندگی کره/سطح زبر در حالت تماس چندنقطهای

در این قسمت، نیروی چسبندگی تماسی سطوح با توجه به تأثیر پروفیل زبری و تعداد نقاط تماسی بر میزان نیروی چسبندگی برای توزیع زبـری بـا طول موج $\lambda=4r$ و $\lambda=2r$ و استخراج می شود. با در نظر گرفتن تعداد نقاط تماسی برابر N، معادله (6) که بیانگر نیروی تماسی در تماس تکنقطه ای است، برای حالت تماس چندنقطهای و توزیع زبری با ضرب نیروی تماسی در به شکل معادله (8) تغییر می کند: N

$$F_{\text{ad}} = \frac{A_H R}{6D_0^2} \left[\frac{Nr}{r+R} + \frac{1}{(1+r/D_0)^2} \right]$$
 (8)

در تحقیقات هدف تعیین نیروی چسبندگی بوده و سطح تماس واقعی و تغییر شکل سطوح بررسی نشده است و در موارد موردنیاز، سطح تماس واقعی بین ذره و سطح زبر غالبا با استفاده از نیروی چسبندگی مدلهای JKR در سطوح صاف بهدست آمده و لذا نیروی چسبندگی دقیق در معادلات تماسی اعمال نشده است؛ اما آزمایشها نشان دادهاند که برخلاف زبری مقیاس میکرو که نیروی چسبندگی را می توان با استفاده از ناحیه کوچک تماسی مشخص نموده و با عبارتهایی از تئوری الاستیسیته بیان نمود، برهم کنشهای سطوح ماشین کاری شده با زبری نانومتری به میزان زیادی تحت تأثیر نیروی وندروالس بین سطوح غیرتماسی است. از این رو در مدل سازی نانو راندن به معادلات تغییر شکل تماسی و نیز سطح واقعی تماس نیاز داریم. معادلات تغییر شکل تماسی و نیز سطح واقعی تماس در تماس تکنقطهای توسط كورايم و ذاكرى با استفاده از مدل رياضي تغيير شكل الاستيك تماس چسبنده شوارتز و براساس معادلات نیروی چسبندگی سطوح زبر ارائه شده است. در این مدل تأثیر کامل نیروهای وندروالس کوتاه-برد و دور-برد در داخل و خارج سطح تماس واقعی اعمال شده است. بهعلاوه، برهم کنش تماسی بین ذره با قله برآمدگی سطح زبر مشابه نیروی چسبندگی مدل JKR در نظر گرفته شده و نیروی برهم کنش دور - برد ذره با صفحه مبنا به نیروی خارجی اضافه می گردد. سپس برای استخراج رابطه شعاع تماسی و بار وارده از روش استخراج مدل JKR استفاده شده است [7]. نیروی معادل هرتزین در مدل $R_H^{
m JKR}$ ، با در نظر گرفتن نیروی دور -برد $2\pi r\omega_2$ به شکل زیر

$$F_{H}^{\text{JKR}} = F + 3\pi r a : \sqrt{F + (3\pi r \omega)^{2}}$$
 (9) با جای گذاری نیروی خارجی معادل، $F + 2\pi r \omega_{2}$ ، معادل هر تزین بهصورت معادله (10) استخراج شده است:

$$F_{H}^{\text{JKR}} = F + 2\pi r \omega_{2} + 3\pi r \omega_{1} \pm \sqrt{6\pi r \omega_{1} (F + 2\pi r \omega_{2}) + (3\pi r \omega_{1})^{2}}$$
 (10)

از طرفی، طبق معادلات (6) و (8)، نیروی چسبندگی در سطوح زبر از دو بخش نیروی داخل دایره تماسی یا کوتاه- برد و نیروی خارج دایره تماس یا دور - برد تشکیل شده است که بیانگر مقادیر نیروی وندروالس تماسی بین ذره/برآمدگی و نیروی وندروالس میانگین غیرتماسی بین ذره اصفحه مبنا بهعنوان سطح صاف میباشد. با فرض تماس چند نقطهای، نیروی وندروالس، معادل در معادلات (9) و (10)، بایستی در تعداد نقاط تماسی ضرب گر $F_{\rm r.c.}$ طبق معادله (10)، نیروی دور -برد یا عبارت غیرتماسی نیروی چسبندگی به عنوان یک نیروی خارجی در نظر گرفته می شود. نهایتا، معادلات تعمیم داده شده شوار تز جهت استفاده در مدل تماس چند نقطهای بهصورت معادله (11) به دست می آید:

زبری چهاروجهی

 $F_{\rm adh}^{\rm rough} = (F_{\rm nc} + F_{\rm external}) + 3N\pi R' \gamma \\ \pm \sqrt{6\pi R' \gamma (F_{\rm nc} + F_{\rm external}) + (3N\pi R' \gamma)^2}$ (11) پس از تعیین نیروی کل چسبندگی سطح براساس معادله (11)، با تقسیم آن بر تعداد نقاط تماسی، " نیروی چسبندگی در یک نقطه تماس ذره با هر قله برآمدگی سطح زبر $F_{\rm idh}^{\rm S}$ در مدل تماس چند نقطهای بهدست میآید.

 $F_{
m adh}^{
m s} = F_{
m adh}^{
m rough}/N$ (12) مقادیر تغییر شکل و ح تماس بین ذره کروی با یک قله برآمدگی سطح زبر، با جای گذاری $F_{
m idh}^{
m s}$ در معادلات JKR در هر نقطه تماس به دست خواهد آمد [10]. سطح تماس کل A در مدل تماس چند نقطهای، از سطح تماس ذره کروی با یک قله برآمدگی سطح زبر ضرب در تعداد نقـاط تماسـی بهدست خواهد آمد.

4-2- نیروی اصطکاک در مقیاس نانو

در حین حرکت دادن ذرات، حرکات محتمل ذرات عبارت از چسبندگی، لغزش و غلتش میتواند باشد [25-27]. بنابراین بایستی از مدلهای اصطکاکی لغزش و غلتش در مقیاس نانو استفاده نمود. با فرض عدم وجود سایش و خوردگی و این که اصطکاک اساسا ناشی از چسبندگی است، اصطکاک لغزشی به شکل رابطه (13) تعریف می شود:

f= au A (13) که در آن au شدت برش دو سطح در تماس و A سطح تماس واقعی کلی که در آن au شدت برای هر ماده ای، مقدار au در تئوری معادل au میاشد که au مدول برشی ماده است [26]. برای اصطکاک غلتشی بین ذره کروی با صفحه مبنا، مدل اصطکاک به صورت معادله au (14) فرض می شود:

$$f_{
m sub}^{\psi}= au_{\psi}A$$
 (14) در معادله فوق au_{ψ} ضریب اصطکاک دورانی است و برای بیشتر مواد au_{ψ} خیلی کمتر از اصطکاک لغزشی است [26].

5-2- مدل دینامیکی راندن نانوذره بر صفحه مبنای با سطح زبر توسط نانو ربات AFM

در این قسمت با توجه به تأثیر و اهمیت زبری سطوح در جابجایی اجسام در مقیاس میکرو/نانومتری، اثر زبری سطح بر مدل دینامیکی راندن نانو/میکرو ذرات با استفاده از پروب AFM در حالت تماس چند نقطهای مورد مطالعه قرار می گیرد. در تحقیقات ارائه شده قبلی برای محاسبه نیروهای اصطکاک از سطح تماسی ظاهری بین ذره صاف و صفحه مبنا و یا فرض تماس تک نقطهای استفاده شده بود. در این قسمت، جهت مدلسازی مکانیک تماس ذره صاف بر روی صفحه مبنای زبر از مدل تماس چندنقطهای با پروفیل زبری شش وجهی و چهاروجهی، در دو حالت توزیع زبری فشرده و قله-دره استفاده خواهد شد. تغییر شکل سطوح با استفاده از روش شوارتز و براساس نیروی چسبندگی استخراج شده بهدست میآید. از اینرو، مدل دقیقی که شامل نیروهای چسبندگی و نیروهای اصطکاک براساس سطح تماس واقعی است، ارائه خواهد شد. بعد از تعیین محل نانو/میکرو ذرات توسط AFM در مد غیرتماسی آن، نوک سوزن نانو ربات در تماس با ذره هدف قرار می گیرد. در طراحی پارامترها از لغزش رأس ابزار و دوران آن اجتناب شده و زاویه تماس در کل زمان پروسه ثابت باقی می ماند و برای عمل جابجایی به شکل ϕ راندن، بزرگتر از صفر است. تماس نوک سوزن با نانو/میکرو ذره موجب تغییر شکل اولیه در میکروتیرک شده و توسط سیستم فیدبک احراز می گردد. پس

از اطمینان از تماس ذره با ابزار، صفحه مبنا با سرعت ثابت حرکت $V_{
m sub}$ می کند که با استفاده از فرض سرعت نسبی می توان فرض نمود ذره با سرعت نسبی معادل سرعت صفحه مبنا ولی در خلاف جهت آن درحرکت است (فاز اول). در فاز اول ورودی مسئله موقعیت لحظهای ذره براساس سرعت حرکت صفحه مبنا بوده و خروجی مدل، مقدار نیروی وارده از طرف رأس سوزن پروب بر ذره F_T در هرلحظه است. حرکت ذره موجب افزایش پیچش و خمش میکروتیرک نانو ربات شده و نیروی عکسالعمل بین نوک سوزن/نانو/میکرو ذره را افزایش میدهد. افزایش نیرو تا لحظه غلبه بر چسبندگی و اصطکاک بین ذره اصفحه مبنا ادامه یافته و پس از آن حرکت نسبی بین ذره اصفحه مبنا آغاز می گردد (فاز دوم). با رسیدن ذره به موقعیت هدف، حركت متوقف شده و ابزار به مكان اوليه باز مي گردد [5]. خروجي اين فاز میزان جابجایی ذره است [29]. در راندن نانو/میکرو ذره بر روی سطح زبر، تغییراتی در مدل نیروی چسبندگی، عمق تغییر شکل و مساحت سطح تماسی ایجاد می شود و پروسه جابجایی نانو/میکرو ذره، مشابه مدلهای موجود است [29,5,3]. چنان که در "شکل 3" (الف) نشان داده شده است، نیروی F_T موجب خمش و پیچش میکروتیرک پروب می گردد. در "شکل 3 طول H و W و W و W و طول و عرض و ضخامت میکروتیر H و W طول Hسوزن پروب AFM است. نیروها و ممان پیچشی میکروتیرک F_y و F_z ، نیروهای عمودی و افقی رأس نوک سوزن پروب $(F_Z
ightarrow F_Y)$ و نیروی $(M_{ heta}
ightarrow F_X)$ راندن ذره F_T درحر کت افقی نانو/میکرو ذرات، در "شکل 3 (الف)" نشان داده شدهاند. نیروها بر زاویه پیچش θ و خیز z_c عمودند. y_c به هم وابستهاند

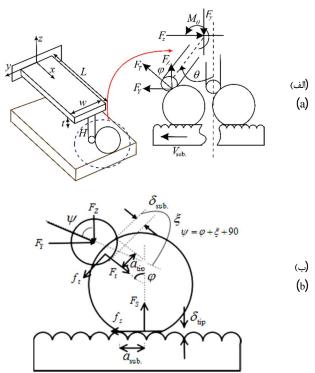


Fig. 3 Displacement of the particle by using the tip of AFM probe, (a) the microcantilever deformation during pushing of the nanoparticle, (b) the interaction forces and deformation of the contact surfaces between the tip/particle and particle/substrate

شکل S جابجایی ذره توسط رأس سوزن پروب AFM، (الف) تغییر شکل میکروتیر ک در حین راندن نانوذره، (ب) نیروهای برهم کنش سطوح و تغییر شکلهای تماسی بین نوک سوزن/ذره و ذره I صفحه مبنا

در شکل 3 (ب) نیروهای برهم کنش سطوح و تغییر شکلهای تماسی بین نوک سوزن 1 ذره و ذره 1 صفحه مبنا مشاهده می شوند. معادلات نیروهای وارد بر میکروتیرک به عنوان تیر یک سر گیردار به ترتیب زیر است:

$$F_{v} = K_{v} y_{p} \tag{15}$$

$$F_{z} = K_{z} z_{p} \tag{16}$$

$$M_{\theta} = K_{\theta}\theta \tag{17}$$

ماتریس سختی فنری میکروتیرک در راستای y و z و θ بهصورت تابعی از خواص مکانیکی و هندسه میکروتیرک بهدست میآید [29]:

$$K_z = \frac{Ewt^3}{4L^3} , K_y = \frac{Etw^3}{4L^3} , K_\theta = \frac{Gwt^3}{6L}$$
 (18)

که E و θ به ترتیب مدول یانگ و ضریب پواسون میکروتیر δ میباشند. با در نظر گرفتن تغییر شکل تماسی بین ذره-راس ابزار δ و ذره-صفحه مبنا δ_s در شعاع یا ارتفاع برآمدگی τ براساس مدل تماس چند نقطهای، معادلات سینماتیکی برای موقعیت انتهای آزاد میکروتیر δ بهدست می آیند:

$$y_p = y_{\text{sub}} + (R_p - \delta_t)\sin\varphi - H\sin\theta$$
 (19)

$$z_p = z_{\text{sub}} + (R_p - \delta_t)\cos\varphi + (R_p + r - \delta_s)$$

$$+H\cos\theta + F_{x}\sin^{2}\theta - F_{z}\cos\theta\sin\theta$$
(20)

$$+\frac{M_{\theta}\cos\theta + I_{p}\ddot{\theta}\cos\theta}{H} + \frac{m\sin\theta}{2}(\ddot{y}_{T}\sin\theta) + \ddot{y}_{p}\sin\theta - \ddot{z}_{T}\cos\theta - \ddot{z}_{p}\cos\theta)$$

$$+\ddot{y}_{p}\sin\theta - \ddot{z}_{T}\cos\theta - \ddot{z}_{p}\cos\theta)$$

$$F_{Z} = F_{z}\cos^{2}\theta - F_{y}\cos\theta\sin\theta$$
(21)

$$+\frac{M_{\theta}\sin\theta + I_{p}\ddot{\theta}\sin\theta}{H} - \frac{m\cos\theta}{2} (\ddot{y}_{T}\sin\theta + \ddot{y}_{p}\sin\theta - \ddot{z}_{T}\cos\theta - \ddot{z}_{p}\cos\theta)$$
(22)

نهایتا نیروی راندن ذره F_T و زاویه آن با محور عمود بر سطح افق ψ با استفاده از معادلات زیر بهدست می آیند:

$$F_T = \sqrt{F_Y^2 + F_Z^2} (23)$$

$$\psi = \tan^{-1}(\frac{F_Y}{F_Z}) \tag{24}$$

6-2- مدلسازی رفتار دینامیکی ذرات

نیروهای اصطکاکی و عمودی و نهایتا شرایط بحرانی برای لحظهٔ حرکت ذره براساس "شکل 8 (ب)" از نیروهای وارد بر رأس سوزن پروب بهدست می آیند. معادلات لازم برای تعیین مقدار بحرانی نیروی اعمالی از طرف رأس سوزن پروب در لحظهٔ حرکت با استفاده از روش به کار رفته در استخراج معادلات در سطوح صاف به دست می آیند [29,5]. نهایتا، شرایط موجود در معادلات زیر برای غلبه نیروی ابزار بر چسبندگی و شروع حرکت ذره بایستی ارضا شوند که نهایتا نیروی بحرانی اعمالی از طرف رأس سوزن پروب در لحظهٔ حرکت را تعیین می کند [29]. با استفاده از معادله اصطکاک لغزشی، شرط لازم جهت شروع حرکت لغزشی ذره بر روی صفحهٔ مبنا بهدست می آید [5]:

$$F_T > \frac{\tau_s A}{\sin\psi - \mu_s \cos\psi} = F_s \tag{25}$$

با استفاده از معادله اصطكاك غلتشى، شرط لازم جهت شروع حركت غلتشى ذره بر روى صفحهٔ مبنا به شكل معادله (26) است [5]:

$$F_T > \frac{\tau_{r_s} A + \tau_{r_t} A_t}{R(\sin\psi + \cos\zeta) + \mu_{r_t} \sin\zeta - \mu_{r_s} \cos\psi} = F_r$$
 (26)

که در معادلات فوق، A، برابر سطح تماس واقعی در مدل تماس چندنقطه ای خواهد بود.

3- شبیه سازی رفتار دینامیکی نانو/میکرو ذره در جابجایی به شکل راندن بر سطح زبر

در ادامه این قسمت ابتدا مقادیر و شرایط اولیه ارائه خواهند شد. سپس رفتار دینامیکی ذره در جابجایی به شیوه راندن بر سطوح زبر با فرض تماس چندنقطهای، با حل همزمان معادلات دینامیکی، تماسی و بحرانی و با اعمال شرایط اولیه شبیهسازی و تحلیل خواهد شد. شبیهسازیها با حل همزمان معادلات (7) تا (26) و با استفاده از شرایط اولیه ارائه شده در معادله (27) اجرا می گردند و معادلات (25) و (26) به عنوان شروط آغاز حرکت ذره می باشند. نتیجه شبیهسازیها، نمودار تغییرات نیروهای دینامیکی F_r و F_s F_r و حرکت است که نیروی بحرانی شروع حرکت لغزشی یا غلتشی ذره از آن استخراج می شود.

1-3- مقادير اوليه مسئله

در این تحقیق، جابجایی ذراتی کروی از جنس طلا بر روی صفحه مبنایی زبر از جنس اکسید سیلیکون و با توزیع زبری ششوجهی و چهاروجهی که با سرعت ثابت $V_{\mathrm{sub.}} = 100 \, \mathrm{nm/s}$ حرکت می کند، شبیه سازی می شود. زاویه تماس پروب با ذره معادل $\varphi = 60^\circ$ و ثابت است [29]. قبل از شروع حرکت صفحه مبنا، برای اطمینان از تماس رأس سوزن پروب با ذره تغییر مكان اوليه $\phi_0=0.7^\circ$ حول محور y در ميكروتير ك ايجاد مىشود. مقدار انرژی سطحی معادل طلا و سیلیکون برای ذرهl رأس سوزن پروب و $\omega = 0.2 \, \text{J/m}^2$ جهت بررسی $\omega = 0.2 \, \text{J/m}^2$ مبنا، تقریبا معادل رفتار دینامیکی نانو/میکرو ذرات، از ذراتی با شعاعهای مختلفی در محدوده 50 تا 500 نانومتری استفاده خواهد شد. این محدوده از اندازه ذره، برای بررسی تغییر حرکت لغزشی به غلتشی یا برعکس انتخاب شده است. در تحقیقات گذشته جابجایی نانو/میکرو ذرات 50 تا 1000 نانومتری بر سطوح صاف، بررسى شده است. طبق اين تحقيقات، نانو ذراتي با شعاع 50 تا 500 نانومتر در حین جابجایی بر روی سطح صاف و در شرایط تعریف شده مسئله، ابتدا شروع به لغزش مى كنند و ذرات با شعاع بالاى 500 نانومتر ابتدا شروع به غلتش می کنند [30,29]. به علاوه، جابجایی ذره بر سطوح زبر با فرض تماس تکنقطهای مطالعه شده است [7]. در این تحقیق، امکان غلتش در زبریهای کم برای ذرات نانومتری مشاهده شده است. مقادیر هندسی پروب AFMدر جدول 1 و خواص مكانيكي آن در جدول 2 ارائه شده است. ضرايب μ_d و μ_s ارائه شدهاند. 3 او مطکاکی موردنیاز برای سطوح تماسی در جدول 3ثابتهای ضریب اصطکاک استاتیکی و دینامیکی حرکت نانو/میکروذره روی صفحه مبنا است (جدول 3). au مقاومت برشی سطوح در تماس بین ذره /صفحه مبنا و نوک I ذره ثابت فرض شده و μ_r و au_r پارامترهای اصطکاک غلتشی میباشند. نهایتا، شبیه سازی ها با استفاده از پروفیل زبری سطح با توزیع ششوجهی و چهاروجهی و طولموجهای $\lambda=4r$ و $\lambda=2r$ براساس مدل رامپ برای تماس چند نقطهای انجام خواهند شد.

2-3- شرايط اوليه

با جای گذاری مقادیر عددی و ساده نمودن معادلات در زمان t=0، شرایط

جدول 1 ابعاد هندسي AFM [29]

_	Table 1 AFM geometric dimensions [29]					
	" (عرض میکروتیر (μm)	ضخامت	ارتفاع	شعاع نوک	
ير	طول میکروتیر (μm)		میکروتیر (μm)	سوزن (μm)	سوزن (nm)	
-	225	19	1	12	20	

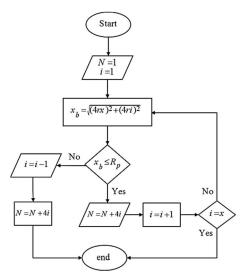


Fig. 5 The algorithm of the number of contact points calculation for tetrahedron roughness profile with $\lambda=4r$

 ${\bf m}$ کل 5 الگوریتم محاسباتی تعداد نقاط تماسی برای پروفیل زبری چهاروجهی با ${\bf \lambda}=4r$

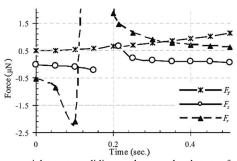


Fig. 6 Nanoparticle starts to sliding on the smooth substrate after 0.213 seconds and critical force of $0.647\mu N$ [29]

شكل 6 شروع به حركت لغزش بر روى صفحه مبناى صاف بعد از 0.213 ثانيه و نيروى $0.647 \mu N$ نيروى $0.647 \mu N$

شروع به لغزش بر روى صفحه مبناى صاف مى كند [29].

در "شکلهای 7 تا 12"، نتایج شبیهسازیهای جدید و نمودار تغییرات نیروی بحرانی راندن نانو/میکرو ذره صاف (0,0) صفحه مبنای زبر بیا پروفیل ششوجهی و چهاروجهی و با د (0,0) قتر (0,0) شش وجهی و چهاروجهی و با د (0,0) قتر (0,0) شخاع قله برآمدگی برای زبریهای مختلف با طول موج (0,0) و (0,0) و (0,0) و (0,0) و با توجه به این که در معادلات نیروی چسبندگی در سطوح زبر، عبارت نیروی چسبندگی غیر تماسی بین ذره و سطح نیز لحاظ شده است، جهت افزایش دقت در مقایسه نمودارها با سطح صاف و تغیین میزان تأثیر زبری سطح، نیروی بحرانی حرکت ذره در سطح صاف نیز با افزودن نیروی چسبندگی غیر تماسی به معادلات JKR تعیین شده است.

در "شکلهای 9 و 10"، نمودار تغییرات نیروی بحرانی حرکت لغزشی و غلتشی نسبت به تغییر شعاع قله زبری برای نانوذرهای با شعاع 400 نانومتر به ترتیب روی سطوح زبری با پروفیل زبری ششوجهی و چهار وجهی، و با طول موجهای $\lambda=4r$ نشان داده شده است.

400 با توجه به نمودارها مشاهده می گردد که میکرو ذرهای به شعاع 400 نانومتر در لحظه شروع حرکت روی صفحه مبنای زبر رفتـار لغزشـی خواهـد داشت که مطابق نتایج به دست آمده در تحقیقات گذشته است [29,5]. بعلاوه در شعاعهای زبری کوچک تا حدود r=4n مقدار نیروی بحرانی لغزشی ذره

جدول 2 خواص مكانيكي AFM [29]

Table 2 The mechanical properties of AFM [29]

مدول یانگ (GPa)	ضريب پواسون	مدول برشی (GPa)	چگالی (kgm ⁻³)
169	0.27	66.54	2330

جدول 3 ضرايب اصطكاك لغزشي اغلتشي [29]

Table 3 Friction coefficient of sliding/rolling [29]

Tuble 5 Theulon coefficient of shaing folding [25]						
مقدار	واحد	پارامتر	ضريب اصطكاك			
0.8	-	μ_s	استاتیکی			
0.7	-	$\mu_{ m d}$	دینامیکی			
80	nm	$\mu_{ m r}$	غلتشي			
28	MPa	τ	مقاومت برشى سطح			
28	Pa.m	$ au_{ m s}$, $ au_{ m r}$	مقاومت برشى سطح غلتشى			

اولیه مسئله به ترتیب زیر بهدست میآید. توجه شود که مشتق دوم تغییر شکل زاویهای و تغییر شکلهای تماسی ناچیز است و معادل صفر فرض شده

$$\begin{cases} \theta_{0} = 0 \\ \dot{\theta} = \frac{\dot{y}_{sub}}{H} \\ \ddot{\theta} = 0 \end{cases} \begin{cases} y_{p_{0}} = y_{T_{0}} = 0 \\ \ddot{y}_{p} = \ddot{y}_{T} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dot{\delta}_{tip} = \dot{\delta}_{sub} = cte. \\ \ddot{\delta}_{tip} = \ddot{\delta}_{sub} = 0 \end{cases} \end{cases} \begin{cases} \Phi_{0} = 0.7^{\circ} \\ z_{p_{0}} = Lsin(\Phi_{0}) \\ z_{p_{0}} = -\dot{y}_{sub}^{2}/H \\ z_{T_{0}} = z_{p_{0}} - H \end{cases}$$
(27)

3-3- نتایج شبیهسازی نیروی بحرانی حرکت نانو/میکرو ذره بر سطح زبر در تماس چندنقطهای

براساس هندسه پروفیل چهاروجهی، با فرض توزیع زبری فشرده و طول موج $\lambda = 4r$ تعداد برآمدگیهای در تماس N با استفاده از الگوریتم "شـکل 5" (براساس هندسه "شکل 4") به دست می آید.

در "شکل $a_{
m sub}$ بیانگر شعاع تماسی ذره بـا صـفحه مبنـا، n فاصـله مرکز برآمدگیها از یکدیگر بوده و زاویه برحسـب درجـه اسـت. در الگـوریتم "شکل $a_{
m sub}$ "، $a_{
m sub}$ میباشد کـه علامـت []، بیـانگر تـابع جـز صـحیح میباشد.

در "شکل 6" نمودارهای تغییرات نیروهای وارده، لغزشی و غلتشی در حین پروسه راندن و قبل از غلبه بر نیروی چسبندگی ذره با سطح صاف برای ذره کروی به شعاع 50 نانومتر نشان داده شدهاند. چنان که مشاهده می شود، ذره تقریبا پس از زمان 0.213 ثانیه با نیروی بحرانی 0.647 میکرو نیوتن

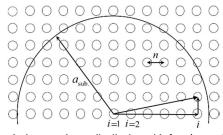


Fig. 4 Tetrahedron roughness distribution with $\lambda = 4r$ to calculate the contact point number N

شکل 4 توزیع زبری چهاروجهی با فرض $\lambda = 4r$ برای محاسبه تعداد زبریهای در تماس N

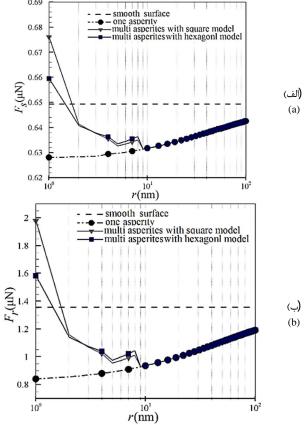


Fig. 7 Variation of the pushing critical force versus to change of the peak radius of the rough surface with the wavelength $\lambda=2r$ for the particle of radius $R_n=50$ nm; (a) sliding force, (b) rolling force

شکل 7 تغییرات نیروی بحرانی راندن نسبت به تغییر شعاع قله زبری روی سطح زبر با طول موج $\lambda=2r$ (الف) نیروی لغزشی، $\lambda=2r$ نیروی غلتشی نیروی غلتشی

براساس پروفیل زبری شش وجهی کمتر از مقدار آن براساس پروفیل زبری چهاروجهی است و با افزایش شعاع قله زبری، وضعیت عکس شده است. در سطوح زبری با توزیع زبری فشرده، با افزایش شعاع زبری در حدود r=19nm نیروی به دست آمده از مدلهای چندنقطهای به سمت تماس تکنقطهای میل می کند و با کاهش فشردگی توزیع زبری، تماس تکنقطهای در زبریهای کوچکتر اتفاق می افتد.

در "شکلهای 11 و 12" تغییرات نیروی بحرانی حرکت لغزشی و غلتشی نسبت به تغییر شعاع قله زبری برای نانوذرهای با شعاع 500 نانومتر به ترتیب روی سطوح زبری با پروفیل زبری ششوجهی و چهاروجهی و طول موجهای $\lambda=2r$ و $\lambda=2r$ نشان داده شده است. طبق نتایج، در شعاعهای زبری کوچک تا حدود r=2n مقدار نیروی بحرانی غلتشی ذره براساس پروفیل زبری ششوجهی کمتر از مقدار آن براساس پروفیل زبری چهاروجهی است و با افزایش شعاع قله زبری، وضعیت عکس شده است. در سطوح زبری با توزیع زبری فشرده، با افزایش شعاع زبری در حدود r=11nm نیروی بدست آمده از مدلهای چندنقطهای به سمت تماس تکنقطهای میل می کند و با کاهش فشردگی توزیع زبری، تماس تکنقطهای در زبریهای کوچکتر اتفاق می افتد.

با توجه به نمودارها مشاهده می گردد که میکرو ذرهای به شعاع 500 نانومتر در لحظه شروع حرکت روی صفحه صاف حرکت لغزشی دارد اما با در نظر گرفتن زبری صفحه مبنا رفتار پیشبینی شده براساس مدلسازیها،

تغییر کرده و بیانگر حرکت غلتشی میباشد که مطابق نتایج بهدست آمده در تحقیقات گذشته است [29,7]. طبق نتایج، پیشبینی رفتار ذره براساس مدلهای تماس چندنقطهای در حد واسط مدلسازیهایی با فرض سطح کاملا صاف و تماس تکنقطهای قرار دارد و بیانگر دقت مدلسازی براساس تمال چندنقطهای میباشد. درمجموع، مقدار نیروی پیشبینی شده توسط مدلسازی راندن نانو/میکرو ذره در سطوح زبر در مقایسه با مقدار آن برای سطوح صاف کمتر است و دقت آن بستگی بهدقت مدلسازی سطح زبر دارد. در حالت کلی، نتایج بیانگر کاهش نیروی اصطکاک چسبندگی در سطوح زبر میباشد که این مسئله مطابق نتایج مطالعات انجام شده در زمینه چسبندگی و اصطکاک سطوح زبر است.

در مجموع با تحلیل کلی نمودارهای بهدست آمده در شبیهسازیها مشاهده می گردد که برای نانوذره با شعاع 50 نانومتری مقدار نیروی بحرانی لغزشی در توزیع زبری فشرده با 2 = λ , برای پروفیل زبری چهاروجهی در تغزشی در توزیع زبری فشرده با λ = 2.5 درصد بیشتر از توزیع زبری ششوجهی میباشد؛ که به دلیل تغییر تعداد زبریهای در تماس است و در توزیع زبری فشرده با λ = 4r مقدار نیروی بحرانی لغزشی برای پروفیل زبری ششوجهی و چهاروجهی هیچ اختلافی باهم نداشته و باهم برابر هستند که ناشی از قطر کوچک ذره و برابری تعداد نقاط تماسی است. با افزایش شعاع ذرات اختلاف زیادی در مقادیر نیروی بحرانی مشاهده می گردد که ناشی از تفاوت تعداد نقاط تماسی

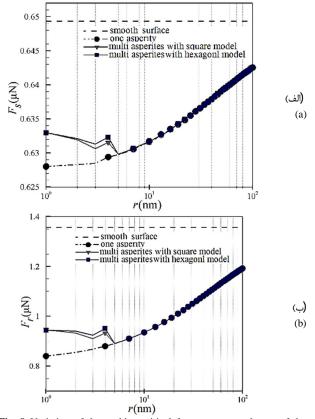


Fig. 8 Variation of the pushing critical force versus to change of the peak radius of the rough surface with the wavelength $\lambda=4r$ for the particle of radius $R_p=50$ nm; (a) sliding force, (b) rolling force

شکل 8 تغییرات نیروی بحرانی راندن نسبت به تغییر شعاع قلّه زبری روی سطح زبر با طول موج $\lambda=4$ برای ذره به شعاع $R_p=50$ nm نیروی $\lambda=4$ (الف) نیروی لغزشی، $\lambda=4$ نیروی غلتشی

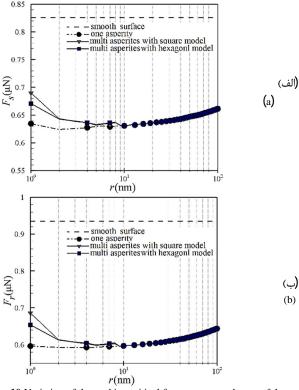


Fig. 10 Variation of the pushing critical force versus to change of the peak radius of the rough surface with the wavelength $\lambda=4r$ for the particle of radius $R_p=400$ nm; (a) sliding force, (b) rolling force شكل 10 تغییرات نیروی بحرانی راندن نسبت به تغییر شعاع قله زبری روی سطح زبر با طول موج $\lambda=4r$ برای ذره به شعاع $\lambda=4r$ (الف) نیروی لغزشی، (ب نیروی غلتشی

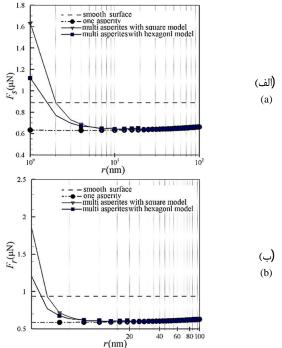


Fig. 11 Variation of the pushing critical force versus to change of the peak radius of the rough surface with the wavelength $\lambda=2r$ for the particle of radius $R_p=500$ nm; (a) sliding force, (b) rolling force شکل 11 تغییرات نیروی بحرانی راندن نسبت به تغییر شعاع قله زبری روی سطح زبر با طول موج 2r=1 برای ذره به شعاع 2r=1 با طول موج 2r=1 با طول موج غلتشی

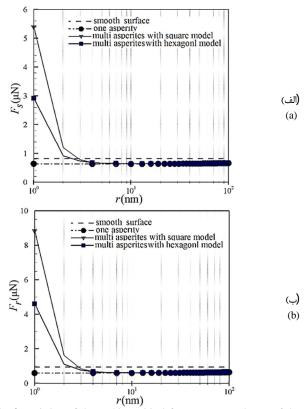


Fig. 9 Variation of the pushing critical force versus to change of the peak radius of the roughness surface with the wavelength $\lambda=2r$ for the particle of radius $R_p=400$ nm; (a) sliding force, (b) rolling force \mathbf{m} شکل 9 تغییرات نیروی بحرانی راندن نسبت به تغییر شعاع قله زبری روی سطح زبر با طول موج $\lambda=2r$ برای ذره به شعاع $\lambda=2r$ (الف) نیروی لغزشی، (ب) نیروی غلتشی

با استفاده از پروفیل زبری متفاوت و اختلاف فشردگی توزیع زبری می باشد. به عنوان نمونه برای ذره 400 نانومتر و در $\lambda = 2r$ این اختلاف 45 درصد مى باشد. لذا به طور كلى با افزايش شعاع ذره اختلاف بين تخمين تعداد نقاط تماسی در استفاده از پروفیل زبری ششوجهی و چهار وجهی بیشتر میشود. با بزرگ شدن شعاع ذره، سطح تماس نیز افزایشیافته و بنابراین تعداد زبریهای در تماس نیز افزایش مییابد. بعلاوه برای شعاع زبریهای کوچک، پروفیل زبری ششوجهی، تعداد نقاط تماسی بیشتری را در مقایسه با پروفیل زبری چهاروجهی برآورد می کند. اما با افزایش شعاع زبریها و با استفاده از هر دو پروفیل زبری شش وجهی و چهاروجهی، تعداد نقاط تماسی تقریبا یکسانی بهدست میآید. البته بایستی توجه گردد که تعریف شعاع زبری کوچک در مقایسه با شعاع ذره تعریف می شود. به عنوان نمونه برای نانوذره با شعاع 50 نانومتری برای $\lambda = 2r$ مقدار نیروی بحرانی در r = 9 در دو حالت توزیع زبری ششوجهی و چهاروجهی باهم برابر میشود، درحالی که برای ذره رای برای این اتفاق در r=19nm مشاهده می شود. همچنین برای 400 نانوذرات با شعاع ثابت، با تغییر شعاع زبری در برخی بازه ها با توجه به هندسه توزیع زبری، تعداد زبریهای در تماس با ذره ثابت باقی می ماند. در این حالت به علت افزایش شعاع زبری مقدار نیروی چسبندگی تماسی (با توجه به عبارت اول معادله (8)) و در نتیجه نیروی بحرانی در حال افزایش می باشد.. در ادامه با افزایش بیشتر شعاع زبری و تغییر تعداد نقاط تماسی به دلیل افزایش شعاع زبری که می تواند کاهشی باشد، گاها کاهش مقدار نیروی بحرانی لغزشی مشاهده می شود که سبب بروز روند صعودی و نزولی در نمودار

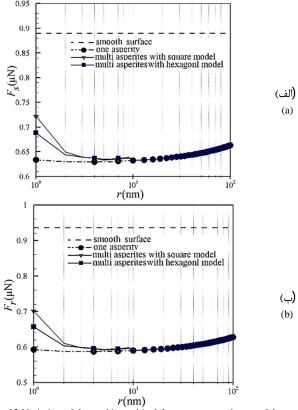


Fig. 12 Variation of the pushing critical force versus to change of the peak radius of the rough surface with the wavelength $\lambda=4r$ for the particle of radius $R_p=500$ nm; (a) sliding force, (b) rolling force شکل 12 تغییرات نیروی بحرانی راندن نسبت به تغییر شعاع قله زبری روی سطح زبر $\lambda=4r$ با طول موج $\lambda=4r$ برای ذره به شعاع nm غیروی غلتشی، (ب) نیروی غلتشی

نیروی بحرانی می گردد.

4- بحث و جمع بندى

هدف از مدلسازی پروسه راندن ذره در مقیاس نانو توصیف رفتار اصطکاکی و دینامیکی با تکیه بر تحلیل خواص مکانیکی ناهمواریها در اندازههای نانومتری است که هدف غایی آن جابجایی دقیق و کنترل موقعیت ذره در هر لحظه از حرکت است که اساس کنترل اتوماتیک جابجایی ذره توسط میکروسکوپ نیروی اتمی میباشد. با توجه به اهمیت زبری سطح و تأثیر آن بر چسبندگی سطوح و مدلسازی دقیق پروسه راندن، و با توجه به این که تحقیقات کمی جهت مدلسازی جابجایی ذره با در نظر گرفتن هندسه دقیق پروفیل زبری انجام شده است و نیز تحقیقات موجود با فرض سطح صاف و یا تماس تکنقطهای انجام شده اند، در این مقاله بهعنوان کار جدید، مدلسازی دقیق تری از پروسه راندن نانوذره روی صفحه مبنای زبر برمبنای مدل تماس چند نقطهای ارائه شد.

ابتدا، با توجه به این که طبق هندسه مدل رامپ نیروی چسبندگی بین ذره کروی/سطح زبر برای تماس تکنقطهای مورد مطالعه قرار گرفته است، و در حالت واقعی وقتی شعاع ذره بزرگتر از اندازه شعاع قله برآمدگیهای سطح زبر باشد، تعداد نقاط تماسی ذره/سطح زبر در منطقه تماسی بیش از یک نقطه خواهد بود و لذا جهت تعیین نیروی موردنیاز برای جدا کردن ذره از سطح زبر، تعداد نقاط تماسی باید مشخص می شد. بدین منظور مدل جدیدی برای تماس چندنقطهای بین ذره کروی صاف و سطح زبر بهصورت

تابعی از پارامترهای سطح زبر و شعاع ذره و نیروی چسبندگی سطوح استخراج گردید. مدل تماس چندنقطهای از ترکیب مدل رامپ، تئوری تماسی JKR و شوارتز، و براساس هندسه تماس با پروفیل زبری ششوجهی و چهاروجهی با ارائه معادلات لازم جهت استخراج نیروهای چسبندگی و سطح تماس واقعی استخراج شد و سپس تغییرات لازم در معادلات دینامیکی راندن ذرات کروی بر روی صفحه مبنای زبر برمبنای مدل تماس چندنقطهای اعمال شد. نهایتا در این پژوهش مدل دینامیکی راندن نانو/میکرو ذره کروی بر پایه تئوری تماس چندنقطهای روی سطوح زبری با پروفیل توزیع زبری ششوجهی و چهاروجهی جهت بررسی رفتار دینامیکی جابجایی آن شبیه-سازی و مطالعه شد. هندسه سطح زبر با استفاده از دو پارامتر اصلی شامل شعاع قله یا اندازه برآمدگی، و طول موج زبری (فشردگی توزیع زبری یا فاصله رأس دو برآمدگی) تعریف شد. شبیه سازی ها با استفاده از پروفیل هندسی ششوجهی و چهاروجهی برای طولموجهای $\lambda = 4r$ و $\lambda = 4r$ براساس مدل تماس چند نقطهای اجرا شد. نهایتا رفتار دینامیکی نانو/میکرو ذراتی با شعاعهای 50 ،400 و 500 نانومتر در جابجایی بر سطوح زبری با پروفیل هندسی ششوجهی و چهاروجهی در توزیع فشرده و نیز قله-دره شبیهسازی و تحلیل شد.

نتایج شبیه سازی ها نشان داد که مقدار نیروی بحرانی کمتر از مقدار بهدست آمده برای صفحه مبنای صاف و بیش از مقدار آن با فرض تماس تکنقطهای میباشد که بدیهی میباشد. با افزایش شعاع نانو/میکرو ذرات، اختلاف نیروی بحرانی حرکت با مقادیر نیروی لازم برای حرکت روی سطح صاف افزایش می یابد. همچنین با افزایش شعاع قله زبری نیروی بحرانی پیشبینی شده براساس مدلهای چندنقطهای به سمت مقدار بهدست آمده با فرض تماس تکنقطهای میل می کند. با کاهش فشردگی توزیع زبری، تماس تکنقطهای در زبریهای کوچکتری اتفاق میافتد. همچنین نتایج نشان می-دهند که نیروی بحرانی حرکت ذره با افزایش شعاع زبری و در مقادیر کوچک، ابتدا سیر نزولی داشته و با افزایش بیشتر زبری، شروع به افزایش می کند که ناشی از افزایش نیروهای چسبندگی تماسی در شعاعهای زبری بزرگ است. برای زبریهای کوچک مقدار نیروی بحرانی لغزشی ذره در تماس چندنقطهای، براساس پروفیل زبری چهاروجهی بیشتر از مقدار آن براساس پروفیل زبری ششوجهی است که با افزایش شعاع قله زبری، در دو مدل نیروی بحرانی تقریبا یکسان میشود. همچنین نیروی بحرانی حرکت باکم شدن فشردگی توزیع زبری کاهش مییابد که ناشی از تفاوت تعداد نقاط تماسی است. این اختلاف در پیشبینی مقدار نیروی بحرانی در زبریهای کوچک قابل توجه است. طبق نتایج تحقیقات موجود میکروذرهای به شعاع بیش از 500 نانومتر در لحظه شروع حرکت روی صفحه صاف حرکت لغزشی دارد اما با در نظر گرفتن زبری صفحه مبنا رفتار پیشبینی شده براساس مدلسازیها، تغییر کرده و میکرو ذرهای به شعاع کمتر از 500 نانومتر روی سطح زبر در لحظه شروع رفتار غلتشي دارد. پيشبيني رفتار لغزشي/غلتشي ذره براساس مدلهای تماس چندنقطهای در حد واسط مدلسازیهایی با فرض سطح کاملا صاف و تماس تکنقطهای قرار دارد که بیانگر دقت مدل سازی براساس تماس چندنقطهای می باشد. از آن جایی که در حالت واقعى سطوح كاملا صاف وجود ندارند، نتايج بهدست آمده امكان جابجايي و کنترل دقیق تر مسیر حرکت نانو/میکروذرات را بر روی صفحه مبنای واقعی به وجود مي آور د.

- Colloid and Interface Science, Vol. 232, No. 1, pp. 10-16, 2000.
- [17] Y. I. Rabinovich, J. J. Adler, A. Ata, R. K. Singh, B. M. Moudgil, Adhesion between nanoscale rough surfaces: II. Measurement and comparison with theory, *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 232, No. 1, pp. 17-24, 2000.
- [18] K. Cooper, N. Ohler, A. Gupta, S. Beaudoin, Analysis of contact interactions between a rough deformable colloid and a smooth substrate, *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 222, No. 1, pp. 63-74, 2000.
- [19] M. George, D. Goddard, The characterisation of rough particle contacts by atomic force microscopy, *Journal of colloid and interface science*, Vol. 299, No. 2, pp. 665-672, 2006.
 [20] Q. Li, V. Rudolph, W. Peukert, London-van der Waals adhesiveness of
- [20] Q. Li, V. Rudolph, W. Peukert, London-van der Waals adhesiveness of rough particles, *Powder Technology*, Vol. 161, No. 3, pp. 248-255, 2006.
 [21] E. Beach, G. Tormoen, J. Drelich, R. Han, Pull-off force measurements
- [21] E. Beach, G. Tormoen, J. Drelich, R. Han, Pull-off force measurements between rough surfaces by atomic force microscopy, *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 247, No. 1, pp. 84-99, 2002.
- [22] M. C. Audry, S. Ramos, E. Charlaix, Adhesion between highly rough alumina surfaces: an atomic force microscope study, *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 331, No. 2, pp. 371-378, 2009.
- [23] Y. V. Kudryavtsev, E. Gelinck, H. R. Fischer, Theoretical investigation of van der Waals forces between solid surfaces at nanoscales, *Surface Science*, Vol. 603, No. 16, pp. 2580-2587, 2009.
- [24] N. Fatah, Study and comparison of micronic and nanometric powders: Analysis of physical, flow and interparticle properties of powders, *Powder Technology*, Vol. 190, No. 1, pp. 41-47, 2009.
- [25] M. Zakeri, M. Kharazmi, Modeling of Friction in Micro/Nano scale with Random Roughness Distribution, Modares Mechanical Engineering, Vol. 14, No. 11, pp. 175-184, 2014. (in Persian فارسي)
- [26] M. Sitti, Nanotribological characterization system by AFM based controlled pushing, Proceedings of the 1th International Conference Nanotechnology IEEE, Maui, HI, October 28-30, pp. 99-104, 2001.
- [27] L. M. Dorogin, S. Vlassov, B. Polyakov, M. Antsov, R. Lõhmus, I. Kink, A. E. Romanov, Real-time manipulation of ZnO nanowires on a flat surface employed for tribological measurements: Experimental methods and modeling, *Physica Status Solidi (b)*, Vol. 250, No. 2, pp. 305-317, 2013.
- [28] H. J. Kim, K. H. Kang, D. E. Kim, Sliding and rolling frictional behavior of a single ZnO nanowire during manipulation with an AFM, *Nanoscale*, Vol. 5, No. 13, pp. 6081-6087, 2013.
- [29] M. Korayem, M. Zakeri, Sensitivity analysis of nanoparticles pushing critical conditions in 2-D controlled nanomanipulation based on AFM, *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, Vol. 41, No. 7-8, pp. 714-726, 2009.
- [30] A. Tafazzoli, M. Sitti, Dynamic modes of nanoparticle motion during nanoprobe-based manipulation, *Proceedings of the 4th International Conference Nanotechnology IEEE*, August 16-19, pp. 35-37, 2004.

5- مراجع

- H. Xie, C. Onal, S. Régnier, M. Sitti, Atomic Force Microscopy Based Nanorobotics: Modelling, Simulation, Setup Building and Experiments, pp. 1-61, Berlin: Springer, 2011.
- [2] M. R. Falvo, R. Superfine, Mechanics and friction at the nanometer scale, Journal of Nanoparticle Research, Vol. 2, No. 3, pp. 237-248, 2000.
- [3] M. Sitti, H. Hashimoto, Controlled pushing of nanoparticles: Modeling and experiments, *IEEE/ASME Transactions on Mechatronics*, Vol. 5, No. 2, pp. 199-211, 2000.
- [4] D. H. Kim, J. Park, B. Kim, K. Kim, Modeling and simulation of nano robotic nano manipulation with an AFM probe, *Proceedings of the International Conference on Control, Automation and Systems*, Muju Resort, Jeonbuk, Korea, October 16-19, 2002.
- [5] A. Tafazzoli, M. Sitti, Dynamic behavior and simulation of nanoparticle sliding during nanoprobe-based positioning, *Proceedings of the international* mechanical engineering congress and exposition, ASME, Anaheim, California, USA, Novamber 13–19, pp. 965-972, 2004.
- [6] M. Taheri, 3D-Dynamic modeling and simulation of biological nanoparticle motion using AFM nano-robot, *Modares Mechanical Engineering* Vol. 15, No. 12, pp. 311-316, 2015. (in Persian فارسى)
- [7] M. H. Korayem, M. Zakeri, Dynamic modeling of manipulation of micro/nanoparticles on rough surfaces, *Applied Surface Science*, Vol. 257, No. 15, pp. 6503-6513, 2011.
- [8] M. Zakeri, J. Faraji, Modeling of the rough spherical nanoparticles manipulation on a substrate based on the AFM nanorobot, *Applied Physics A*, Vol. 117, No. 4, pp. 1947-1962, 2014.
- [9] D. Alducin, G. Casillas, F. Mendoza-Santoyo, A. Ponce, M. José-Yacamán, Kinematics of gold nanoparticles manipulation in situ transmission electron microscopy, *Journal of Nanoparticle Research*, Vol. 17, No. 5, pp. 1-7, 2015.
- [10] J. N. Israelachvili, Intermolecular and Surface Forces With Applications To Colloidal And Biological Systems, pp. 150-189, London: Academic Press, 1985.
- [11] K. L. Johnson, K. L. Johnson, Contact Mechanics, pp. 202-277, London: Cambridge university press, 1985.
- [12] U. D. Schwarz, A generalized analytical model for the elastic deformation of an adhesive contact between a sphere and a flat surface, *Journal of Colloid* and *Interface Science*, Vol. 261, No. 1, pp. 99-106, 2003.
- [13] K. Fuller, D. Tabor, The effect of surface roughness on the adhesion of elastic solids, Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, Vol. 345, No. 1642, pp. 327-342, 1975.
- [14] J. Greenwood, J. Williamson, Contact of nominally flat surfaces, Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, Vol. 295, No. 1442, pp. 300-319,1966.
- [15] H. Rumpf, Mechanische Verfahrenstechnik, pp. 95-105, Munich: Hanser,
- [16] Y. I. Rabinovich, J. J. Adler, A. Ata, R. K. Singh, B. M. Moudgil, Adhesion between nanoscale rough surfaces: I. Role of asperity geometry, *Journal of*