

ارزیابی چیدمان سطحی خودروهای مولکولی به کمک شبیه‌سازی درشت‌دانه دینامیک مولکولی

مهران واعظی^۱ - حسین نجات پیشکناری^۲ - محمدرضا اجتهادی^۳

^۱ دانشجوی دکتری، پژوهشکده علوم و فناوری نانو (دانشگاه صنعتی شریف)

^۲ دانشیار، دانشکده مهندسی مکانیک (دانشگاه صنعتی شریف)

^۳ استاد تمام، دانشکده فیزیک (دانشگاه صنعتی شریف)

nejat@sharif.edu

چکیده

استفاده از مدل درشت‌دانه در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی امکان بررسی نانو ساختارها را با صرف زمان و هزینه کمتر فراهم می‌سازد. در پژوهش حاضر، مدل درشت‌دانه‌ای برای توصیف چیدمان سطحی نانو خودروها ارائه می‌گردد. در این مدل، فرض می‌شود که در برهمکنش بین نانو خودروها، برهمکنش بین چرخ‌ها نقش عمده را ایفا می‌کند. آنالیز انرژی پتانسیل بین دو نانو خودرو پیکربندی تعادلی نانو خودروها را توصیف می‌کند. با شبیه‌سازی خوشه‌ی شامل دو نانو خودرو در دماهای مختلف از ۲۰۰ تا ۶۰۰ کلوین، پایداری حرارتی پیکربندی‌های تعادلی مورد آزمایش قرار می‌گیرند. در دمای ۲۰۰ کلوین، پیکربندی‌های تعادلی نانو خودروها پایدار باقی‌مانده و در دمای ۴۰۰ کلوین نانو خودروها می‌توانند از یک پیکربندی تعادلی به پیکربندی دیگر تغییر وضعیت دهند. این در حالی است که در دمای ۶۰۰ کلوین و بالاتر، انرژی حرارتی منتقل شده به دو نانو خودرو باعث جدایی آن‌ها می‌شود. در گام بعد، چیدمان سطحی خوشه‌هایی شامل چهار و هشت نانو خودرو بررسی می‌گردد. پیش‌بینی‌های به‌دست‌آمده از مدل درشت‌دانه مطابق با نتایج مطالعات قبلی پیرامون مدل تمام-اتم خوشه‌های شامل نانو خودروهاست.

واژه‌های کلیدی

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، مدل درشت‌دانه، نانو خودرو، ماشین‌های مولکولی، خودسامانی روی سطح

Nanocars assembly on surface: coarse-grained molecular dynamics study

Mehran Vaezi: Ph.D. student, Institute for Nanoscience and Nanotechnology (Sharif University of Technology)
Hossein Nejat Pishkenari: Associate Professor, Faculty of Mechanical Engineering (Sharif University of Technology)
Mohammad Reza Ejtehadi: Professor, Department of Physics (Sharif University of Technology)

nejat@sharif.edu

Abstract

Using coarse-grained molecular dynamics (CGMD), the simulations of the nanostructures are performed considerably faster and with low computational costs. In the present study, a coarse-grained model is proposed for describing the surface assembly of a molecular machine, called as nanotruck. In this model, we assumed that the interactions of fullerene wheels have the main role in the nanocars interactions. The analysis of the potential energy reveals three stable configurations in the interaction of two nanocars. The stable configuration of nanocars obtained from the coarse-grained model is in agreement with the results of the all-atom molecular dynamics simulations. Simulating the stable configurations at the temperatures of 300, 400 and 600 K, we examined the thermal stability and separation of nanocars. Since each stable configuration shows a specific radius of gyration, we employed this parameter to study the thermal stability of configurations at different temperatures. At 300 K, the nanocars maintain their stable configurations, and at the temperature of 400 K, the nanocars are able to change their relative orientations. The thermal energy supplied at 600 K and higher temperatures is sufficient to break the cluster of two nanocars, and the molecules are separated at this temperature range. The potential energy of the interaction of two molecules finds zero value during the simulation time, which refers to the separation of nanotrucks at this temperature. In the next step, we evaluate the surface arrangement of larger clusters including four and eight nanocars. Considering the relative orientations of each pair of neighboring nanocars it is concluded that, the stable orientations of nanocars are similar to those observed in the cluster of two nanocars. The results of the coarse-grained model on the assembly of nanocars are consistent with the conclusions of the all-atom simulations of nanocars. The proposed coarse-grained model can be employed to study the assembly of other fullerene-based nanocars.

Keywords: Molecular dynamics simulations, coarse-graining, nanocars, molecular machines, self-assembly

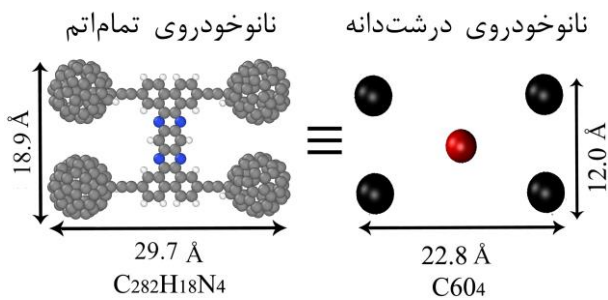
یکی از روش‌های دقیق ساخت نانومواد با ابعاد کوچک، ساخت با رویکرد پایین به بالا است [۱]، که در آن نانومواد از طریق خودسامانی^۱ پیش‌سازه‌های مولکولی به دست می‌آیند [۲]. به‌منظور مونتاژ موفقیت‌آمیز نانو ساختار مورد نظر از طریق روش ساخت پایین به بالا، ابتدا ویژگی‌های مولکول‌های پیش‌سازه که در طی فرآیند خودآرایی به یکدیگر متصل می‌شوند، باید شناسایی شوند [۳]. در حال حاضر ارتباط بین ساختار مولکول‌های پیش‌سازه و نتیجه فرآیند خودآرایی توجه بسیاری از پژوهش‌ها را به خود جلب کرده است [۴-۷].

از حوزه‌هایی که به‌منظور ساخت نانومواد با دیدگاه پایین به بالا مورد توجه قرار گرفته است، طراحی و سنتز ماشین‌های مولکولی حرکت‌کننده روی سطح است که به نام «نانو خودروها» شناخته می‌شوند [۸]. این ماشین‌های مولکولی که از نظر ظاهر شبیه به ماشین‌های مرسوم هستند، از اجزایی نظیر چرخ، شاسی و محور تشکیل می‌شوند [۹]. این ساختارها پتانسیل جابجایی سطحی نانومواد را دارند [۱۰]، و با این هدف مورد ارزیابی قرار می‌گیرند که با انتقال هدفمند مواد روی سطح بتوانند نانو ساختارهایی با ابعاد کوچک شکل دهند. از طرفی، این ماشین‌های مولکولی به‌عنوان واحدهای ساختاری مواد بزرگ‌تر می‌توانند خود یک ساختار خود-مونتاژ مورد نیاز را به وجود بیاورند [۱۱]. از این روی، بررسی نحوه حرکت و برهمکنش بین نانو خودروها و نحوه اتصال آن‌ها هنگامی که بیش از یک نانو خودرو روی سطح داریم، حائز اهمیت است.

در سال‌های اخیر بررسی حرکت نانو خودروها روی سطح، مورد توجه بسیاری از کارهای پژوهشی قرار گرفته است [۱۲-۱۵]. در سال ۲۰۰۶، نوع خاصی از خودروهای مولکولی به نام «نانوتراک» و «نانوکار» توسط جیمز توز و همکارانش [۱۶] سنتز شد، که در آن‌ها از چهار مولکول فولرین به‌عنوان چرخ استفاده شده است. ساختار کروی فولرین، این مولکول را به گزینه‌ی مناسبی جهت استفاده در نانو خودروها تبدیل می‌کند. در مطالعات بعدی، از ساختارهای دیگری نظیر پی-کربورین [۱۷]، ادمنتین [۱۴] و ترکیبات آلی-فلزی [۱۸] به‌عنوان چرخ‌های نانو خودرو استفاده شد. به لحاظ آزمایشگاهی، جابجایی این نانوماشین‌ها روی سطح معمولاً از طریق میدان الکتریکی ناشی از میکروسکوپ تونلی روبشی^۲ صورت می‌گیرد [۱۹]. از این روش در مسابقات نانو خودروها که برای اولین بار در سال ۲۰۱۷ در فرانسه برگزار شد، نیز استفاده گردید [۲۰].

آکیمو و همکارانش [۲۱] اولین تلاش تئوری به‌منظور ارزیابی حرکت نانو خودروها روی سطح را انجام دادند. در این پژوهش حرکت نانو خودروها روی سطح طلا در دمای بالای ۴۰۰ کلوین دامنه جابجایی قابل‌توجهی پیدا کرد، که این با مشاهدات آزمایشگاهی تطابق دارد. با توجه به بررسی حرکت نانو خودروها روی سطوح دوبعدی مانند گرافن [۲۲] و نیتريدبور [۲۳] این نتیجه حاصل می‌شود که، در دمای یکسان نانو خودروها روی این سطوح، نسبت به سطوح فلزی ضریب انتشار و جابجایی بیشتری را تجربه می‌کنند. دسته دیگری از مطالعات روی هدایت هدفمند حرکت نانو خودروها روی سطح انجام گرفته است. نعمتی و همکارانش [۲۴-۲۶] به کمک روش دینامیک مولکولی حرکت جهت‌دار نانو خودرو را تحت شرایط مختلفی گزارش کرده‌اند. از جمله شرایطی که باعث حرکت جهت‌دار نانو خودروها می‌شود استفاده از پله‌های اتمی در سطح [۲۷]، سطوح ترکیبی [۲۴] و ایجاد گرادیان دمایی [۲۵] و گرادیان کرنش [۲۸] در سطح می‌باشد. علاوه بر روش‌های مبتنی بر دست‌کاری سطح، حرکت جهت‌دار سطحی در نوعی نانو خودرو با شش چرخ نیز گزارش شده است [۱۷].

در برخی از پژوهش‌های آزمایشگاهی، خودآرایی مولکولی نانو خودروها روی سطح مورد توجه قرار گرفته است. در یکی از این مطالعات، نوعی ماشین مولکولی ساخته شده که از دو قسمت مکمل تشکیل می‌گردد که به کمک پیوند هیدروژنی و یا در مدلی دیگر با برهمکنش فلز-لیگاند به یکدیگر متصل می‌شوند [۲، ۱۱]. استفاده از این برهمکنش‌های ناپیوندی به دلیل جهت‌پذیری فضایی مناسب برای ساخت نانو خودروها مورد توجه هستند. در ادامه، با ایجاد دو عامل برقرارکننده پیوند هیدروژنی در واحد ساختاری این نانو خودروها، زنجیره خود مونتاژ تولید می‌شود، که این زنجیره «نانوقطار» نامیده شده است [۲۹]. در مشاهدات آزمایشگاهی طول زنجیره خودمونتاژ به دست آمده از این روش تا چند میکرومتر اندازه‌گیری شده است. در حالی که از خودآرایی در ساخت ماشین‌های مولکولی استفاده شده است، چیدمان و آرایش این ساختارها روی سطح کمتر مورد توجه قرار گرفته است. از طرفی، ما در آزمایشگاه با مجموعه‌ای از نانو خودروها روی سطح مواجه هستیم [۱۹]. شناخت برهمکنش ناپیوندی بین نانو خودروها و چیدمان سطحی آن‌ها، می‌تواند در طراحی نانو ساختارهای سطحی مفید واقع شود.



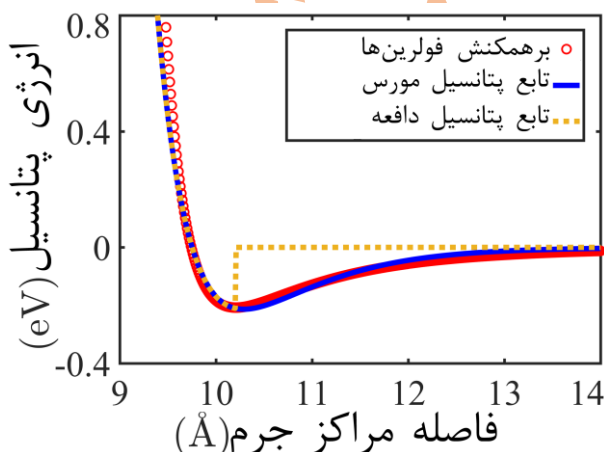
شکل ۱- نمایش مدل تمام-اتم و درشت‌دانه نانوخودرو

برای تعریف برهمکنش بین ذرات چرخ در مدل درشت‌دانه، ابتدا انرژی برهمکنش بین دو فولرین برحسب فاصله بین مرکز جرم آن‌ها محاسبه شد. به این منظور، با ثابت نگه‌داشتن یک فولرین و جابجایی یک‌بعدی فولرین دیگر، انرژی برهمکنش بین دو مولکول از طریق محاسبه مجموع انرژی پتانسیل بین اتم‌های آن‌ها به دست آمد. برهمکنش بین اتم‌های دو فولرین توسط تابع انرژی پتانسیل لِنارد-جونز ۶-۱۲ تعریف شده و پارامترهای آن $\sigma = 3/4 \text{ \AA}$ و $\epsilon = 2/4 \text{ meV}$ است [۳۵]. به این ترتیب مطابق شکل ۲، انرژی برهمکنش بین دو مولکول فولرین برحسب فاصله مرکز جرم آن‌ها به دست می‌آید. همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، با استفاده از تابع مورس، منحنی‌ای به نمودار انرژی برهمکنش دو فولرین برازش کرده و این‌گونه برهمکنش بین دو فولرین به شکل زیر، توسط تابع پتانسیل مورس با شعاع قطع ۲۰ آنگستروم تعریف می‌گردد.

$$U(x) = D \left(e^{-2\alpha(x-x_0)} - 2e^{-\alpha(x-x_0)} \right) \quad (1)$$

در رابطه فوق ضرایب تابع مورس برازش شده، عبارت‌اند از

$$D = 0.21 \text{ eV}, \alpha = 1/29 \text{ 1/\AA}, x_0 = 10/29 \text{ \AA}$$



شکل ۲- انرژی برهمکنش دو مولکول فولرین برحسب فاصله مرکز جرم آن‌ها. تابع مورس استفاده شده برای تعریف پتانسیل بین دو مولکول و تابع پتانسیل جهت ایجاد دافعه در مرکز نانوخودرو نیز برحسب فاصله ذرات رسم شده‌اند.

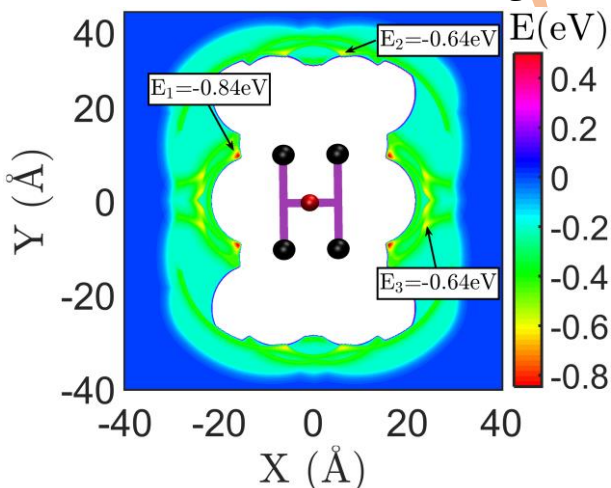
روش متداولی که در بررسی حرکت سطحی مولکولی مورد استفاده قرار می‌گیرد، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تمام-اتم است [۳۰-۳۴]. استفاده از این روش که در آن غالباً از میدان نیروی مکانیک مولکولی [۲۱] استفاده می‌شود، متضمن صرف وقت و هزینه قابل توجهی می‌باشد. در پژوهش حاضر، به منظور افزایش سرعت محاسبات جهت تعیین آرایش سطحی نانوخودروها و نیز امکان بررسی آرایش سطحی نانوخودروهای دیگر، اقدام به طراحی مدل درشت‌دانه‌ای برای شبیه‌سازی ماشین‌های مولکولی بر پایه فولرین شده است. در ابتدا، برهمکنش سطحی دو نانوخودرو و پیکربندی‌های تعادلی آن‌ها توسط مدل درشت‌دانه به دست می‌آید. با تغییر دمای شبیه‌سازی، پایداری حرارتی این پیکربندی‌های تعادلی در دماهای مختلف ارزیابی می‌شود. پیش‌بینی‌های حاصل از مدل درشت‌دانه با نتایج مطالعات قبلی که روی مدل تمام-اتم نانوخودروها انجام شده مقایسه می‌گردد. در نهایت، امکان استفاده از این مدل برای سیستم‌های بزرگ‌تر شامل چهار و هشت نانوخودرو به‌طور جداگانه بررسی می‌شود.

۲- روش‌های محاسباتی

به منظور بررسی سریع آرایش سطحی نانوخودروها و همچنین امکان ارزیابی چیدمان سطحی نانوخودروهای دیگر، اقدام به طراحی مدل درشت‌دانه ماشین‌های مولکولی شد. در این مدل فرض می‌شود که نانوخودروها بیشترین برهمکنش را از طریق چرخ‌ها با یکدیگر دارند. از این رو مطابق شکل ۱، چهار ذره متناظر با چهار چرخ نانوخودرو در نظر گرفته می‌شوند. از آنجایی که در نانوخودروها، چرخ‌ها به کمک پیوندهای شیمیایی به یکدیگر مقید شده‌اند، در مدل درشت‌دانه نیز چرخ‌ها با جملات پیوندی و خمش زاویه‌ای هارمونیک با ضریب سختی زیاد (10000 eV/\AA^2 و 10000 eV/rad^2) به یکدیگر متصل می‌شوند تا ساختارهای صلبی را حین شبیه‌سازی داشته باشیم. همان‌طور که در شکل ۱ می‌بینیم، پیوندهایی که طول نانوخودرو مستطیلی شکل را مشخص می‌کنند، فاصله تعادلی $22/8 \text{ \AA}$ دارند و پیوندهایی که عرض نانوخودرو را مشخص می‌کنند دارای طول تعادلی $12/0 \text{ \AA}$ می‌باشند. مقادیری که برای طول تعادلی پیوند بین ذرات (چرخ‌ها) در نظر گرفته شده است، معادل فاصله مرکز جرم چرخ‌های نانوخودرو در مدل تمام-اتم می‌باشد [۲۴]. زاویه‌های تعادلی در جملات خمش زاویه‌ای نیز برابر ۹۰ درجه در نظر گرفته شده، تا ذرات مشابه چرخ‌های نانوخودرو روی رئوس یک مستطیل قرار گیرند. لازم به ذکر است که، جرم ذرات، معادل جرم ۶۰ اتم کربن (جرم فولرین) در نظر گرفته شد.

به دست می‌آوریم. لازم به ذکر است که، انرژی برهمکنش بین دو نانوخودرو از طریق پتانسیل مورس و پتانسیل دافعه معرفی شده در شکل ۲ محاسبه می‌شود. نانوخودروی محیطی با گام‌های ۰/۱/۰ آنگستروم در اطراف نانوخودروی مرکزی جابجا می‌شود و در هر نقطه با گام‌های ۱ درجه می‌چرخد. علت چرخش ۹۰ درجه‌ای نانوخودروی محیطی در هر نقطه، تقارن موجود در ساختار نانوخودرو (تقارن D_{2h}) می‌باشد.

شکل ۳، کمترین انرژی پتانسیل بین دو نانوخودرو در فواصل مختلف مرکز جرم آن‌ها و در پیکربندی‌های متفاوت را نشان می‌دهد. طبق این شکل، با توجه به تقارن موجود در نانوخودرو تقریباً سه نوع نقطه کمینه موضعی وجود دارد. انرژی برهمکنش بین دو نانوخودرو در این حالات تعادلی، معادل $-0/84$ ، $-0/64$ و $-0/64$ الکترون‌ولت است. بر اساس شکل ۳، در حالات تعادلی ۱ و ۲، که به ترتیب دارای انرژی پتانسیل $-0/84$ و $-0/64$ الکترون‌ولت هستند، مرکز جرم نانوخودروی محیطی در نقاط $(9/5 \text{ \AA}$ و $-16/0 \text{ \AA})$ و $(31/3 \text{ \AA}$ و $6/6 \text{ \AA})$ می‌باشد. در این حالات کمینه انرژی، محورهای دو نانوخودرو با یکدیگر موازی می‌باشد. از طرفی در حالت تعادلی سوم، مرکز جرم نانوخودروی محیطی در نقطه‌ی $(-1/4 \text{ \AA}$ و $24/2 \text{ \AA})$ قرار داشته و در این حالت راستای محور دو نانوخودرو عمود بر یکدیگر می‌باشد.



شکل ۳- کمترین انرژی پتانسیل بین دو نانوخودرو درحالی‌که، نانوخودرو مرکز در مبدأ مختصات قرار گرفته و نانوخودرو محیطی در اطراف آن به نقاط مختلف جابجا شده و نسبت به آن در زوایای مختلف قرار می‌گیرد.

به‌منظور نمایش بهتر پیکربندی‌های تعادلی دو نانوخودرو، موقعیت نسبی آن‌ها در سه حالت تعادلی نام برده شده، در شکل ۴ به نمایش درآمدند. بر اساس مدل درشت‌دانه ارائه شده برای نانوخودروها، پیکربندی شماره ۱ پایدارترین پیکربندی تعادلی دو نانوخودرو می‌باشد. با توجه به انرژی پیکربندی‌های شماره ۲ و ۳ ($-0/64 \text{ eV}$)، این ساختارها از پایداری یکسانی برخوردارند.

مشکلی که در شبیه‌سازی نانوخودرو چهار ذره‌ای با آن مواجه هستیم، در هم فرورفتن نانوخودروهاست. مطابق نمایش تمام-اتم نانوخودرو (شکل ۱)، فواصل بین چرخ‌ها توسط شاسی اشغال شده است و چرخ‌های نانوخودروی دیگر نمی‌توانند در این فواصل قرار گیرند. اما هنگام استفاده از مدل درشت‌دانه با چهار ذره، چرخ‌های یک نانوخودرو درون بخش داخلی نانوخودروی مقابل قرار می‌گیرند که در حالت طبیعی این مکان با شاسی نانوخودرو اشغال شده است.

به‌منظور حل این مشکل، یک‌ذره به جرم شاسی در مرکز نانوخودرو تعبیه می‌شود (ذره قرمز رنگ در شکل ۱). تفاوت این ذره با چرخ‌ها در این است که، این ذره صرفاً برهمکنش دافعه با ذراتی که به آن نزدیک می‌شوند برقرار می‌کند. همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌کنید، انرژی پتانسیل برهمکنش سایر چرخ‌ها با این ذره‌ی مرکزی در واقع همان تابع پتانسیل مورس است که در آن شعاع قطع به نحوی انتخاب شده که صرفاً به نیرو دافعه اجازه اثر می‌دهد و مانع از پیکربندی نامطلوب دو نانوخودرو می‌شود.

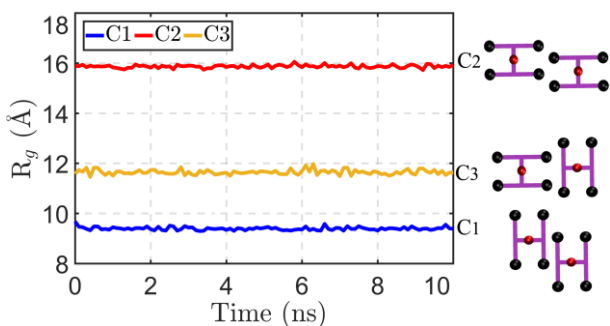
در مدل ارائه شده، به‌منظور افزایش سرعت شبیه‌سازی‌ها زیرلایه‌ای در نظر نمی‌گیریم و مسئله در دو بعد حل می‌شود. از ترموستات نوز-هور [۳۶، ۳۷] برای ایجاد دمای ثابت در شبیه‌سازی استفاده شده است. شبیه‌سازی‌ها به کمک نرم‌افزار لمپس [۳۸] پیاده‌سازی شده و از روش انتگرال‌گیری ورله سرعتی برای حل معادلات حرکت استفاده می‌شود. برای شبیه‌سازی مدل درشت‌دانه نانوخودروها از گام زمانی ۱ فمتوثانیه استفاده می‌گردد.

۳- بحث و نتایج:

۳-۱- انرژی پتانسیل برهمکنش دو نانوخودرو

به‌منظور درک موقعیت تعادلی دو نانوخودرو، آنالیز انرژی پتانسیل انجام شد. در این آنالیز، با استفاده از مدل درشت‌دانه، یک نانوخودرو در مبدأ مختصات قرار می‌گیرد. نانوخودرو دیگر، مکان‌های مختلف در اطراف نانوخودروی مرکزی را جاروب می‌کند. در هر نقطه در اطراف نانوخودروی مرکزی، نانوخودرو دوم حول محور عمود بر سطح ۹۰ درجه می‌چرخد و در هر موقعیت انرژی پتانسیل بین دو نانوخودرو محاسبه می‌گردد. برای هر نقطه در اطراف نانوخودرو مرکزی، کمترین انرژی پتانسیل بین دو نانوخودرو که از چرخش نانوخودرو محیطی به‌دست‌آمده ثبت می‌گردد. به این طریق، ما در فواصل مختلف دو نانوخودرو، کمترین انرژی پتانسیل برهمکنش دو نانوخودرو را به ازای پیکربندی‌های متفاوت (زاویه‌های نسبی مختلف دو نانوخودرو)

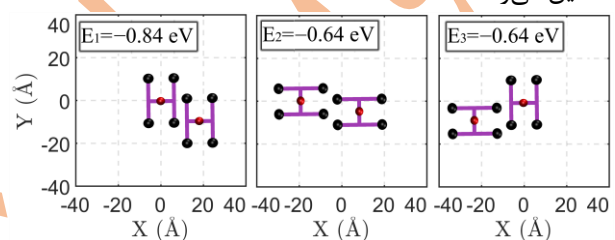
می‌باشند. همچنین، N تعداد نانوذره‌های موجود در خوشه است که در این حالت برابر ۲ در نظر گرفته می‌شود. مطابق شکل ۵، هریک از پیکربندی‌های تعادلی از خود شعاع ژیراسیون منحصر به فردی را در دمای ۲۰۰ کلوین نشان می‌دهد. در پیکربندی شماره ۱، با توجه به اینکه ذرات در فاصله نزدیک‌تری نسبت به مرکز جرم خوشه قرار می‌گیرند، شعاع ژیراسیون نسبت به سایر پیکربندی‌ها کمتر است ($\overline{R_g} = 9/39 \text{ \AA}$). در پیکربندی‌های تعادلی شماره ۲ و ۳، شعاع ژیراسیون به ترتیب مقادیر متوسط $15/86 \text{ \AA}$ و $11/65 \text{ \AA}$ پیدا می‌کند. با توجه به ثابت بودن مقادیر شعاع ژیراسیون در شبیه‌سازی با پیکربندی‌های تعادلی مختلف در دمای ۲۰۰ کلوین، این نتیجه حاصل می‌شود که این پیکربندی‌ها در این دما پایدار هستند. نانوذره‌هایی که در ابتدا در وضعیت‌های نسبی تعادلی شماره ۱، ۲ و ۳ قرار داده شده‌اند، پیکربندی خود را تا پایان شبیه‌سازی (۱۰ نانوثانیه) حفظ می‌کنند. از طرفی، پایداری حرارتی وضعیت‌های تعادلی در این دما، با مطالعات قبلی پیرامون پایداری پیکربندی‌های تعادلی نانوذره‌های تمام-اتم سازگاری دارد [۳۹].



شکل ۵- شعاع ژیراسیون مربوط به پیکربندی‌های تعادلی شماره ۱، ۲ و ۳ در حین شبیه‌سازی در دمای ۲۰۰ کلوین.

در گام بعدی، پیکربندی‌های تعادلی دو نانوذره را در دماهای ۴۰۰، ۴۳۰ و ۴۶۰ کلوین مورد آزمایش قرار می‌دهیم. شکل ۶، شعاع ژیراسیون دو نانوذره را در دماهای مذکور و در طول ۱۰ نانوثانیه شبیه‌سازی نشان می‌دهد. طبق این شکل، شعاع ژیراسیون متناظر با پیکربندی تعادلی شماره ۲، در حین شبیه‌سازی مقادیر کمتری پیدا می‌کند که به معنای تغییر وضعیت نسبی نانوذره‌ها در طول شبیه‌سازی می‌باشد. همان‌طور که در تغییرات شعاع ژیراسیون خوشه دوتایی نانوذره مشخص است، دو نانوذره در بازه‌های زمانی مشخصی شعاع ژیراسیون متناظر با پیکربندی شماره ۳ ($11/65 \text{ \AA}$) را پیدا می‌کنند. در واقع در بازه‌های زمانی کوتاهی وضعیت نسبی از پیکربندی تعادلی شماره ۲ به پیکربندی تعادلی شماره ۳ تغییر می‌کند. با افزایش دما به ۴۶۰ کلوین، بسامد تغییر

در پژوهشی که اخیراً روی مدل تمام-اتم نانوذره‌ها انجام دادیم [۳۹]، سه حالت تعادلی برای سیستم دو نانوذره یافت شد. طبق این تحقیق، موقعیت نسبی دو نانوذره در حالات تعادلی مشابه پیکربندی‌های تعادلی به دست آمده از حالت درشت‌دانه می‌باشند. از طرفی، انرژی حالات تعادلی در مدل تمام-اتم، کمی با آنچه از مدل درشت‌دانه به دست می‌آید، متفاوت است. تفاوت مقادیر انرژی در مدل درشت‌دانه و تمام-اتم مربوط به در نظر گرفتن ذره مرکزی در نانوذره درشت‌دانه شده است. به طور خلاصه، مدل درشت‌دانه ارائه شده برای نانوذره موقعیت نسبی تعادلی دو نانوذره را درست پیش‌بینی کرده، اما مقدار انرژی حالات تعادلی را کمی متفاوت تخمین می‌زند.



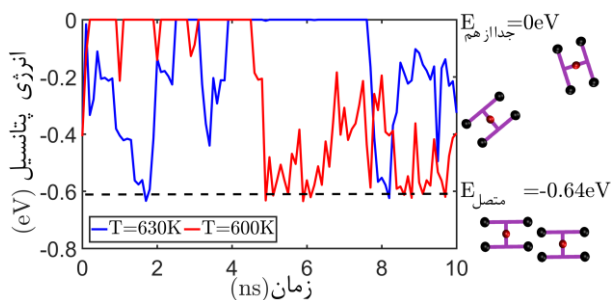
شکل ۶- موقعیت نسبی دو نانوذره در پیکربندی‌های متناظر با کمینه انرژی پتانسیل.

۳-۲- پایداری حرارتی پیکربندی‌های تعادلی:

طبق آنچه در بررسی مدل تمام-اتم نانوذره‌ها مشخص شده است [۳۹، ۷]، با توجه به اینکه پیکربندی‌های تعادلی متناظر با نقاط کمینه موضعی انرژی پتانسیل هستند، در اثر افزایش دما نانوذره‌ها می‌توانند از یک حالت تعادلی (یک کمینه انرژی موضعی)، خارج شده و پیکربندی تعادلی دیگری را پیدا کنند. با توجه به پژوهش ذکر شده، دو نانوذره در دمای ۲۰۰ کلوین و پایین‌تر پیکربندی تعادلی خود را حفظ می‌کنند. در دمای ۴۰۰ کلوین، تغییر پیکربندی‌های تعادلی به یکدیگر گزارش شده، و در دماهای بالا (۶۰۰ کلوین و بیشتر)، با توجه به انرژی حرارتی زیاد، جدایش دو نانوذره از یکدیگر مشاهده می‌گردد [۷]. به منظور بررسی صحت مدل درشت‌دانه در تخمین پایداری حرارتی پیکربندی‌های تعادلی، دو نانوذره درشت‌دانه در دماهای ۲۰۰، ۴۰۰ و ۶۰۰ کلوین مورد بررسی قرار گرفتند. کمیتی که برای بررسی پایداری حرارتی ساختارهای تعادلی مورد ارزیابی قرار می‌گیرد، شعاع ژیراسیون مربوط به خوشه دوتایی نانوذره است.

$$R_g = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\mathbf{r}(i) - \mathbf{r}_{cm}|^2} \quad (2)$$

در رابطه اخیر، $\mathbf{r}(i)$ و \mathbf{r}_{cm} به ترتیب مختصات مرکز جرم خوشه و مختصات مرکز جرم نانوذره‌های درون خوشه

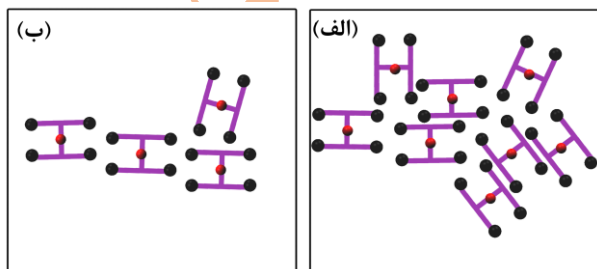


شکل ۷- انرژی پتانسیل مربوط به خوشه شامل دو نانوذره در دماهای ۶۰۰ و ۶۳۰ کلوین.

در برخی زمان‌ها، سطح انرژی به مقدار انرژی متناظر با پیکربندی‌های تعادلی ۲ و ۳ می‌رسد و در این بازه‌های محدود زمانی دو نانوذره در این موقعیت‌های تعادلی قرار می‌گیرند. برخورد مجدد نانوذرها به یکدیگر پس از جدایش صورت گرفته، بستگی به ابعاد جعبه شبیه‌سازی دارد. اگر شبیه‌سازی در یک جعبه بسیار بزرگ صورت گیرد، نانوذرها پس از یک بار جدا شدن، مدت‌زمان بسیار زیادی را نیاز دارند تا مجدد روی سطح برخورد کرده و یکدیگر را پیدا کنند.

۳-۳- آرایش سطحی خوشه‌های بزرگ‌تر نانوذرو:

پس از آنکه آرایش سطحی دو نانوذره را در دماهای مختلف بررسی کردیم، ساختارهای دوبعدی خوشه‌های نانوذروی که شامل ۴ و ۸ خودرو می‌باشند را بررسی می‌کنیم. برای این منظور، خوشه‌های مذکور در دمای ۲۰۰ کلوین که وضعیت تعادلی نانوذرها به لحاظ حرارتی پایدار هستند، به مدت ۲۰ نانوثانیه شبیه‌سازی شدند. از طرفی در مطالعه اخیر، به این موضوع پی بردیم که در خوشه‌های بزرگ‌تر نانوذرو، اتصالات بین هر زوج نانوذرو مشابه با پیکربندی‌های تعادلی است که در بررسی خوشه دوتایی نانوذرو به دست آمد. در شکل ۸، ساختار نهایی نانوذرها را پس از ۲۰ نانوثانیه مشاهده می‌کنیم.

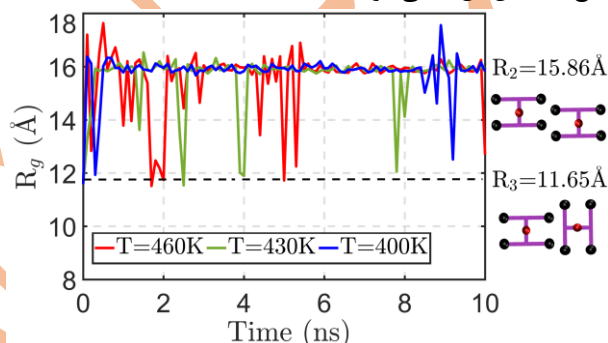


شکل ۸- ساختارهای نهایی به دست آمده از شبیه‌سازی خوشه‌های الف) هشت‌تایی و ب) چهارتایی نانوذرو، در دمای ۲۰۰ کلوین.

طبق این شکل، در اکثر موارد وضعیت نسبی هر زوج نانوذرو مجاور مشابه اتصالات تعادلی به دست آمده در قسمت‌های قبل می‌باشد. در شکل ۸، ملاحظه می‌کنیم که سه تا از نانوذرها در پیکربندی تعادلی شماره ۲ قرار دارند و نانوذروی چهارم

وضعیت نسبی نانوذرها افزایش می‌یابد، زیرا در این دما با افزایش انرژی گرمایی، دو نانوذرو این توانایی را پیدا می‌کنند تا از نقاط کمینه انرژی پتانسیل که در شکل ۳ مشاهده کردیم خارج شده و وضعیت‌های تعادلی با انرژی دیگر را تجربه کنند. تغییر وضعیت نسبی نانوذرها، و تبدیل پیکربندی‌های تعادلی به یکدیگر در بررسی‌های تمام-اتم خودروهای مولکولی در دمای ۴۰۰ کلوین نیز گزارش شده [۳۹]، که این صحت مدل درشت‌دانه ارائه شده را تأیید می‌کند.

همان‌طور که در قسمت قبل مشاهده کردیم، پیکربندی‌های تعادلی پایداری حرارتی خود را در دمای ۴۰۰ کلوین و بالاتر از دست می‌دهند. باین‌حال، در این دما دو نانوذرو همچنان درون یک خوشه قرار داند و جاذبه و اندروالسی بین نانوذرها مانع جدایش آن‌ها می‌شود.



شکل ۶- شعاع ژیراسیون مربوط به خوشه دوتایی نانوذرو در دماهای ۴۰۰، ۴۳۰ و ۴۶۰ کلوین برحسب زمان شبیه‌سازی.

با افزایش دما به بازه‌ی ۶۰۰ کلوین و بیشتر، طبق پژوهش‌های اخیر پیرامون حرکات سطحی نانوذروهای تمام-اتم و ساختارهای مشابه [۲۲، ۴۰]، انرژی حرارتی بالا این امکان را فراهم می‌کند تا مولکول‌ها بر جاذبه و اندرالس بین خود غلبه کنند و از یکدیگر جدا شوند. شکل ۷، انرژی پتانسیل بین مولکولی را برای خوشه‌ی شامل دو نانوذرو در دماهای ۶۰۰ و ۶۳۰ کلوین نشان می‌دهد. بر اساس تغییرات انرژی پتانسیل، دو نانوذرو در دمای ۶۰۰ کلوین در بازه‌ی زمانی قابل‌توجهی سطح انرژی صفر پیدا می‌کنند که این به معنای جدا شدن دو مولکول از یکدیگر است. با افزایش دما به ۶۳۰ کلوین در بازه‌ی زمانی طولانی‌تری سطح انرژی پتانسیل صفر می‌شود و انرژی گرمایی ذرات در این دما باعث واجذب مولکول‌ها از یکدیگر می‌شود. لازم به ذکر است که افت مجدد مقدار انرژی پتانسیل از مقدار صفر به مقادیر کمتر به معنای برخورد و اتصال مجدد نانوذرها روی سطح است.

پیکربندی شماره ۳ را با نانوذروی همسایه تجربه می‌کند. در خوشه هشت‌تایی نیز، با دقت در نانوذروه‌های موجود در همسایگی همدیگر به این نتیجه می‌رسیم که در اغلب حالات، وضعیت نسبی نانوذروه‌ها مشابه وضعیت پیکربندی‌های تعادلی است که در خوشه دوتایی دیده شد. لازم به ذکر است که، وجود پیکربندی‌های تعادلی مربوط به خوشه دوتایی در خوشه‌های بزرگ‌تر نانوذرو مطابق با نتایج مدل تمام-اتم می‌باشد.

از محدودیت‌های مطالعه رفتار نانوذروه‌ها به روش تمام-اتم زمان‌بر بودن اجرای محاسبات می‌باشد. روش درشت‌دانه حاضر، با هدف کاهش هزینه محاسباتی و به‌منظور بررسی چیدمان سطحی نانوذروه‌ها ارائه گردیده است. همان‌طور که در بخش ۳-۱ و ۳-۲ این مطالعه ملاحظه گردید، روش ارائه‌شده پیکربندی‌های تعادلی را در اتصال دو نانوذرو و پایداری حرارتی آن‌ها را به‌درستی پیش‌بینی می‌کند. با افزایش تعداد نانوذروه‌ها در یک خوشه به چهار و هشت نانوذرو، اگرچه پیکربندی‌های تعادلی مشاهده‌شده در مدل درشت‌دانه خوشه‌ها (پیکربندی‌های شماره ۱، ۲ و ۳)، مطابق با پیکربندی‌های تعادلی به‌دست‌آمده از مدل تمام-اتم است، اما روش درشت‌دانه پیش‌بینی دقیقی در مورد تعداد هر نوع پیکربندی ارائه نمی‌دهد. به‌عنوان مثال، در شکل ۸ الف که نتیجه شبیه‌سازی هشت نانوذروی درشت‌دانه را نشان می‌دهد، یک زوج نانوذرو در پیکربندی تعادلی شماره ۲ قرار گرفته‌اند. درحالی‌که در مدل تمام-اتم این خوشه نتیجه شبیه‌سازی [۳۹]، دو زوج نانوذرو را در پیکربندی تعادلی شماره ۲ نشان می‌دهد. بنابراین، مدل درشت‌دانه حاضر در بررسی نوع اتصال نانوذروه‌ها در خوشه‌های مولکولی و پایداری حرارتی آن‌ها قابل‌استفاده بوده و برای پیش‌بینی دقیق تعداد گونه‌های مختلف اتصال، استفاده از مدل تمام-اتم توصیه می‌شود.

۴- نتیجه‌گیری:

با استفاده از روش دینامیک مولکولی، به ارائه مدل درشت‌دانه جهت بررسی چیدمان سطحی ماشین‌های مولکولی پرداخته شد. در مدل ارائه‌شده، برهمکنش نانوذروه‌های برپایه فولرین بیشتر از طریق چرخ‌ها در نظر گرفته می‌شود. در ساختار درشت‌دانه نانوذروه‌ها، چهار ذره به‌عنوان چرخ‌های فولرینی نانوذرو و یک ذره مرکزی به‌عنوان شاسی اختیار می‌شوند. ذرات تشکیل‌دهنده نانوذرو، توسط باندهایی با ضریب سختی بالا به یکدیگر متصل می‌شوند تا مشابه مدل تمام-اتم نانوذروی صلبی را در حین شبیه‌سازی داشته باشیم. به کمک تابع انرژی پتانسیل مورس، برهمکنش واندروالسی موجود بین چرخ‌های نانوذروه‌ها تعریف می‌شوند و با در نظر گرفتن بخش دافعه‌ی

تابع پتانسیل برای ذره مرکزی، از برهمکنش نامطلوب نانوذروه‌ها جلوگیری به عمل می‌آید.

برای تعیین پیکربندی‌های تعادلی دو نانوذرو، آنالیز انرژی پتانسیل بر روی خودروه‌های مولکولی انجام شد. در این آنالیز، یک نانوذرو در مبدأ مختصات ثابت فرض می‌شود و نانوذروی دیگر به نقاط مختلف در اطراف نانوذرو مرکزی منتقل شده و در هر نقطه حول محور عمود بر سطح یک دور چرخانده می‌شود. به ازای نقاط مختلف در اطراف نانوذروی مرکزی و به ازای جهت‌گیری‌های نسبی مختلف دو نانوذرو کمترین سطح انرژی پتانسیل، ثبت می‌شود. با توجه به تغییرات سطح انرژی پتانسیل که به ازای فواصل مختلف و جهت‌گیری‌های متفاوت دو نانوذرو به دست می‌آید، سه نقطه با کمترین انرژی پتانسیل ملاحظه می‌گردد. در این نقاط کمینه انرژی پتانسیل که متناظر با پیکربندی‌های تعادلی دو نانوذرو هستند، انرژی برهمکنش بین مولکولی برابر با $0/84$ ، $0/64$ و $0/64$ الکترون‌ولت می‌باشد. وضعیت نسبی دو نانوذرو در پیکربندی‌های تعادلی مطابق با نتایج به‌دست‌آمده از بررسی مدل تمام-اتم سیستم دو نانوذرو می‌باشد.

با مطالعه شعاع ژیراسیون و سطح انرژی پتانسیل مربوط به برهمکنش بین دو نانوذرو، پایداری حرارتی پیکربندی‌های تعادلی در دماهای ۲۰۰، ۴۰۰ و ۶۰۰ کلوین بررسی شدند. در دمای ۲۰۰ کلوین، شعاع ژیراسیون مربوط به هر سه پیکربندی تعادلی مقدار ثابتی را در طول شبیه‌سازی نشان می‌دهد، که این به معنای پایداری حرارتی پیکربندی‌ها در این دما می‌باشد. در دمای ۴۰۰ کلوین، شعاع ژیراسیون بین مقدار متناظر با پیکربندی تعادلی شماره ۳ و شعاع ژیراسیون پیکربندی ۲ در تناوب است. با افزایش دما به ۴۳۰ و ۴۶۰ کلوین، بسامد تغییر پیکربندی دو نانوذرو افزایش می‌یابد. در نتیجه در بازه دمایی اطراف ۴۰۰ کلوین، نانوذروه‌ها انرژی لازم را پیدا می‌کنند تا از یک نقطه کمینه انرژی پتانسیل به نقطه دیگر (از یک پیکربندی تعادلی به پیکربندی دیگر) تغییر وضعیت دهند. در بازه دمایی بالاتر (۶۰۰ کلوین و بیشتر)، انرژی حرارتی منتقل‌شده به دو نانوذرو به‌قدری افزایش می‌یابد، که دو نانوذرو قادرند بر جاذبه واندروالسی بین خود غلبه کنند و از یکدیگر جدا شوند. رفتار دمایی مدل درشت‌دانه خوشه دوتایی نانوذرو در دماهای نام‌برده (۲۰۰، ۴۰۰ و ۶۰۰ کلوین)، با مطالعه مدل تمام-اتم خوشه شامل دو نانوذرو سازگاری دارد.

با شبیه‌سازی خوشه‌های بزرگ‌تر که شامل ۴ و ۸ نانوذرو می‌باشند، موقعیت تعادلی نانوذروه‌ها در دمای ۲۰۰ کلوین به‌دست آمد. با در نظر گرفتن نحوه اتصال هر نانوذرو با

۸. Shirai, Y., et al., *Surface-rolling molecules*. Journal of the American Chemical Society, ۲۰۰۶. ۱۲۸(۱۴): p. ۴۸۵۴-۴۸۶۴.
۹. Morin, J.-F., Y. Shirai, and J.M. Tour, *En route to a motorized nanocar*. Organic letters, ۲۰۰۶. ۸(۸): p. ۱۷۱۳-۱۷۱۶.
۱۰. Nemati, A., et al., *Investigation into thermally activated migration of fullerene-based nanocars*. Scientia Iranica, ۲۰۱۸. ۲۵(۳): p. ۱۸۳۵-۱۸۴۸.
۱۱. Sasaki, T., J.M. Guerrero, and J.M. Tour, *The assembly line: self-assembling nanocars*. Tetrahedron, ۲۰۰۸. ۶۴(۳۶): p. ۸۵۲۲-۸۵۲۹.
۱۲. Khatua, S., et al., *Influence of the Substrate on the Mobility of Individual Nanocars*. The Journal of Physical Chemistry Letters, ۲۰۱۰. ۱(۲۲): p. ۳۲۸۸-۳۲۹۱.
۱۳. Khatua, S., et al., *Micrometer-scale translation and monitoring of individual nanocars on glass*. ACS nano, ۲۰۰۹. ۳(۲): p. ۳۵۱-۳۵۶.
۱۴. Chu, P.-L.E., et al., *Synthesis and single-molecule imaging of highly mobile adamantane-wheeled nanocars*. ACS nano, ۲۰۱۳. ۷(۱): p. ۳۵-۴۱.
۱۵. Jin, T., et al., *Diffusion of nanocars on an air-glass interface*. The Journal of Physical Chemistry C, ۲۰۱۸. ۱۲۲(۳۳): p. ۱۹۰۲۵-۱۹۰۳۶.
۱۶. Sasaki, T., et al., *Synthesis of a single-molecule nanotruck*. Tetrahedron Letters, ۲۰۰۷. ۴۸(۳۳): p. ۵۸۱۷-۵۸۲۰.
۱۷. Hosseini Lavasani, S.M., H. Nejat Pishkenari, and A. Meghdari, *How chassis structure and substrate crystalline direction affect the mobility of thermally driven p-carborane-wheeled nanocars*. The Journal of Physical Chemistry C, ۲۰۱۹. ۱۲۳(۸): p. ۴۸۰۵-۴۸۲۴.
۱۸. Vives, G. and J.M. Tour, *Synthesis of a nanocar with organometallic wheels*. Tetrahedron Letters, ۲۰۰۹. ۵۰(۱۳): p. ۱۴۲۷-۱۴۳۰.
۱۹. Zhang, J., et al. *Investigating the motion of molecular machines on surfaces by STM: The nanocar and beyond*. in 2007 7th IEEE Conference on Nanoxodrooهای مجاور درمی‌یابیم که، آرایش نسبی هر زوج نانوخودروی مجاور مشابه با پیکربندی‌های تعادلی دیده‌شده در سیستم دو نانوخودرو است، که این مورد در تحقیقات مدل تمام-اتم نانوخودروها نیز مشاهده شده است. مدل درشت‌دانه ارائه‌شده برای بررسی چیدمان سطحی نانوخودروها، پیکربندی تعادلی زوج نانوخودروها و پایداری حرارتی آن‌ها را به‌درستی پیش‌بینی می‌کند. این مدل درشت‌دانه که با فرض غالب بودن سهم برهمکنش چرخ‌ها در برهمکنش بین دو نانوخودرو می‌باشد، قابل توسعه برای سایر نانوخودروها، به‌ویژه نانوخودروهای برپایه فولرین می‌باشد و بدین روش در صرف هزینه و وقت به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای صرفه‌جویی می‌گردد.
- مراجع و منابع
۱. Zhang, X., et al., *Self-assembly and photoinduced fabrication of conductive nanographene wires on boron nitride*. Nature communications, ۲۰۲۲. ۱۳(۱): p. ۱-۸.
۲. Villagómez, C.J., et al., *Bottom-up assembly of molecular wagons on a surface*. Journal of the American Chemical Society, ۲۰۱۰. ۱۳۲(۴۷): p. ۱۶۸۴۸-۱۶۸۵۴.
۳. Adorf, C.S., et al., *Analysis of self-assembly pathways with unsupervised machine learning algorithms*. The Journal of Physical Chemistry B, ۲۰۱۹. ۱۲۴(۱): p. ۶۹-۷۸.
۴. Li, M., et al., *Coordination-directed self-assembly of molecular motors: towards a two-wheel drive nanocar*. Nanoscale, ۲۰۲۱. ۱۳(۳۹): p. ۱۶۷۴۸-۱۶۷۵۴.
۵. Schmaltz, T., et al., *Tuning the molecular order of C 60-based self-assembled monolayers in field-effect transistors*. Nanoscale, ۲۰۱۴. ۶(۲۱): p. ۱۳۰۲۲-۱۳۰۲۷.
۶. Baskar, A.V., et al., *Self-Assembled Fullerene Nanostructures: Synthesis and Applications*. Advanced Functional Materials, ۲۰۲۲. ۳۲(۶): p. ۲۱۰۶۹۲۴.
۷. Vaezi, M., H.N. Pishkenari, and M.R. Ejtehadi, *Collective movement and thermal stability of fullerene clusters on the graphene layer*. Physical Chemistry Chemical Physics, ۲۰۲۲. ۲۴(۱۹): p. ۱۱۷۷۰-۱۱۷۸۱.

- (110) surface. *Molecular Systems Design & Engineering*, ۲۰۲۰. ۵(۷): p. ۱۱۸۶-۱۱۹۲.
۳۱. Kianezhad, M., et al., *Rectilinear motion of carbon nanotube on gold surface*. *International Journal of Mechanical Sciences*, ۲۰۲۲. ۲۱۷: p. ۱۰۷۰-۲۶.
۳۲. Vaezi, M., H. Nejat Pishkenari, and A. Nemati, *Mechanism of C60 rotation and translation on hexagonal boron-nitride monolayer*. *The Journal of Chemical Physics*, ۲۰۲۰. ۱۵۳(۲۳): p. ۲۳۴۷۰۲.
۳۳. Vaezi, M. and H.N. Pishkenari, *Comparison of Diffusive Motion of C60 on Graphene and Boron Nitride Surfaces*. arXiv preprint arXiv:۲۱۰۸.۰۰۴۷۷, ۲۰۲۱.
۳۴. Kianezhad, M., et al., *Unidirectional Motion of C60-based Nanovehicles Using Hybrid Substrates with Temperature Gradient*. ۲۰۲۲.
۳۵. Rafii-Tabar, H., *Computational modelling of thermo-mechanical and transport properties of carbon nanotubes*. *Physics Reports*, ۲۰۰۴. ۳۹۰(۴-۵): p. ۲۳۵-۴۵۲.
۳۶. Nosé, S., *A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods*. *The Journal of chemical physics*, ۱۹۸۴. ۸۱(۱): p. ۵۱۱-۵۱۹.
۳۷. Hoover, W.G., *Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions*. *Physical review A*, ۱۹۸۵. ۳۱(۳): p. ۱۶۹۵.
۳۸. Plimpton, S., *Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics*. *Journal of computational physics*, ۱۹۹۵. ۱۱۷(۱): p. ۱-۱۹.
۳۹. Vaezi, M., H.N. Pishkenari, and M.R. Ejtehadi, *Nanocar swarm movement on graphene surfaces*. *Physical Chemistry Chemical Physics*, ۲۰۲۲. ۲۴(۴۵): p. ۲۷۷۵۹-۲۷۷۷۱.
۴۰. Mofidi, S.M., et al., *Role of graphene surface ripples and thermal vibrations in molecular dynamics of C60*. *The Journal of Physical Chemistry C*, ۲۰۱۹. ۱۲۳(۳۲): p. ۲۰۰۲۶-۲۰۰۳۶.
- Nanotechnology (IEEE NANO)*. ۲۰۰۷. IEEE.
۲۰. Rapenne, G. and C. Joachim, *The first nanocar race*. *Nature Reviews Materials*, ۲۰۱۷. ۲(۶): p. ۱-۳.
۲۱. Akimov, A.V., et al., *Molecular dynamics of surface-moving thermally driven nanocars*. *Journal of Chemical Theory and Computation*, ۲۰۰۸. ۴(۴): p. ۶۵۲-۶۵۶.
۲۲. Mofidi, S.M., et al., *Locomotion of the C60-based nanomachines on graphene surfaces*. *Scientific reports*, ۲۰۲۱. ۱۱(۱): p. ۱-۱۱.
۲۳. Vaezi, M., H.N. Pishkenari, and A. Nemati, *Mechanism of the motion of nanovehicles on hexagonal boron-nitride: A molecular dynamics study*. *Computational Materials Science*, ۲۰۲۲. ۲۰۷: p. ۱۱۱۳۱۷.
۲۴. Nemati, A., et al., *Controlling the diffusive motion of fullerene-wheeled nanocars utilizing a hybrid substrate*. *The Journal of Physical Chemistry C*, ۲۰۱۹. ۱۲۳(۴۲): p. ۲۶۰۱۸-۲۶۰۳۰.
۲۵. Nemati, A., et al., *Directional control of surface rolling molecules exploiting non-uniform heat-induced substrates*. *Physical Chemistry Chemical Physics*, ۲۰۲۰. ۲۲(۴۶): p. ۲۶۸۸۷-۲۶۹۰۰.
۲۶. Nemati, A., et al., *Influence of vacancies and grain boundaries on the diffusive motion of surface rolling molecules*. *The Journal of Physical Chemistry C*, ۲۰۲۰. ۱۲۴(۳۰): p. ۱۶۶۲۹-۱۶۶۴۳.
۲۷. Nemati, A., et al., *Directing the diffusive motion of fullerene-based nanocars using nonplanar gold surfaces*. *Physical Chemistry Chemical Physics*, ۲۰۱۸. ۲۰(۱): p. ۳۳۲-۳۴۴.
۲۸. Vaezi, M., H. Nejat Pishkenari, and M.R. Ejtehadi, *Programmable Transport of C60 by Straining Graphene Substrate*. *Langmuir*, ۲۰۲۳.
۲۹. Sasaki, T., et al., *Nanotrains and self-assembled two-dimensional arrays built from carboranes linked by hydrogen bonding of dipyrindones*. *Nano Research*, ۲۰۰۸. ۱(۵): p. ۴۱۲-۴۱۹.
۳۰. Sezginel, K.B. and C.E. Wilmer, *Modeling diffusion of nanocars on a Cu*