

ارزیابی چیدمان سطحی خودروهای مولکولی به کمک شبیه‌سازی درشت‌دانه دینامیک مولکولی

مهران واعظی (دانشجوی دکتری)

پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه صنعتی شریف

حسین نجات پیشکناری* (دانشیار)

دانشکده‌ی مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی شریف

محمدرضا اجتهادی (استاد)

دانشکده‌ی فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف

مهندسی مکانیک شریف (بهار ۱۴۰۳)
دوره‌ی ۴۰، شماره‌ی ۱، ص. ۳۹-۴۶، (پژوهشی)

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

واژگان کلیدی: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، مدل درشت‌دانه، نانوخودرو، ماشین‌های مولکولی، خودسامانی روی سطح.

۱. مقدمه

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] به منظور مونتاز موفقیت‌آمیز نانوساختار موردنظر 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 می‌باشد

* نویسنده مسئول

تاریخ: دریافت ۲۵/۱۰/۱۴۰۱، اصلاحیه ۲۱/۲/۱۴۰۲، پذیرش ۳۰/۱/۱۴۰۲.

استناد به این مقاله:

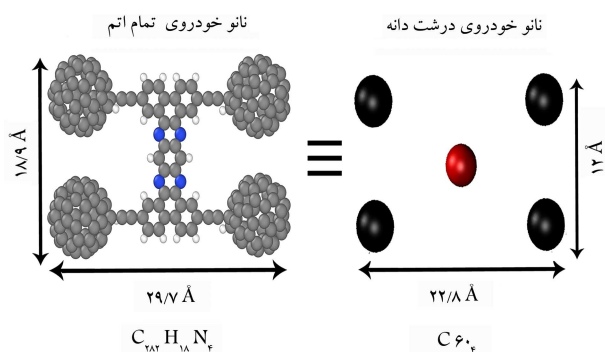
واعظی، مهران، نجات پیشکناری، حسین و اجتهادی، محمدرضا، ۱۴۰۳. ارزیابی چیدمان سطحی خودروهای مولکولی به کمک شبیه‌سازی درشت‌دانه دینامیک مولکولی. دانشکده‌ی مهندسی مکانیک شریف، ۴۰(۱)، صص. ۳۹-۴۶. DOI:10.24200/J40.2023.61727.1669

می شود. پیش بینی های حاصل از مدل درشت دانه ای با نتایج مطالعات قبلی که روی مدل تمام - اتم نانوخودروها انجام شده مقایسه می گردد. در نهایت، امکان استفاده از این مدل برای سیستم های بزرگ تر شامل چهار و هشت نانوخودرو به طور جداگانه بررسی می شود.

۲. روش های محاسباتی

در مدل درشت دانه ای ارائه شده، فرض می شود که نانوخودروها بیشترین برهمکنش را از طریق چرخ ها با یکدیگر دارند. از این رو مطابق شکل ۱، چهار ذره متناظر با چهار چرخ نانوخودرو در نظر گرفته می شوند. از آنجایی که در نانوخودروها، چرخ ها به کمک پیوندهای شیمیایی به یکدیگر مقید شده اند، در مدل درشت دانه ای نیز چرخ ها با بخش های پیوندی و خمش زاویه ای هارمونیک با ضریب سختی زیاد (به ترتیب $10000 \text{ eV}/\text{\AA}^2$ و $10000 \text{ eV}/\text{rad}^2$) به یکدیگر متصل می شوند، تا در حین شبیه سازی ساختارهای صلبی وجود داشته باشد. همان طور که در شکل ۱ می بینیم، پیوندهایی که طول نانوخودرو مستطیلی شکل را مشخص می کنند، فاصله تعادلی $22/\text{\AA}$ دارند و پیوندهایی که عرض نانوخودرو را مشخص می کنند دارای طول تعادلی $12/\text{\AA}$ می باشند. مقادیری که برای طول تعادلی پیوند بین ذرات (چرخ ها) در نظر گرفته شده است، معادل فاصله مرکز جرم چرخ های نانوخودرو در مدل تمام - اتم می باشد. [۲۴] زاویه های تعادلی در جملات خمش زاویه ای نیز برابر 90° درجه در نظر گرفته شده، تا ذرات مشابه چرخ های نانوخودرو روی رئوس یک مستطیل قرار گیرند. لازم به ذکر است که جرم ذرات، معادل جرم 60 اتم کربن (جرم فولرین) در نظر گرفته شده است.

برای تعریف برهمکنش بین ذرات چرخ در مدل درشت دانه، ابتدا انرژی برهمکنش بین دو فولرین برحسب فاصله بین مرکز جرم آنها محاسبه شد. بدین منظور، با ثابت نگه داشتن یک فولرین و جابجایی یک بعدی فولرین دیگر، انرژی برهمکنش بین دو مولکول از طریق محاسبه مجموع انرژی پتانسیل بین اتم های آنها به دست می آید. برهمکنش بین اتم های دو فولرین توسط تابع انرژی پتانسیل لندارد - جونز ۶-۱۲ تعریف شده و پارامترهای آن $\epsilon = 2/4 \text{ meV}$ و $\sigma = 3/4 \text{ \AA}$ و در نظر گرفته شده است. [۲۵] به این ترتیب مطابق شکل ۲، انرژی برهمکنش بین دو مولکول فولرین برحسب فاصله مرکز جرم آنها به دست می آید. همان طور که در شکل ۲ مشاهده می شود، با استفاده از تابع مورس، یک منحنی بر انرژی برهمکنش دو فولرین برآزش کرده و این گونه برهمکنش بین دو فولرین در شکل ۲، توسط تابع پتانسیل مورس با شعاع قطع 20° آنگستروم تعریف می گردد.



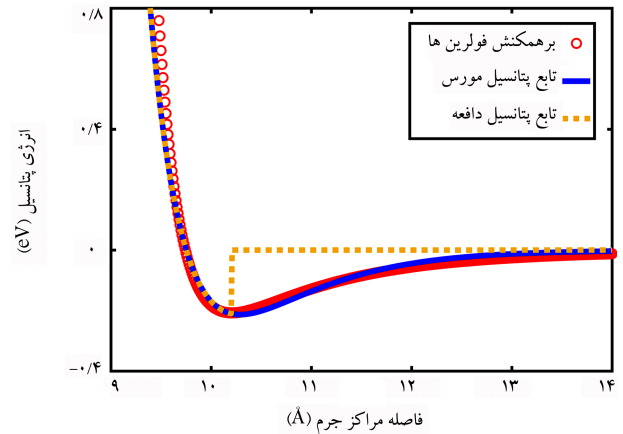
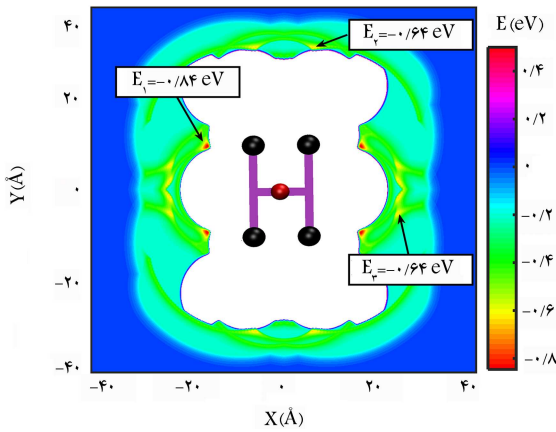
شکل ۱. نمایش مدل تمام - اتم و درشت دانه نانوخودرو.

مولکولی به نام «نانوتراک» و «نانوکار» توسط جیمز توز و همکارانش [۱۶] سنتز شد، که در آنها از چهار مولکول فولرین به عنوان چرخ استفاده شده است. ساختار کروی فولرین، این مولکول را به گزینه ای مناسبی جهت استفاده در نانوخودروها تبدیل می کند. در مطالعات بعدی، از ساختارهای دیگری نظیر پی - کرورین، [۱۷] ادمنتین [۱۴] و ترکیبات آلی - فلزی [۱۸] به عنوان چرخ های نانوخودرو استفاده شده است. به لحاظ آزمایشگاهی، جابجایی این نانوماشین ها روی سطح معمولاً از طریق میدان الکتریکی ناشی از میکروسکوپ تونلی روبشی 2 صورت می گیرد. [۱۹] از این روش در مسابقات نانوخودروها که برای اولین بار در سال ۲۰۱۷ در فرانسه برگزار شد، استفاده گردید. [۲۰]

آکیمو و همکارانش [۲۱] اولین تلاش تئوری به منظور ارزیابی حرکت نانوخودروها روی سطح را انجام دادند. در این پژوهش، حرکت نانوخودروها روی سطح طلا در دمای بالای 400°C کلوین، دامنه ای جابجایی قابل توجهی پیدا کرد که با مشاهدات آزمایشگاهی تطابق دارد. با توجه به بررسی حرکت نانوخودروها روی سطح دو بعدی مانند گرافن [۲۲] و نیتريدیور [۲۳] این نتیجه حاصل می شود که در دمای یکسان نانوخودروها روی این سطح نسبت به سطح فلزی، ضریب انتشار و جابجایی بیشتری را تجربه می کنند. دسته دیگری از مطالعات، روی هدایت هدمند حرکت نانوخودروها روی سطح انجام گرفته است. نعمتی و همکارانش [۲۴-۲۶] به کمک روش دینامیک مولکولی حرکت جهت دار نانوخودرو را تحت شرایط مختلفی گزارش کرده اند. از جمله شرایطی که باعث حرکت جهت دار نانوخودروها می شود استفاده از پله های اتمی در سطح، [۲۷] سطوح ترکیبی، [۲۴] ایجاد گرا دیان دمایی [۲۵] و گرا دیان کرنش [۲۸] در سطح می باشد. علاوه بر روش های مبتنی بر دست کاری سطح، حرکت جهت دار سطحی در نوعی نانوخودرو با شش چرخ نیز گزارش شده است. [۱۷]

در برخی از پژوهش های آزمایشگاهی، خودآرایی مولکولی نانوخودروها روی سطح مورد توجه قرار گرفته است. در یکی از این مطالعات، نوعی ماشین مولکولی ساخته شده که از دو قسمت مکمل تشکیل می گردد که به کمک پیوند هیدروژنی و یا در مدلی دیگر با برهمکنش فلز - لیگاند به یکدیگر متصل می شوند. [۱۹] استفاده از این برهمکنش های ناپیوندی به دلیل جهت پذیری، فضایی مناسب برای ساخت نانوخودروها مورد توجه هستند. در ادامه، با ایجاد دو عامل برقرارکننده پیوند هیدروژنی در واحد ساختاری این نانوخودروها، زنجیره خود مونتاژ تولید می شود، که این زنجیره «نانوقطر» نامیده شده است. [۲۹] در مشاهدات آزمایشگاهی طول زنجیره خودمونتاژ به دست آمده، از این روش تا چند میکرومتر اندازه گیری شده است. در شرایطی که از خودآرایی در ساخت ماشین های مولکولی استفاده شده است، چیدمان و آرایش این ساختارها روی سطح کمتر مورد توجه قرار گرفته است. از طرفی، در آزمایشگاه با مجموعه ای از نانوخودروها روی سطح مواجه هستیم. [۱۹] شناخت برهمکنش ناپیوندی بین نانوخودروها و چیدمان سطحی آنها، می تواند در طراحی نانو ساختارهای سطحی مفید واقع شود.

روش متداولی که در بررسی حرکت سطحی مولکولی مورد استفاده قرار می گیرد، شبیه سازی دینامیک مولکولی تمام - اتم است. [۳۰-۳۲] استفاده از این روش که در آن غالباً از میدان نیروی مکانیک مولکولی [۲۱] استفاده می شود، نیازمند صرف وقت و هزینه قابل توجهی می باشد. 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 درشت دانه ای برای شبیه سازی ماشین های مولکولی بر پایه فولرین شده است. در ابتدا، برهمکنش سطحی دو نانوخودرو و یکربندی های تعادلی آنها توسط مدل درشت دانه ای به دست می آید. با تغییر دمای شبیه سازی، پایداری حرارتی این یکربندی های تعادلی در دماهای مختلف ارزیابی



شکل ۲. انرژی برهمکنش دو مولکول فولرین برحسب فاصله مرکز جرم آنها.

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

در رابطه ۱ ضرایب تابع مورس برآزش شده، عبارتند از $D = 1/29 \text{ eV}/\text{Å}$ ، $\alpha = 10/29 \text{ Å}^{-1}$ و $x_0 = 10/29 \text{ Å}$.

همانطور که در شکل ۲ مشاهده می شود، تابع مورس استفاده شده برای تعریف پتانسیل بین دو مولکول و تابع پتانسیل جهت ایجاد دافعه در مرکز نانوخودرو نیز برحسب فاصله ذرات رسم شده اند. مشکلی که در شبیه سازی نانوخودرو چهار ذره ای با آن مواجه هستیم، در هم فرورفتن نانوخودروهاست. مطابق نمایش تمام - اتم نانوخودرو (شکل ۱)، فواصل بین چرخ ها توسط شاسی اشغال شده است و چرخ های نانوخودرو دیگر نمی توانند در این فواصل قرار گیرند. اما هنگام استفاده از مدل درشت دانه با چهار ذره، چرخ های یک نانوخودرو درون بخش داخلی نانوخودرو مقابل قرار می گیرند که در حالت طبیعی این مکان با شاسی نانوخودرو اشغال شده است.

به منظور حل این مشکل، یک ذره به جرم شاسی در مرکز نانوخودرو تعبیه می شود (ذره قرمز رنگ در شکل ۱). تفاوت این ذره با چرخ ها در این است که این ذره صرفاً برهمکنش دافعه با ذراتی که به آن نزدیک می شوند برقرار می کند. همان طور که در شکل ۲ مشاهده می شود، انرژی پتانسیل برهمکنش سایر چرخ ها با این ذره مرکزی در واقع همان تابع پتانسیل مورس است که در آن شعاع قطع به نحوی انتخاب شده که صرفاً به نیروی دافعه اجازه اثر می دهد و مانع از پیکربندی نامطلوب دو نانوخودرو می شود.

در مدل ارائه شده، به منظور افزایش سرعت شبیه سازی ها زیرلایه ای در نظر نمی گیریم و مسئله در دو بعد حل می شود. از ترموستات نوز - هورر [۳۷، ۳۶] برای ایجاد دمای ثابت در شبیه سازی استفاده شده است. شبیه سازی ها به کمک نرم افزار لمپس [۲۸] پیاده سازی شده است که از روش اتنگرال گیری ورله سرعتی برای حل معادلات حرکت استفاده می گردد. برای شبیه سازی مدل درشت دانه ای نانوخودروها از گام زمانی ۱ فمتوثانیه استفاده می گردد.

۳. بحث و نتایج

۳.۱. انرژی پتانسیل برهمکنش دو نانوخودرو

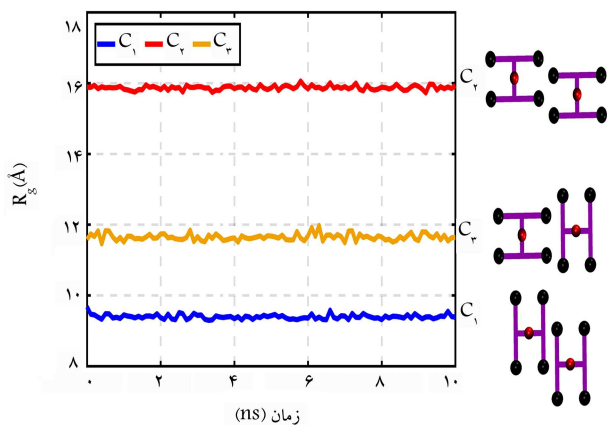
به منظور درک موقعیت تعادلی دو نانوخودرو، آنالیز انرژی پتانسیل انجام شد. در این آنالیز، با استفاده از مدل درشت دانه، یک نانوخودرو در مبدأ مختصات قرار می گیرد.

شکل ۳. کمترین انرژی پتانسیل بین دو نانوخودرو در حالی که، نانوخودرو مرکز در مبدأ مختصات قرار گرفته و نانوخودرو محیطی در اطراف آن به نقاط مختلف جایجا شده و نسبت به آن در زوایای مختلف قرار می گیرد.

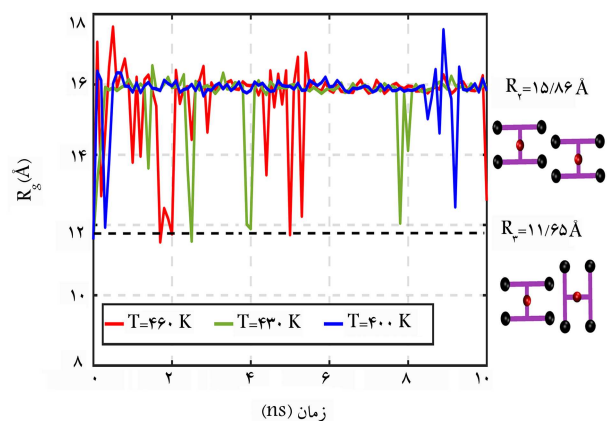
نانوخودروی دیگر، مکان های مختلف در اطراف نانوخودروی مرکزی را جاروب می کند. در هر نقطه در اطراف نانوخودروی مرکزی، نانوخودروی دوم حول محور عمود بر سطح ۹۰ درجه می چرخد و در هر موقعیت انرژی پتانسیل بین دو نانوخودرو محاسبه می گردد. برای هر نقطه در اطراف نانوخودروی مرکزی، کمترین انرژی پتانسیل بین دو نانوخودرو که از چرخش نانوخودروی محیطی به دست آمده ثبت می گردد. به این طریق، ما در فواصل مختلف دو نانوخودرو، کمترین انرژی پتانسیل برهمکنش دو نانوخودرو را به ازای پیکربندی های متفاوت (زاویه های نسبی مختلف دو نانوخودرو) به دست می آوریم. لازم به ذکر است که انرژی برهمکنش بین دو نانوخودرو از طریق پتانسیل مورس و پتانسیل دافعه معرفی شده، در شکل ۲ محاسبه می شود. نانوخودروی محیطی با گام های ۱ و ۰٫۷۰ انگستروم در اطراف نانوخودروی مرکزی جایجا می شود و در هر نقطه با گام های ۱ درجه می چرخد. علت چرخش ۹۰ درجه ای نانوخودروی محیطی در هر نقطه، تقارن موجود در ساختار نانوخودرو (تقارن D_{2h}) می باشد.

شکل ۳، کمترین انرژی پتانسیل بین دو نانوخودرو در فواصل مختلف مرکز جرم در پیکربندی های متفاوت را نشان می دهد. طبق این شکل، با توجه به تقارن موجود در نانوخودرو تقریباً سه نوع نقطه کمیته موضعی وجود دارد. انرژی برهمکنش بین دو نانوخودرو در این حالات تعادلی، معادل -0.84 eV ، -0.64 eV و -0.64 eV الکترون ولت است. براساس شکل ۳، در حالات تعادلی ۱ و ۲، که به ترتیب دارای انرژی پتانسیل -0.84 eV و -0.64 eV الکترون ولت هستند، مرکز جرم نانوخودروی محیطی در نقاط $(9/5 \text{ Å}, 16/0 \text{ Å})$ و $(31/3 \text{ Å}, 6/6 \text{ Å})$ می باشد. در این حالات کمیته انرژی، محورهای دو نانوخودرو با یکدیگر موازی می باشد. از طرفی در حالت تعادلی سوم، مرکز جرم نانوخودروی محیطی در نقطه $(1/4 \text{ Å}, 24/2 \text{ Å})$ و قرار داشته که در این حالت راستای محور دو نانوخودرو عمود بر یکدیگر می باشد.

به منظور نمایش بهتر پیکربندی های تعادلی دو نانوخودرو، موقعیت نسبی آنها در سه حالت تعادلی نام برده شده، در شکل ۴ به نمایش درآمدند. براساس مدل درشت دانه ارائه شده برای نانوخودروها، پیکربندی شماره ۱ پایدارترین پیکربندی تعادلی دو نانوخودرو می باشد. با توجه به انرژی پیکربندی های شماره ۲ و ۳ (-0.64 eV) ، این ساختارها از پایداری یکسانی برخوردارند. در پژوهشی که اخیراً روی مدل تمام - اتم نانوخودروها انجام دادیم [۳۹] سه حالت تعادلی برای سیستم دو نانوخودرو یافت شد. طبق این تحقیق، موقعیت نسبی دو نانوخودرو در حالات تعادلی مشابه پیکربندی های تعادلی به دست آمده از حالت درشت دانه می باشند. از طرفی،



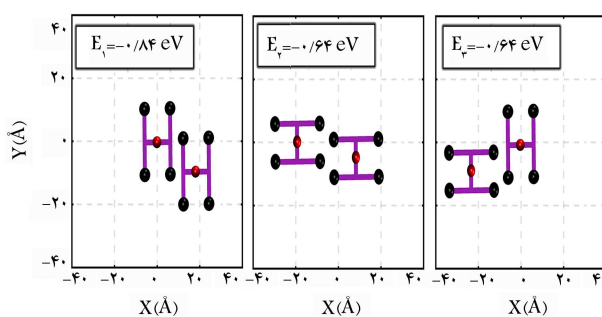
شکل ۵. شعاع ژیراسیون مربوط به پیکربندی‌های تعادلی شماره ۱، ۲ و ۳ در حین شبیه‌سازی در دمای ۲۰۰ کلوین.



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

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 نانوخودروهای تمام - اتم سازگاری دارد.^[۳۹]

در گام بعدی، پیکربندی‌های تعادلی دو نانوخودرو را در دماهای ۴۰۰، ۴۳۰ و ۴۶۰ کلوین مورد آزمایش قرار می‌دهیم. شکل ۶، شعاع ژیراسیون دو نانوخودرو 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 نانوخودروها در طول شبیه‌سازی می‌باشد. همان‌طور که در تغییرات شعاع ژیراسیون خوشه دوتایی نانوخودرو مشخص است، دو نانوخودرو در بازه‌های زمانی مشخصی مقدار شعاع ژیراسیون (۱۱/۶۵ Å) متناظر با پیکربندی شماره ۳ 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 وضعیت نسبی نانوخودروها افزایش می‌یابد، زیرا در این دما با افزایش انرژی گرمایی، دو نانوخودرو این توانایی را پیدا می‌کنند تا مطابق با شکل ۳، از نقاط کمینه انرژی پتانسیل خارج شده و وضعیت‌های تعادلی با انرژی متفاوتی را تجربه کنند. تغییر وضعیت نسبی نانوخودروها و تبدیل پیکربندی‌های تعادلی به یکدیگر در بررسی‌های تمام - اتم



شکل ۴. موقعیت نسبی دو نانوخودرو در پیکربندی‌های متناظر با کمینه انرژی پتانسیل.

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 نانوخودرو درشت‌دانه شده است. به طور خلاصه، مدل درشت‌دانه ارائه شده برای نانوخودرو موقعیت نسبی تعادلی دو نانوخودرو را درست پیش‌بینی کرده، اما مقدار انرژی حالات تعادلی را کمی متفاوت تخمین می‌زند.

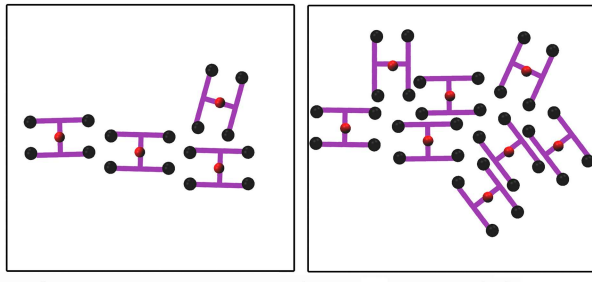
۲.۳. پایداری حرارتی پیکربندی‌های تعادلی

طبق آنچه در بررسی مدل تمام - اتم نانوخودروها مشخص شده است،^[۳۹] با توجه به اینکه پیکربندی‌های تعادلی متناظر با نقاط کمینه موضعی انرژی پتانسیل هستند، در اثر افزایش دما نانوخودروها 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 نانوخودرو 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 نانوخودرو از یکدیگر مشاهده می‌گردد.^[۷]

به منظور بررسی صحت مدل درشت‌دانه در تخمین پایداری حرارتی پیکربندی‌های تعادلی، دو نانوخودرو 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 نانوخودرو است که از رابطه زیر قابل محاسبه می‌باشد:

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

در رابطه‌ی اخیر، $\mathbf{r}(i)$ به ترتیب مختصات مرکز جرم خوشه و مختصات مرکز جرم نانوخودروهای درون خوشه می‌باشند. همچنین، N تعداد نانوخودروهای موجود در خوشه است که در این حالت برابر ۲ در نظر گرفته می‌شود. مطابق شکل ۵، در دمای ۲۰۰ کلوین هر یک از پیکربندی‌های تعادلی از خود شعاع ژیراسیون منحصر به فردی را نشان می‌دهند. 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 ($\bar{R}_g = 9/39 \text{ Å}$). در پیکربندی‌های تعادلی شماره ۲ و ۳، شعاع ژیراسیون به ترتیب مقادیر متوسط $15/86 \text{ Å}$ و $11/65 \text{ Å}$ را دارد. با توجه به ثابت بودن مقادیر شعاع ژیراسیون در شبیه‌سازی با پیکربندی‌های تعادلی مختلف در دمای ۲۰۰ کلوین، این نتیجه به دست می‌آید که این پیکربندی‌ها در این دما پایدار هستند. نانوخودروهایی که در ابتدا در وضعیت‌های نسبی تعادلی



شکل ۸. ساختارهای نهایی به دست آمده از شبیه سازی خوشه های الف و ب در دمای ۲۰۰ کلوین.

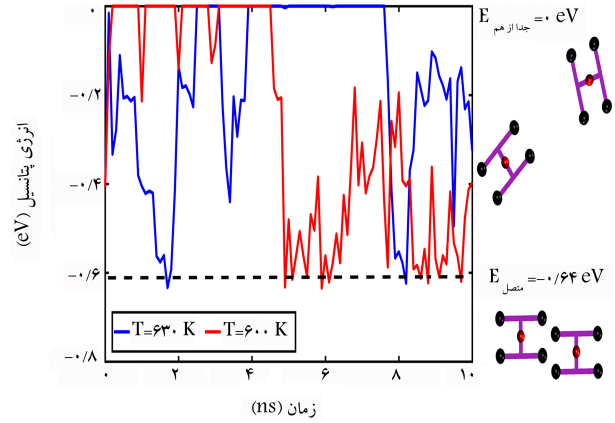
نانو خودروه به دست آمد. در شکل ۸، ساختار نهایی نانو خودروها پس از ۲۰ نانوثانیه مشاهده می شود.

مطابق با شکل ۸، در اکثر موارد وضعیت نسبی هر زوج نانو خودرو مجاور، مشابه اتصالات تعادلی به دست آمده در قسمت های قبل می باشد. در شکل ۸ ب، ملاحظه می شود که سه نانو خودروها در پیکربندی تعادلی شماره ۲ قرار دارند و نانو خودروی چهارم پیکربندی شماره ۳ را با نانو خودروی همسایه، تجربه می کند. با دقت در نانو خودروهای موجود در همسایگی همدیگر در خوشه هشت تایی، می توان نتیجه گرفت که وضعیت نسبی نانو خودروهای مشابه در اغلب حالات، وضعیت پیکربندی های تعادلی است که در خوشه دوتایی مشاهده شد. لازم به ذکر است که وجود پیکربندی های تعادلی مربوط به خوشه دوتایی در خوشه های بزرگ تر نانو خودرو مطابق با نتایج مدل تمام - اتم می باشد.

از محدودیت های مطالعه رفتار نانو خودروها به روش تمام - اتم زمان بر بودن اجرای محاسبات می باشد. روش درشت دانه حاضر، با هدف کاهش هزینه محاسباتی و به منظور بررسی چیدمان سطحی نانو خودروها ارائه گردیده است. همان طور که در بخش ۳-۱ و ۳-۲ این مطالعه ملاحظه گردید، روش ارائه شده، پیکربندی های تعادلی را در اتصال دو نانو خودرو و پایداری حرارتی آنها را به درستی پیش بینی می کند. با افزایش تعداد نانو خودروها به چهار و هشت نانو خودرو در یک خوشه، اگرچه پیکربندی های تعادلی مشاهده شده (پیکربندی های شماره ۱، ۲ و ۳)، در مدل درشت دانه خوشه ها، مطابق با پیکربندی های تعادلی به دست آمده از مدل تمام - اتم است، ولی روش درشت دانه پیش بینی دقیقی در مورد تعداد هر نوع پیکربندی ارائه نمی دهد. به عنوان مثال، در شکل ۸ - الف که نتیجه شبیه سازی هشت نانو خودروی درشت دانه نشان داده شده است، یک زوج نانو خودرو در پیکربندی تعادلی شماره ۲ قرار گرفته اند. در حالی که در مدل تمام - اتم این خوشه، نتیجه شبیه سازی دو زوج نانو خودرو را در پیکربندی تعادلی شماره ۲ نشان می دهد.^[۳۹] بنابراین، مدل درشت دانه حاضر در بررسی نوع اتصال نانو خودروها در خوشه های مولکولی و پایداری حرارتی آنها قابل استفاده بوده و برای پیش بینی دقیق تعداد گونه های مختلف اتصال، استفاده از مدل تمام - اتم توصیه می شود.

۴. نتیجه گیری

در این مقاله، با استفاده از روش دینامیک مولکولی، مدل درشت دانه جهت بررسی چیدمان سطحی ماشین های مولکولی ارائه شد. در مدل ارائه شده، برهمکنش نانو خودروهای بر پایه فولرین بیشتر از طریق چرخ ها در نظر گرفته می شود. در



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

خودروهای مولکولی در دمای ۴۰۰ کلوین نیز گزارش شده است^[۳۹] که این صحت مدل درشت دانه را تأیید می کند.

همان طور که در قسمت قبل مشاهده شد، پیکربندی های تعادلی پایداری حرارتی خود را در دمای کلوین و بالاتر از دست می دهند. با این وجود، در این دما دو نانو خودرو، درون یک خوشه قرار دارند و جاذبه و اندرآلوسی بین نانو خودروها مانع جدایش آنها می شود.

با افزایش دما به بازه ۶۰۰ کلوین و بیشتر، طبق پژوهش های اخیر پیرامون حرکات سطحی نانو خودروهای تمام - اتم و ساختارهای مشابه،^[۴۰،۴۱] انرژی حرارتی بالا این امکان را فراهم می کند تا مولکول ها بر جاذبه و اندرآلوسی بین خود غلبه کنند و از یکدیگر جدا شوند. شکل ۷، انرژی پتانسیل بین مولکولی را برای خوشه ای شامل دو نانو خودرو در دماهای ۶۰۰ و ۶۳۰ کلوین نشان می دهد. بر اساس تغییرات انرژی پتانسیل، دو نانو خودرو در دمای ۶۰۰ کلوین در بازه زمانی قابل توجهی سطح انرژی صفر پیدا می کنند که این به معنای جدا شدن دو مولکول از یکدیگر است. با افزایش دما به ۶۳۰ کلوین در بازه زمانی طولانی تری سطح انرژی پتانسیل صفر و انرژی گرمایی ذرات در این دما باعث و جذب مولکول ها از یکدیگر می شود. لازم به ذکر است که افت مجدد مقدار انرژی پتانسیل از مقدار صفر به مقادیر کمتر به معنای برخورد و اتصال مجدد نانو خودروها روی سطح است.

در برخی زمان ها، سطح انرژی به مقدار انرژی متناظر با پیکربندی های تعادلی ۲ و ۳ می رسد و در این بازه های محدود زمانی دو نانو خودرو در این موقعیت های تعادلی قرار می گیرند. برخورد مجدد نانو خودروها به یکدیگر پس از جدایش، بستگی به ابعاد جعبه شبیه سازی دارد. اگر شبیه سازی در یک جعبه بسیار بزرگ صورت گیرد، نانو خودروها پس از یک بار جدا شدن، نیاز به مدت زمان بسیار زیادی نیاز دارند تا دوباره روی سطح برخورد کرده و یکدیگر را بیابند.

۳.۳. آرایش سطحی خوشه های بزرگ تر نانو خودرو

پس از بررسی آرایش سطحی دو نانو خودرو در دماهای مختلف، ساختارهای دوبعدی خوشه های نانو خودروی که شامل ۴ و ۸ خودرو می باشند، مورد بررسی قرار می گیرد. از آنجاکه در دمای ۲۰۰ کلوین، وضعیت تعادلی نانو خودروها به لحاظ حرارتی پایدار هستند، خوشه های مذکور در این دما، به مدت ۲۰ نانوثانیه شبیه سازی می شوند. از طرفی مطابق با نتایج مطالعات اخیر، در خوشه های بزرگ تر نانو خودروها، اتصالات بین هر زوج نانو خودرو مشابه پیکربندی های تعادلی است که در بررسی خوشه دوتایی

تعادلی، مقدار ثابتی را در طول شبیه‌سازی نشان داد 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 قرار داشت. با افزایش دما به ۴۳۰ و ۴۶۰ کلوین، بسامد تغییر پیکربندی دو نانوخودرو افزایش یافت. در نتیجه، در بازه دمایی اطراف ۴۰۰ کلوین، نانوخودروها انرژی لازم را برای اینکه از یک نقطه با انرژی پتانسیل کمینه به نقطه دیگر (از یک پیکربندی تعادلی به پیکربندی دیگر) تغییر وضعیت دهند، به دست آوردند.

در بازه دمایی بالاتر (۶۰۰ کلوین و بیشتر)، انرژی حرارتی مستقل شده به دو نانوخودرو به قدری افزایش یافت که دو نانوخودرو توانستند بر جاذبه و اندروالسی بین خود غلبه کنند و از یکدیگر جدا شوند. رفتار دمایی مدل درشت‌دانه خوشه دوتایی نانوخودرو در دماهای نام‌برده (۲۰۰، ۴۰۰ و ۶۰۰ کلوین)، با مطالعه مدل تمام - اتم خوشه شامل دو نانوخودرو سازگاری دارد. با شبیه‌سازی خوشه‌های بزرگ‌تر که شامل ۴ و ۸ نانوخودرو می‌باشند، موقعیت تعادلی نانوخودروها در دمای ۲۰۰ کلوین به دست آمد. با در نظر گرفتن نحوه اتصال هر نانوخودرو با نانوخودروهای مجاور، این نتیجه حاصل شد که آرایش نسبی هر زوج نانوخودروی مجاور با پیکربندی‌های تعادلی دیده شده در سیستم دو نانوخودرو مشابه می‌باشد که این مورد در تحقیقات مدل تمام - اتم نانوخودروها نیز مشاهده شده است. مدل درشت‌دانه ارائه شده برای بررسی چیدمان سطحی نانوخودروها، پیکربندی تعادلی زوج نانوخودروها و پایداری حرارتی آنها را به درستی پیش‌بینی می‌کند. مدل درشت‌دانه مزبور که با فرض غالب بودن سهم برهمکنش چرخ‌ها در برهمکنش بین دو نانوخودرو ایجاد شده است، برای سایر نانوخودروها، به‌ویژه نانوخودروهای بر پایه فولرین قابل توسعه است که این روش از نظر هزینه و زمان، روشی کاملاً مقرون به - صرفه می‌باشد.

ساختار درشت‌دانه نانوخودروها، چهار ذره به‌عنوان چرخ‌های فولرینی نانوخودرو و یک ذره مرکزی به‌عنوان شاسی انتخاب می‌شوند. ذرات تشکیل‌دهنده نانوخودرو، توسط باندهایی با ضریب سختی بالا به یکدیگر متصل می‌شوند تا مشابه مدل تمام - اتم، در حین شبیه‌سازی نانوخودرو صلب باشد. به‌کمک تابع انرژی پتانسیل مورس، برهمکنش و اندروالسی موجود بین چرخ‌های نانوخودروها تعریف می‌شوند و با در نظر گرفتن بخش دافعه‌ی تابع پتانسیل برای ذره مرکزی، از برهمکنش نامطلوب نانوخودروها جلوگیری می‌شود.

برای تعیین پیکربندی‌های تعادلی دو نانوخودرو، آنالیز انرژی پتانسیل بر روی خودروهای مولکولی انجام شد. در این آنالیز، یک نانوخودرو در مبدأ مختصات ثابت فرض گردید و نانوخودروی دیگر در اطراف نانوخودروی مرکزی، به نقاط مختلف منتقل شده و در هر نقطه، حول محور و عمود بر سطح، یک دور چرخانده شد. به ازای نقاط مختلف در اطراف نانوخودروی مرکزی و به ازای جهت‌گیری‌های نسبی مختلف دو نانوخودرو، کمترین سطح انرژی پتانسیل، ثبت گردید. با توجه به تغییرات سطح انرژی پتانسیل که به ازای فواصل مختلف و جهت‌گیری‌های متفاوت دو نانوخودرو به دست آمد، سه نقطه با کمترین انرژی پتانسیل ملاحظه شد. در این نقاط کمینه انرژی پتانسیل که متناظر با پیکربندی‌های تعادلی دو نانوخودرو هستند، انرژی برهمکنش بین مولکولی برابر با ۰/۸۴، -۰/۶۴ و -۰/۶۴ الکترون‌ولت شد. وضعیت نسبی دو نانوخودرو در پیکربندی‌های تعادلی، مطابق با نتایج به دست آمده از بررسی مدل تمام - اتم سیستم دو نانوخودرو می‌باشد.

با مطالعه شعاع ژیراسیون و سطح انرژی پتانسیل مربوط به برهمکنش بین دو نانوخودرو، پایداری حرارتی پیکربندی‌های تعادلی در دماهای ۲۰۰، ۴۰۰ و ۶۰۰ کلوین بررسی شدند. در دمای ۲۰۰ کلوین، شعاع ژیراسیون مربوط به هر سه پیکربندی

پانوشته‌ها

1. Self-Assembly
2. Scanning Tunneling Microscope
3. Molecular Mechanics Force Field

منابع (References)

1. Zhang, X., Gärisch, F., Chen, Z., Hu, Y., Wang, Z., Wang, Y., Xie, L., Chen, J., Li, J., Barth, J.V. and Narita, A., 2022. Self-assembly and photoinduced fabrication of conductive nanographene wires on boron nitride. *Nature Communications*, 13(1), p.442. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-27600-1>.
2. Villagómez, C.J., Sasaki, T., Tour, J.M. and Grill, L., 2010. Bottom-up assembly of molecular wagons on a surface. *Journal of the American Chemical Society*, 132(47), pp.16848-16854. <https://doi.org/10.1021/ja105542j>.
3. Adorf, C.S., Moore, T.C., Melle, Y.J. and Glotzer, S.C., 2019. Analysis of self-assembly pathways with unsupervised machine learning algorithms. *The Jour-*

nal of Physical Chemistry B, 124(1), pp.69-78. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b09621>.

4. Li, M., Li, S., Zhang, K., Chi, X., Zhou, H., Xu, H.B., Zhang, Y., Li, Q., Wang, D. and Zeng, M.H., 2021. Coordination-directed self-assembly of molecular motors: Towards a two-wheel drive nanocar. *Nanoscale*, 13(39), pp.16748-16754. <https://doi.org/10.1039/D1NR05046J>.
5. Schmaltz, T., Khassanov, A., Steinrück, H.G., Magerl, A., Hirsch, A. and Halik, M., 2014. Tuning the molecular order of C 60-based self-assembled monolayers in field-effect transistors. *Nanoscale*, 6(21), pp.13022-13027. <https://doi.org/10.1039/C4NR03557G>.
6. Baskar, A.V., Benzigar, M.R., Talapaneni, S.N., Singh, G., Karakoti, A.S., Yi, J., Al-Muhtaseb, A.A.H., Ariga, K., Ajayan, P.M. and Vinu, A., 2022. Self-assembled fullerene nanostructures: Synthesis and applications. *Advanced Functional Materials*, 32(6), p.2106924. <https://doi.org/10.1002/adfm.202106924>.
7. Vaezi, M., Pishkenari, H.N. and Ejtehadi, M.R., 2022. Collective movement and thermal stability of fullerene clusters on the graphene layer. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 24(19), pp.11770-11781. <https://doi.org/10.1039/D2CP00667G>.

8. Shirai, Y., Osgood, A.J., Zhao, Y., Yao, Y., Saudan, L., Yang, H., Yu-Hung, C., Alemany, L.B., Sasaki, T., Morin, J.F. and Guerrero, J.M., 2006. Surface-rolling molecules. *Journal of the American Chemical Society*, 128(14), pp.4854-4864. <https://doi.org/10.1021/ja058514r>.
9. Morin, J.F., Shirai, Y. and Tour, J.M., 2006. En route to a motorized nanocar. *Organic Letters*, 8(8), pp.1713-1716. <https://doi.org/10.1021/ol060445d>.
10. Nemati, A., Meghdari, A., Nejat Pishkenari, H. and Sohrabpour, S., 2018. Investigation into thermally activated migration of fullerene-based nanocars. *Scientia Iranica*, 25(3), pp.1835-1848. <https://doi.org/10.24200/sci.2018.20321>.
11. Sasaki, T., Guerrero, J.M. and Tour, J.M., 2008. The assembly line: Self-assembling nanocars. *Tetrahedron*, 64(36), pp.8522-8529. <https://doi.org/10.1016/j.tet.2008.05.074>.
12. Khatua, S., Godoy, J., Tour, J.M. and Link, S., 2010. Influence of the Substrate on the Mobility of Individual Nanocars. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 1(22), pp.3288-3291. <https://doi.org/10.1021/jz101375q>.
13. Khatua, S., Guerrero, J.M., Claytor, K., Vives, G., Kolomeisky, A.B., Tour, J.M. and Link, S., 2009. Micrometer-scale translation and monitoring of individual nanocars on glass. *ACS Nano*, 3(2), pp.351-356. <https://doi.org/10.1021/nn800798a>.
14. Chu, P.L.E., Wang, L.Y., Khatua, S., Kolomeisky, A.B., Link, S. and Tour, J.M., 2013. Synthesis and single-molecule imaging of highly mobile adamantane-wheeled nanocars. *ACS Nano*, 7(1), pp.35-41. <https://doi.org/10.1021/nn304584a>.
15. Jin, T., Garcia-López, V., Kuwahara, S., Chiang, P.T., Tour, J.M. and Wang, G., 2018. Diffusion of nanocars on an air-glass interface. *The Journal of Physical Chemistry C*, 122(33), pp.19025-19036. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b05668>.
16. Sasaki, T., Morin, J.F., Lu, M. and Tour, J.M., 2007. Synthesis of a single-molecule nanotruck. *Tetrahedron Letters*, 48(33), pp.5817-5820. <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2007.06.081>.
17. Hosseini Lavasani, S.M., Nejat Pishkenari, H. and Meghdari, A., 2019. How chassis structure and substrate crystalline direction affect the mobility of thermally driven p-carborane-wheeled nanocars. *The Journal of Physical Chemistry C*, 123(8), pp.4805-4824. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b10779>.
18. Vives, G. and Tour, J.M., 2009. Synthesis of a nanocar with organometallic wheels. *Tetrahedron Letters*, 50(13), pp.1427-1430. <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2009.01.042>.
19. Zhang, J., Osgood, A., Shirai, Y., Morin, J.F., Sasaki, T., Tour, J.M. and Kelly, K.F., 2007. Investigating the motion of molecular machines on surfaces by STM: The nanocar and beyond. In *2007 7th IEEE Conference on Nanotechnology (IEEE NANO)*. (pp. 243-246). IEEE. <https://doi.org/10.1109/NANO.2007.4601180>.
20. Rapenne, G. and Joachim, C., 2017. The first nanocar race. *Nature Reviews Materials*, 2(6), pp.1-3. <https://doi.org/10.1038/natrevmats.2017.40>.
21. Akimov, A.V., Nemukhin, A.V., Moskovsky, A.A., Kolomeisky, A.B. and Tour, J.M., 2008. Molecular dynamics of surface-moving thermally driven nanocars. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 4(4), pp.652-656. <https://doi.org/10.1021/ct7002594>.
22. Mofidi, S.M., Nejat Pishkenari, H., Ejtehadi, M.R. and Akimov, A.V., 2021. Locomotion of the C60-based nanomachines on graphene surfaces. *Scientific Reports*, 11(1), p.2576. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-82280-7>.
23. Vaezi, M., Pishkenari, H.N. and Nemati, A., 2022. Mechanism of the motion of nanovehicles on hexagonal boron-nitride: A molecular dynamics study. *Computational Materials Science*, 207, p.111317. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2022.111317>.
24. Nemati, A., Nejat Pishkenari, H., Meghdari, A. and Ge, S.S., 2019. Controlling the diffusive motion of fullerene-wheeled nanocars utilizing a hybrid substrate. *The Journal of Physical Chemistry C*, 123(42), pp.26018-26030. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b08335>.
25. Nemati, A., Pishkenari, H.N., Meghdari, A. and Ge, S.S., 2020. Directional control of surface rolling molecules exploiting non-uniform heat-induced substrates. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 22(46), pp.26887-26900. <https://doi.org/10.1039/D0CP04960C>.
26. Nemati, A., Nejat Pishkenari, H., Meghdari, A. and Ge, S.S., 2020. Influence of vacancies and grain boundaries on the diffusive motion of surface rolling molecules. *The Journal of Physical Chemistry C*, 124(30), pp.16629-16643. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c03697>.
27. Nemati, A., Pishkenari, H.N., Meghdari, A. and Sohrabpour, S., 2018. Directing the diffusive motion of fullerene-based nanocars using nonplanar gold surfaces. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20(1), pp.332-344. <https://doi.org/10.1039/C7CP07217A>.
28. Vaezi, M., Nejat Pishkenari, H. and Ejtehadi, M.R., 2023. Programmable transport of C60 by straining graphene substrate. *Langmuir*, 39(12), pp.4483-4494. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.3c00180>.
29. Sasaki, T., Guerrero, J.M., Leonard, A.D. and Tour, J.M., 2008. Nanotrains and self-assembled two-dimensional arrays built from carboranes linked by hydrogen bonding of dipyrindones. *Nano Research*, 1, pp.412-419. <https://doi.org/10.1007/s12274-008-8041-4>.
30. Sezginel, K.B. and Wilmer, C.E., 2020. Modeling diffusion of nanocars on a Cu (110) surface. *Molecular Systems Design & Engineering*, 5(7), pp.1186-1192. <https://doi.org/10.1039/C9ME00171A>.
31. Kianezhad, M., Youzi, M., Vaezi, M. and Pishkenari, H.N., 2022. Rectilinear motion of carbon nanotube on gold surface. *International Journal of Mechanical Sciences*, 217, p.107026. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2021.107026>.
32. Vaezi, M., Nejat Pishkenari, H. and Nemati, A., 2020. Mechanism of C60 rotation and translation on hexagonal boron-nitride monolayer. *The Journal of Chemical Physics*, 153(23). <https://doi.org/10.1063/5.0029490>.
33. Vaezi, M. and Pishkenari, H.N., 2021. Comparison of Diffusive Motion of C60 on Graphene and Boron Nitride Surfaces. *ArXiv Preprint ArXiv:2108.00477*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2108.00477>.

34. Kianezhad, M., Youzi, M., Vaezi, M. and Nejat Pishkenari, H., 2023. Unidirectional motion of C60-based nanovehicles using hybrid substrates with temperature gradient. *Scientific Reports*, 13(1), p.1100. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-28245-4>.
35. Rafii-Tabar, H., 2004. Computational modelling of thermo-mechanical and transport properties of carbon nanotubes. *Physics Reports*, 390(4-5), pp.235-452. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2003.10.012>.
36. Nosé, S., 1984. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods. *The Journal of Chemical Physics*, 81(1), pp.511-519. <https://doi.org/10.1063/1.447334>.
37. Hoover, W.G., 1985. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Physical Review A*, 31(3), p.1695. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.31.1695>.
38. Plimpton, S., 1995. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 117(1), pp.1-19. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>.
39. Vaezi, M., Pishkenari, H.N. and Ejtehadi, M.R., 2022. Nanocar swarm movement on graphene surfaces. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 24(45), pp.27759-27771. <https://doi.org/10.1039/D2CP03856K>.
40. Mofidi, S.M., Nejat Pishkenari, H., Ejtehadi, M.R. and Akimov, A.V., 2019. Role of graphene surface ripples and thermal vibrations in molecular dynamics of C60. *The Journal of Physical Chemistry C*, 123(32), pp.20026-20036. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b03947>.