



## تحلیل اثر جذب بیومولکول فلاوین مونونوکلئوتید بر روی فرکانس طبیعی نانولوله های زیست سازگار برن - نیتتریدی

شهرام آجری\*

گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه مراغه، مراغه، ایران

### تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۳۹۸/۱۲/۱۰

بازنگری: ۱۳۹۹/۰۹/۰۳

پذیرش: ۱۳۹۹/۱۰/۰۴

ارائه آنلاین: ۱۳۹۹/۱۰/۰۸

### کلمات کلیدی:

نانولوله های برن - نیتترید

جذب فیزیکی،

فلاوین مونونوکلئوتید

فرکانس طبیعی

شبیه سازی دینامیک مولکولی

**خلاصه:** در این مطالعه، رفتار ارتعاشی و فرکانس طبیعی نانولوله برن - نیتتریدی تک و دوجداره، تحت جذب فیزیکی بیومولکول های فلاوین مونونوکلئوتید با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی در دو محیط مختلف خلا و محیط آبی بررسی شده است. همچنین، تاثیر شرایط مرزی متفاوت و پارامترهای هندسی مانند شعاع و تعداد جداره ها بر فرکانس طبیعی مطالعه گردیده است. بر اساس نتایج بدست آمده، جذب فیزیکی این مولکول، فرکانس طبیعی نانولوله های برن - نیتتریدی را کاهش می دهد که در مورد نانولوله های برن - نیتتریدی با شرایط مرزی کاملا گیردار قابل توجه است. علاوه بر این، ملاحظه شد که تغییر فرکانسی نانولوله های برن - نیتتریدی با تکیه گاه گیردار - آزاد در محیط سیال آبی به دلیل تغییر شکل مود ناشی از نیروی خارجی وان دروالس، مثبت خواهد بود. همچنین، مشاهده شده است که تغییر فرکانس نانولوله های برن - نیتتریدی تک جداره با نسبت ابعاد کوچکتر در مقایسه با نانولوله های برن - نیتتریدی تک جداره با نسبت ابعاد بزرگتر و نانولوله های دو جداره، بیشتر است. مطالعه در محیط آبی نشان می دهد که تغییر فرکانس به طور قابل توجهی افزایش می یابد در حالی که شیب این تغییر نسبت به درصد وزنی مولکول کاهش می یابد. نتایج این مطالعه را می توان به عنوان یک مطالعه پایه ای در سیستم های نانوالکترومکانیکی مربوط به طراحی نانوبیوسنسورهای با کارآمدی بیشتر تشخیص مولکول ها در محیط های دارای سیال در نظر گرفت.

### ۱. مقدمه

آنها را بطور قابل توجهی محدود می کند. بررسی های مختلف نشان می دهد که این محدودیت ها را می توان با کمک عامل دار کردن<sup>۱</sup> از بین برد که بر این اساس، خواص ذاتی و رفتار نانو ساختار میزبان عامل دار شده به طور قابل توجهی تغییر می کند [۲۰-۳۲]. مطالعات بر روی نانولوله های برن - نیتتریدی نشان می دهد که علاوه بر اینکه خواص الکتریکی، مغناطیسی و مکانیکی نانولوله های برن - نیتتریدی عامل دار شده دست خوش تغییر می شود، حلالیت آنها به طرز چشمگیری بهبود می یابد [۳۳-۳۹].

مشتقات فسفات افزوده شده از ویتامین B<sub>2</sub>، فلاوین مونونوکلئوتید نامیده می شود که مولکول نسبتاً کوچکی است که قابلیت واکنش فیزیکی را با نانولوله های برن - نیتتریدی دارا هستند. بر اساس

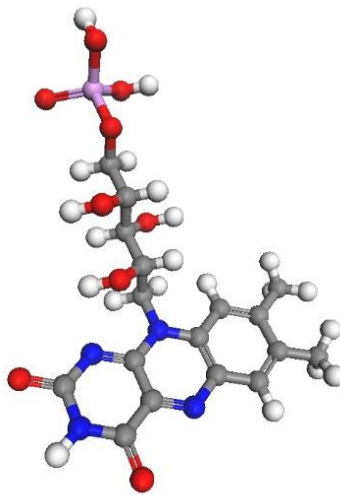
پیشنهاد یک همانند غیر آلی (معدنی) از نانولوله های کربنی یعنی نانولوله های برن - نیتترید [۱۰۲] با خواص منحصر بفرد مانند شکاف باند گسترده و خواص ترمومکانیکی بالا همراه با ثبات شیمیایی [۳-۹] نشان می دهد که نانولوله های برن - نیتتریدی می توانند به عنوان جایگزینی برای نانولوله های کربنی [۱۰-۱۲] در سیستم های نانوالکترومکانیکی که ناشی از برخی خواص قابل مقایسه با نوع کربنی است مورد استفاده قرار گیرند [۱۳-۱۷]. اگرچه این خصوصیات منحصر به فرد با توجه به عدم سمیت سلولی، آنها را برای کاربردهای نانوبیوتکنولوژی [۱۸ و ۱۹] کارآمدتر می کند، خنثی بودن به لحاظ شیمیایی و عدم حلالیت آنها در حلال های مختلف کاربردهای بالقوه

\* نویسنده عهده دار مکاتبات: sajori@maragheh.ac.ir

1 Functionalization

حقوق مؤلفین به نویسندگان و حقوق ناشر به انتشارات دانشگاه امیرکبیر داده شده است. این مقاله تحت لایسنس آفرینندگی مردمی (Creative Commons License) در دسترس شما قرار گرفته است. برای جزئیات این لایسنس، از آدرس <https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode> دیدن فرمائید.





شکل ۱. ساختار مولکولی فلاوین مونوکلوئوتید

Fig. 1. Molecular structure of FMN

نانولوله‌های برن-نیتریدی تعیین شده و تغییر فرکانس تحت جذب درصدهای مختلف وزنی از فلاوین مونو نوکلئوتید محاسبه می‌شود. همچنین، تاثیرات شرایط مرزی مختلف، شعاع و تعداد جداره‌های نانولوله‌ها در فرکانس طبیعی و تغییر آن مورد بررسی قرار می‌گیرد. علاوه بر این، اثر محیط‌های مختلف شبیه‌سازی مانند خلا و محیط سیال آبی که عموماً نانولوله‌های عامل‌دار شده در آن قرار می‌گیرند، مطالعه گردیده‌اند.

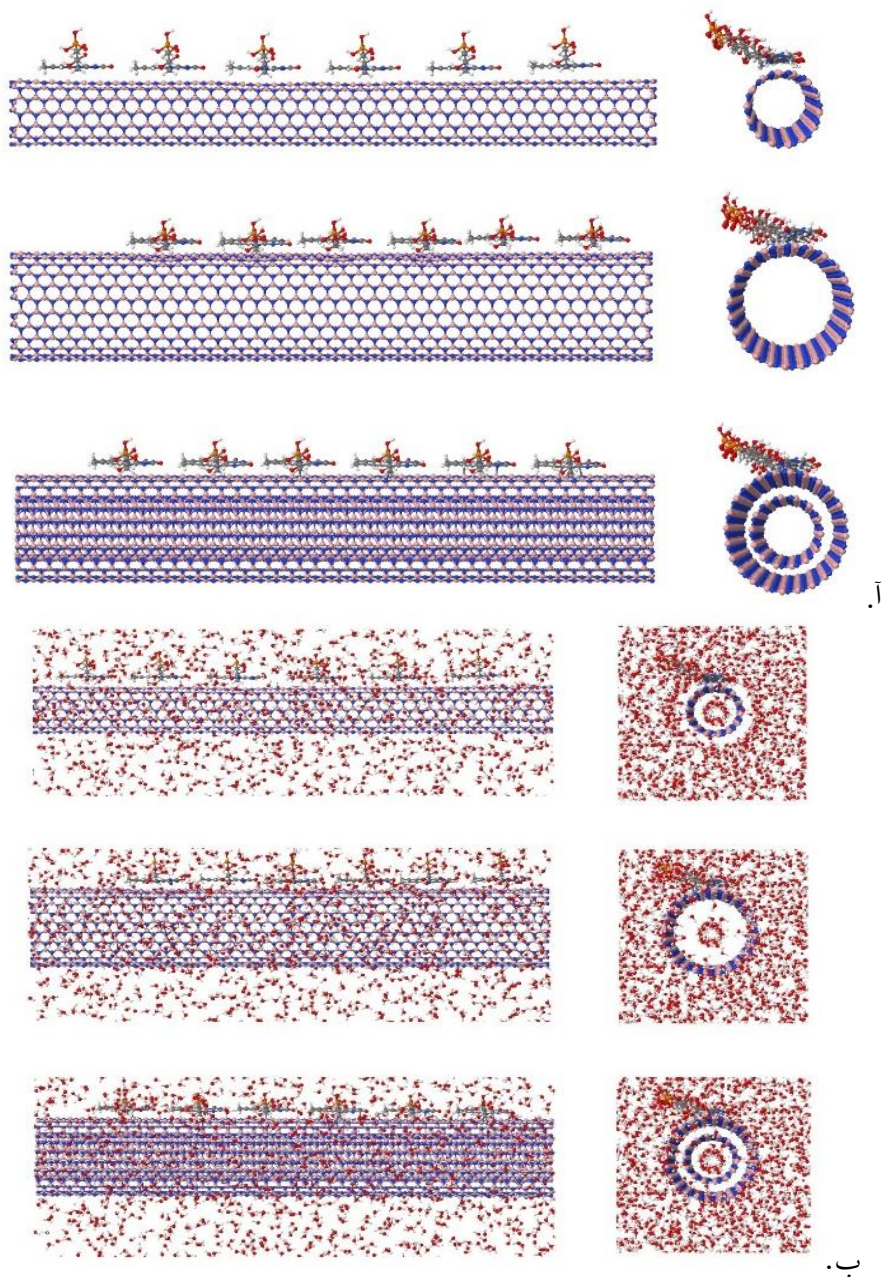
## ۲. روش شبیه‌سازی و مدل

### ۲-۱- جزئیات شبیه‌سازی

با بکارگرفتن پکیج لمپس، همه‌ی شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی در این مطالعه انجام می‌شود [۴۴]. بر این اساس، به منظور محاسبه‌ی نیرو و انرژی بین ذرات از میدان نیرویی امبر [۴۶-۴۵] که در مقیاس تغییر شکل‌های کوچک و الاستیک که شامل شکستن و ایجاد پیوند نمی‌شوند، توصیف دقیقی از مولکول‌های غیرآلی ارائه می‌دهند، استفاده شده است. به منظور انتگرال‌گیری از معادلات حرکت از الگوریتم سرعت-ورلت استفاده شده است که با ترکیب ترموستات نوز-هوور، شبیه‌سازی‌ها با توجه به ثابت‌بودن ابعاد سلول شبیه‌سازی در هنگام کانونی که در آن حجم، دما و تعداد اتم‌های سیستم ثابت در نظر گرفته می‌شود، انجام شده است. تمامی شبیه‌سازی‌ها با گام

نتایج آزمایشگاهی، نانولوله‌های برن-نیتریدی تحت جذب فیزیکی مولکول‌های فلاوین مونو نوکلئوتید می‌توانند فلئورسنت سبز پایدار را در طیف‌های گسترده‌ای از شرایط محیطی منتشر کنند که باعث می‌شود که قابلیت کاربردی قابل توجهی در نانوشان‌گرها و نانوحسگرهای بیولوژیکی داشته باشند [۴۰ و ۴۱].

مطالعه‌هایی بر روی خواص و رفتار مکانیکی اعم از کمانش، کشش و ارتعاشات نانولوله‌های کربنی خالص و تحت جذب فیزیکی و شیمیایی صورت گرفته است [۲۴-۲۰، ۴۲ و ۴۳] که با در نظر گرفتن هدف کاربرد در نانوکامپوزیت‌ها و رفع سمومیت در سیستم‌های بیولوژیکی، اساساً متفاوت از کاربرد ساختارهای دیگر به خصوص نانولوله‌های زیست‌سازگار برن-نیتریدی می‌باشد. از این رو، با توجه به اینکه مطالعه‌ی رفتار مکانیکی از جمله رفتار ارتعاشی و فرکانس طبیعی ساختارها در طراحی و تحلیل هر سیستم نانوالکترومکانیکی مانند نانوحسگرها از اهمیت بالایی برخوردار است، در این مطالعه به بررسی رفتار ارتعاشی نانولوله‌های برن-نیتریدی تک و دوجداره تحت جذب فیزیکی فلاوین مونو نوکلئوتید پرداخته می‌شود که بر اساس مطالعات پیشین ذکر شده خواص منحصر به فردی به عنوان نانوشان‌گر و نانوحسگر فلاوین مونو نوکلئوتید از خود نشان می‌دهد و تاکنون مطالعه‌ای در این زمینه بر روی نانولوله‌های برن-نیتریدی صورت نگرفته است. به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، فرکانس طبیعی



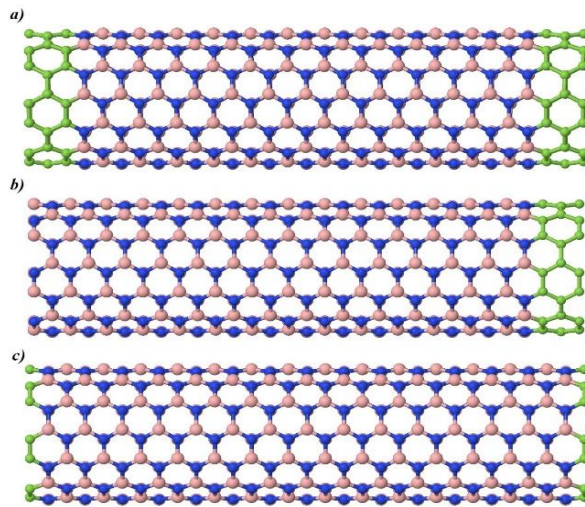
شکل ۲. شماتیک اولیه‌ی مدل‌های شبیه‌سازی (آ) در خلا و (ب) در محیط سیال آبی

Fig. 2. Schematic of initial configuration for simulation models a) in vacuum, b) in aqueous environment

تبادل خود در دمای ۳۰۰ کلوین برسد. سپس نانولوله‌ها با تغییر شکل اولیه، آزادانه ارتعاش می‌کنند. بر اساس مطالعات پیشین لازم به ذکر است که اساساً نانولوله‌ها در حالت عادی در مود اولیه‌ی خود در حال ارتعاش می‌باشند. سپس، در طول شبیه‌سازی، مختصات مرکز جرم نانولوله‌ها بر حسب زمان ذخیره شده و در نهایت فرکانس طبیعی

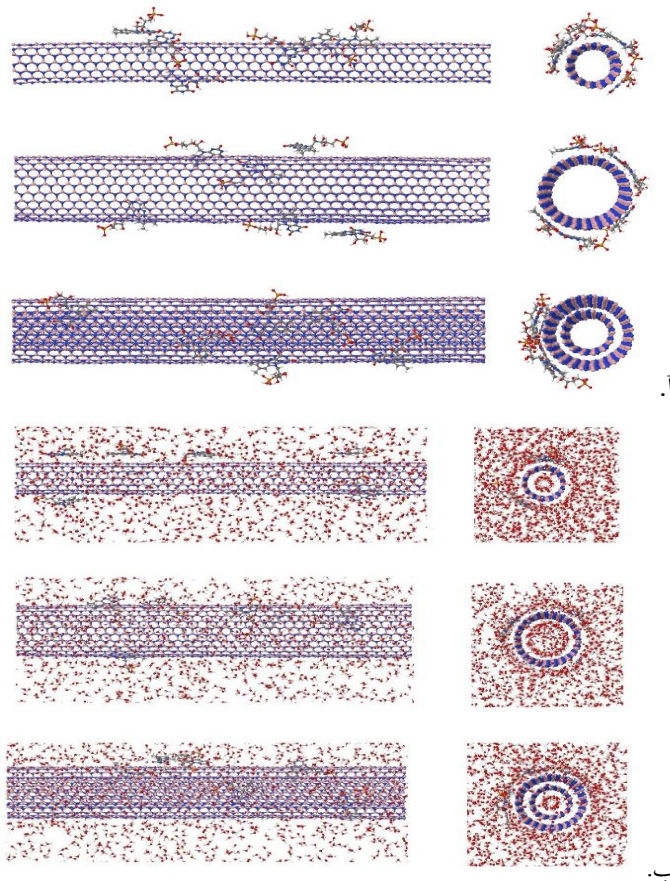
زمانی ۱ فمتو ثانیه در دمای محیط (۳۰۰ کلوین) صورت گرفته است [۴۷-۴۹]. لازم به ذکر است که روابط حاکم بر پتانسیل امبر و ترموستات نوز- هوور در مرجع [۴۲] با جزییات آورده شده است. به منظور مطالعه‌ی رفتار ارتعاشی سیستم، پس از کمینه‌سازی اولیه‌ی انرژی، کل سیستم به مدت ۵۰۰ پیکوثانیه آرام می‌شود تا به حالت





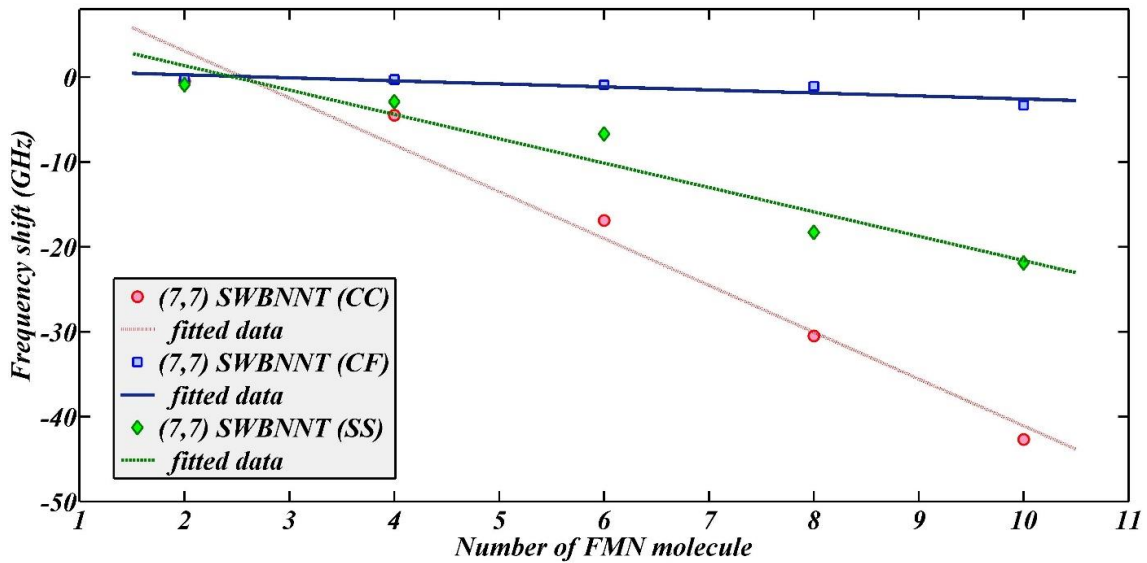
شکل ۳. شرایط مرزی (آ) کاملاً گیردار، (ب) گیردار - آزاد و (ج) کاملاً ساده

Fig. 3. Boundary conditions, a) CC, b) CF and c) SS



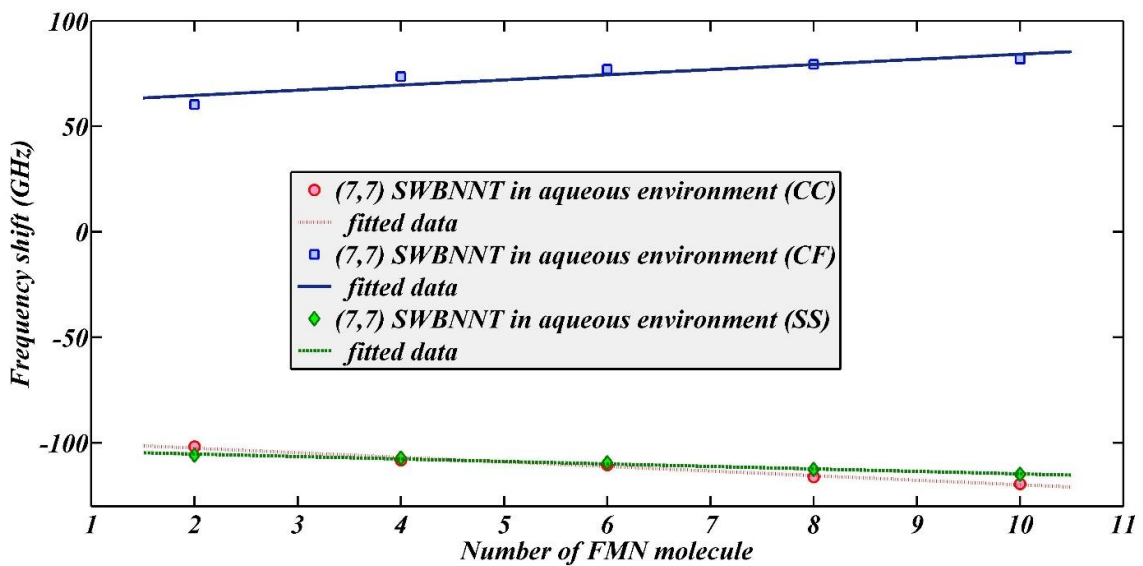
شکل ۴. نمونه ساختار نهایی نانولوله‌ی تحت جذب (آ) در خلأ، (ب) در محیط سیال آبی

Fig. 4. Samples of final structure of NTs under adsorption, a) in vacuum, b) in aqueous environment



شکل ۵. تغییر فرکانس نانولوله‌ی تک جداره عامل‌دار شده با مولکول فلاوین مونو نوکلئوتید

Fig. 5. Frequency shift of functionalized SWNTs with FMN molecule



شکل ۶. تغییر فرکانس نانولوله‌ی تک جداره عامل‌دار شده با مولکول فلاوین مونو نوکلئوتید در محیط سیال آبی

Fig. 6. Frequency shift of functionalized SWNTs with FMN molecule in aqueous environment

برن- نیتريدی تک جداره یعنی (۷,۷) و (۱۲,۱۲) و یک نانولوله‌ی دوجداره‌ی (۱۲,۱۲) و (۷,۷) با طول تقریبی ۱۱۰ آنگستروم انتخاب شده‌اند.

در ادامه، همان‌طور که در شکل ۲ نشان داده شده است، مولکول‌های فلاوین مونوکلوئوتید در نزدیکی جداره نانولوله‌های برن-

سیستم با کمک تبدیل فوریه‌ی سریع بدست می‌آیند [۹ و ۵۰].

## ۲-۲- مدل شبیه‌سازی

ساختار مولکولی مولکول فلاوین مونو نوکلئوتید در شکل ۱ نشان داده شده است. به منظور اجرای شبیه‌سازی‌ها، دو نانولوله‌ی

نیتزیدی در محیط خلا و سیال آبی با چگالی تقریبی یک گرم بر سانتی متر مکعب قرار می‌گیرند [۴۳].

لازم به ذکر است که سه شرط مرزی مختلف و مهم در مکانیک یعنی کاملاً گیردار (CC)، کاملاً ساده (SS) و گیردار-آزاد (CF) در نظر گرفته شده که در شکل ۳ با رنگ سبز نشان داده شده‌اند.

با در نظر گرفتن نانولوله‌های برن-نیتزیدی (۷و۷)، (۱۲و۱۲) و (۱۲و۱۲) و (۷و۷)، هر مولکول فلاوین مونو نوکلئوتید، به ترتیب دارای درصد وزنی ۳/۵٪، ۲٪ و ۱/۵٪ است. پس از کمینه‌سازی انرژی و آرامش اولیه سیستم، مولکول‌های فلاوین مونو نوکلئوتید بر روی دیواره‌ی نانولوله‌های برن-نیتزیدی بر اثر اندرکنش وان‌دروالسی و پیوند پی جذب می‌شوند که نمونه‌ای از ساختارهای به آرامش رسیده در شکل ۴ ارائه گردیده‌اند. لازم به ذکر است مطالعه در مورد نحوه‌ی جذب فیزیکی و پارامترهای مهم در این مبحث در مطالعه‌ی پیشین آورده شده است [۴۳]. در نهایت، از ساختارهای نهایی بدست‌آمده به منظور مطالعه‌ی رفتار ارتعاشی و محاسبه‌ی فرکانس طبیعی استفاده گردیده است.

### ۳- نتایج و بحث

#### ۳-۱- تاثیر شرایط مرزی

به منظور مطالعه تاثیر شرایط مرزی بر فرکانس طبیعی نانولوله‌های برن-نیتزیدی عامل‌دار شده، نانولوله‌ی برن-نیتزیدی تک جداره (۷،۷) انتخاب شده است. با در نظر گرفتن نانولوله‌ی برن-نیتزیدی تک جداره خالص (۷،۷) با شرایط مرزی گیردار، ساده و گیردار-ساده در خلا، فرکانس‌های طبیعی به ترتیب ۱۵۰، ۱۴۰ و ۴۰ گیگاهرتز بدست می‌آیند که با مطالعه‌ی پیشین همخوانی دارد [۹] و نشانگر عملکرد قابل قبول میدان نیرویی امبر در توصیف رفتار ارتعاشی نانولوله‌ها می‌باشد. لازم به ذکر است که مرجع [۹] با استفاده از پتانسیل چند-جسمی بر پایه‌ی ترسف، فرکانس طبیعی نانولوله‌های برن-نیتزیدی را در حالت گیردار در ابعاد مشابه با کار حاضر، در حدود ۱۶۰ گیگاهرتز محاسبه کرده است که با در نظر گرفتن این موضوع که پتانسیل امبر در مطالعه‌ی خواص و رفتار مکانیکی نسبت به پتانسیل‌های چند-جسمی بر پایه‌ی ترسف، مقادیر مرتبط را اندکی کوچک‌تر پیش‌بینی می‌کند [۲۱، ۲۳، ۴۲، ۴۳]، مقدار بدست‌آمده در کار حاضر قابل توجیه می‌باشد. بر همین اساس،

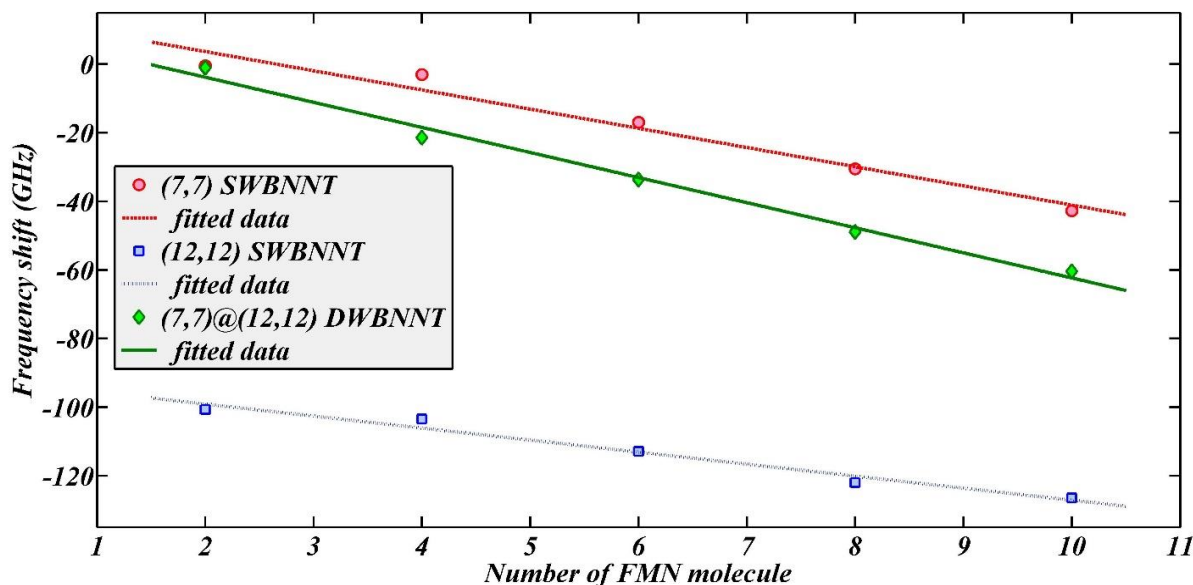
به دلیل اختلاف موجود بین مقادیر محاسبه‌شده در مورد به کارگیری پتانسیل‌های مختلف که ناشی از تقریب‌ها و توابع تعریف‌شده‌ی آن‌ها در توصیف پیوندهای اتمی می‌باشد، در مطالعه و نمودارهای این مقاله، تغییرات فرکانس مورد بررسی قرار گرفته که تا حد امکان این مورد پوشش داده شود.

نتایج در مورد نانولوله‌های برن-نیتزیدی عامل‌دار شده نشان می‌دهد که با افزایش تعداد و درصد وزنی مولکول‌های فلاوین مونو نوکلئوتیدی، فرکانس طبیعی نانولوله‌های برن-نیتزیدی با جذب این مولکول‌ها در جداره‌ی خارجی آن کاهش می‌یابد. شکل ۵ تغییر فرکانس طبیعی نانولوله‌های برن-نیتزیدی عامل‌دار شده‌ی (۷،۷) را با شرایط مرزی متفاوت در خلا نشان می‌دهد. ملاحظه می‌شود که کاهش فرکانس طبیعی در مورد نانولوله‌های برن-نیتزیدی با شرایط مرزی کاملاً گیردار برجسته‌تر است در حالی که تغییر فرکانس طبیعی برای نانولوله‌های تک جداره عامل‌دار شده با شرایط مرزی گیردار-آزاد ناچیز است.

همچنین، مشاهده می‌شود که با افزایش درصد وزنی فلاوین مونو نوکلئوتید میزان کاهش فرکانس طبیعی افزایش می‌یابد. به عنوان مثال، فرکانس طبیعی نانولوله‌های برن-نیتزیدی عامل‌دار شده با ۱۰ مولکول فلاوین مونو نوکلئوتید جذب شده تقریباً ۲۸٪، ۱۵٪، ۲٪ برای شرایط مرزی کاملاً گیردار، کاملاً ساده و گیردار-آزاد کاهش می‌یابد.

محاسبات فرکانس طبیعی نانولوله‌های برن-نیتزیدی عامل‌دار شده در محیط آبی با شرایط مرزی مختلف نشان می‌دهد که اندازه‌ی تغییر فرکانس طبیعی، بزرگتر از مقدار آن در خلا است که در شکل ۶ نشان داده شده است.

لازم به ذکر است که تمامی تغییرات فرکانس‌ها نسبت به نانولوله‌ی خالص بدون جذب فیزیکی و در خلا محاسبه شده‌اند. در شکل ۶ ملاحظه می‌گردد که بر خلاف شیب تغییر فرکانس با تعداد مولکول‌های جذب‌شده (درصد وزنی) در خلا، این شیب در محیط آبی بسیار کوچک‌تر می‌باشد و در واقع تغییرات فرکانس با افزایش مولکول‌های جذب‌شده تغییر چندانی نمی‌کند. این مورد را می‌توان به حضور مولکول‌های آب و نیروی اشباع نوسانی خارجی و فشار خارجی پیوسته از طریق نیروهای وان‌دروالسی نسبت داد. به عنوان مثال، برای حالت کاملاً گیردار و کاملاً ساده و در خلا، مقدار



شکل ۷. اثر شعاع و تعداد جداره نانولوله‌ی عامل‌دار شده با مولکول فلاوین مونو نوکلئوتید بر روی تغییر فرکانس در خلا

Fig. 7. Effect of radius and number of walls of functionalized NTs with FMN molecule on the Frequency shift in vacuum

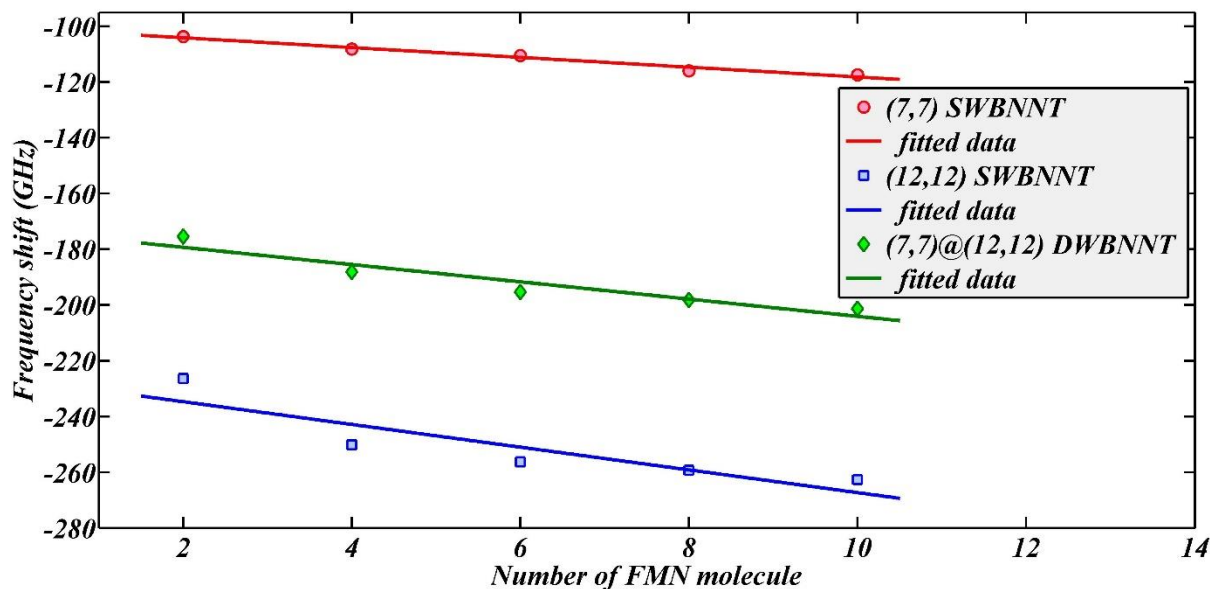
فلاوین مونونوکلئوتید در حضور مولکول‌های آب برای شرایط تکیه‌گاهی گیردار- آزاد نسبت به سایر شرایط تکیه‌گاهی بیشتر می‌باشد که با توضیحات پیشین نسبت به مثبت بودن تغییرات فرکانس و همچنین نیروی اشباع نوسانی وان‌دروالس قابل توجیه می‌باشد. به عنوان مثال، اندازه‌ی تغییرات فرکانس در حالت خلا برای شرط مرزی گیردار- آزاد با افزایش تعداد مولکول‌ها از ۲ به ۱۰ عدد در حدود ۴ برابر افزایش یافته که کمترین مقدار بین شرایط تکیه‌گاهی مختلف در خلا می‌باشد و این در حالیست که در حضور مولکول‌های آب این تغییرات ۱/۴ برابر می‌باشد که ضمن تایید بر کاهش نوسانات در مقابل جذب مولکول‌های بیشتر در محیط آبی نسبت به خلا، در مقایسه با سایر شرایط تکیه‌گاهی در محیط شبیه‌سازی آبی بیشترین مقدار خواهد بود.

### ۳-۲- تاثیر پارامترهای هندسی

برای مطالعه‌ی تاثیرات شعاع و تعداد جداره بر روی فرکانس طبیعی نانولوله‌های برن- نیتتریدی عامل‌دار شده، نانولوله‌های برن- نیتتریدی تک و دو جداره با شرایط مرزی کاملاً گیردار انتخاب شده است. طبق محاسبات، فرکانس طبیعی نانولوله‌های برن- نیتتریدی

تغییر فرکانس از مقدار ۴۴- و ۲۰- گیگاهرتز در حضور ۱۰ مولکول فلاوین مونونوکلئوتید به مقدار ۱۳۲- و ۱۲۵- گیگاهرتز در محیط آبی می‌رسد. همچنین، ملاحظه می‌شود که تغییرات کاهش فرکانس در محیط خلا بسیار شدیدتر از تغییرات آن در محیط آبی می‌باشد. به عنوان مثال، اندازه تغییر فرکانس برای نانولوله‌های برن- نیتتریدی عامل‌دار شده با ۱۰ مولکول فلاوین مونو نوکلئوتید در خلا ۴۷ برابر و ۲۴ برابر بزرگتر از تغییر فرکانس نانولوله‌های برن- نیتتریدی تحت جذب با دو مولکول فلاوین مونو نوکلئوتید برای شرایط مرزی کاملاً گیردار و کاملاً ساده است در حالی که در مورد شبیه‌سازی‌ها در محیط آبی این مقادیر به ترتیب ۱/۲ برابر و ۱/۱ برابر می‌باشد.

با در نظر گرفتن شرایط تکیه‌گاهی گیردار- آزاد، ملاحظه می‌شود که برای مقادیر محاسبه‌شده در شکل (۶)، تغییرات فرکانس بر خلاف سایر موارد مثبت می‌باشد. همانطور که در مرجع [۴۸] با جزییات کامل توضیح داده شده است این افزایش به مفهوم افزایش فرکانس اول طبیعی نبوده و وجود مولکول‌های آب و آزاد بودن یک انتهای نانولوله باعث القای ارتعاشات در شکل مودی بالاتر از شکل مود اول بوده، لذا تغییرات فرکانس مثبت بدست می‌آیند. همچنین بر خلاف حالت خلا، مقدار تغییرات فرکانس با افزایش تعداد مولکول‌های



شکل ۸. اثر شعاع و تعداد جداره نانولوله‌ی عامل‌دار شده با مولکول فلاوین مونو نوکلئوتید بر روی تغییر فرکانس در محیط آبی

Fig. 8. Effect of radius and number of walls of functionalized NTs with FMN molecule on the Frequency shift in aqueous environment

تک جداره‌ی (۱۲،۱۲) اندکی کوچکتر از نانولوله برن-نیتريدی تک جداره‌ی (۷،۷) و نانولوله‌های برن-نیتريدی دو جداره‌ی (۱۲،۱۲) و (۷،۷) است. ملاحظه می‌گردد که بیشترین تغییرات شیف فرکانسی با تعداد مولکولهای جذب‌شده، مربوط به نانولوله‌ی دو جداره و با مقدار تقریبی ۶۰ گیگاهرتز می‌باشد که مربوط با افزایش تعداد مولکولهای فلاوین مونونوکلئوتید از ۲ عدد به ۱۰ عدد است و این در حالیست که این تغییرات برای نانولوله‌ی تک جداره‌ی (۷،۷) و (۱۲،۱۲) تقریباً برابر با ۴۰ و ۲۵ گیگاهرتز می‌باشد.

انجام شبیه‌سازی‌ها در محیط آبی نشان می‌دهد که اندازه‌ی تغییر فرکانس طبیعی به طور قابل توجهی نسبت به حالت خلا افزایش می‌یابد درحالی‌که حساسیت تغییر فرکانس به تعداد مولکولهای فلاوین مونو نوکلئوتید (درصد وزنی) کاهش می‌یابد. مطابق با شکل ۸، مشاهده می‌گردد که تغییر فرکانس نانولوله‌های برن-نیتريدی دو جداره در آب بیشتر از خلا بوده و به نانولوله‌ی خارجی تک جداره‌ی تشکیل‌دهنده‌ی آن نزدیک‌تر می‌شود. به عنوان مثال تغییر فرکانس در مورد نانولوله‌های (۷،۷) و دو جداره حداقل ۴ برابر شده است که

تک جداره (۱۲،۱۲) و نانولوله‌های برن-نیتريدی دو جداره (۱۲،۱۲) و (۷،۷) به ترتیب ۳۲۷ گیگاهرتز و ۲۷۵ گیگاهرتز محاسبه شده‌اند که قابل مقایسه با مقادیر بدست آمده با پتانسیل چند-جسمی بر پایه‌ی ترسف می‌باشند [۹]. همان‌طور که در شکل (۷) مشاهده می‌گردد، با جذب فیزیکی مولکولهای فلاوین مونو نوکلئوتید بر روی نانولوله‌های برن-نیتريدی، فرکانس طبیعی نانولوله‌های برن-نیتريدی کاهش می‌یابد. بر این اساس، مشاهده شده که اندازه‌ی تغییر فرکانس نانولوله‌های دو جداره مابین اندازه‌ی تغییر فرکانس نانولوله‌های تشکیل‌دهنده داخلی و خارجی نانولوله‌های برن-نیتريدی دو جداره است. همچنین، مشاهده می‌شود که در خلا تغییر فرکانس نانولوله‌ی دو جداره به مقدار آن در نانولوله‌ی داخلی نزدیک‌تر بوده و در محدوده‌ی زیر ۶۰ گیگاهرتز قرار می‌گیرد. درحالی‌که تغییرات فرکانسی نانولوله‌ی تک جداره‌ی (۱۲،۱۲) بالاتر از ۱۰۰ هرتز می‌باشد که می‌تواند ناشی از نسبت ابعاد کوچکتر به ازای طول مشخص در مقایسه با نانولوله‌ی تک جداره‌ی (۷،۷) باشد. علاوه براین می‌توان مشاهده کرد که شیب تغییر فرکانس نانولوله‌های برن-نیتريدی



نانولوله های برن- نیتریدی تک جداره با شعاع کوچکتر ((۷،۷)) و نانولوله های برن- نیتریدی دو جداره شامل آنها ((۱۲،۱۲)) و ((۷،۷)) است. در این مطالعه نشان داده شد که این تغییرات فرکانس در خلا برای نانولوله های تک جداره ی ((۷،۷)) و دو جداره ی ((۱۲،۱۲)) و ((۷،۷)) در دامنه ی کمتر از ۶۰ گیگاهرتزی و برای نانولوله های تک جداره ی ((۱۲،۱۲)) در دامنه ی بالای ۱۰۰ گیگاهرتزی قرار دارد. همچنین، ملاحظه شد که حضور مولکول های آب منجر به کاهش بیشتر در فرکانس طبیعی می شود و این دامنه ی تغییرات فرکانس ذکر شده به ترتیب به ۲۰۰ گیگاهرتز و ۲۲۰ گیگاهرتز افزایش پیدا می کنند. در نهایت، مشاهده گردید که حساسیت فرکانس طبیعی به جذب درصدهای مختلف وزنی مولکول های فلاوین مونو نوکلئوتید با حضور مولکول های آب کاهش می یابد.

#### مراجع

- [1] A. Rubio, J. L. Corkill, M. L. Cohen, Theory of graphitic boron nitride nanotubes, *Physical Review B* 49 (1994) 5088-5081.
- [2] N.G. Chopra, R.L. Luyken, K. Cherrey, V.H. Crespi, M.L. Cohen, S.G. Louie, A. Zettl, Boron-nitride nanotubes, *Science* 269 (1995) 967-966.
- [3] R. Ansari, S. Ajori, Molecular dynamics study of the torsional vibration characteristics of boron-nitride nanotubes, *Physics Letters A* 378 (2014) 2880-2876.
- [4] S. Ajori, R. Ansari, Torsional buckling behavior of boron-nitride nanotubes using molecular dynamics simulations, *Current Applied Physics* 8(14) (2014) 1075-1072.
- [5] R. Arenal, X. Blase, A. Loiseau, Boron-Nitride and Boron Carbon Nitride Nanotubes: Synthesis, Characterization and Theory, *Advances in Physics* 59 (2010) 179-101.
- [6] P. Ayala, R. Arenal, A. Loiseau, A. Rubio, T. Pichler, The Physical and Chemical Properties of HeteroNanotubes, *Reviews of modern physics* 82 (2010) 1885-1843.
- [7] Y.K. Yap, B-C-N Nanotubes and Related Nanostructures, Springer Science & Business Media, Volume 6 (2009) 299-1.
- [8] X. Blase, A. Rubio, S.G. Louie, M.L. Cohen, Stability and Band Gap Constancy of Boron-Nitride Nanotubes, *Europhysics Letters* 28 (1994) 340-335.

در حضور ۱۰ مولکول فلاوین مونونوکلئوتید اتفاق می افتد و با کاهش تعداد مولکول های جذب شده این نسبت به صورت قابل توجهی افزایش می یابد و این تغییرات فرکانس زیر محدوده ی ۲۰۰ گیگاهرتزی قرار دارند. این در حالیست که در مورد نانولوله های تک جداره ی ((۱۲،۱۲)) با نسبت ابعادی کوچکتر با طول یکسان، این نسبت مقداری در حدود ۲ تا ۲/۵ برابر را داراست و تغییرات فرکانسی بالاتر از ۲۲۰ گیگاهرتز را شامل می شود. مقایسه ی تغییر فرکانس برای نانولوله های برن- نیتریدی در محیط های خلا و آبی نشان می دهد که حساسیت نانولوله های برن- نیتریدی دو جداره و نانولوله های برن- نیتریدی تک جداره با نسبت ابعاد بزرگتر در مواجهه با مولکول های فلاوین مونو نوکلئوتید به همراه آب به طور قابل توجهی نسبت به نانولوله های برن- نیتریدی تک جداره با نسبت ابعاد کوچکتر، بیشتر است.

#### ۴- نتیجه گیری

بر اساس شبیه سازی دینامیک مولکولی، ویژگی های ارتعاشی و فرکانس طبیعی نانولوله های برن- نیتریدی تک جداره و دو جداره ی عامل دار شده با مولکول فلاوین مونو نوکلئوتید مورد بررسی قرار گرفته و اثرات شرایط مرزی های مختلف، شعاع و تعداد جداره ها با در نظر گرفتن خلا و محیط های شبیه سازی آبی بر روی فرکانس طبیعی مطالعه شدند. طبق نتایج شبیه سازی، عامل دار سازی غیر کوآلانسسی (جذب فیزیکی) فرکانس طبیعی نانولوله های برن- نیتریدی را در حضور ۱۰ مولکول فلاوین مونو نوکلئوتید (۳۵ درصد وزنی) تقریباً ۲۸٪، ۱۵٪، ۲٪ برای شرایط مرزی کاملاً گیردار، کاملاً ساده و گیردار- آزاد کاهش می دهد. همچنین مشاهده شد که فرکانس طبیعی نانولوله های برن- نیتریدی با شرایط مرزی کاملاً گیردار و خلا به جذب مولکول فلاوین مونو نوکلئوتید نسبت به نانولوله های برن- نیتریدی با سایر شرایط مرزی و حضور سیال آب حساس تر است به گونه ای که تغییرات فرکانس در خلا ۴۷ برابر، ۲۴ برابر و ۴ برابر بزرگتر از تغییر فرکانس نانولوله های برن- نیتریدی تحت جذب با دو مولکول فلاوین مونو نوکلئوتید برای شرایط مرزی کاملاً گیردار، کاملاً ساده و گیردار- آزاد است در حالی که در مورد شبیه سازی ها در محیط آبی این مقادیر به ترتیب ۱/۲ برابر، ۱/۱ برابر و ۱/۴ برابر می باشند. علاوه بر این، ملاحظه گردید که با طول مشابه، تغییر فرکانس نانولوله های برن- نیتریدی تک جداره با شعاع بزرگتر ((۱۲،۱۲))، بزرگتر از تغییر فرکانس

- [19] X. Chen, P. Wu, M. Rousseas, D. Okawa, Z. Gartner, A. Zettl, C.R. Bertozzi, Boron nitride nanotubes are noncytotoxic and can be functionalized for interaction with protein and cells, *Journal of the American Chemical Society* 131 (2009) 89–890.
- [20] S. Ajori, R. Ansari, Vibrational characteristics of diethyltoluenediamines (DETDA) functionalized carbon nanotubes using molecular dynamics simulations, *Physica B*, 459 (2015) 61-58.
- [21] R. Ansari, S. Ajori, A. Ameri, Elastic and structural properties and buckling behavior of single-walled carbon nanotubes under chemical adsorption of atomic oxygen and hydroxyl, *Chemical Physics Letters* 617-616 (2014) 125-120.
- [22] S. Ajori, R. Ansari, and S. Haghighi, Small strain effect on the mechanical vibration behavior of cross-linked functionalized carbon nanotubes with polyethylene: A molecular-dynamics study, *EPL (Europhysics Letters)*, 4(125) (2019) 43001.
- [23] R. Ansari, S. Ajori, S. Rouhi, Structural and elastic properties and stability characteristics of oxygenated carbon nanotubes under physical adsorption of polymers' *Applied Surface Science*, 332 (2015): 647-640.
- [24] S. Ajori, R. Ansari, M. Darvizeh, Vibration characteristics of single- and double-walled carbon nanotubes functionalized with amide and amine groups, *Physica B* 462 (2015) 8.
- [25] J. Zhu, J.D. Kim, H. Peng, J.L. Margrave, V.N. Khabashesku, E.V. Barrera, Improving the dispersion and integration of single-walled carbon nanotubes in epoxy composites through functionalization, *Nano Letters* 8(3) (2003) 1113-1107.
- [26] C.M. Chang, Y.L. Liu, Functionalization of multi-walled carbon nanotubes with non-reactive polymers through an ozone-mediated process for the preparation of a wide range of high performance polymer/carbon nanotube composites, *Carbon* 4(48) (2010) 1297-1289.
- [27] J.M. Yuan, Z.F. Fan, X.H. Chen, X.H. Chen, Z.J. Wu, L.P. He, Preparation of polystyrene-multi walled carbon nanotube composites with individual-dispersed nanotubes
- [9] R. Ansari, S. Ajori, A molecular dynamics study on the vibration of carbon and boron nitride double-walled hybrid nanotubes, *Applied Physics A* 120 (2015) -1399 1406.
- [10] M.F.L. De Volder, S.H. Tawfick, R.H. Baughman, A.J. Hart, *Carbon Nanotubes: Present and Future Commercial Applications*, *Science* 339 (2013) 539-535.
- [11] M. Terrones, *Science and Technology of The Twenty-First Century: Synthesis, Properties, and Applications of Carbon Nanotubes*, *Annual review of materials research*, 33 (2003) 501-419.
- [12] S. Park, M. Vosguerichian, Z. Bao, A review of fabrication and applications of carbon nanotube film-based flexible electronics, *Nanoscale* 5 (2013) 1752-1727.
- [13] W.H. Moon, H.J. Hwang, Molecular-dynamics simulation of structure and thermal behaviour of boron nitride nanotubes, *Nanotechnology* 15 (2004) 434-431.
- [14] Q. Cheng, Y. Liu, G. Wang, H. Liu, M. Jin, and R. Li, Free vibration of a fluid-conveying nanotube constructed by carbon nanotube and boron nitride nanotube. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 109 (2019) 190-183.
- [15] J. Zhang, and C. Wang, Beat vibration of hybrid boron nitride-carbon nanotubes—A new avenue to atomic-scale mass sensing. *Computational Materials Science*, 127 (2017) 276-270.
- [16] T.D. Jorshari, M.A. Roudbari, D. Scerrato and A. Kouzani, Vibration suppression of a boron nitride nanotube under a moving nanoparticle using a classical optimal control procedure. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 6(31) (2019) 1842-1825.
- [17] H.M. Sedighi, and M. Malikan, Stress-driven nonlocal elasticity for nonlinear vibration characteristics of carbon/boron-nitride hetero-nanotube subject to magneto-thermal environment. *Physica Scripta*, 5(95) (2020) 055218.
- [18] C.Y. Zhi, Y. Bando, C.C. Tang, Q. Huang, D. Golberg, Boron nitride nanotubes: functionalization and composites, *Journal of Materials Chemistry* 18 (2008) 3908–3900.

- T. Hussain, Capacity enhancement of polyolithiated functionalized boron nitride nanotubes: an efficient hydrogen storage medium. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 27(22) (2020) 15682-15675.
- [37] S. Quiles-Díaz, Y. Martínez-Rubí, J. Guan, K.S. Kim, M. Couillard, H.J. Salavagione, M.A. Gómez-Fatou, and B. Simard, Enhanced thermal conductivity in polymer nanocomposites via covalent functionalization of boron nitride nanotubes with short polyethylene chains for heat-transfer applications. *ACS Applied Nano Materials*, 1(2) (2018) 451-440.
- [38] X. Wu, W. An, X.C. Zeng, Chemical functionalization of boron-nitride nanotubes with NH<sub>3</sub> and amino functional groups, *Journal of the American Chemical Society* 36(128) (2006) 12006-12001.
- [39] G. Gou, B. Pan, L. Shi, Noncovalent functionalization of BN nanotubes with perylene derivative molecules: an ab initio study, *ACS Nano* 3(4) (2010) 1320-1313
- [40] Zh. Gao, Ch. Zhi, Y. Bando, D. Golberg, T. Serizawa, Noncovalent Functionalization of Boron Nitride Nanotubes in Aqueous Media Opens Application Roads in Nanobiomedicine, *Nanobiomedicine*, 1 (2014) 7-1.
- [41] Z. Gao, C. Zhi, Y. Bando, D. Golberg, T. Serizawa, Noncovalent functionalization of disentangled boron nitride nanotubes with flavin mononucleotides for strong and stable visible-light emission in aqueous solution". *ACS applied materials & Interfaces*, 3 (2011) 627.
- [42] S. Ajori, R. Ansari Khalkhali, and M. Darvizeh, The structural properties and vibrational behavior of physisorbed carbon nanotubes with flavin mononucleotide biomolecule in water using molecular dynamics simulation. *Modares Mechanical Engineering*, 150-144 (2016) (1)16 (in Persian).
- [43] R. Ansari, S. Ajori, and A. Ameri, Stability characteristics and structural properties of single-and double-walled boron-nitride nanotubes under physical adsorption of Flavin mononucleotide (FMN) in aqueous environment using molecular dynamics simulations. *Applied Surface Science*, 244-233 (2016) 366.
- [44] S.J. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range and strong interfacial adhesion, *Polymer* 14(50) (2009) 3291-3285.
- [28] M. Ran, W. Sun, Y. Liu, W. Chu, C. Jiang, Functionalization of multi-walled carbon nanotubes using water-assisted chemical vapor deposition, *Journal of Solid State Chemistry* 197 (2013) 522-517.
- [29] I. Pełech, U. Narkiewicz, D. Moszynski, R. Pełech, Simultaneous purification and functionalization of carbonnanotubes using chlorination, *Journal of Materials Research* 27 (2012) 2375-2368.
- [30] I.V. Lara, I. Zanella, S.B. Fagan, Functionalization of carbon nanotube by carboxyl group under radial deformation, *Chemical Physics*, 428 (2014) 120-117.
- [31] H. Garate, A.D. Falco, M.S. Moreno, M.L. Fascio, S. Goyanes, N.B. D'Accorso, Influence of the electronic distribution of polymers in the spatial conformation of polymer grafted carbon nanotube composites, *Physica B*, 16(407) (2012) 3187-3184.
- [32] F.L. Liu, P. Xiao, H.L. Fang, H.F. Dai, L. Qiao, Y.H. Zhang, Single-walled carbon nanotube-based biosensors for the detection of volatile organic compounds of lung cancer, *Physica E* 2(44) (2011) 372-367.
- [33] K.K. Smith, N.D. Redeker, J.C. Rios, M.H. Mecklenburg, J.C. Marcischak, A.J. Guenther, and K.B. Ghiassi, Surface Modification and Functionalization of Boron Nitride Nanotubes via Condensation with Saturated and Unsaturated Alcohols for High Performance Polymer Composites. *ACS Applied Nano Materials*, 7(2) (2019) 4060-4053.
- [34] S.H. Kang, S.W. Jeon, S.Y. Moon, Y.J. Yoon, and T.H. Kim, Fabrication of Non-Covalently Functionalized Boron Nitride Nanotubes with High Stability and Water-Redispersibility. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 11 (2020) 4516-4511
- [35] C.K. Maity, S. Sahoo, K. Verma, A.K. Behera, and G.C. Nayak, Facile functionalization of boron nitride (BN) for the development of high-performance asymmetric supercapacitors. *New Journal of Chemistry*, 19(44) (2020) 8119-8106.
- [36] P. Panigrahi, A. Kumar, H. Bae, H. Lee, R. Ahuja, and

- Society, 19)117) (1995) 5197-5179.
- [47] C.L. Zhang, H.S. Shen, Predicting the elastic properties of double-walled carbon nanotubes by molecular dynamics simulation, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 41 (2008) 055404.
- [48] M.P. Allen, D.J. Tildesley, *Computer Simulation of liquids*, Oxford university press, 1986.
- [49] W.G. Hoover, Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions, *Physical review A* 31 (1985) -1695 1697.
- [50] R. Ansari, S. Ajori, and A. Ameri, On the vibrational characteristics of single-and double-walled carbon nanotubes containing ice nanotube in aqueous environment. *Applied Physics A*, 1)121) (2015) 232-223.
- molecular dynamics, *Journal of computational physics*, 117 (1995) 19-1.
- [45] C. Grindon, S. Harris, T. Evans, K. Novik, P. Coveney, C. Laughton, Large-scale molecular dynamics simulation of DNA: implementation and validation of the AMBER98 force field in LAMMPS, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 362 (2004) -1373 1386.
- [46] W.D. Cornell, P. Cieplak, C.I. Bayly, I.R. Gould, K.M.Jr. Merz, D.M. Ferguson, D.C. Spellmeyer, T. Fox, J.W. Caldwell, P.A. Kollman, A second generation force field for the simulation of proteins and nucleic acids and organic molecules. *Journal of the American Chemical*

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم

S. Ajori, Analyzing the effect of adsorption of Flavin Mononucleotide biomolecule on the natural frequency of biocompatible boron-nitride nanotubes, *AmirKabir J. Mech. Eng.*, 53(Special Issue 4) (2021) 2577-2588.

DOI: [10.22060/mej.2020.18014.6709](https://doi.org/10.22060/mej.2020.18014.6709)

