بسم الله الرحمن الرحيم

مبادئ تقنية النانو

دراسة مبنية على الجزيء في المنظومات الصغيرة للمادة المكثفة

تأليف

G. Ali Mansoori

ترجمة

الأستاذ الدكتور/ ماهر حمدي الصاحب
أستاذ
قسم الهندسة الميكانيكية – كلية الهندسة
جامعة الملك سعود

الدكتور/ مُحَمَّد إبراهيم الماجد
أستاذ مشارك
المشرف: البرنامج الوطني لتقنية الأقمار الاصطناعية
مدينة الملك عبد العزيز للعلوم والتقنية

دار جامعة الملك سعود للنشر
KING SAUD UNIVERSITY PRESS

ص.ب ٦٨٩٥٣ - الرياض ١١٥٣٧ المملكة العربية السعودية

ح دار جامعة الملك سعود للنشر، ١٤٤٠هـ (٢٠١٩م)

فهرسة مكتبة الملك فهد الوطنية أثناء النشر

المنصوري، جي علي.

مبادئ تقنية النانو : دراسة مبنية على الجزيء في المنظومات الصغيرة للمادة المكثفة . / جي علي المنصوري ؛ ماهر حمدي الصاحب ؛ مُحَمَّد إبراهيم الماجد - الرياض، ١٤٣٩هـ.

٣٨٦ ص؛ ١٧سم × ٢٤ سم

ردمك: ٩ - ٦٤٤ - ٥٠٧ - ٦٠٣ — ٩٧٨

١- تقنية النانو أ. الصاحب ، ماهر حمدي (مترجم) ب. الماجد ، مُحَمَّد ابراهيم (مترجم) ج. العنوان

ديوي ٦٢٠,٥ ١٤٣٩/٥٩٦٧

رقم الإيداع: ١٤٣٩/٥٩٦٧

ردمك: ٩ - ٦٤٤ - ٥٠٧ - ٦٠٣ — ٩٧٨

هذه ترجمة عربية محكمة صادرة عن مركز الترجمة بالجامعة لكتاب:

Principals of Nanotechnology
Molecular-Based Study of Condensed Matter in Small Systems
By G. Ali Mansoori
© 2005 byW0rld Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.
وقد وافق المجلس العلمي على نشرها في اجتماعه الرابع للعام ١٤٣٨/ ١٤٣٩هـ المعقود بتاريخ ١٠/ ٢/ ١٤٣٩هـ الموافق ٣٠/ ١٠/ ٢٠١٧م.

جميع حقوق النشر محفوظة. لا يسمح بإعادة نشر أي جزء من الكتاب بأي شكل وبأي وسيلة سواء كانت إلكترونية أو آلية بما في ذلك التصوير والتسجيل أو الإدخال في أي نظام حفظ معلومات أو استعادتها بدون الحصول على موافقة كتابية من دار جامعة الملك سعود للنشر.

دار جامعة الملك سعود للنشر
KING SAUD UNIVERSITY PRESS

مقدمة المترجمين

تم نقل هذا الكتاب " مبادئ تقنية النانو" تأليف جي. علي المنصوري إلى اللغة العربية ضمن برنامج تشجيع التعريب بجامعة الملك سعود من خلال مركز الترجمة بجامعة الملك سعود، وبالتعاون مع معهد الملك عبد الله لتقنية النانو . فقد دأب مركز الترجمة الجليل على تشجيع العلم وإثراء المكتبة العربية بما يستجد من علوم وآفاق المعرفة . ونود هنا أن نسجل شكرنا وتقديرنا للمركز والمعهد والقائمين عليهما لجهودهم المتميزة في دعمهم لحركة التعريب والترجمة، والموافقة الكريمة على قيامنا بنقل هذا العمل إلى اللغة العربية وتولي الجامعة مهمة طباعته ونشره .

يتناول كتاب " مبادئ تقنية النانو " موضوعاً حيوياً ذا أهمية عملية بالغة، بطريقة علمية وعملية شاملة وموضوعية، حيث قدم طريقة متفردة جديدة وفلسفة عميقة وعلمية في تناول موضوع تقنية النانو. ويعتبر هذا الكتاب من أهم المصادر في اللغة الإنجليزية والعربية في هذا المجال، حيث يجمع كافة المعلومات الخاصة بأساليب معالجة تقنية النانو بكيفية متميزة. ويمتاز كذلك بتفرده الملاحظ في مادته العلمية وشموليته وحسن تبويبه وسهولة أسلوبه في عرض المعلومات، مما يجعله حقاً من الكتب القيمة القليلة في هذا المجال الهام والمفيدة بصورة استثنائية وليفي باحتياجات المدرسين والمحاضرين والطلاب والمهندسين والباحثين. ويعتبر مرجعا قويا وموثوقا في متناول أي شخص يريد فهما للقضايا الرئيسة، وأفضل التطبيقات، وأحدث التطورات في مجال تقنية النانو.

يقع هذا الكتاب في أحد عشر فصلاً تتناول بالتحليل: تقنية النانو ومبادءها، وطرق إنتاج وسلوك مواد النانو و تطبيقاتها. تضمنت كذلك العديد من المواضيع الأساسية و التحليلات ودراسة الحالات المطبقة في الأساليب الهندسية في هذا المجال، وجاءت المواضيع الأساسية التي تمت مناقشتها كالتالي: الفصل الأول : التحسينات في تقنية النانو الذرية والجزئية تلى ذلك الفصل الثاني:

الذي يصف القوى والطاقات الكامنة البينية الجزيئية لمنظومات النانو ثم الفصل الثالث: الذي قدم الديناميكا الحرارية و الميكانيكا الإحصائية للأنظمة الصغيرة ، وتبع ذلك الفصل الرابع: موضحا طرق مونت كارلو لمحاكاة منظومات النانو، والفصل الخامس: حيث بين طرق محاكاة منظومات النانو في الديناميكا الجزيئية ، يعرض الفصل السادس طرق المحاكاة والأمثلية الحاسوبية لمنظومات النانو ، والفصل السابع: قدم شرحا لتحولات الطور في منظومات النانو ، وثم الفصل الثامن: الذي بين التجميع الموقعي للذرّاتِ والجزيئاتِ ، والفصل التاسع: ناقش التجميع الجزيئي الذاتي ، والفصل العاشر: الذي عرض موضوع الكيمياء التوليفية الاندماجية الدينامكية ، ثم جاء أخيرا الفصل الحادي عشر: وقد وثق وبين استخدامات كتل البناء الجزيئية – الديامونديويد. ولإتمام الفائدة وتعميق الفهم فقد تم إدراج قائمة بأهم المراجع في نهاية كل فصل.

وفي ترجمتنا لهذا الكتاب بذلنا جهداً خاصاً كي يأتي التعريب متطابقاً ومنسجماً مع النص الأصلي (الإنجليزي) وسلساً في الأسلوب وجزلاً في العبارات ومفهوما من القارئ . وقد التزمنا الدقة في النقل والأمانة العلمية وعدم الابتعاد ما أمكن عن النص الأصلي، إلا بما تقتضيه الضرورة اللغوية . ولقد حرصنا ما أمكن على استخدام المصطلحات الفنية و الالتزام بضوابط الترجمة والقواعد التي أعدها مركز الترجمة بجامعة الملك سعود، ووفق قرارات مجامع اللغة العربية وخصوصاً مجمع اللغة العربية بالقاهرة، وأوردنا كذلك العناوين باللغة الإنجليزية وذلك لإتمام الفائدة وإعانة القارئ للوقوف على المعنى بأسرع وقت ممكن .

وأخيراً نتوجه بالدعاء إلى الله العلي القدير بأن نكون قد وفقنا في ترجمة هذا الكتاب وأن نكون قد أسهمنا في إثراء المكتبة العربية بكتاب قيم يسد ثغرة صغيرة في هذا الصرح الشامخ، وأن يجد القارئ العربي الفائدة المرجوة من مادته . يعتبر اقتناء هذا الكتاب ضروريا لأي شخص يعمل حاليا في ميدان تقنية النانو، حيث إنه يمثل ثمرة قيمة لخبرات فريدة ومتميزة. ونرجو أن نكون قد أدينا بهذا العمل المتواضع بعضاً من واجبنا نحو الدارسين والباحثين والقراء ونحو اللغة العربية التي حملت ولا تزال راية الفكر والعلم ولواء التقدم و نور المعرفة التي أضاءت دروب الحضارات الإنسانية .

المترجمان

ماهر الصاحب ومحمد الماجد

المحتويات

مقدمة المترجمين ..... هـ

تمهيد ..... ز

الفصل الأول : التحسينات في تقنية النانو الذرية والجزئية

مقدمة ١

أهمية مقياس النانو ٣

الأسس الذرية والجزيئية لتقنية النانو ٥

بعض الاكتشافات والمخترعات الهامة الحديثة ١٠

مجهر النفق الماسح ١٠

مجهر القوة الذرية ١١

المجسمات الماسية " الديمندودات" ١٢

كرات بكي ١٤

أنابيب النانو الكربونية ١٥

السيكلودكسترنيات وليبوصم وأجسام مونوكلونال المضادة ١٧

الأبحاث الجارية ونشاطات التطوير ٢٠

المستقبل المرتقب لعلم النانو وتقنية النانو ٢

الاستنتاجات و المناقشة ٢٨

بعض أهم المواقع ذات العلاقة على شبكة الإنترنت ٢٩

المراجع ٣٠

الفصل الثاني: القوى والطاقات الكامنة البينية الجزيئية لمنظومات النانو

المقدمة ٣٣

التفاعلات التساهمية وغير التساهمية ٣٤
الطاقات الكامنة والقوى البينية الجزيئية والذرية ٣٦
التطوير التجريبي والنظري للطاقات الكامنة البينية الجسيمية ٤١
الخطوة الأولى (١): النمذجة التجريبية وقياس مجهرالقوى الذرية ٤٣
الخطوة (٢): نمذجة نظرية..... ٤٨
جعل الموجة المستوية المزيدة خطية ٤٨
جعل الموجة المستوية المزيدة كاملة الطاقة المحتملة خطية ٥٠
الخطوة (٣): تطوير الطاقات الكامنة المحتملة لجسيمات النانو ٥٢
إحتمالات الطاقات الكامنة الظاهرية البينية للذرات والجزيئات ٥٣
١- احتمالات الطاقات الكامنة البينية الذرية للمنظومات المعدنية..... ٥٥
١-١ طاقات احتمالات نموذج التضمين الذري المتعدد الأجسام..... ٥٦
١-٢ طاقات احتمالات فينيس و سنكلير متعددة الاجسام ٥٩
١-٣ طاقات احتمالات ستون و تشين متعددة الجسم و طويلة المدى ٦٢
١-٤ طاقات احتمالات موريل – موترام للجسم- المتعدد ٦٤
١-٥ طاقات احتمالات الجسم -المتعددة لرافي-تابار وستون لسبيكة طويلة المدى ٦٦
١-٦ طاقات احتمالات تعتمد على الزاوية..... ٦٨
٢- طاقات احتمالات بينية ذرية للمنظومات المترابطة – تساهميا..... ٦٩
٢-١ طاقات احتمالات تيرسوف للجسم المتعددة كربون-كربون ، و سليكون- سليكون، وكربون-سليكون ٦٩
٢-٢ الجيل الأول لطاقات احتمالات الهيدروكربونات نوع بيرنر-تيرسوف ٧١
٢-٣ الجيل الثاني لطاقات احتمالات الهيدروكربونات نوع بيرنر-تيرسوف ٧٣
٣- طاقات الاحتمال البينية الذرية لمنظومات الكربون-كربون الغير تساهمية..... ٧٥
٣-١ طاقات احتمالات لينارد – جونز وكيهارا..... ٧٥
٣-٢ طاقة الاحتمال الأسية-٦ ..... ٤٩
٣-٣ طاقة احتمال رؤوف-هيكمان..... ٧٧
٤- طاقات الاحتمال البينية الذرية لمنظومة المعدن- والكربون..... ٧٨
٥- مجال جهد الموقع – الذري ٧٩
الإستنتاجات والمناقشة ٨١

المراجع ٨٢

الفصل الثالث: الديناميكا الحرارية و الميكانيكا الإحصائية للأنظمة الصغيرة

مقدمة ٨٧
منظومات الديناميكا الحرارية في مقياس النانو ٩٠
الطاقة و الحرارة و الشغل في منظومات النانو ٩٣
قوانين الديناميكا الحرارية ٩٤
القانون الصفري ٩٧
القانون الأول ٩٨
القانون الثانى ١٠١
القانون الثالث ١٠٢
الميكانيكا الإحصائية للمنظومات الصغيرة ١٠٣
الديناميكا الحرارية و الميكانيكا الإحصائية لمنظومات النانو الغير شاملة ١٠٥
نظرية أويلر للدوال المتجانسة ١٠٧
صيغ بولتزمان و بولتزمان- جيبس للأنتروبي ١٠٨
صيغة تساليز للإنتروبي ١٠٩
الطاقم المايكرو كانونيكال (القانوني المجهري) للمنظومات غير الشمولية ١١٤
الطاقم الكانونيكال (القانوني) للمنظومات اللاشمولية ١١٥
الاستنتاجات والمناقشة ١١٧
المراجع ١١٨

الفصل الرابع: طرق مونت كارلو لمحاكاة منظومات النانو

مقدمة ١٢١
توليد الأعداد العشوائية ١٢٢
توليد أعداد عشوائية موزعة بانتظام في الفترة [0,1] ١٢٢
توليد أعداد عشوائية في الفترة [a,b] وفقا لدالة توزيع معلومة P(x) ١٢٤
أخذ العينات حسب الأهمية ١٢٤
طريقة تكامل مونت كارلو ١٢٧
التطبيق على منظومات النانو المكونة من جسيمات دقيقة قليلة العدد ١٣٠

ميكانيكا الاتزان الإحصائية وطريقة مونت كارلو ١٣٢
عملية ماركوف ١٣٢
اختيار دالة التحول ١٣٥
مثال ١٣٧
نسب القبول واختيار التحريكات ١٣٨
حيل فنية أخرى لتحسين سرعة المحاكاة ١٣٩
تطبيق طريقة مونت كارلو على مسائل عدم الاتزان ١٤١
معادلة لانجيفن ١٤٢
المنظومات المتفاعلة ١٤٥
استنتاجات ومناقشة ١٤٧
المراجع ١٤٨

الفصل الخامس: طرق محاكاة منظومات النانو في الديناميكا الجزيئية

مقدمة ١٤٩
مبادئ المحاكاة الديناميكية الجزيئية لمنظومات النانو ١٥١
تكامل معادلة نيوتن للحركة ١٥٤
١- طريقة فيرلت ١٥٥
٢- طريقة الضفدع الوثاب ١٥٦
٣- طريقة السرعة-فيرلت ١٥٦
٤- طريقة جير للتنبؤ والتصويب ١٥٨
اختيار الخطوة الزمنية ١٥٩
المحاكاة الديناميكية الجزيئية للمنظومات المتلامسة مع حمام حراري ١٥٩
١- ثيرموستات تقييس السرعة ١٦٠
٢- ثيرموستات المنظومة الموسعة لنوزيه وَ هوفر ١٦٠
٣- ثيرموستات لانجيفن ١٦٢
الحسابات الناتجة من المحاكاة الديناميكية الجزيئية ١٦٥
الاستنتاجات والمناقشة ١٦٦
المراجع ١٦٨

الفصل السادس: طرق المحاكاة والأمثلية الحاسوبية لمنظومات النانو

مقدمة ١٦٩
(أ) تصنيف طرق المحاكاة حسب الدقة وزمن الحاسوب ١٧٠
الطرق ذات الدقة القصوى (إشغال مكثف جدا لوحدة المعالجة المركزية ١٧٢
الطرق ذات ثاني أقصى دقة ١٧٢
الطرق شبه التجريبية ١٧٣
الطرق العشوائية ١٧٤
(ب) تصنيف الأمثليات في المحاكاة الجزيئية ١٧٥
طرق الأمثلية الموضعية ١٧٦
١- طريقة الهبوط ذي الانحدار الأعظم ١٧٦
٢- طريقة الديناميكا النيوتونية المهمدة ١٧٧
٣- طريقة المنحدرات المترافقة ١٧٧
٤- الطرق شبه النيوتونية ١٧٨
طرق الأمثلية الشاملة ١٨٠
١- طريقة التلدين المحاكى ١٨١
٢- الخوارزمية الجينية ١٨٦
استنتاجات ومناقشة ١٨٧
المراجع ١٨٩

الفصل السابع: تحولات الطور في منظومات النانو

مقدمة ١٩١
قاعدة طور جيبس ١٩٣
تحولات الطور ١٩٥
مقارنة تحولات الطور بين المنظومات الصغيرة والكبيرة ١٩٨
التشظي ٢٠٣
مشاهدات عملية لتحولات الطور في المنظومات الصغيرة ٢٠٤
١- تبخر الماء في أنبوبة نانونية محكمة السد ٢٠٤
٢- تكوين المذيلات والمذيلات المرافقة ٢٠٦
٣- مثال على التبلّر ٢٠٩

استنتاجات ومناقشة ٢١١
المراجع ٢١٣

الفصل الثامن: التجميع الموقعي للذرّاتِ والجزيئاتِ

مقدمة ٢١٥
التجميع الموقعي (أَو الألي) ٢١٦
مجس المسح المجهري ٢٢١
١- منعم الطبغرافية ٢٢٢
٢- التأثير الكمي الميكانيكي لعبور النفق ٢٢٣
٣- ظاهرة الدفع الإلكتروني ٢٢٤
٤- مجهر المسح النفقي ٢٢٥
٥- حلقة التغذية الخلفية للإلكترونياتِ ٢٢٦
٦- مجهرِ القوةِ الذرّيِ ٢٢٧
تطبيقات STM للتجميع الموقعيِ مِنْ الجزيئاتِ ٢٢٨
الإستنتاجات والمُناقشة ٢٣١
المراجع ٢٣٢

الفصل التاسع: التجميع الجزيئي الذاتي

المقدمة ٢٣٣
العوامل الخمسة المسؤولة عن التجميع الذاتي ٢٣٤
١- دور كتلِ البناء الجزيئيةِ (MBBs) في التجميع الذاتي ٢٣٤
٢- دور التفاعلات بين الجزيئات في التجميع الذاتي ٢٣٥
٣- الإرجاعية ٢٣٦
٤- الحركة الجزيئية ٢٣٦
٥- بيئة الإجراء ٢٣٦
بَعْض أمثلةِ الجمعياتِ الذاتيةِ المسيطر عليهاِ ٢٣٦
(أ) التجميع الذاتي بإستخدام السطوح الصلبة - تقنيات التجميد ٢٣٦
(أ-١) إزدواج الصلةِ عن طريق الأجسام المضادة ٢٣٨
(أ-٢) إزدواج الصلة بواسطة نظام بيوتين – ستريبت افيدين ٢٣٨
(أ-٣) مركبات الأيون المعدني المجمد الحركة ٢٣٩

(أ-٤) التجميع الذاتي أحادي الطبقة ٢٤١
(أ-١-٤) الامتزاز (الامدصاص) الفيزيائي ٢٤١
(أ-٢-٤) الإدراج في محاليل كهربائية أو بوليمرات موصلة ٢٤١
(أ-٣-٤) الإدراج في التجمع الذاتي أحادي الطبقة ٢٤١
(أ-٤-٤) المرفقات غير موجهة الى التجمع الذاتي أحادي الطبقة ٢٤٢
(أ-٥-٤) المرفقات الموجهة الى التجمع الذاتي أحادي الطبقة ٢٤٢
(أ-٦-٤) مرفقات الموقع المحدد المباشر للذهب ٢٤٢
(أ-٥) الإنفعال الموجهه للتجميع الذاتي ٢٤٣
(أ-٦) التجميع الذاتي الموجهه لـDNA ٢٤٤
(أ-٧) التجميع الذاتي على أسطح السيليكون ٢٤٥
(ب) التجميع الذاتي في وسط مائع ٢٤٦
الاستنتاجات والمناقشة ٢٤٧
المراجع ٢٤٩

الفصل العاشر: الكيمياء التوليفية الاندماجية الديناميكية

المقدمة ٢٥١
المكتبة التوليفية الاندماجية الديناميكية ٢٥٤
التحديات والقيود في تصميم المكتبة الاندماجية الحيوية ٢٥٨
١- طبيعة مركبات وقوالب المكتبة الاندماجية الحيوية ٢٥٨
٢- أنواع التفاعلات فيما بين الجزئيات في المكتبة الاندماجية ٢٥٩
٣- الظروف الدينامية الحرارية ٢٦٠
٤- طرق تحليل المكتبة الاندماجية الحيوية ٢٦٠
التمييز الجزيئي ٢٦١
بعض الامثلة والتطبيقات للمكتبة الاندماجية الحيوية ٢٦٤
كيمياء الضيف والمضيف ٢٦٦
النتائج والمناقشة ٢٧١
المراجع ٢٧٣

الفصل الحادي عشر: كتل البناء الجزيئية – الدياموندويد

المقدمة ٢٧٥

كتل البناء الجزيئي ٢٧٦
الدايموندات ٢٨٣
بعض الخصائص الفيزيائية والكيميائية لجزيئات الدايموندويد ٢٨٣
تركيب الدايموندات ٢٨٨
الاستخدامات العامة للدايموندويد ٢٨٨
استخدام الدايموندات كـ (MBBs) ٢٨٩
استخدام الدايموندويد في توصيل الدواء و هدف الدواء ٢٩٢
التشكيل المباشر لـ DNA و هياكل النانو البروتينيه-ادمانتين ٢٩٥
الدايموندات لكيمياء المضيف-الضيف ٢٩٧
الإستنتاجات والمناقشة ٢٩٩
المراجع ٣٠١
الخاتمة **٣٠٣**
ثبت المصطلحات **٣٤٣**
أولاً: عربي - إنجليزي **٣٤٣**
ثانياً: إنجليزي – عربي **٣٦١**
كشاف الموضوعات **٣٧٩**