بسم الله الرحمن الرحيم

نمذجة وميكانيكا المواد القائمة على الكربون ذات البنية النانومترية

تأليف

Duangkamon Baowan, Barry J. Cox
Tamsyn A. Hilder, James M. Hill
Ngamta Thamwattana

ترجمة

د. منصور حسن الشهري

قسم الرياضيات - كلية العلوم

جامعة الملك سعود

دار جامعة الملك سعود للنشر
KING SAUD UNIVERSITY PRESS

ص.ب ٦٨٩٥٣ - الرياض ١١٥٣٧ المملكة العربية السعودية

ح دار جامعة الملك سعود للنشر، ١٤٤٣هـ (٢٠٢١م)

فهرسة مكتبة الملك فهد الوطنية أثناء النشر

باوان، دوانجكامون.

نمذجة وميكانيكا المواد القائمة على الكربون ذات البنية النانومترية / دوانجكامون باوان؛ منصور حسن الشهري - الرياض، ١٤٤٣هـ.

٤٧٧ ص؛ ١٧سم × ٢٤ سم

ردمك: ٠ - ٠١٢ - ٥١٠ - ٦٠٣ - ٩٧٨

١- تقنية النانو أ. الشهري، منصور حسن (مترجم) ب. ج. العنوان

ديوي ٥, ٦٢٠ ١٤٤٣/١٢٤٠

رقم الإيداع: ١٤٤٣/١٢٤٠

ردمك: ٠ - ٠١٢ - ٥١٠ - ٦٠٣ - ٩٧٨

هذه ترجمة عربية محكمة صادرة عن مركز الترجمة بالجامعة لكتاب:

Modelling and Mechanics of Carbon-based Nanostructured Materials
By: Duangkamon Baowan & Barry J. Cox & Tamsyn A. Hilder & James M. Hill & Ngamta Thamwattana
© Elsevier Inc 2017.
وقد وافق المجلس العلمي على نشرها في اجتماعه الثامن عشر للعام الدراسي ١٤٤٢هـ، المعقود بتاريخ ١٤/ ٩/ ١٤٤٢هـ، الموافق ٢٦/ ٤/ ٢٠٢١م.

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 المترجم

في الآونة الأخيرة أصبح علم النانو، وتقنيته من العلوم ذات الأهمية العالية؛ وذلك لماله من تطبيقات في مجالات عديدة منها المجال الطبي، والمجال الصناعي، وغيرها. وقد تم نشر العديد من الأبحاث، والكتب في هذا المجال بعدة لغات وخاصة الإنجليزية، ولكن لم تحظَ اللغة العربية سوى بعدد قليل جداً يهتم بدراسة تقنية النانو. وهذا شجعني لترجمة هذا الكتاب القيم والمهتم بتقديم النمذجة الرياضية في مجال تقنية النانو الذي يساعد على فهم أعمق لطرق استخدام النمذجة الرياضية، ويثري المكتبة العربية في هذا المجال.

يعتبر هذا الكتاب من الكتب القليلة في مجال النمذجة في علم النانو، كما يعد مرجعًا مهمًا للباحثين والطلاب المتخصصين في مجال النمذجة الرياضية لتقنية النانو حيث إنه يحتوي على الكثير من المعلومات، والأمثلة، والتمارين ذات العلاقة بتقنية النانو وعلومه، فهو يسهم في بناء أرضية علمية قوية في النمذجة الرياضية لتقنية النانو.

يضم الكتاب أحد عشر فصلاً، حيث تقدم الفصول الستة الأولى تمهيدًا ومقدمة للكتاب، وتركز على الأفكار الأساسية، وتقتصر على المواد التي ترتبط بالطلاب والباحثين في المراحل الأولى في مجال الرياضيات. كما تتناول الفصول الخمسة الأخيرة نفس الأفكار المقدمة في الفصول الستة الأولى، لكن لحالات وأشكال هندسية أكثر تعقيداً. يشتمل الكتاب على العديد من التمارين والأمثلة التي قام بصياغتها مجموعة من الباحثين المختصين في مجال النمذجة الرياضية لتقنية النانو.

وهنا يجب أن ننوه بأنه بالرغم من أهمية تقنية النانو؛ فإن عددًا قليلاً من الكتب باللغة العربية متوفر للقارئ والباحث في هذا المجال؛ لذلك يجب حث المهتمين في هذا المجال على التركيز في زيادة المعلومات والمراجع المتعلقة بتقنية النانو باللغة العربية. هذا الأمر سيكون عاملاً مساعدًا للطلاب والباحثين والمهتمين في مجال تقنية النانو.

مقدمة المؤلفين

تم تصميم هذا الكتاب لدعم المرحلتين الجامعية الثالثة والرابعة ذات العلاقة بالنمذجة الرياضية في مجال تقنية النانو. الكتاب قائم على توضيح طريقة استخدام الهندسة والميكانيكا الأولية جنبا إلى جنب مع النظريات الرياضية لبعض الدوال الخاصة لصياغة نماذج رياضية في سياق الفيزياء النظرية التي تم تحليلها ومقارنتها من خلال الإجراءات الحسابية مثل المحاكاة الديناميكة الجزيئية.

إن المحتوى الأساسي للكتاب يعتمد على استخدام فرضية الاستمرارية لكثافة السطح الذري، بحيث يتم استبدال رمزي المجموع بتكاملات السطح الثنائي التي تحتوي على دوال الطاقة الذرية $\Phi(\rho) = -A\rho^{-n}$. في أغلب الحالات يمكن إيجاد حل هذه التكاملات تحليلياً، وعلى العموم فحل هذه التكاملات ليس بالبديهي أو السهل. على سبيل المثال، ففي حالة الكهرباء الساكنة أو طاقة الجاذبية لنيوتن $\Phi(\rho) = -A\rho^{-1}$؛ ويقول السيد جيمس جينز في الصفحة ٣٣ من "النظرية الرياضية للكهرباء والمغناطيس؛ سيكتشف الطالب أنه ليس من السهل إيجاد حل للتكاملات بشكل مباشر، حتى في بعض حالات التكامل البسيطة". المنظور الرياضي لهذا الكتاب يكمن في حل الكثير من التكاملات باستخدام الدوال الفوق هندسية (hypergeometric functions)، مثل:

$$F(\alpha, \beta;\ \gamma\ ;\ z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\beta)\Gamma(\gamma-\beta)} \int_0^1 \frac{t^{\beta-1}(1-t)^{\gamma-\beta-1}}{(1-t)^{\alpha}}\, dt,$$

التي تكون صالحة في حالة $Re(\gamma) > Re(\beta) > 0$، حيث Γ هي دالة جاما؛ كذلك هناك نتائج مماثلة لدوال أبل الفوق هندسية (Appell hypergeometric functions).

هذه الصيغ مهمة لسببين أولاً: تساعد هذه الصيغ في حل التكامل باستخدام الدوال الخاصة المعروفة، مثل كثيرة حدود ليجندر، ثانياً: يمكن إيجاد الحلول العديدة بسهولة للدوال الفوق هندسية من خلال حزم جبرية مثل الميبل (MAPLE) والماتلاب (MATLAB). سنلاحظ في هذا الكتاب، أنه سوف يتم اعتماد هذه الحزم البرمجية بشكل متكرر لإيجاد الحلول العددية للتكاملات. بشكل خاص في الحالات التي يكون فيها الحل العددي مطلوباً بحيث يكون إيجاده بحاجة لوقت طويل؛ ونعلق هنا أن هذه الأساليب قد تكون أكثر فاعلية من طرق أخرى مثل محاكاة الديناميكيا الجزيئية. نعلق كذلك على أن العديد من التكاملات الناشئة عن الدالة الفوق هندسية، أو دالة أبل الفوق هندسية يمكن أيضاً تقيمها باستخدام الدوال الناقصية. هذه التفاصيل ليست مدرجة في الكتاب؛ ننصح القارئ المهتم الرجوع إلى المنشورات الأصلية المذكورة في المراجع.

تعطي الفصول الستة الأولى تمهيدًا ومقدمة للكتاب بحيث تركز على الأفكار الأساسية، وتقتصر على المواد التي ترتبط بطلاب الرياضيات في عامهم الثالث الجامعي بالنسبة للجامعات الأسترالية. كما تتناول الفصول الخمسة الأخيرة نفس الأفكار المقدمة مسبقاً، لكن لحالات وأشكال هندسية أكثر تعقيداً من الحالات الواردة في الفصول الستة الأولى. يشتمل الكتاب على العديد من التمارين والأمثلة التي قام بصياغتها مجموعة العمل البحثي لتقنية النانو في جامعة ولونجونج بأستراليا. في الوقت الحالي هناك وفرة من المعلومات المتعلقة بتقنية النانو؛ ومع ذلك فالمعلومات المتعلقة بتقنية النانو المرتبطة بالآليات الفيزيائية أو البيولوجية قد تكون متوفرة لكن بشكل محدود، وهناك حاجة لزيادة هذه المعلومات في شكل نماذج بسيطة تلخص السلوك المعروف بشكل صحيح. نعتقد أن هذا الكتاب سوف يوضح للطالب كيفية استغلال الهندسة والميكانيكا والتحليل الرياضي للحصول على نماذج ذات معنى فيزيائي.

يعرب المؤلفون عن امتنانهم بشكل خاص للأستاذ كوانشوي تشنغ (Professor Quanshui Zheng) من قسم ميكانيكا الهندسة بجامعة تسينغهوا ببكين الذي ساعدت نصائحه المهمة في العمل البحثي الذي يقوم عليه هذا الكتاب.

المحتويات

مقدمة المترجم.....هـ

مقدمة المؤلفين.....ز

الفصل الأول: هندسة وميكانيكا الهياكل النانوكربونية

(١ , ١) نبذة..... ١

(١ , ٢)البنى النانوية الكربونية..... ٤

(١ , ٢ , ١) الجرافين وروابط الكربون–الكربون..... ٤

(٢ , ٢ , ١) الأنابيب النانوية الكربونية والنموذج الملتف..... ٧

(٣ , ٢ , ١) الفوليرينات متعددة السطوح (جولدبيرج) ١٧

(٤ , ٢ , ١) المخروطات ٢٤

(٥ , ٢ , ١) نظرية أويلر والخماسي المعزول ٢٩

(١ , ٣) التفاعل بين البنى الجزيئية.....٣٤

(١ , ٣ , ١) طاقة التفاعل ٣٤

(٢ , ٣ , ١) قوة التفاعل.....٣٨

(٣ , ٣ , ١) جهد لينارد– جونز ٣٨

(١ , ٤) لمحة عن الكتاب ٤٢

تمارين.....٤٣

الفصل الثاني: تمهيدات رياضية

(٢,١) مقدمة ٤٥
(٢,٢) دالة ديراك دلتا $\delta(x)$ ٤٥
(٢,٣) دالة هيفيساید $H(x)$ ٥٠
(٢,٤) دالة جاما $\Gamma(z)$ ٥١
(٢,٥) دالة بيتا $B(x,y)$ ٥٦
(٢,٦) الدالة الفوق هندسية $F(a,b;\ c;\ z)$ ٥٨
(٢,٦,١) المتسلسلات فوق الهندسية ٥٨
(٢,٦,٢) العلاقات بالدوال الأخرى ٥٩
(٢,٦,٣) المعادلات التفاضلية فوق الهندسية ٦١
(٢,٦,٤) العلاقات المتجاورة ٦٣
(٢,٦,٥) التبديلات التربيعية ٦٤
(٢,٦,٦) صيغ التكامل للدالة فوق الهندسية ٦٥
(٢,٧) دالة أبل فوق الهندسية $F_1(a;b;b';c;x;y)$ ٦٦
(٢,٨) دوال ليجندر المرتبطة $P_\upsilon^\mu(z)$ و $Q_\upsilon^\mu(z)$ ٦٧
(٢,٩) كثيرتي حدود شيبيشيف $Tn(x)$ و $Un(x)$ ٦٩
(٢,١٠) التكاملات الناقصية $F(\Phi,k)$ و $E(\Phi,k)$ ٧٠
تمارين ٧١

الفصل الثالث: تحديد مجالات جهد لينارد- جونز

(٣,١) مقدمة ٧٣
(٣,٢) تفاعل المكونات الخطية ٧٥
(٣,٢,١) تفاعل نقطة مع خط ٧٥
(٣,٢,٢) تفاعل نقطة مع مستوٍ ٧٨
(٣,٢,٣) التفاعل بين مستقيمين منحرفين ٧٩

(٤ , ٢ , ٣) التفاعل بين المستقيمات والمستويات المتوازية ٨٠
(٣ , ٣) تفاعل السطح الكروي ٨١
(١ , ٣ , ٣) نظام الإحداثيات الكروي ٨١
(٢ , ٣ , ٣) تفاعل نقطة مع كرة ٨٣
(١ , ٢ , ٣ , ٣) طريقة بديلة ٨٤
(٣ , ٣ , ٣) التفاعل بين مستقيم وسطح كروي ٨٥
(٤ , ٣ , ٣) التفاعل بين مستوٍ وسطح كروي ٨٩
(٥ , ٣ , ٣) تفاعل اثنين من السطوح الكروية متحدي المركز ٩١
(٦ , ٣ , ٣) التفاعل بين سطحين كرويين غير متحدي المركز ٩٢
(٤ , ٣) تفاعل السطح الأسطواني الشكل ٩٣
(١ , ٤ , ٣) نظام الإحداثيات الأسطوانية (r, θ, z) ٩٣
(٢ , ٤ , ٣) التفاعل بين نقطة داخلية وسطح أسطواني بطول لانهائي ٩٥
(٣ , ٤ , ٣) تفاعل نقطة خارجية مع سطح أسطواني بطول لانهائي ٩٧
(٤ , ٤ , ٣) التفاعل بين سطح كروي وسطح أسطواني ذا طول لانهائي ١٠٠
(٥ , ٤ , ٣) التفاعل بين الأسطح الأسطوانية المتوازية وبطول لانهائي ١٠٢
(٦ , ٤ , ٣) التفاعل بين نقطة تقع على المحور الأسطواني وسطح أسطواني محدود من جهة واحدة ١٠٤

الفصل الرابع: الأنابيب النانوية الكربونية المتداخلة

(١ , ٤) مقدمة ١٠٧
(٢ , ٤) ذرة@ فوليرين-فوليرين إيندوهيدرال ١٠٨
(٣ , ٤) الفوليرين@ الفوليرين – بصيلات الكربون ١١٣
(٤ , ٤) الفوليرين@ أنابيب الكربون النانوية ١١٨
(٥ , ٤) البصلة الكربونية@ أنابيب الكربون النانوية ١٢٤
(٦ , ٤) أنبوب نانوي كربوني @ أنبوب نانوي كربوني – أنبوب نانوي كربوني مزدوج الجدار . ١٢٨

(٤,٧) حزم الأنابيب النانوية ١٣٤
(١,٧,٤) طاقة التفاعل لاثنين من الأنابيب النانوية ١٣٦
(٢,٧,٤) موضع التوازن لحزمة من الأنابيب النانوية ١٣٨
(٤,٨) أنبوب نانوي كربوني@ حزمة أنابيب نانوية ١٤٠
(٤,٩) فوليرين@ حزمة أنابيب نانوية ١٤١
تمارين ١٤٤

الفصل الخامس: شروط القبول وطاقة الشفط

(٥,١) مقدمة ١٤٧
(١,١,٥) طاقة القبول ١٤٨
(٢,١,٥) طاقة الشفط ١٥٠
(٥,٢) فوليرين C_{60} داخل أنبوب نانوي كربوني ١٥١
(١,٢,٥) شروط القبول ١٥٢
(٢,٢,٥) طاقة الشفط ١٥٨
(٥,٣) الأنابيب النانوية الكربونية مزدوجة الجدران ١٦٠
(١,٣,٥) شروط القبول ١٦٠
(٢,٣,٥) طاقة الشفط ١٧١
(٥,٤) حزمة الأنابيب النانوية الكربونية ١٧٢
(١,٤,٥) شرط القبول ١٧٣
(٢,٤,٥) طاقة الشفط ١٧٩
تمارين ١٨٠

الفصل السادس: المذبذبات النانوية

(٦,١) مقدمة ١٨١

(٦,١,١) قانون نيوتن الثاني ١٨٢
(٦,١,٢) السلوك التذبذبي ١٨٣
(٦,٢) تذبذب جزيء الفوليرين C_{60} داخل الأنابيب النانوية الكربونية أحادية الجدار ١٨٤
(٦,٢,١) السلوك التذبذبي ١٨٤
(٦,٢,٢) قوة الاحتكاك ١٩٠
(٦,٣) التذبذب بالنسبة للأنابيب النانوية الكربونية مزدوجة الجدار ١٩٤
(٦,٣,١) طاقة التفاعل بالنسبة للأنابيب النانوية الكربونية مزدوجة الجدار ذات الطول المحدود ١٩٤
(٦,٣,٢) السلوك التذبذبي ١٩٩
(٦,٤) تذبذب الأنابيب النانوية في الحزم النانوية ٢٠٧
(٦,٤,١) طاقة التفاعل لأطوال محدودة من الأنابيب النانوية والحزم النانوية ٢٠٧
(٦,٤,٢) السلوك التذبذبي ٢١٠
تمارين ٢١٣

الفصل السابع: ميكانيكا البنى الأخرى الأكثر تعقيداً: النانوبيبود والفوليرين ذو السطح الكروي
(٧,١) مقدمة ٢١٥
(٧,٢) هياكل النانوبيبود ٢١٦
(٧,٢,١) تغليف جزيء فوليرين C_{60} بشكل مباشر في نهاية مفتوحة ٢١٨
(٧,٢,٢) تغليف جزيء فوليرين C_{60} حول حافة نهاية مفتوحة ٢٢١
(٧,٢,٣) تغليف جزيء فوليرين C_{60} من فتحة على جدار الأنبوب ٢٢٥
(٧,٢,٤) هياكل النانوبيبود المتعرجة التي تضم C_{60} $(2K + 1)$ جزيئاً ٢٣٠
(٧,٢,٥) هياكل النانوبيبود الحلزونية التي تضم K C_{60} جزيئاً ٢٣٦
(٧,٣) الفوليرين البيضوي (شبه الكروي) ٢٤٢

(٧,٣,١) طاقة التفاعل لفوليرين شبه كروي مع أنبوب نانوي كربوني أحادي الجدار وشبه لانهائي بالطول ٢٤٣
(٧,٣,٢) تفاعل الجزيئات شبه الكروية الموجودة على محور الأنابيب النانوية الكربونية أحادية الجدار ٢٥١
(٧,٣,٢,١) تفاعل جزيء الفوليرين C_{60} الكروي ٢٥٢
(٧,٣,٢,٢) تفاعل جزيئات الفوليرين شبه الكروية ٢٥٣
تمارين ٢٥٧

الفصل الثامن: الأنابيب النانوية كمركبات لتوصيل الأدوية

(٨,١) مقدمة ٢٥٩
(٨,٢) العمليات الرياضية الأساسية ٢٦٥
(٨,٢,١) الهجين بين طريقتي التقريب المستمر–والتفاعل المنفصل ٢٦٥
(٨,٢,٢) معلمات لينارد– جونز– قواعد الخلط ٢٧٣
(٨,٢,٣) التغليف ٢٧٣
(٨,٢,٤) الافتراضات ٢٧٤
(٨,٣) تغليف السيسبلاتين في الأنبوب النانوي الكربوني ٢٧٧
(٨,٣,١) سلوك التغليف ٢٨١
(٨,٤) مواد الأنابيب النانوية البديلة ٢٨٧
(٨,٤,١) سلوك التغليف ٢٩٤
تمارين ٢٩٨

الفصل التاسع: صيغة جديدة للمعلمات الهندسية للأنابيب النانوية الكربونية

(٩,١) مقدمة ٣٠١
(٩,٢) النموذج "الدائري" التقليدي ٣٠٢
(٩,٣) النموذج "متعدد السطوح" الجديد ٣٠٤

(١, ٣, ٩) المعلمات الهندسية المحددة ٣٠٤
(٢, ٣, ٩) الحدود الأساسية وحدود التصحيح ٣٠٥
(٤, ٩) تفاصيل النموذج متعدد السطوح ٣١٠
(١, ٤, ٩) الأنابيب النانوية الكربونية في النموذج متعدد السطوح ٣١٠
(٢, ٤, ٩) توجيه الأوجه المثلثية متساوية الأضلاع ٣١٢
(٣, ٤, ٩) ترتيب الأوجه الهرمية ٣١٤
(٥, ٩) النتائج ٣١٧
(٦, ٩) الخلاصة ٣٢١
تمارين ٣٢٢

الفصل العاشر: نهجان متميزان لربط هياكل الكربون النانوية

(١, ١٠) مقدمة ٣٢٣
(١, ١, ١٠) اختلاف طول الرابطة ٣٢٤
(٢, ١, ١٠) اختلاف الزاوية الرابطة ٣٢٥
(٢, ١٠) الحلقات النانوية (السوار النانوي) ٣٢٨
(١, ٢, ١٠) تشكيل الحلقات النانوية من اثنين من أنابيب الكربون النانوية المتميزة ٣٢٩
(٢, ٢, ١٠) النتائج والمناقشة ٢٣٥
(٣, ٢, ١٠) تشكل الحلقات النانوية من ثلاثة أنابيب نانوية متميزة من الكربون ٣٤٠
(٤, ٢, ١٠) النتائج والمناقشة ٣٤٧
(٣, ١٠) ضم الأنابيب النانوية الكربونية وصفائح الجرافين المسطحة ٣٥٠
(١, ٣, ١٠) اختلاف طول الرابطة ٣٥٢
(٢, ٣, ١٠) اختلاف الزاوية الرابطة ٣٥٣
(٣, ٣, ١٠) النتائج والمناقشة ٣٦١
(٤, ١٠) البرعم النانوي ٣٦٤
(١, ٤, ١٠) اختلاف طول الرابطة ٣٦٥

(٢, ٤, ١٠) اختلاف الزاوية الرابطة ٣٦٦
(٣, ٤, ١٠) النتائج والمناقشة ٣٦٦
تمارين..... ٣٦٨

الفصل الحادي عشر: طريقة الاستمرارية لربط البنى النانوية الكربونية

(١, ١١) مقدمة..... ٣٦٩
(٢, ١١) حساب التغير ٣٧٠
(٣, ١١) ربط الأنابيب النانوية الكربونية وصفائح الجرافين المسطحة ٣٧٢
(١, ٣, ١١) النموذج I: انحناء موجب..... ٣٧٥
(٢, ٣, ١١) النموذج II: الانحناء الموجب والسالب..... ٣٧٨
(٣, ٣, ١١) النتائج والمناقشة ٣٨٠
(٤, ١١) البراعم النانوية..... ٣٨٥
(١, ٤, ١١) النموذج الأول: الانحناء الإيجابي..... ٣٨٦
(٢, ٤, ١١) النموذج II: الانحناء الموجب والسالب..... ٣٨٨
(٣, ٤, ١١) النتائج والمناقشة ٣٩٠
(٥, ١١) الفول السوداني النانوي (نانوبينات)..... ٣٩٧
(١, ٥, ١١) النموذج I: المنحني الموجب ٤٠٠
(٢, ٥, ١١) النموذج II: المنحنيات الموجبة والسالبة ٤٠١
(٣, ٥, ١١) النتائج والمناقشة ٤٠٣
تمارين..... ٤٠٧

تلميحات للحلول **٤٠٩**
قائمة المراجع..... **٤٥٣**
ثبت المصطلحات: أولاً: عربي- إنجليزي **٤٥٧**
ثانياً: إنجليزي- عربي..... **٤٦٥**
كشاف الموضوعات **٤٧٣**