

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه تهران

نانو مهندسی در

علم و تکنولوژی

مقدمه‌ای بر دنیای نانوپراحی

مترجمان:

دکتر عبدالحسین فریدون

(استاد دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه تهران)

مهندس حسین همیان

(مدرس دانشگاه)

سرشناسه	ریث، میثائیل، ۱۹۶۳ - م. Rieth, Michael
عنوان و نام پدیدآور	نانومهندسی در علم و تکنولوژی (مقدمه‌ای بر دنیای نانو طراحی)؛ [مولف] میثائیل ریث؛ مترجمان عبدالحسین فریدون، حسین همتیان؛ ویراستار صفورا فدایی‌زاده.
مشخصات نشر	سمنان: دانشگاه سمنان، ۱۳۹۳.
مشخصات ظاهری	و. ۱۸۰ ص.
شابک	978-600-7065-48-8
وضعیت فهرست نویسی	فیا
یادداشت	یادداشت اصلی: Nano-engineering in science and technology : an introduction to the world of nano-design, 2003.
یادداشت	کتابنامه: ص. ۱۶۲. یادداشت: نمایه. موضوع: نانوتکنولوژی
موضوع	نانوساختارها. شناسه افزوده: فریدون، عبدالحسین، ۱۳۳۴ - مترجم
شناسه افزوده	همتیان، حسین، ۱۳۶۶ - مترجم
شناسه افزوده	فدایی‌زاده، صفورا، ۱۳۶۲ - ویراستار. شناسه افزوده: دانشگاه سمنان
شناسه افزوده	Semnan University. رده بندی کنگره: ۱۳۹۳ ۷/۹/۱۷۴: T
رده بندی دیویی	۶۲۰/۵: شماره کتابشناسی ملی: ۳۶۷۸۶۲۸



نانومهندسی در علم و تکنولوژی مقدمه‌ای بر دنیای نانوطراحی

مترجمان: دکتر عبدالحسین فریدون - مهندس حسین همتیان

نوبت چاپ: اول - زمستان ۱۳۹۳

ناشر: انتشارات دانشگاه سمنان

ویراستار: صفورا فدایی‌زاده

طرح جلد: اسماعیل شجاعی

شمارگان: ۳۰۰ جلد

قیمت: ۱۵۰۰۰۰ ریال

ISBN: 978-600-7065-48-8

شابک: ۹۷۸-۶۰۰-۷۰۶۵-۴۸-۸

حق چاپ محفوظ و متعلق به انتشارات دانشگاه سمنان می باشد.

وب سایت: www.press.semnan.ac.ir تلفن انتشارات: ۰۲۳ - ۳۳۲۸۳۲۷۰

پیشگفتار مترجمین

امروزه کشف نانوذرات و کاربردهای مختلف آن‌ها به دلیل خواص ویژه در تولید مواد مرکب و با توجه به ابعاد این ذرات تحولات عظیمی در تولید مواد با خواص و رفتار منحصر به فرد به وجود آورده است. نانوتکنولوژی طراحی را به طور اساسی تغییر داده و دانش بسیار وسیع و مهمی برای طراحان به وجود آورده است. لذا بررسی خواص و ویژگی‌های نانومواد اجتناب ناپذیر می‌باشد. از آنجاکه تهیه مواد و به خصوص آزمایش خواص، هزینه‌های فوق العاده‌ای داشته و امکان انجام و بررسی همه جانبه را مشکل می‌سازد، متخصصین و دانشمندان به روش‌های در دسترس که جوابگوی نیاز و تحلیل نانومواد باشد روی آورده‌اند. همچنین مادامی که هنوز از واقعیت کاربردهای نانوتکنولوژی پیچیده دور هستیم، نانومهندسی و نانوطراحی تقریباً، منحصرأ در کامپیوترها وجود دارد.

نانومهندسی محاسباتی، رشته تحقیقی مهمی است که هدف آن توسعه طراحی در مقیاس نانو و روش‌های شبیه‌سازی برای فعال کردن و سرعت بخشیدن به طراحی و ساخت وساز وسایل و سیستم‌های واقعی در مقیاس نانو می‌باشد. بنابراین هدف از این کتاب، ارائه مقدمه‌ای بر روش‌ها، تکنیک‌ها و مشکلاتی است که از نانوطراحی و مهندسی محاسباتی بدست آمده است. به دلیل ساده‌گی، تمرکز بر روش دینامیک مولکولی می‌باشد که برای توصیف موضوع فقط بر اساس دانش فیزیک مناسب است. البته در برخی جنبه‌ها نیز از مکانیک کوانتوم یا مکانیک آماری استفاده شده است.

لذا اطلاع از ساختار نانومواد و نحوه توزیع نیروها بین نانوذرات، تقویت‌کننده‌ها و زمینه‌ها و مدل‌سازی آن‌ها و روابط و تئوری‌های حاکم لازم و ضروری بوده و به عبارتی مهندسی این گونه نانومواد، نانوتوده‌ها و نانوربات‌ها از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است.

بنابراین با عنایت به تجربیات این‌جانبان در ساخت، بررسی و تحلیل مواد نانوکامپوزیت و همچنین ارائه کلیه نتایج تحلیلی و آزمایشگاهی تحقیقاتی به صورت کتاب و مقالات متعدد، ترجمه کتاب حاضر را ضروری و برای کارشناسانی که در این زمینه فعال می‌باشند، به خصوص دانشجویان ارشد و دکتری مفید می‌دانیم.

مترجمین ضمن اعتراف به این حقیقت که ترجمه کتابی به این گستردگی عاری از خطا و اشتباه نیست منتظر دریافت نظرات و پیشنهادات ارزنده دانشجویان و کارشناسان عزیز می‌باشند.

از معاونت محترم پژوهشی دانشگاه سمنان و انتشارات دانشگاه سمنان که در جهت چاپ و انتشار سریع کتاب همکاری داشته‌اند سپاسگزاری می‌شود. لازم است تشکر ویژه خود را به خانم فدائی‌زاده جهت ویراستاری کتاب اعلام نمایم. همچنین از زحمات آقای اسماعیل شجاعی در مورد طرح روی جلد تقدیر می‌شود.

در اینجا بر خود لازم می‌دانیم از همکاری همسرانمان که با به‌وجود آوردن شرایط مناسب زندگی، امکان تمرکز فکری جهت ترجمه این کتاب را فراهم نمودند در حد توان قدردانی نمایم و امیدواریم مطالب پیش روی برای کارشناسان، مهندسين و دانشجویان طالب علم و دانش مفید واقع شود.

E-mail: hoseinhemmatian@gmail.com

دکتر عبدالحسین فریدون - مهندس حسین همتیان

پاییز ۱۳۹۳

پیشگفتار

اندیشه ساخت اشیای بسیار کوچک و غیرقابل تصور در سطح اتمی، اندیشه جدیدی نیست. ا.رفینمن^۱، برنده جایزه نوبل فیزیک سال ۱۹۶۵، در سال ۱۹۵۹ در مهمانی بزرگ و معروفی گفت: «تعداد زیادی اتاق در پایین وجود دارد». چطور ممکن است بتوان ۲۴ جلد کتاب دایرة المعارف بریتانیکا^۲ را با حجمی کوچک ایجاد کرد؟ وی در مورد ذخیره سازی اطلاعات در سطح اتمی و نیز در مورد ساخت ماشین هایی با اندازه مولکولی سخن گفت: «واهمه ای ندارم که سؤال آخر را بررسی کنم؛ درباره اینکه آیا می توانیم در آینده، اتم ها را به صورتی که می خواهیم تبدیل کنیم. تا جایی که می دانم اصول فیزیک، برخلاف امکان حرکت اتم به اتم اشیا صحبت نمی کند و ما برای نقض هر قانونی تلاش نمی کنیم اما در عمل این انجام نشده، زیرا ما خیلی بزرگ هستیم. اگر در انجام کارهایمان توانمند باشیم، مسائل شیمی، زیست شناسی و فیزیک فوق العاده به ما کمک می کنند و سرانجام به توانایی انجام کارها در سطح اتمی خواهیم رسید. پیشرفتی که فکر می کنم نمی توان آن را انکار کرد» [افینمن ۱۹۶۰].

اکنون پس از چند دهه، میکروسکوپ های آزمایشگاهی نه تنها می توانند اتم ها را مشاهده کنند، بلکه قادر به دستکاری تک تک آنها نیز هستند. به نظر می رسد دستیابی به این توانایی و پیشرفت های اخیر در اندازه گیری، دستکاری و سازماندهی ماده در سطح اتمی، انقلابی در علم و تکنولوژی روی داده است. هر جا که ساختارهایی کوچک تر از یک میکرومتر در نظر گرفته می شود، واژه نانوتکنولوژی نقش پررنگی دارد. اما نانوتکنولوژی مراحل فراتر از مینیاتورسازی (ساخت در ابعاد کوچک) را در برمی گیرد.

درحالی که ممکن است نانوتکنولوژی به صورت ساده به عنوان تکنولوژی ای براساس دستکاری تک تک اتم ها و مولکول ها برای ایجاد ساختارهای خاص و پیچیده اتمی شناخته شود [پروژه تحقیقاتی پلیسی، ۱۹۸۹]^۳. باید متوجه بود که در مقیاس نانومتر، از لحاظ کیفی تلاش های جدیدی صورت گرفته و همچنین ویژگی ها و فرایندهایی ظاهر شده است که توسط علم مکانیک کوانتوم، محدودیت مواد در ساختارهای کوچک،

۱. R.Feynman

۲. Brittanica

۳. Policy Research Project, ۱۹۸۹

شکاف دو وجهی و پدیده‌های دیگر تسلط یافته است. علاوه بر این، بسیاری از تئوری‌های جدید ماده در مقیاس میکرومتر دارای طول های بحرانی با ابعاد نانومتر بوده، بنابراین این تئوری‌ها برای توصیف پدیده‌های جدید در مقیاس نانومتر کافی نمی‌باشند.

با وجود این، مفهوم نانوتکنولوژی بسیار گسترده‌تر است. این مفهوم یک پیشگویی از ایجاد یک تکنولوژی و کنترل معقول ساختار ماده می‌باشد که واژه‌های دیگری مانند ساخت مولکولی، نانومهندسی و ... نیز به کار می‌رود. به عبارت دیگر، قضیه اصلی نانوتکنولوژی این است که تقریباً هر ساختار شیمیایی پایدار خاص در واقعیت ساخته می‌شود. محققان امیدوارند که نانوماشین‌هایی را طراحی و برنامه‌ریزی کنند که به صورت اتم به اتم، اشیائی با مقیاس بزرگ بسازند. با تعداد کافی از این رویهم‌گذاری‌کننده‌ها برای کار کردن، همراه با تکرارکننده‌ها، برای ایجاد کی‌هایی از خودشان می‌توان با استفاده از مواد قابل دسترسی چون خاکریزه، شن و آب، اشیائی در هر اندازه و مقدار ساخت [درکسلر ۱۹۸۱، درکسلر و همکاران ۱۹۹۱، رجیس ۱۹۹۵، مرکل ۲۰۰۱].^۱ کامپیوترهایی ۱۰۰۰ برابر سریع‌تر و ارزان‌تر از مدل‌های اخیر، ربات‌های نانوزیستی که سلول‌های سرطانی را درمان می‌کنند، برج‌ها، پل‌ها و جاده‌های ساخته‌شده از رشته‌های الماس غیرشکستنی یا ساختمان‌هایی که قابل تعمیر و تغییر شکل هستند، ممکن است از نتایج نانوتکنولوژی در آینده باشند.

امروزه، در حالی که نانوتکنولوژی هنوز دوران طفولیت را به سر می‌برد و تنها نانو ساختارهای ابتدایی می‌توانند با کنترل ایجاد شوند، این گفته‌ها به نظر داستانی تخیلی است، اما دانشمندان بر این عقیده‌اند که اینها امکان‌پذیر می‌باشد، و قطعات مورد نیاز آنها در حال ساخته شدن است. نانوتکنولوژی برای دانشمندان، مهندسان و اقتصاددانان دغدغه‌هایی فکری ایجاد کرده که نه تنها به دلیل کشف‌های فراوان در مقیاس نانومتر بوده است، بلکه به دلیل پیامدهای اجتماعی ناشی از آن نیز می‌باشد. در پاییز سال ۲۰۰۰ نامه‌ی کاخ سفید (از دفتر علوم و تکنولوژی سیاسی و دفتر برنامه و بودجه) که به تمام نمایندگان فدرال فرستاده شد که در آن، نانوتکنولوژی در رأس فهرست رشته‌های تحقیق و توسعه در ایالات متحده قرار داده داشت. کنگره، در نوامبر ۲۰۰۰ طرح ابتکاری نانوتکنولوژی ملی را به تصویب رساند، که مبلغ کلی ۴۲۲ میلیون دلار بین

۱. Drexler, ۱۹۸۸; Drexler et al, ۱۹۹۱; Regis, ۱۹۹۵; Merkle, ۲۰۰۱

سازمان‌ها و نمایندگان توزیع شود. آن‌ان ای، روکو، سیمز، ۲۰۰۱] و این قطعاً شباهتی به یک داستان تخیلی ندارد. اکنون، نانوتکنولوژی را از دیدگاه آموزشی بررسی می‌کنیم. مهم‌ترین شاخه علمی باتوجه به توسعه کاربردهای نانوتکنولوژی ممکن است چه چیزی باشد؟

به‌منظور کاربردی‌کردن نانوتکنولوژی، محققان باید زیست، شیمی، فیزیک، مهندسی، علوم کامپیوتر و بسیاری از موضوعات خاص دیگر مانند مهندسی پروتئین یا فیزیک سطح را بدانند. پیچیدگی علوم مدرن، دانشمندان را مجبور به تبادل اطلاعات بین رشته‌ها و تخصص‌ها می‌کند که متأسفانه این امر بسیار رایج نیست، بنابراین همین گستردگی یکی از دلایلی است که سبب می‌شود نانوتکنولوژی به‌سختی پیشرفت می‌کند. اما امروزه یک خواسته به‌وضوح قابل رؤیت می‌باشد و آن این است که: نانوتکنولوژی مهم‌ترین بخش هر فرایند توسعه‌ای را طراحی می‌کند. اگر نانوتکنولوژی به حقیقت بییوندد، هزینه‌های گذشته آن در تولید تقریباً ناچیز می‌شود، درحالی‌که هرچه پیچیدگی آن افزایش یابد، کار طراحی آن نیز بیشتر خواهد شد. به‌علاوه، رشته طراحی مهندسی پیچیده‌تر می‌شود و باید رویهم‌گذاری‌کننده‌های اتمی، و تکرارکننده‌ها، نانومواد و ... را نیز طراحی کرد. اگر ما بتوانیم هر چیزی را با هر اندازه‌ای بسازیم، سؤال کاربردی این است که "چه چیزی می‌توانیم بسازیم؟" یا "چه چیزی را برای ساختن انتخاب کنیم؟". پاسخ به این سؤالات و برنامه‌ریزی برای تغییر گسترده در طراحی نانو می‌تواند برنامه‌ریزی طراحی را به کار بسیار مهمی تبدیل کند [میلانسکی، ۲۰۰۰].

خلاصه اینکه نانوتکنولوژی طراحی را به‌طوراساسی تغییر می‌دهد و به‌این‌ترتیب درآینده، برای مهندسان یا طراحان نانو در آینده دانش بسیار وسیع و مهمی به‌وجودمی‌آید. مادامی که ما هنوز از واقعیت کاربردهای نانوتکنولوژی پیچیده دور هستیم، مهندسی و طراحی نانو تقریباً، منحصرأ در کامپیوترها وجود دارد. نانومهندسی محاسباتی، رشته تحقیقی مهمی است که هدف آن توسعه طراحی در مقیاس نانو و روش‌های شبیه‌سازی برای فعال‌کردن و سرعت‌بخشیدن به طراحی و ساخت‌وساز وسایل و سیستم‌های واقعی در مقیاس نانو می‌باشد. در مقایسه با ساخت میکروسکوپی که

۱. NNI, Roco, Sims, ۲۰۰۱

۲. Milanski, ۲۰۰۰

منجر به انقلاب میکروالکترونیک‌ها در قرن ۲۰ شده است، نانوطراحی و مهندسی کلیدی برای انقلاب نانوتکنولوژی در قرن ۲۱ خواهد شد.

بنابراین هدف از این پژوهش، ارائه مقدمه‌ای بر روش‌ها، تکنیک‌ها، مشکلات و سختی‌هایی است که از نانوطراحی و مهندسی محاسباتی بدست آمده است. به دلیل سادگی، تمرکز بر روش دینامیک مولکولی می‌باشد که برای توصیف موضوع فقط بر اساس دانش فیزیک مناسب است. البته در برخی جنبه‌ها باید وارد جزئیات بیشتر شویم؛ مثلاً دانش مکانیک کوانتوم یا مکانیک آماری مورد نیاز می‌باشد، اما چنین زیرمجموعه‌هایی ممکن است نادیده گرفته شوند.

از شومرز^۱ (ویراستار) به خاطر تشویق‌ها، کمک‌ها و پیشنهادهایش تشکر ویژه دارم. از اشمیتز^۲ به خاطر حمایت‌هایش در تمام موضوعات محاسبات عملکردی تشکر فراوان دارم. همچنین از مونا موریس^۳ برای فراهم کردن تصاویر اس‌ای ام^۴ سپاسگزارم. از ناتاشا^۵ به دلیل مطالعه دقیق و کنترل دست‌نوشته‌ها و از ربکا^۶ به خاطر حمایت‌های اخلاقی‌اش بسیار متشکرم. به پلیتیس^۷ و دیگران که بحث‌های جالبی در این زمینه مطرح کرده‌اند، مدیونم. آخرین تشکر را از پت^۸ (ویراستار) و کل تیم وردساینترفیک^۹ برای همکاری‌های حرفه‌ای و نزدیکی‌شان در طول انتشار این کتاب دارم.

مشاتیل ریت^{۱۰}

کارلسروهه^{۱۱} ۲۰۰۲

۱. W.Schommers

۲. F.Schmitz

۳. E.Materna-Morris

۴. SEM

۵. Natascha

۶. Rebecca

۷. C.Politís

۸. S.Patt

۹. World Scientific

۱۰. Michael Rieth

۱۱. Karlsruhe

فهرست

فصل اول: مقدمه	۹
فصل دوم: نیروهای بین اتمی	۱۷
۱-۲. روش های مکانیک کوانتوم مسائل چندمجهولی	۱۸
۲-۲. سطح انرژی پتانسیل	۲۱
۳-۲. برآورد پتانسیل جفتی	۲۳
۴-۲. مزایا و محدودیت های تقریب پتانسیل جفتی	۲۵
۵-۲. پتانسیل های پدیدار شناختی	۲۸
۱-۵-۲. پتانسیل های باکینگهام	۲۸
۲-۵-۲. پتانسیل های مورس	۳۱
۳-۵-۲. پتانسیل های لئونارد- جونس	۳۲
۴-۵-۲. پتانسیل های بارکر برای اتم های کریپتون و زنون	۳۴
۶-۲. پتانسیل های کاذب (شبه پتانسیل ها)	۳۷
۱-۶-۲. پتانسیل اسچومرز برای آلومینیوم	۴۲
۷-۲. پتانسیل های چندبدنه	۴۴
فصل سوم: دینامیک مولکولی	۴۷
۱-۳. مدل هایی برای محاسبات دینامیک مولکولی	۵۰
۱-۱-۳. مقادیر اولیه	۵۱
۲-۱-۳. تعادل همدم	۵۶
۳-۱-۳. مرزها	۵۸
۴-۱-۳. نانوطراحی و نانو ساختار	۶۲
۲-۳. تکنیک های تصویرسازی	۶۴
۳-۳. حل معادلات حرکت	۶۸

۷۱	۱-۳-۳. الگوریتم‌های ورلت
۷۲	۲-۳-۳. اصلاح گر- پیش‌بینی‌کننده نوردسیک-گیر
۷۵	۳-۳-۳. ارزیابی الگوریتم‌های ترکیبی
۷۶	۴-۳-۳. روش‌های دیگر
۷۷	۵-۳-۳. کمیت‌های نرمالیزه‌شده
۷۷	۴-۳. محاسبه میدان نیروی مؤثر
۷۸	۱-۴-۳. استخراج نیرو
۷۹	۲-۴-۳. روش لیست کردن
۸۰	۳-۴-۳. الگوریتم‌های سلولی
۸۲	۴-۴-۳. روند دینامیک مولکولی دامنه کوتاه موازی مقیاس پذیر (اس‌پی‌اس‌ام)
۸۴	۵-۴-۳. بحث و گفتگو
۸۵	۵-۳. اجرا
۸۷	فصل چهارم: ویژگی نانو سیستم‌ها
۸۸	۱-۴. پایداری حرارتی
۹۲	۲-۴. خواص مادی اصلی
۹۶	۳-۴. پوشش در سطح نانومتر
۹۶	۴-۴. مقادیر میانگین و توابع همبستگی
۹۷	۱-۴-۴. تئوری مجموع
۱۰۰	۲-۴-۴. تابع همبستگی جفتی
۱۰۲	۳-۴-۴. جابه‌جایی میانگین مربعات
۱۰۶	۴-۴-۴. تابع خودهمبستگی سرعت
۱۰۸	۵-۴-۴. چگالی فونون تعمیم یافته حالت‌ها
۱۱۰	۶-۴-۴. ضریب ساختار

۱۱۳.....	۷-۴-۴. ملاحظات اضافی
۱۱۵.....	فصل پنجم: نانومهندسی مطالعات و نتایج
۱۱۷.....	۱-۵. نانوساختارهای تابعی
۱۲۲.....	۲-۵. نانوماشین‌ها
۱۲۸.....	۳-۵. نانوتوده‌ها
۱۲۹.....	۱-۳-۵. آزمایش‌های ساختاری
۱۳۴.....	۲-۳-۵. دینامیک حالات Al_{500}
۱۳۶.....	۳-۳-۵. تأثیر شرایط اولیه
۱۳۷.....	۴-۳-۵. تأثیر دمای اولیه
۱۳۹.....	۵-۳-۵. تأثیر ساختار کریستالی
۱۴۱.....	۶-۳-۵. تأثیر شکل بیرونی و اندازه توده
۱۴۶.....	۷-۳-۵. تأثیر پتانسیل تعامل (ماده)
۱۴۸.....	۸-۳-۵. نتیجه‌گیری
۱۵۰.....	۴-۵. تبدیلات نانوتوده تحریک‌شده
۱۵۲.....	۵-۵. ملاحظات مقایسه
۱۵۵.....	۶-۵. پدیده دو شاخه‌شدگی (انشعاب) در مقیاس نانومتر
۱۵۷.....	۷-۵. قیاس‌ها با زیست‌شناسی
۱۵۷.....	۸-۵. ملاحظات نهایی
۱۶۱.....	کتاب‌شناسی
۱۶۷.....	نمایه