

تصميم ونمذجة توابع الشبكات العصبونية باستخدام الإلكترونيات الجزيئية

م. علي رجب سقور *

(تاريخ الإيداع ٢٠٢٣/٣/١٢ . قُبل للنشر في ٢٠٢٣/٥/٩)

□ ملخص □

تعتمد الإلكترونيات الجزيئية على تصميم الدارات الإلكترونية باستخدام البوليمرات والمواد العضوية كسلاسل الكربون، وهي تكنولوجيا حديثة تدمج بين ثلاث علوم أساسية وهي الفيزياء والكيمياء وعلم المواد، وتتميز الإلكترونيات الجزيئية بصغر حجمها واستهلاكها القليل للطاقة مقارنة مع الإلكترونيات التي تعتمد على أنصاف النواقل. تُستخدم الشبكات العصبونية وتطبيقاتها في مجال الذكاء الصناعي وتهدف لتطبيق آلية عمل الدماغ البشري في الدارات الإلكترونية حيث يتم تطبيق خوارزميات عملها رقمياً من قبل وحدة المعالجة المركزية في الحاسب لتنفيذ خطواتها بدقة.

في هذا البحث سنقوم بتصميم الشبكات العصبونية الجزيئية عن طريق دراسة النموذج الإلكتروني للشبكات العصبونية وتصميم تابع التنشيط log-sig بشكل إلكتروني تشابهي ومن ثم سنقوم بتصميمه بشكل جزيئي بالاعتماد على الميزة الرياضية للتثنائي الجزيئي، بالتالي سنقوم بتصميم النواة الرئيسية للشبكات العصبونية الجزيئية القائمة على سلاسل الكربون مما يساهم بشكل كبير في استخدامها في مجال الطب داخل جسم الإنسان ويحقق قفزة نوعية في تصميم وحدات المعالجة العصبية في الحواسيب الجزيئية.

تم الاعتماد على برنامج Multisem لتصميم النموذج الإلكتروني للعصبون، وبرنامج Matlab لنمذجة عمل تابع التنشيط log-sig باستخدام المعادلة الرياضية للتثنائي الجزيئي.

الكلمات المفتاحية: الإلكترونيات الجزيئية، الشبكات العصبونية، تابع التنشيط log-sig.

* مهندس - ماجستير في هندسة تكنولوجيا الإلكترونيات - قسم هندسة النظم الحاسوبية والإلكترونية - كلية هندسة تكنولوجيا المعلومات والاتصالات - جامعة طرطوس - سوريا

Design and modeling functions of neural networks using molecular electronics

Eng. Ali Sakor *

(Received 12/3/2023 . Accepted 9/5/2023)

□ ABSTRACT

Molecular electronics is based on the design of electronic circuits using polymers and organic materials such as carbon series. It is a modern technology that combines three basic sciences: physics, chemistry and materials science, Molecular electronics are characterized by their small size and low energy consumption compared to electronics that rely on semiconductors.

Neural networks and their applications are used in the field of artificial intelligence. They aim to implement the mechanism of the human brain in electronic circuits, where its work algorithms are applied digitally by the computer's central processing unit to carry out its steps accurately.

In this paper, we will design molecular neural networks by studying the electronic model of neural networks and designing the log-sig transfer function in an analog electronic form, and then we will design it in a molecular form using the molecular diode model. Thus, we will design the main nucleus of molecular neural networks based on carbon series, which will contribute significantly to their use in the field of medicine within the human body and achieve a qualitative leap in the design of neural processing units in molecular computers.

Multisem program was relied upon to design the electronic model of the neuron, and Matlab program to model the work of the log-sig transfer function using the mathematical model of the bimolecular.

Key words: Molecular electronics, neural networks, log-sig transfer function.

* Engineer – Master in Electronics Technology Engineering – Computer and Electronic System Engineering Department – Information and communication Technology Engineering – Tartous University, Syria.

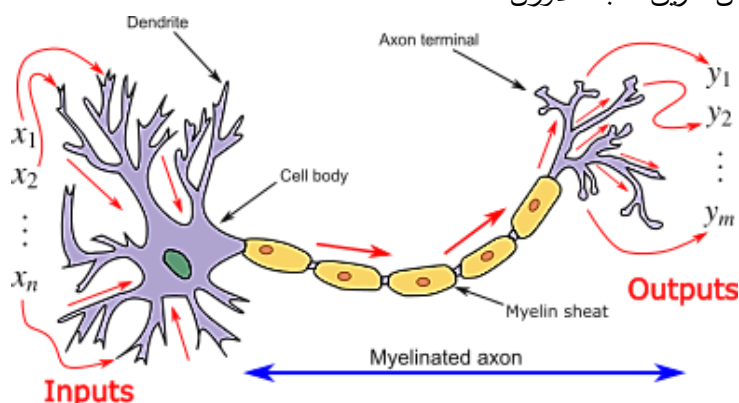
1- مقدمة

شهد مجال الدارات المتكاملة تطوراً كبيراً من حيث حجم العناصر على الشريحة حتى وصل إلى نهاية قانون مور مما يعيق تطور الدارات المتكاملة، لذلك كان لا بد من استخدام تكنولوجيا أخرى لتصميم الدارات المتكاملة، وقد فتحت الإلكترونيات الجزيئية الباب لتكنولوجيا جديدة حيث ستمكن من حل المشاكل التي نعاني منها حالياً في الدارات المتكاملة.

عمل الباحثون مؤخراً على تصنيع الأسلاك الإلكترونية الجزيئية [1] [2]، والصمامات الثنائية الإلكترونية الجزيئية، والمفاتيح الكهربائية ثنائية الأطراف [3][4][5][6]، كما تم الاعتماد على النماذج البسيطة لتصميم دارات جزيئية بعدد قليل من الثنائيات كما هو موضح تجريبياً [7][8][9][10][11].

تشير هذه التطورات الواعدة في مجال الإلكترونيات الجزيئية إلى أنه من الممكن بناء دارات إلكترونية جزيئية أكثر تعقيداً وتشمل مجموعة من العناصر الإلكترونية الجزيئية لتعمل كبديل للدوائر المتكاملة الحالية.

الشبكات العصبونية الاصطناعية: هي تقنيات حسابية مصممة لمحاكاة الطريقة التي يؤدي بها الدماغ البشري مهمة معينة وذلك عن طريق معالجة ضخمة موزعة تفرعياً ومكونة من وحدات معالجة بسيطة، هذه الوحدات ما هي إلا عناصر حسابية تُسمى وحدات أو عقد Nodes والتي تمتلك خاصية عصبية حيث تقوم بتخزين المعرفة العملية والمعلومات التجريبية عن طريق ضبط الأوزان.



الشكل (1) الخلايا والمشابك العصبية

قام الباحثون بتطبيق خوارزميات عمل هذه الشبكات باستخدام الحاسب، ويتم تدريب الشبكة العصبونية من خلال اتباع عمليات التعلم الذاتي لتحقيق أفضل النتائج.

إن الدمج بين مجالي الشبكات العصبونية والإلكترونيات الجزيئية سيمكننا من تصميم دارات هجينة يمكن استخدامها في مجال الطب في جسم الإنسان، كونها تلائم كيمياء الجسم البشري، كما يمكن الحصول على دارات عصبونية تشابهية جزيئية فائقة السرعة لاستخدامها في الحواسيب الجزيئية، ولتحقيق ذلك لابد من أدوات نمذجة حاسوبية وبرامج محاكاة لإتاحة المجال أمام الباحثين لتقديم الحلول والتعديلات لتصميم الدوائر الجزيئية، لذلك تم في هذا البحث نمذجة عمل الإلكترونيات الجزيئية رياضياً بالاستناد لنتائج تجارب سابقة.

2 - هدف البحث

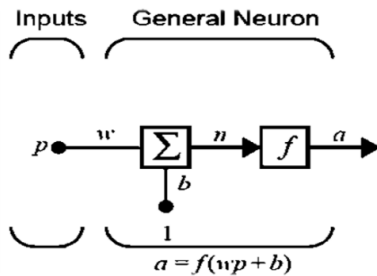
يهدف هذا البحث لتحويل النموذج الرياضي لتوابع الشبكات العصبونية إلى دارة إلكترونية تشابهية، ومن ثم نمذجة الأسلاك والثنائيات الجزيئية التي اقترحها العلماء رياضياً لتصميم توابع الشبكات العصبونية والتأكد من وظيفتها، كونه حتى الآن لا يوجد محاكيات لنمذجة هذا النوع من الدارات الهجينة ومازالت عملية تصميم الترانزستورات والثنائيات الجزيئية تتم رياضياً [12][13][14]، وكذلك تطبيقات الشبكات العصبونية الاصطناعية المستخدمة في الحواسيب تنفذ عملياتها بشكل رقمي تسلسلي وتشابه الشبكات العصبية الدماغية فقط بطريقة التعلم والتدريب [15][16][17][18]، وهنا تكمن أهمية هذا البحث في تصميم الخلايا العصبية بشكل تشابهي يماثل الخلايا العصبية البيولوجية.

3- طرائق البحث ومواده

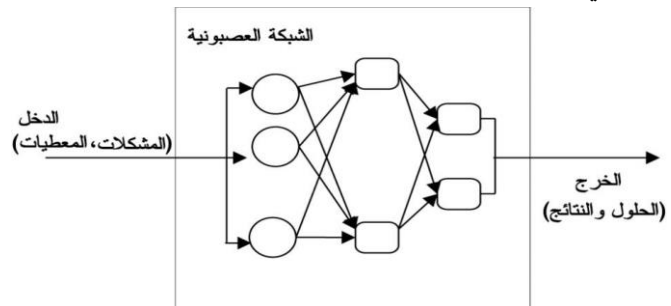
أنجز هذا البحث اعتماداً على دراسات ومراجع علمية عديدة تختص في هذا المجال وقد أخذت نتائجها وتوصياتها بعين الاعتبار، حيث تم استخدام النماذج الرياضية للشبكات العصبونية الاصطناعية وتصميم دارات إلكترونية تشابهية لتؤدي وظيفتها باستخدام المحاكى الإلكتروني multisem، ومن ثم استخراج النماذج الرياضية للثنائيات الجزيئية التي قام الباحثون باختبارها تجريبياً وتصميم توابع التحويل للشبكات العصبونية الاصطناعية ونمذجتها رياضياً باستخدام برنامج ماتلاب Matlab.

3-1- الشبكات العصبونية الاصطناعية :

تتألف الشبكات العصبونية من طبقة أو عدة طبقات من العصبونات مرتبطة بعضها ببعض وهي نموذج حاسوبي لمحاكاة طريقة عمل الدماغ البشري، يوضح الشكل(2) شبكة عصبونية متعددة الطبقات، والشكل(3) الوصف الرياضي للعصبون.



الشكل (3) الوصف الرياضي للعصبون



الشكل (2) طبقات الشبكة العصبونية

يتألف العصبون دخل p ووزن w وانحياز b وتابع تحويل f وخرج a وتُعطى العلاقة الرياضية للعصبون بالشكل

التالي:

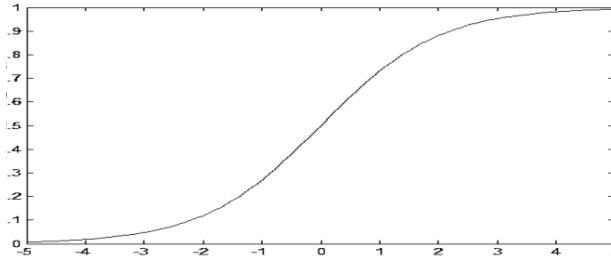
$$a = f(wp + b) \quad (1)$$

ويمكن أن تتعدد المداخل حسب الحاجة لذلك ولكل دخل وزن w خاص به.

بالنسبة لتابع التحويل f يوجد لدينا مجموعة من توابع التحويل ويتم اختيار تابع التحويل حسب المشكلة المراد

حلها، في هذا البحث سنقوم بتصميم التابع log-sigmoid الموضح بالشكل(4) والذي يُعطى بالمعادلة الآتية:

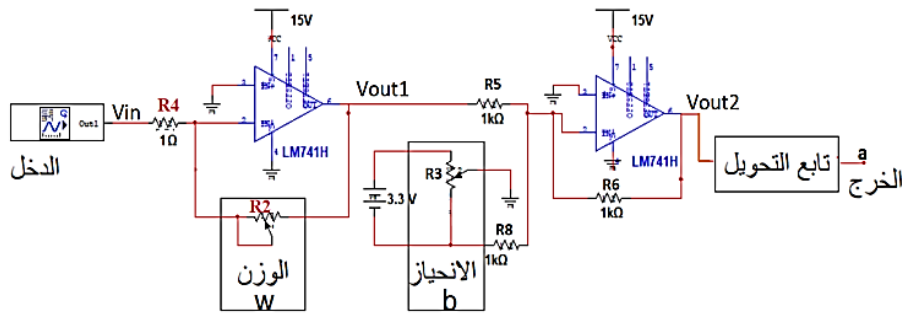
$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (2)$$



الشكل (4) المنحني البياني للتابع log-sig

٣-١-١- التصميم الإلكتروني للعصبون

باستخدام المحاكى الإلكتروني multisim قمنا بتصميم النموذج الرياضي للعصبون إلكترونياً [19]، يوضح الشكل (5) الدارة الإلكترونية للعصبون.

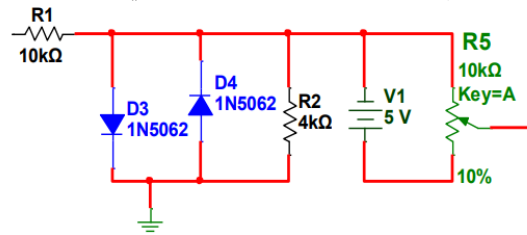


الشكل (5) التصميم الإلكتروني للعصبون

تتألف الدارة من مكبري عمليات، يقوم المكبر العاكس الأول بضرب الدخل بالوزن، حيث يكون الوزن هو قيمة المقاومة R_2 ويقوم المكبر الثاني بجمع قيمة الانحياز إلى النتيجة السابقة ثم يتم تطبيق تابع التحويل لحساب الخرج، فنكون المعادلة النهائية للعصبون بالشكل الآتي:

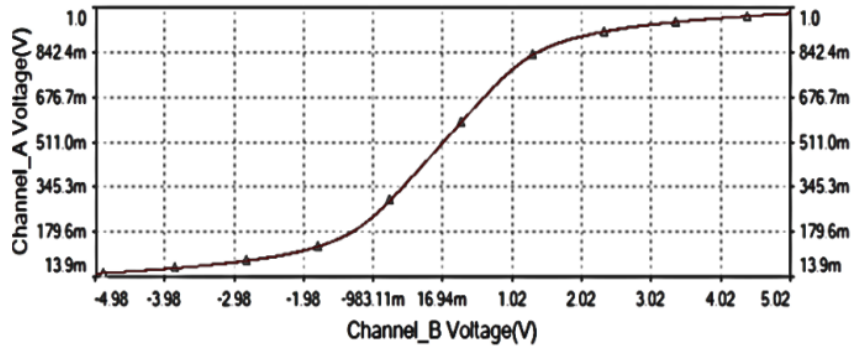
$$a = f(R_2 V_{in} + V_{R3}) \quad (3)$$

بالنسبة لتابع التحويل log-sig يتم تصميمه إلكترونياً بالشكل الآتي [27]:



الشكل (6) التصميم الإلكتروني للتابع log-sig

يحدد الثنائيان مجال الخرج للدارة حيث يقوم الثنائي D_3 بحذف أي جهد أكبر من عتبة التمرير له، وكذلك يقوم الثنائي D_4 بنفس العملية لكن للجهد السالب فيساهمان بظهور الخرج اللاخطي على طرفي المجال، ونقوم بضبط قيمة الخرج باستخدام المقاومتين R_1, R_2 مع إضافة جهد $0.5V$ للخرج ليطابق قيمة التابع الأصلي log-sig، عند تطبيق إشارة دخل مثلثية ضمن المجال $[-5V-5V]$ ينتج الخرج كما في الشكل (7) وهو مطابق للتابع log-sig بصيغته الرياضية.

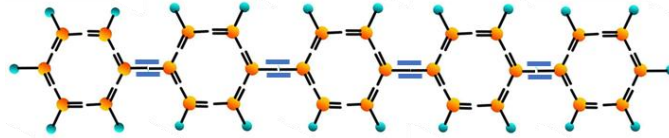


الشكل (7) خرج الدارة الإلكترونية للتابع log-sig

3-2- الإلكترونيات الجزيئية

يختص علم الإلكترونيات الجزيئية بدراسة وتطبيق الكتل البنائية الجزيئية في تصنيع المكونات الإلكترونية المختلفة، وهذا يتضمن كلاً من التطبيقات الكتلية الخاصة بالبوليمرات الموصلة، والمكونات الإلكترونية مفردة الجزيء، ويعد علم الإلكترونيات الجزيئية علماً تكاملياً حيث يشمل فروع الفيزياء والكيمياء وعلم المواد. [28]

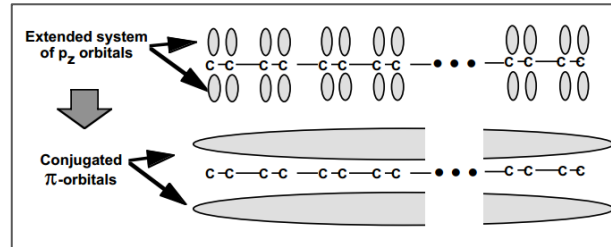
تعتمد الإلكترونيات الجزيئية على هياكل من سلاسل الكربون وهي جزيئات فينيلين C_6H_4 مرتبطة ببعضها بعض ومنتهيه بمجموعات فينيل C_6H_5 على كلا الطرفين تُعرف باسم بوليفينيلين، ويمكن تصنيعها في عدد من الأشكال والأطوال المختلفة للحصول على جزيئات بخصائص مناسبة ويوضح الشكل (8) سلسلة بوليفينيلين مرتبطة برابطة ثلاثية [20].



الشكل (8) سلسلة بوليفينيلين ثلاثية الترابط

أثبت العلماء تجريبياً قدرة هذه السلاسل على نقل التيار الكهربائي [2][24][8] ونظراً لمساحتها الصغيرة جداً فإنها تتمتع بكثافة تيار عالية حوالي $4 \times 10^{-12} \text{ electrons per sec} - \text{nm}^2$.

إن مصدر الناقلية لسلك البوليفينيلين هو عبارة عن مجموعة من المدارات الجزيئية من النوع pi التي تقع أعلى وأسفل مستوى الجزيء عندما يكون في شكل مستوي أو بالقرب من مستوي كما هو موضح في الشكل (9)، حيث تتداخل المدارات pi المرتبطة بكل ذرة فردية أو "متراقة" لإنشاء مجموعة من المدارات pi الممتدة على طول المركب.



الشكل (9) مصدر الناقلية في رابطة باي

يمكن لوحد أو أكثر من المدارات pi غير المشغولة أو المشغولة جزئياً توفير "قنوات" تسمح بنقل إلكترونات إضافية من أحد طرفي الجزيء إلى الطرف الآخر عندما يكون تحت انحياز الجهد، تمت مناقشة

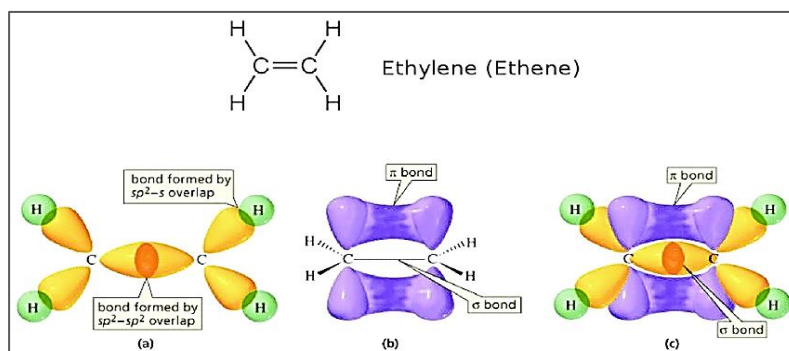
آليات هذا النقل بالتفصيل من قبل راتنر Ratner وجورتنر Jortner [21]، بناءً على دراسات تم اكتشافها من قبل موخিকা وراتنر ومعاونوهما [22][23].

بشكل عام، إن الجزيئات العطرية مثل البوليفينيلين يمكنها نقل التيار، وينطبق هذا على الجزيئات القائمة على البوليفينيلين المرتبطة مع مجموعات أخرى مثل (ethenyl -HC=CH-) و (ethylen -C≡C-) التي يتم إدخالها بين الحلقات العطرية.

غالباً ما يتم إدخال روابط الإيثينيل أو الأسيتيلين المترابط ثلاثياً كفواصل بين حلقات الفينيل في السلك الجزيئي [24]. وتقضي هذه المبادئ على التداخل الفراغي بين ذرات الهيدروجين المرتبطة بالحلقات المجاورة. وإلا فإن هذا التداخل سيغير الحلقات في السلك على الدوران بشكل غير مستوي وهذا من شأنه أن يقلل من مدى التداخل المداري pi بين الحلقات المجاورة، ويفكك قنوات الإلكترون، ويقلل من موصلية السلك الجزيئي.

3-2-1- الجزيئات العضوية الأليفاتية

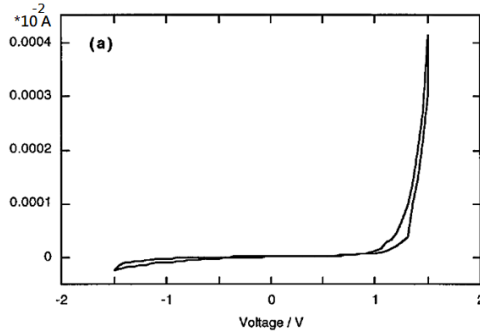
وهي جزيئات تحتوي فقط على روابط سيجما مثل C-C أو C-H حيث تمنع الشحنة الموجبة للنواة الإلكترونية من العبور على طول محور الجزيء وبالتالي لا يمكن لهذا الهيكل نقل الإلكترونات بسهولة وعندما يتم إدخال مجموعة أليفاتية صغيرة في منتصف سلسلة بوليفينيلين موصلة فإنها تكسر القناة الموصلة وتشكل حاجزاً لنقل الإلكترون [25] وسنستخدم هنا مركب الإيثيلين C₂H₄ الموضح بالشكل (10).



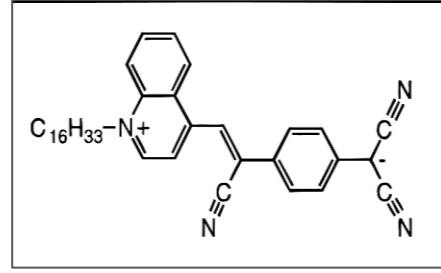
الشكل (10) الروابط في الأيثيلين

3-2-2- الثنائي الجزيئي

يوضح الشكل (11) النموذج الأول الذي وضعه ميتزجر Metzger [9] وريد Reed [8] اللذين كانا الأساس الذي تم الاعتماد عليه لاحقاً لتصميم الثنائي الجزيئي القائم على البوليفينيلين، حيث قام الباحثان بتجربة سلاسل جزيئية بين قطبين ذهب لتصميم الثنائي وأثبتنا بالقياس أن هذه التصاميم تعمل كثنائي، ويبين الشكل (12) الخصائص الكهربائية المقاسة.

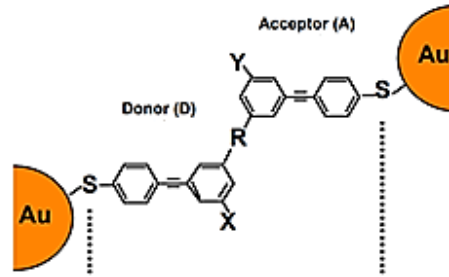


الشكل (12) الخصائص الكهربية لثنائي ميتزجر



الشكل (11) تصميم ميتزجر للثنائي الجزيئي

ولكن المشكلة التي اعترضتهما هي عدم القدرة على دمج التصميم مع أسلاك البوليفينيلين لإنشاء دارة جزيئية كاملة، لذلك قام كل من Aviram و Ratner بتعديل تصميم ميتزجر لإمكانية دمج مع أسلاك البوليفينيلين مع بقاء نفس الخصائص الكهربية له، كما هو مبين في الشكل (13)، لذلك سنعمد النموذج الذي اقترحه Aviram و Ratner في الدراسة [26].



الشكل (13) نموذج Aviram و Ratner

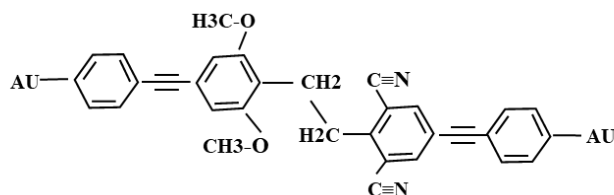
يتكون الثنائي الجزيئي في هذا النموذج من ثلاثة أجزاء:

- متبرع
- آخذ

● جسر يفصل بين المتبرع والآخذ بواسطة روابط من نوع سيجمما.

ويستخدم أسلاك جزيئية من البوليفينيلين كعمود فقري موصل، يُطلق على المجموعات المتبرعة والآخذة للإلكترونات بمنشطات داخل الجزيء، تمثل هذه المجموعات شوائب للذرات تماماً مثل الإشابة في أنصاف النواقل من أجل التحكم في خصائصها الكهربية.

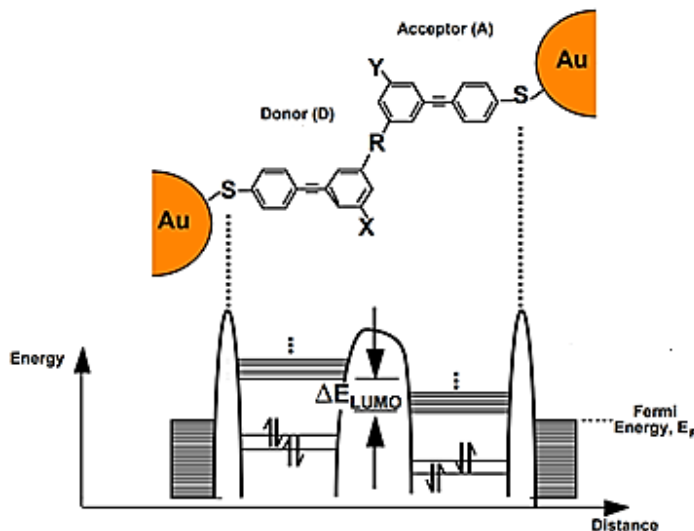
يجب أن يُظهر هذا النظام الجزيئي خصائص الوصلة pn حيث أن بدائل التبرع بالإلكترونات تزيد من كثافة الإلكترونات وتجعل الجزيء غنياً بالإلكترونات مثل النوع n، واستخدم الباحثان المركب OCH₃ كمتبرع للإلكترونات، كذلك تعمل بدائل سحب الإلكترونات على تقليل كثافة الإلكترونات في الجزيء العضوي ليعمل مثل النوع p. واستخدم الباحثان المركب C≡N كأخذ للإلكترونات، ونظراً لأن المتبرع والآخذ يمكن أن يتفاعل بقوة مع بعضهما بعضاً، يجب أن يفصل بينهما عن طريق استخدام روابط سيجمما وتم اختيار مجموعة ثنائي الميثيلين الأليفاتية (CH₂CH₂) لأنها أصغر مجموعة أليفاتية غير موصلة يمكن أن تكون بمثابة حاجز نفقي ضيق R، حيث تمنع مجموعة الحاجز الوصول إلى حالة التوازن، بينما تسمح للإلكترونات تحت انحياز الجهد بالعبور نفقياً من خلالها، فيصبح التصميم الجزيئي للثنائي بالشكل (14).



الشكل (14) نموذج Aviram و Ratner

3-2-2-1- سويات الطاقة:

يوضح الشكل (15) سويات الطاقة للتنائي الجزيئي عند عدم تطبيق جهد خارجي [27].



الشكل (15) سويات الطاقة لنموذج Aviram و Ratner

ترتفع سويات طاقة التكافؤ على الجانب الأيسر من الجزيء ويؤثر ارتفاع الطاقة هذا على جميع المدارات الجزيئية المتوضعة على الجانب الأيسر. يتضمن ذلك المدار الجزيئي الأعلى المشغول (HOMO) ، والمدار الجزيئي الأدنى غير المشغول (LUMO) ، والمدارات ذات الطاقة المنخفضة غير المشغولة ("LUMO") على الجانب الأيسر المتبرع من الجزيء.

ترجع هذه التأثيرات إلى تأثير المجموعة البديلة X التي تمنح الإلكترون.

على عكس ما سبق يتم خفض جميع مستويات طاقة التكافؤ على يمين الحاجز المركزي من خلال وجود مجموعة آخذة للإلكترون Y. يؤثر خفض الطاقة هذا على جميع المدارات الجزيئية المتوضعة على الجانب الأيمن من الجزيء، يتضمن هذا HOMO و LUMOs المتوضعة على الجانب الأيمن من الجزيء.

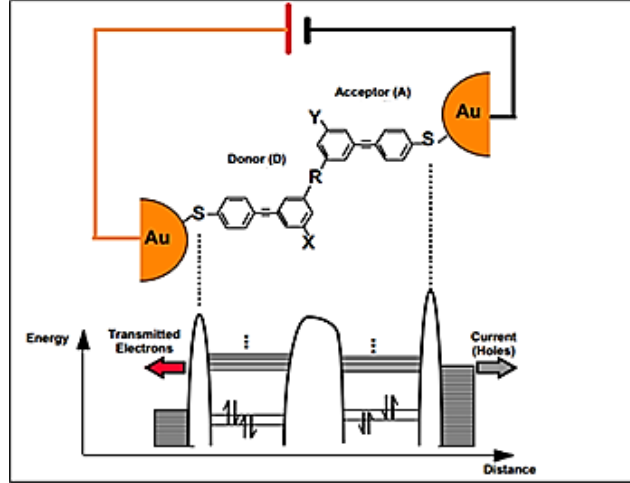
في منتصف الجزيء تمثل المجموعة العازلة R حاجز طاقة كامن. يعمل كجسر عازل بين "تصفي" المتبرع والآخذ للتنائي للحفاظ على حالة عدم التوازن الناجم عن بدائل المتبرع والآخذ.

يوفر هذا الاختلاف في مستويات الطاقة للمانح والآخذ الأساس لتشغيل التنائي المعدل الجزيئي.

توجد أيضاً حواجز طاقة بين الجزيء وملامسات الذهب (Au) في كلا الطرفين بسبب روابط الثيول، حيث تقوم بالحفاظ على درجة من العزل الكهربائي بين الأجزاء المختلفة من الهيكل ولا يجب أن تكون عريضة أو مرتفعة لدرجة تمنع الإلكترونات تحت تحييز الجهد المناسب من اختراقها.

3-2-2-2- الانحياز الأمامي:

عند تطبيق جهد أمامي كما في الشكل (16)، ترتفع طاقات الإلكترونات المتصلة مع القطب السالب وتتنخفض طاقة الإلكترونات المتصلة مع القطب الموجب، لأن تغير الطاقة للإلكترونات هو إشارة معاكسة للجهد المطبق.

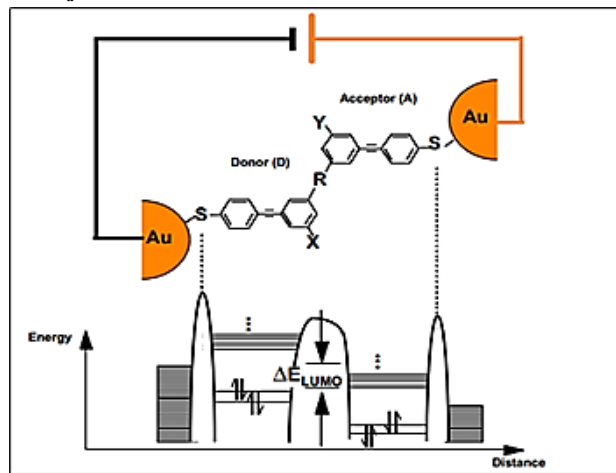


الشكل (16) الانحياز الأمامي للشئائي

عندما يكون الجهد المطبق كاف لرفع سويات الطاقة المشغولة المتصلة مع القطب السالب بحيث تساوي على الأقل طاقة المدار LUMO الموجود في الجزء الآخذ من الشئائي تبدأ الإلكترونات بالتدفق عبر الجزيء للوصول إلى الطاقة المنخفضة (المتصلة مع القطب الموجب). ولا يلزم سوى جهد انحياز صغير نسبياً لتحقيق ذلك. وذلك لأن جميع مستويات الطاقة للأخذ قد تم تخفيضها مسبقاً من خلال وجود مجموعة الإشباع الجزيئي Y.

3-2-2-3- الانحياز العكسي:

يتم تطبيق جهد "عكسي" على النظام كما في الشكل(17)، لكي تبدأ الإلكترونات الموجودة في الجهة المتصلة مع القطب السالب في التدفق عبر الجزيء، يجب أن يكون انحياز الجهد العكسي كافياً لرفع طاقة الإلكترونات للتلامس الذهبي المتصل مع القطب السالب على الأقل مثل طاقة مدارات LUMO في الجزء المتبرع من الجزيء.

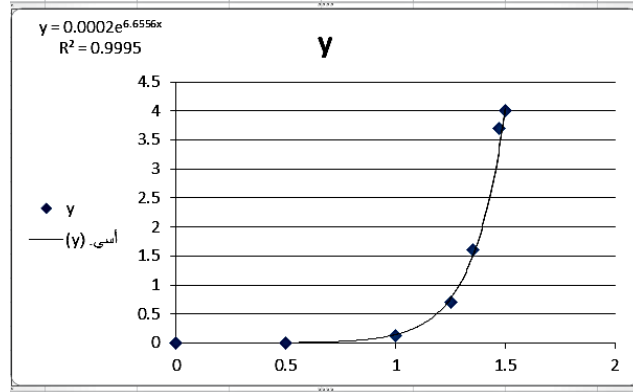


الشكل (17) الانحياز العكسي للشئائي

ومع ذلك، في حالة الانحياز العكسي، يكون مقدار الجهد الذي يجب تطبيقه أكبر بكثير مما هو عليه في حالة الانحياز الأمامي لأنه كما هو موضح سابقاً تم رفع جميع مستويات الطاقة لنصف المتبرع من خلال وجود المجموعة البديلة X. وبالتالي يجب تطبيق المزيد من الجهد في الاتجاه العكسي أكثر من الاتجاه الأمامي من أجل جعل الإلكترونات تتدفق عبر الجزيء. هذا هو السلوك الكلاسيكي للتنائي.

3-2-2-4 النموذج الرياضي للتنائي الجزيئي:

في الشكل (12) الذي يعرض الخصائص الكهربائية لتنائي مبيتر، حيث تم أخذ مجموعة من النقاط لاستخراج المعادلة الرياضية المميزة لهذا التنائي باستخدام برنامج excel كما هو موضح في الشكل (18) [26].



الشكل (18) استخراج معادلة التنائي الجزيئي

$$Y = 2 * e^{6.6556x} * 10^{-4} \quad (4)$$

حيث:

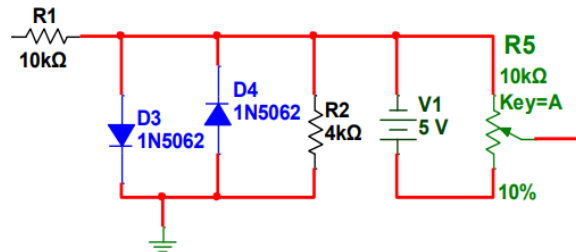
Y: التيار المار عبر التنائي مقدراً بـ (uA).

X: الجهد المطبق على طرفي التنائي مقدراً بـ (V).

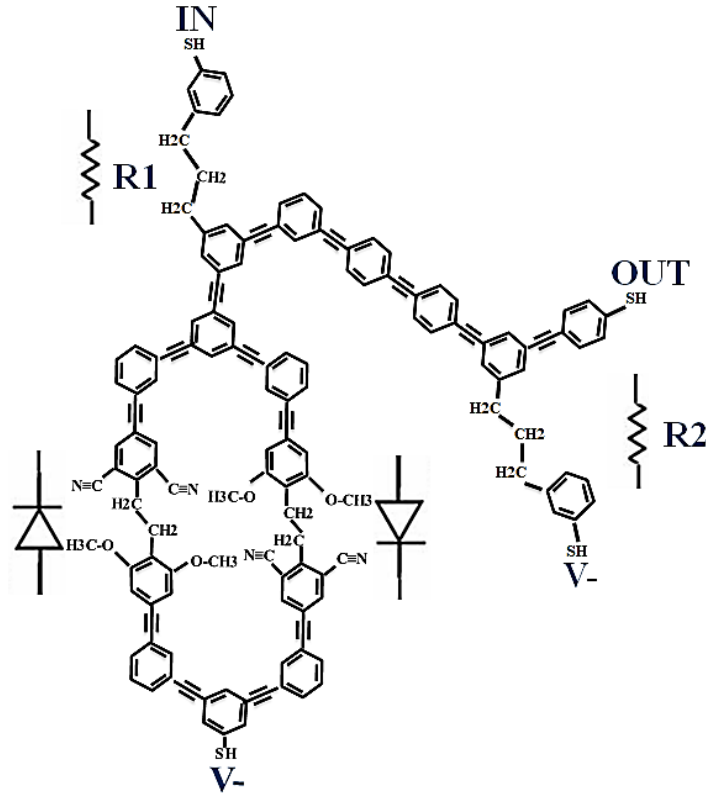
بعد الحصول على المعادلة الرياضية للتنائي الجزيئي سنقوم بتصميم التابع log-sig بشكل جزيئي ونتأكد من خرج الدارة الجزيئية رياضياً باستخدام برنامج matlab.

3-3-3 تصميم التابع log-sig باستخدام الإلكترونيات الجزيئية:

يوضح الشكل (19) التصميم الإلكتروني للتابع log-sig والشكل (20) التصميم الجزيئي له.



الشكل (19) التصميم الإلكتروني للتابع log-sig

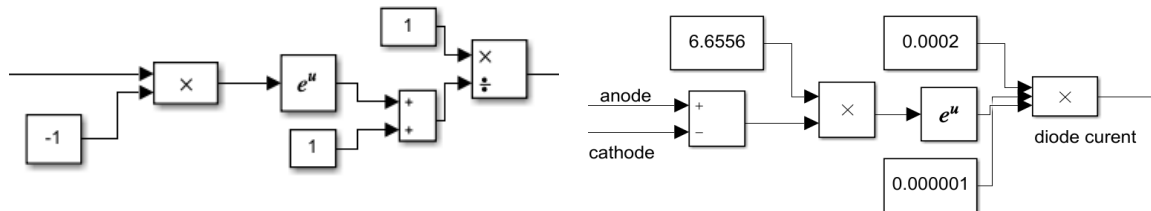


الشكل (20) التصميم الجزيئي للتابع log-sig

تتألف الدارة الجزيئية من ثنائيين جزيئيين متعاكسين مماثلين لنموذج Aviram و Ratner الموضح في الشكل (14) بالإضافة للمقاومات، وهي مجموعات من ثنائي الميثيلين الأليفاتية (CH₂CH₂) التي ذكرناها سابقاً، ويتم تكرار مجموعة ثنائي الميثيلين الأليفاتية تجريبياً للوصول للمقاومة المطلوبة، ويربط بين الثنائيات والمقاومات أسلاك البوليفينيلين.

4-3- نمذجة الدارة الجزيئية للتابع log-sig

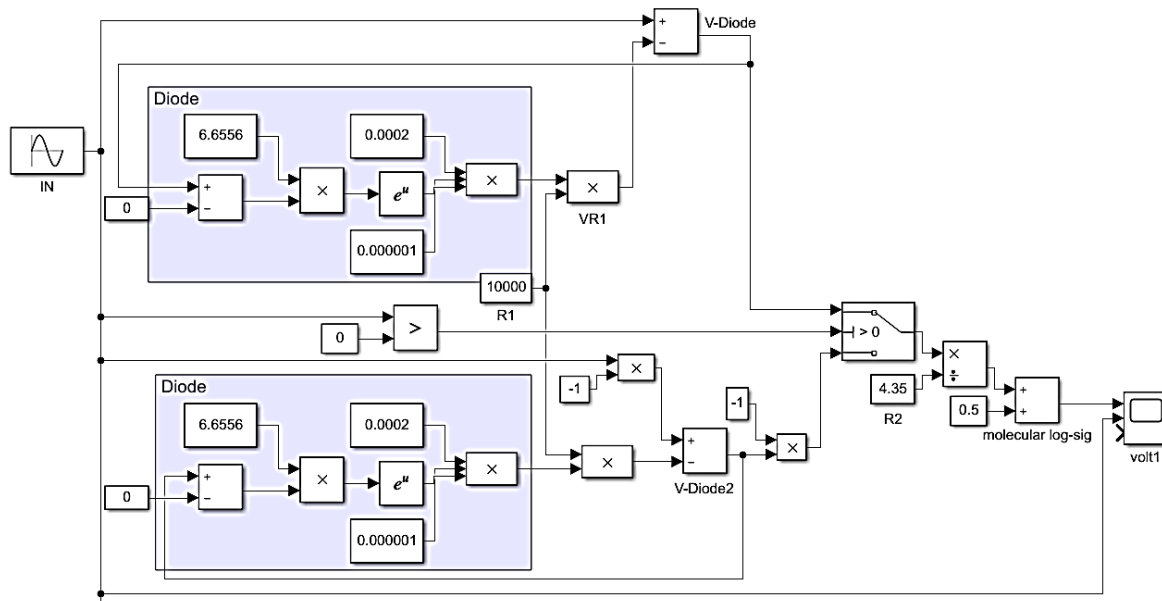
باستخدام برنامج Matlab سنقوم بنمذجة الدارة الجزيئية للتابع log-sig الموضحة في الشكل (20) بالاعتماد على المعادلة الرياضية المستخلصة للثنائي الجزيئي، يوضح الشكل (21) النموذج الصندوقي للثنائي الجزيئي، والشكل (22) المخطط الصندوقي للتابع الأصلي log-sig.



الشكل (21) المخطط الصندوقي للثنائي الجزيئي

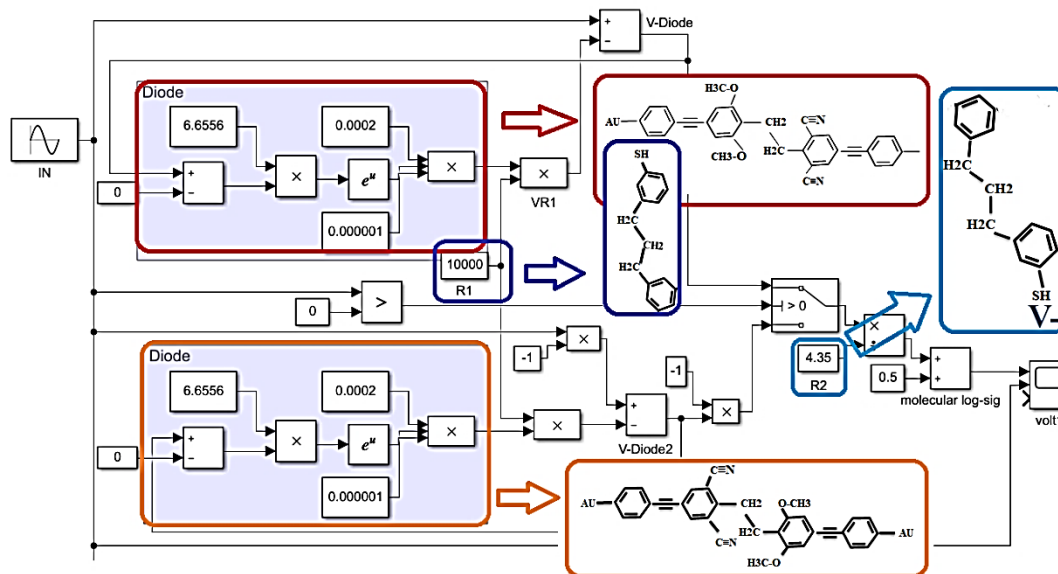
الشكل (22) المخطط الصندوقي للتابع الأصلي log-sig

يوضح الشكل (23) نمذجة الدارة الجزيئية للتابع log-sig باستخدام matlab.



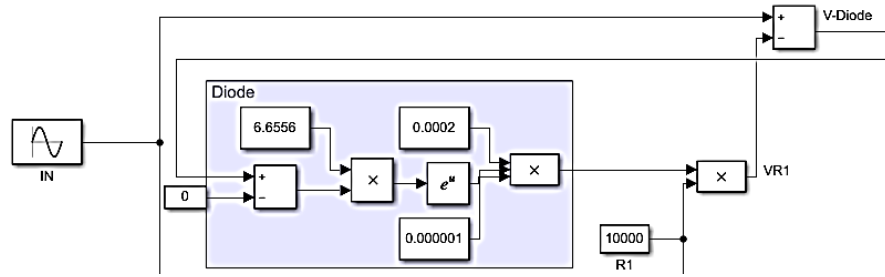
الشكل (23) نمذجة الدارة الجزيئية للتابع log-sig

يوضح الشكل (24) ربط كل جزء من المخطط الصندوقي بما يقابله في التصميم الجزيئي.



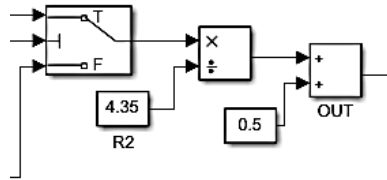
الشكل (24) ربط التصميم الجزيئي بالمخطط الصندوقي

يُمثل الجزء الموضَّح في الشكل (25) الثنائي الجزيئي الأول حيث تقوم بضرب تيار الخرج للثنائي بقيمة المقاومة R1 المتصلة مباشرة مع الدخل لحساب هبوط الجهد على المقاومة ثم تقوم بطرح هبوط الجهد على المقاومة من جهد الدخل وهو هبوط الجهد على الثنائيين الجزيئيين.



الشكل (25) تفصيل الدارة الجزيئية للتابع log-sig

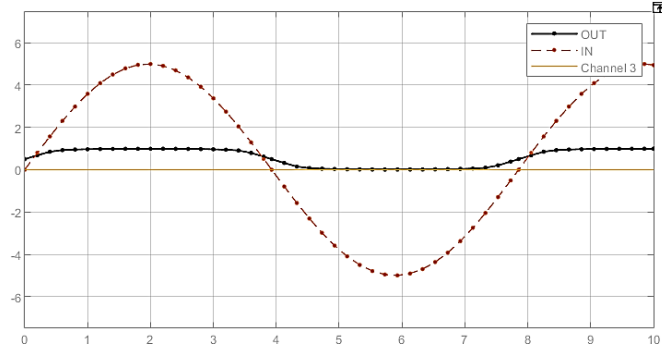
بالنسبة للتنائي الثاني نقوم بنفس الخطوات ولكن بإشارة معاكسة كونه يعمل عند الجهد السالب، ثم نقوم باختيار مسار مرور التيار عبر أحد الثنائيين لحساب هبوط الجهد على الثنائيين وذلك بالاعتماد على إشارة الدخل في حال كانت موجبة أو سالبة بحيث يتحقق الانحياز الأمامي لأحدهما كما يُظهر الشكل (26)، ثم نقوم المقاومة المتصلة مع الأرضي بدور مقسم جهد مع المقاومة المتصلة مع الدخل ونختار قيمتها تجريبياً للوصول للخرج المطلوب، وفي النهاية نُضيف قيمة الإزاحة المطلوبة للدارة كما في التصميم الإلكتروني.



الشكل (26) تفصيل الدارة الجزيئية للتابع log-sig

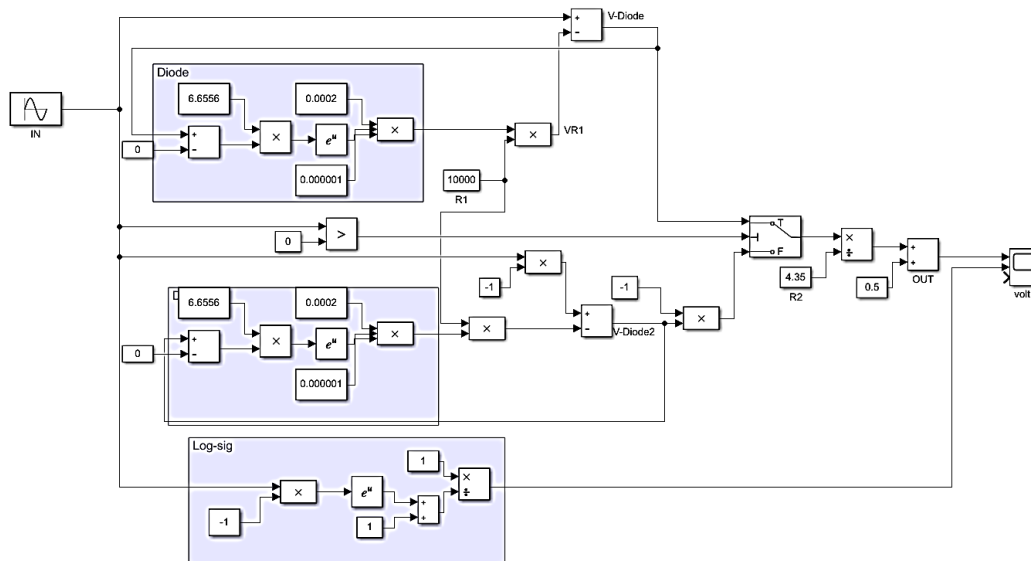
4- النتائج والمناقشة

سوف نناقش نتائج نمذجة التابع الجزيئي log-sig ومقارنته مع خرج التابع الأصلي، عند تطبيق إشارة دخل جيبية ضمن المجال [-5V-5V] يكون خرج الدارة الجزيئية كما هو موضح في الشكل (27).



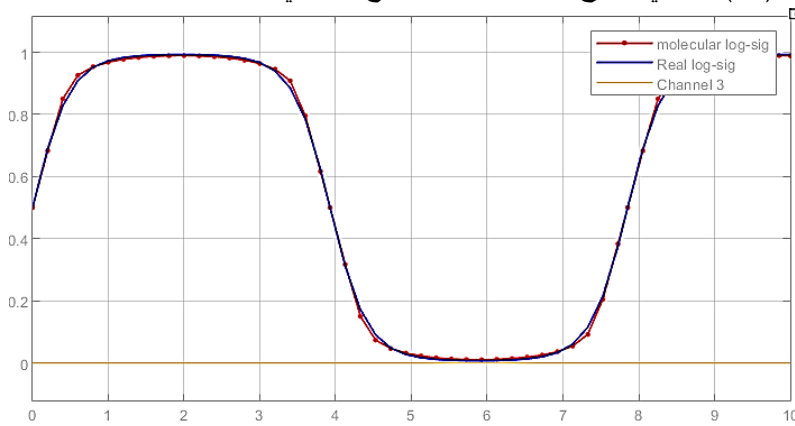
الشكل (27) إشارتي الدخل والخرج للدارة الجزيئية للتابع log-sig

سنقوم بمقارنة خرج الدارة الجزيئية بالخرج الأصلي للتابع log-sig للتأكد من نجاح التصميم الجزيئي، كما يُظهر الشكل (28).



الشكل (28) مقارنة الدارة الجزيئية والتابع الأصلي

يوضح الشكل (29) إشارتي الخرج للدارة الجزيئية والتابع الأصلي.



الشكل (29) خرج الدارة الجزيئية والتابع الأصلي

نلاحظ تطابق إشارتي الخرج بين التابع log-sig الجزيئي والتابع الأصلي ويمكن للدارة الجزيئية السابقة أن تقوم بدور التابع log-sig وبالتالي تمثل هذه الدارة النواة الأساسية لتصنيع الشبكات العصبونية التشابعية الجزيئية.

5- الاستنتاجات والتوصيات

- إنَّ تصميم توابع الشبكات العصبونية الاصطناعية بشكل تشابهي جزئي يحقق قفزة نوعية في مجال الشبكات العصبونية على الصعيدين الحاسوبي والطبي.
- إذا كان بالإمكان تصنيع وتقليد سلوك الدارات باستخدام المركبات العضوية بالتالي سنتمكن من دمجها داخل جسم الإنسان وتعتمد على السائلة العصبية كتغذية كهربائية لها.
- ستحقق الإلكترونيات الجزيئية تطوراً كبيراً في مجال الدارات الإلكترونية المتكاملة حيث ستساهم في إعادة الحياة لقانون مور بعد أن وصلت الدارات المتكاملة لحدود تصنيع 1nm.

6- المراجع

- [1] Reed, M. A; Zhou, C; Muller, C. J; Burgin, T. P; Tour, J. M; 1997, *Conductance of a Molecular Junction*. Science, vol. 278, pp. 252-254.
- [2] Tans, S. J; Devoret, M. H; Dai, H; Thess, A; Smalley, R. E; Geerligs, L. J; Dekker, C. 1997, *Individual single-wall carbon nanotubes as quantum wires*. Nature, 386(6624), 474–477.
- [3] Ottaviano, L; Santucci, S; Di Nardo, S; Lozzi, L; Passacantando, M; Picozzi, P. 1997, *Rectifying behavior of silicon-phthalocyanine junctions investigated with scanning tunneling microscopy/spectroscopy*. Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 15(3), 1014–1019.
- [4] Xu, Q; Scuri, G; Mathewson, C; Kim, Ph; Nuckolls, C; Bouilly, D. 2017, *Single Electron Transistor with Single Aromatic Ring Molecule Covalently Connected to Graphene Nanogaps*. Nano Letters, acs.nanolett.7b01745.
- [5] S, safapour; R, sabbaghi; F, razaghian; A, shokri. 2022, *Modeling flip-flops based on molecular diode structures*. Journal of Molecular.
- [6] Huanyan Fu, Xin Zhu, Peihui Li, Mengmeng Li, Lan Yang, Chuancheng Jia, Xuefeng Guo. 2022, *Recent progress in single-molecule transistors: their designs, mechanisms and applications*. Journal of Materials Chemistry C.
- [7] Bumm, L. A; Arnold, J. J; Cygan, M, T; Dunbar, T. D; Burgin, T, P; Jones, L; Weiss, P. S. 1996, *Are Single Molecular Wires Conducting?*. Science, 271(5256), 1705–1707..
- [8] Zhou, C; Deshpande, M. R; Reed, M. A; Jones, L; Tour, J. M. 1997, *Nanoscale metal/self-assembled monolayer/metal heterostructures*. Applied Physics Letters, 71(5), 611–613.
- [9] Metzger, R. M; Chen, B; Höpfner, U; Lakshmikantham, M. V; Vuillaume, D; Kawai, T; Ashwell, G. J. 1997, *Unimolecular Electrical Rectification in Hexadecylquinolinium Tricyanoquinodimethanide*. Journal of the American Chemical Society, 119(43), 10455–10466.
- [10] Davis, W. B; Svec, W. A; Ratner, M. A; & Wasielewski, M. R. 1998, *Molecular-wire behaviour in p-phenylenevinylene oligomers*. Nature, 396(6706), 60–63.
- [11] Reed M, A. 1999, *Progress in Molecular-Scale Devices and Circuits*. presented at 57th Annual IEEE Device Research Conference, Santa Barbara, CA, 28-30.
- [12] Mathew, P. T; Fang, F. 2018, *Advances in Molecular Electronics: A Brief Review*. Engineering.
- [13] Chen, H; Fraser Stoddart, J. 2021, *From molecular to supramolecular electronics*. Nature Reviews Materials, 6(9), 804–828.
- [14] Jia, C; Famili, M; Carlotti, M.;Liu, Y; Wang, P; Grace, I. M; Duan, X. 2018, *Quantum interference mediated vertical molecular tunneling transistors*. Science Advances, 4(10), eaat8237.
- [15] Khodja DE, Kheldoun A, Refoufi L 2010, *Sigmoid Function Approximation for ANN Implementation in FPGA Devices*. CSECS '10 Proceedings of the 9th WSEAS international conference on Circuits, systems, electronics, control & signal processing p. 112-116.
- [16] HAGAN M, DEMUTH H, 1999, *Neural networks for control*. Proceedings of the American Control Conference (Cat. No⁹⁹.CH36251). doi:10.1109/acc.1999.786109 , p.1642-1656.
- [17] Jeyanthi S., Subadra M. 2014, *Implementation of single neuron using various activation functions with FPGA*. IEEE International Conference on Advanced Communications, Control and Computing Technologies, doi:10.1109/icaccct.2014.7019273 , p.1126-1131.
- [18] Ali HK, Mohammed EZ ,2010, *Design Artificial Neural Network Using FPGA*.VOL.10 No.8, IJCSNS International Journal of Computer Science and Network Security,88-92.
- [19] م.علي رجب سقور، دراسة وتصميم الشبكات العصبونية الاصطناعية بشكل إلكتروني تشابهي . مجلة جامعة البعث، سلسلة العلوم الهندسية الميكانيكية والكهربائية والمعلوماتية، المجلد 42، العدد 15.
- [20] Chang, R. 2010, *Chemistry 10th Edition*.
- [21] Ratner, M. A; Jortner J. 1997, *Molecular Electronics: Some Directions . in Molecular Electronis*. J. Jortner and M. Ratner, Eds. London, U.K.: Blackwell Science Ltd, pp. 5-72.

- [22] Mujica, V; Kemp, M; Ratner, M. A. 1994, *Electron conduction in molecular wires. I. A scattering formalism*. The Journal of Chemical Physics, 101(8), 6849–6855.
- [23] Mujica, V; Kemp, M; Roitberg, A; Ratner, M. 1996, *Current-voltage characteristics of molecular wires: Eigenvalue staircase, Coulomb blockade, and rectification*. The Journal of Chemical Physics, 104(18), 7296–7305.
- [24] Reed, M. A. 1999, *Molecular-scale electronics. Proceedings of the IEEE*, 87(4), 652–658.
- [25] WEISS, P. S; BUMM, L. A; DUNBAR, T. D; BURGİN, T. P; TOUR, J. M; & ALLARA, D. L. 1998, *Probing Electronic Properties of Conjugated and Saturated Molecules in Self-Assembled Monolayers*. Annals of the New York Academy of Sciences, 852(1 MOLECULAR ELE), 145–168.
- [26]. د حسن البستاني، م. نور احمد ، نمذجة ومحاكاة الإلكترونيات الجزيئية. 2023 مجلة جامعة طرطوس، سلسلة العلوم الهندسية ، المجلد 7، العدد 2.
- [27] Ellenbogen, J.C; Love, J.C. 2000, *Architectures for molecular electronic computers. I. Logic structures and an adder designed from molecular electronic diodes*. 88(3), 386–426.
- [28] Callister, W.D, Rethwisch, D.G. 2007, *Materials science and engineering*.