

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	5
ПРЕДИСЛОВИЕ К РУССКОМУ ИЗДАНИЮ	6
Глава 1. ДОСТИЖЕНИЯ АТОМНОЙ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ НАНОТЕХНОЛОГИИ	15
Введение	15
Значение наношкалы	17
Атомные и молекулярные основы нанотехнологии	19
Некоторые ключевые изобретения и открытия	22
Сканирующий туннельный микроскоп	22
Атомный силовой микроскоп	23
Диамантоиды	24
«Бакиболы»	26
Углеродные нанотрубки	26
Циклодекстрины, липосомы и моноклональные антитела	28
Современные исследования и разработки	30
Перспективы нанонауки и нанотехнологии	36
Обсуждение и выводы	37
Некоторые важные интернет-сайты, имеющие отношение к нанотехнологии	38
Литература к главе 1	38
Глава 2. МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СИЛЫ И ПОТЕНЦИАЛЫ В НАНОСИСТЕМАХ	42
Введение	42
Ковалентные и нековалентные взаимодействия	42
Потенциальная энергия и силы межатомного и межмолекулярного взаимодействий	44
Экспериментальная и теоретическая разработки потенциалов межчастичного взаимодействия	49
Этап (1): АСМ-измерения и эмпирическое моделирование	50
Этап (2): теоретическое моделирование	54
Линейризованные присоединенные плоские волны (ЛППВ)	54

Полнопотенциальный метод линеаризованных присоединенных плоских волн (ПП ЛППВ).....	56
Этап (3): разработка потенциалов для наночастиц	58
Феноменологические межатомные и межмолекулярные потенциалы	59
1. Межатомные потенциалы для систем из металлов	60
1.1. Многочастичные потенциалы модели «погруженного» атома (МПА).....	61
1.2. Многочастичные потенциалы Финниса и Синклера (ФС)	64
1.3. Дальнодействующие многочастичные потенциалы Саттона и Чена (СЧ).....	66
1.4. Многочастичные потенциалы Маррела–Моттрама	67
1.5. Многочастичные дальнодействующие потенциалы Рафии–Табара и Саттона (РТС) для сплавов металлов.....	70
1.6. Потенциалы, зависящие от угла между связями в металлах.....	71
2. Межатомные потенциалы для систем с ковалентными связями.....	73
2.1. Многочастичные потенциалы Терсоффа для описания взаимодействий атомных пар C-C, Si-Si и C-Si.....	73
2.2. Потенциалы Бреннера типа Терсоффа с первичными поправками для генерации углеводородов.....	75
2.3. Потенциалы Бреннера типа Терсоффа со вторичными поправками для генерации углеводородов.....	77
3. Межатомные потенциалы для систем с нековалентными связями C-C	79
3.1. Потенциалы Леннарда–Джонса и Кихары	79
3.2. Потенциал «exp-6»	79
3.3. Потенциал Руоффа–Хикмана	80
4. Межатомные потенциалы для системы металл–углерод	81
5. Поле механических напряжений вблизи узлов атомной решетки	82
Обсуждение и выводы.....	83
Литература к главе 2.....	84

Глава 3. ТЕРМОДИНАМИКА И СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА МАЛЫХ СИСТЕМ

Введение	93
Наноразмерные термодинамические системы.....	96
Энергия, теплота и работа в наносистемах	98
Законы термодинамики.	99
Нулевой закон	101
Первый закон	102
Второй закон	104
Третий закон.....	105
Статистическая механика малых систем.....	106

