

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
Линеаризованные 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 С-С, Si-Si и С-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 С-С	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

Термодинамика и статистическая механика неэкстенсивных систем	108
Теорема Эйлера об однородных функциях	109
Формулы энтропии Больцмана и Больцмана–Гиббса	110
Формула энтропии Цаллиса	111
Микроканонический ансамбль неэкстенсивных систем	115
Канонический ансамбль неэкстенсивных систем	116
Обсуждение и выводы	117
Литература к главе 3	118
Глава 4. МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОСИСТЕМ МЕТОДАМИ	
МОНТЕ-КАРЛО	121
Введение	121
Генерация случайных чисел	122
Генерация равномерно распределенных случайных чисел	
в интервале $[0, 1)$	122
Генерация случайных чисел на отрезке $[a, b)$ в соответствии	
с заданной функцией распределения $P(x)$	123
Выборка по значимости	123
Интегрирование методом Монте-Карло	126
Приложения метода МК к наносистемам, состоящим	
из нескольких частиц	129
Равновесная статистическая механика и метод Монте-Карло	131
Процесс Маркова	131
Выбор функции перехода в новое состояние	134
Пример	135
Коэффициенты принятия и выбор направления движения	136
Другие находки улучшения скорости моделирования	137
Применение метода Монте-Карло к неравновесным задачам	139
Уравнение Ланжевена	139
Взаимодействующие системы	142
Обсуждение и выводы	144
Литература к главе 4	144
ГЛАВА 5. МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОСИСТЕМ МЕТОДАМИ	
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ.....	147
Введение	147
Принципы МД-моделирования наносистем	149
Интегрирование уравнения движения Ньютона	151
1. Метод Верле	152
2. Метод с перешагиванием («чехарда»)	153
3. Метод скоростей Верле	153
4. Предикторно-корректорный метод Гира	154

5. Выбор шага по времени Δt	155
МД-моделирование систем в контакте с тепловой ванной – термостатом	156
1. Термостат с масштабированием скоростей.....	156
2. Термостат Нозе–Хувера (метод расширенной системы)	157
3. Термостат Ланжевена.....	159
Расчеты свойств систем по данным МД-моделирования	161
Обсуждение и выводы.....	161
Литература к главе 5	162
ГЛАВА 6. МЕТОДЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОПТИМИЗАЦИИ НАНОСИСТЕМ.....	165
Введение	165
А. Классификация методов моделирования, основанных на точности и времени вычислений	166
Методы с точностью аппроксимации наивысшего порядка (самый ЦПУ-интенсивный ввод/вывод).....	168
Методы с точностью аппроксимации второго порядка.....	168
Полуэмпирические методы.....	169
Стохастические методы.....	169
В. Классификация оптимизаций для молекулярного моделирования	171
Методы локальной оптимизации [27–29]	171
1. Метод наискорейшего спуска (МНС)	171
2. Метод динамики Ньютона с демпфированием	172
3. Метод сопряженных градиентов (МСГ).....	172
4. Квазиньютоновские методы	173
Методы глобальной оптимизации [28, 29]	174
1. Алгоритм имитации отжига	175
2. Генетический алгоритм	179
Обсуждение и выводы	180
Литература к главе 6	181
Глава 7. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В НАНОСИСТЕМАХ.....	184
Введение	184
Правило фаз Гиббса.....	186
Фазовые переходы	187
Сравнение фазовых переходов в малых и больших системах.....	189
Фрагментация.....	193
Экспериментально наблюдаемые фазовые переходы в малых системах	194
1. Испарение воды в закрытой нанотрубке	194
2. Мицеллообразование и коацервация	196
3. Кристаллизация	199

Обсуждение и выводы	201
Литература к главе 7	202
Глава 8. ПОЗИЦИОННАЯ СБОРКА АТОМОВ И МОЛЕКУЛ.....	205
Введение	205
Позиционная (или механическая) сборка.....	206
Сканирующая зондовая микроскопия.....	211
1. Топографинер	211
2. Квантово-механический туннельный эффект	211
3. Пьезоэлектрические явления.....	213
4. Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ)	214
5. Контур электронной обратной связи	214
6. Атомный силовой микроскоп (АСМ).....	215
Применения СТМ для позиционной сборки молекул	216
Обсуждение и выводы	219
Литература к главе 8	219
Глава 9. МОЛЕКУЛЯРНАЯ САМОСБОРКА	221
Введение	221
Пять факторов, ответственных за самосборку.....	222
1. Молекулярные «строительные» блоки (МСБ).....	222
2. Межмолекулярные взаимодействия при самосборке.....	223
3. Обратимость процесса самосборки	223
4. Подвижность молекул	223
5. Среда протекания процесса	223
Примеры контролируемых самосборок.....	224
А. Самосборки на твердых поверхностях (методики фиксации заравок)	224
А1. Связывание за счет энергии сродства к антителам	224
А2. Связывание за счет энергии сродства при помощи системы биотин-стрептавидин (БИО-СТВ) и его модификации.	225
А3. Комплексообразование с фиксированными ионами металлов (КФИМ)	225
А4. Самосборка монослоя (ССМ).....	226
А4.1. Физическая адсорбция	227
А4.2. Включение в полиэлектролиты или проводящие полимеры	227
А4.3. Включение в ССМ.....	227
А4.4. Неориентированное присоединение к ССМ.....	228
А4.5. Ориентированное присоединение к ССМ.....	228
А4.6. Прямое избирательное по узлу присоединение к золоту ..	229
А5. Самосборка, направляемая воздействием деформации	227

А6. ДНК-направляемая самосборка.....	229
А7. Самосборка на поверхностях кремниевых подложек	230
В. Самосборка в жидкой среде	231
Обсуждение и выводы.....	232
Литература к главе 9	233
Глава 10. ДИНАМИЧЕСКАЯ КОМБИНАТОРНАЯ ХИМИЯ	236
Введение	236
Динамическая комбинаторная библиотека (ДКБ)	238
Проблемы и ограничения при разработке ДКБ	241
(1) Природа компонентов и «темплетов» ДКБ	242
(2) Типы межмолекулярных взаимодействий в ДКБ.....	242
(3) Термодинамические условия	243
(4) Методы анализа ДКБ	243
Распознавание молекул.	244
Некоторые примеры ДКБ и их применение	247
Химия комплексов «гость–хозяин».....	249
Обсуждение и выводы	253
Литература к главе 10	253
Глава 11. ДИАМАНТОИДЫ – МОЛЕКУЛЯРНЫЕ	
«СТРОИТЕЛЬНЫЕ» БЛОКИ	257
Введение	257
Молекулярные «строительные» блоки	258
Диамантоиды.....	264
Некоторые физические и химические свойства	
молекул диамантоидов	264
Синтез диамантоидов.....	268
Применение диамантоидов.....	268
Применение диамантоидов в виде МСБ.....	269
Диамантоиды как средства для доставки лекарственных	
веществ и их целенаправленного переноса.....	271
ДНК-направляемая сборка и ДНК-адамantan-протеиновые	
наноструктуры	273
Диамантоиды в химии комплексов «гость–хозяин».....	276
Обсуждение и выводы	277
Литература к главе 11	278
ГЛОССАРИЙ	283
ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ	307