

Nanoteknoloji ve Bilgisayar Modellemeleri

Cem Özdoğan

Çankaya Üniversitesi, Malzeme Bilimi ve Mühendisliği Bölümü, 06810 Ankara, Türkiye
ozdogan@cankaya.edu.tr

Nano Bilim ve Nano Teknoloji günümüzde sık duyduğumuz iki terimdir. İlgili alanları 1 ile 100 nanometre (santimetrenin milyonda biri, bir nanometreyi ifade etmektedir) arasında küçük boyutlardaki sistemler, ki bu sistemler atom ve molekül boyutları seviyelerindedir, ile yeni kavramlar ve ürünler geliştirmektir. Temel düşünce, bu küçük sistemler/malzemeler ile daha büyük, karmaşık ve işlevsel yapıların tasarlanması ve geliştirilmesidir. Nano boyutta ürün çıkarma çalışmalarından önce yapılan çalışmalar, var olan ürünleri küçültme (büyükten küçüğe yönelim, mikro-lithografi yöntemi), mikro düzeylere indirgeme üzerine kurulmuştur. Nano çalışmalar ile tasarımın nano boyutlarda yeni ürünler geliştirme (küçükten büyüğe yönelim) üzerine yoğunlaşması ile bakış açıları değişmiş ve yeni yaklaşımlar ile yeni kavramlar ortaya çıkmaya başlamıştır.

"*Bilgisayar*" çağının getirdikleri ve bu alanda yapılan çalışmalar, ortaya çıkmakta olan ürünler, yeni gelen "*Nano*" çağı için gerekli altyapıyı oluşturmakta ve nano yapılarda ilerlemeye ışık tutmaktadır. "*Nano*" çağının gelişiminde, bilim insanlarının kullandıkları araçlar ve ihtiyaç duydukları üretkenlik altyapılarının deneysel tabanlı olmakla birlikte, oluşan maliyet sorunları ve/veya deneysel olarak yapılması zor ve masraflı olması, bilgisayar tabanlı benzetim (simülasyon) yöntemlerine ayrı bir önem kazandırmıştır. Bu durum da bilgisayar deneyleri olarak adlandırılmaktadır. Günümüzde pek çok şirket, nano teknolojik ürünleri, ekipmanları üretirken yaptıkları araştırmalarda kullandıkları benzetim ve modelleme yazılımlarını kendileri geliştirmekte veya açık kaynaklı uygulamaları kullanmaktadır. Atomların buldukları ortamlardaki davranışlarının çözümlenmesinde ve yeni oluşturulan ürünler üzerinde yapılan deneylerde sonuçlarının toplanmasında kullanılan analiz ve benzetim uygulamaları yeni gelişen bilim ile paralel gelişimlerini sürdürmektedirler. Özellikle kuantum kimyası alanında çok sayıda paket program hem benzetim hemde görselleştirme alanlarında geliştirilmiş ve ticari bir yapı almışlardır.