

Nanosistemlerden kristale: Farklı alanlar, farklı malzemeler, farklı yöntemler ve hepsini bir araya getirme uğraşı

Emre S. Taşcı

[<http://www.emresururi.com>]

(ODTÜ Fizik Bölümü)

Hacettepe Üniversitesi,
Fizik Mühendisliği Bölümü Seminer Salonu,
28 Mayıs 2014 Çarşamba, 14:00

Sanal dünyada hesap gücünün, uygulamada ise atomik boyutlardaki işleme tekniklerinin sürekli gelişmesinin sonucu olarak, hesaplamalarda Moore yasasının, gerçek dünyada ise Feynman'ın meşhur "aşağıda çok yer var!" önermesinin sınırlarına varmış durumdayız. Böyle bir dünyada birden fazla işlevselliği bünyesinde barındıran yeni malzemelerin ve sistemlerin tasarlanıp üretilmesi eskisinden de büyük bir önem taşımakta. Gerek deneysel, gerekse hesaplamalar sonucunda toplanan verilerin fazlalığı bize yeni imkanlar sunmakta olup, farklı boyutlar (ve alanlar) üzerinden köprüler kurmamıza imkan vermekte: bilinen sistemlerden yola çıkarak, deneysel açıdan masraflı olan deneme/yanılma aşamasını benzetimler vasıtasıyla sanal ortamda gerçekleştirilerek üretime yardımcı olduğumuz bir safhadayız.

Bu sunumda, nanosistemler ve atomik kümelerin üretimine dair algoritmaların geliştirilmesinden başlayarak, bu sistemlerin moleküler dinamik benzetimler yoluyla incelenmesine; oradan DFT ve bilişim yoluyla kendini iyileştiren malzeme arayışına değinip, sonrasında da grup teorisinin her türlü teorik, pratik, yarı-teorik/yarı-pratik bileşeniyle geliştirdiğimiz uygulamaları anlatıp, yeni karbon yapılar ve multiferroik perovskitler üzerinden bütün bu alanları bir araya getirme uğraşımı (ve böylelikle akademik hayatımı da) özetlemeye çalışacağım.

Anahtar kelimeler: Nanosistemler ve atomik kümeler; Moleküler Dinamik; Katıhal Fiziği; Dönüşüm Sağlamlaştırması (Transformation Toughening); Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT); Grup Teorisi; Yapısal Ağaçlar (Barnighausen Trees); Faz Geçişleri; Pseudo-simetri; Malzeme Bilişimi (Materials Informatics).

