

به نام خالق هستی

مقدمه‌ای بر نانو تکنولوژی و کاربردهای آن



بخش اول

مقدمه ای بر نانو تکنولوژی

ایده نانو فناوری را برای بار نخست، فیزیکدان مشهور آمریکایی ریچارد فاینمن، در ۲۹ دسامبر ۱۹۵۹ مطرح کرد. پدر علم نانو در اجلاس سالانه انجمن فیزیکدانان آمریکا در انستیتو فناوری کالیفرنیا در یک سخنرانی با عنوان " در آن پایین فضای زیادی وجود دارد" به معرفی توانایی های موجود در جهان مولکول ها و دستکاری اتم ها به منظور ساخت مواد با خصوصیات و کارایی جدید پرداخت. در این سخنرانی فاینمن امکان نگارش دایره المعارف بریتانیا را بر نوک سوزن توضیح داد. در واقع هدف او ایجاد انگیزه در مراکز آموزشی و پژوهشی برای جلب توجه به دنیای نانو بود.



ریچارد فاینمن برنده جایزه نوبل فیزیک:

There is plenty of room at the bottom

مقیاس نانو به افتخار سهم ارزنده آقای فاینمن:

$$1 \text{ φn man} = 10^{-9} \text{ m} = 10^{-3} \text{ μm} = 10^{\circ} \text{A}$$

سال ۱۹۶۵ تولید نانو ذرات فلزی در مقیاس آزمایشگاهی

کلمه نانوفناوری برای نخستین بار در سال ۱۹۸۶ در کتاب "موتورهای آفرینش در عصر جدید نانوفناوری" استفاده شد.



پیشینه نانو فناوری

شیشه گران قرون وسطایی از نخستین نانو فناوریان بودند که با افزودن نانو ذرات طلا سبب تغییر رنگ در شیشه های کلیساها شدند.



جام لیکر گوس

مقدمه ای بر نانو تکنولوژی

مقیاس نانو

پیشوند نانو در اصل یک کلمه یونانی است. معادل لاتین این کلمه Dwarf به معنای کوتوله و قد کوتاه است.

قلمرو جهان نانو فناوری سرزمینی به وسعت ۱ تا ۱۰۰ نانومتر است. یک نانومتر $1/800000$ قطر موی انسان است.



کوچکترین اشیای قابل دید توسط چشم غیر مسطح اندازه ای حدود ۱۰۰۰۰۰ نانومتر دارند.

نانو تکنولوژی چیست؟

علم نانو مطالعه اصول اولیه مولکول ها و ساختارهای با ابعاد بین ۱ تا ۱۰۰ نانو متر است. این ساختارها را نانو ساختار می نامیم. نانو تکنولوژی کاربرد این ساختارها در دستگاههای با اندازه نانومتری است.

❖ یکی از ویژگی های مهم نانو تکنولوژی جنبه چند رشته ای آن است. (نانو زیست, نانو شیمی, نانو فیزیک, نانو پزشکی و ..)

یکی از ویژگی های مهم نانو تکنولوژی جنبه چند رشته ای آن است. مفهوم چند رشته ای در نانو تکنولوژی بدان معنا است که نیروی کاری نانو تکنولوژی باید دارای بینش وسیعی از مفاهیم زیست شناسی، فیزیک، شیمی، اصول مهندسی طراحی فرآیند و محصولات باشد. به عنوان مثال، علم زیست شناسی به دو دلیل مورد نیاز است : اول آنکه محصولات نانو تکنولوژی به شدت از سیستمهای زیستی تبعیت میکنند و دوم اینکه محصولات نانو کاربرد چشمگیری در زیست پزشکی دارند. علم فیزیک مورد نیاز است زیرا دنیای نانو دنیای توابع موج و کشف نیروهای اتمی ناشناخته است. علم شیمی مورد نیاز است زیرا روش های پیوند مولکول ها با همدیگر و چگونگی ترکیب مواد را به ما می آموزد. به اصول مهندسی مورد نیاز است تا بتوان قابلیت تولید و حیات اقتصادی را تضمین نمود.

چرا نانو تکنولوژی؟

آنچه باعث ظهور نانو تکنولوژی شده عبارتند از:

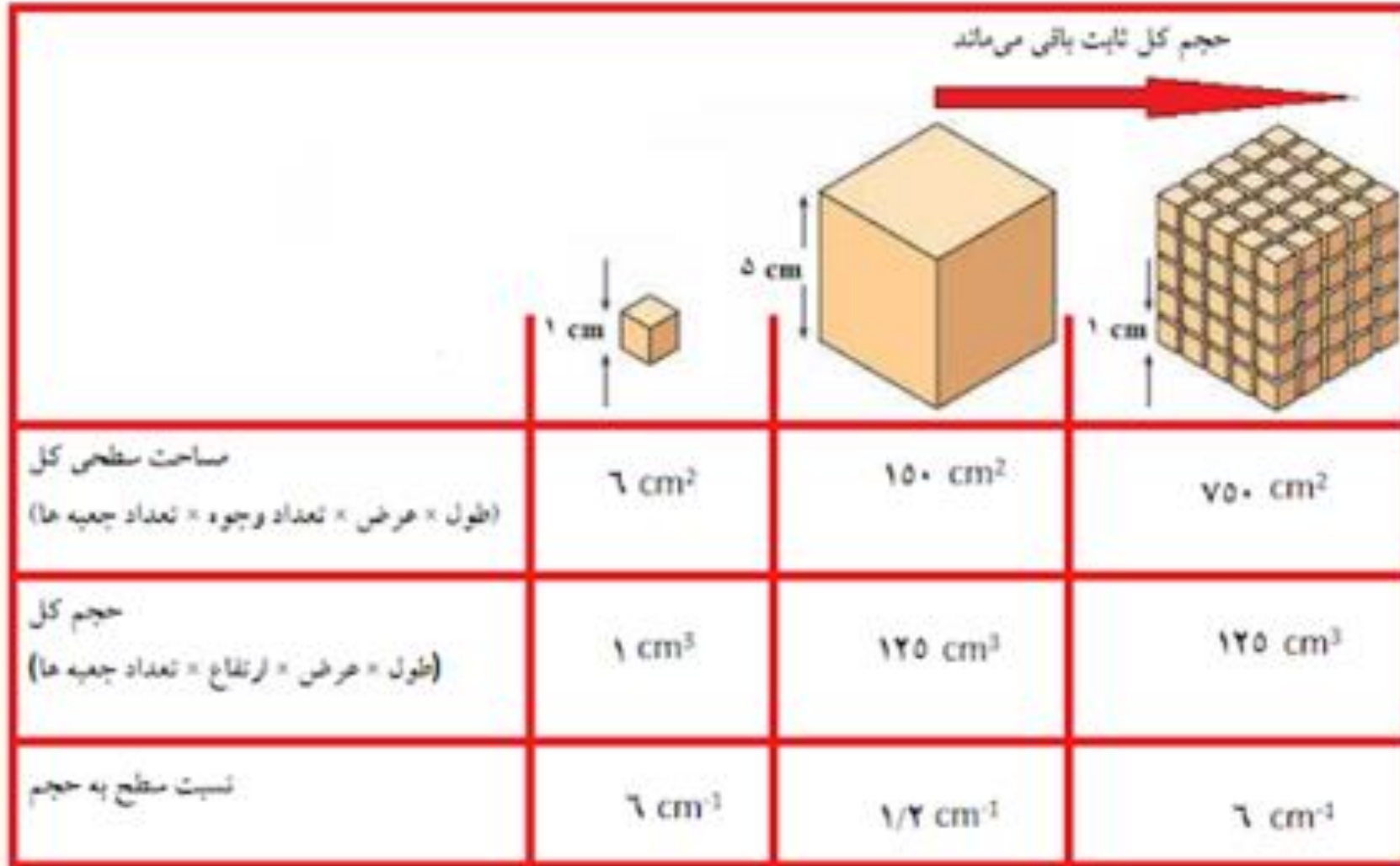
۱- نسبت سطح به حجم بالای نانو مواد

۲- کوانتومی بودن ساختار انرژی آنها

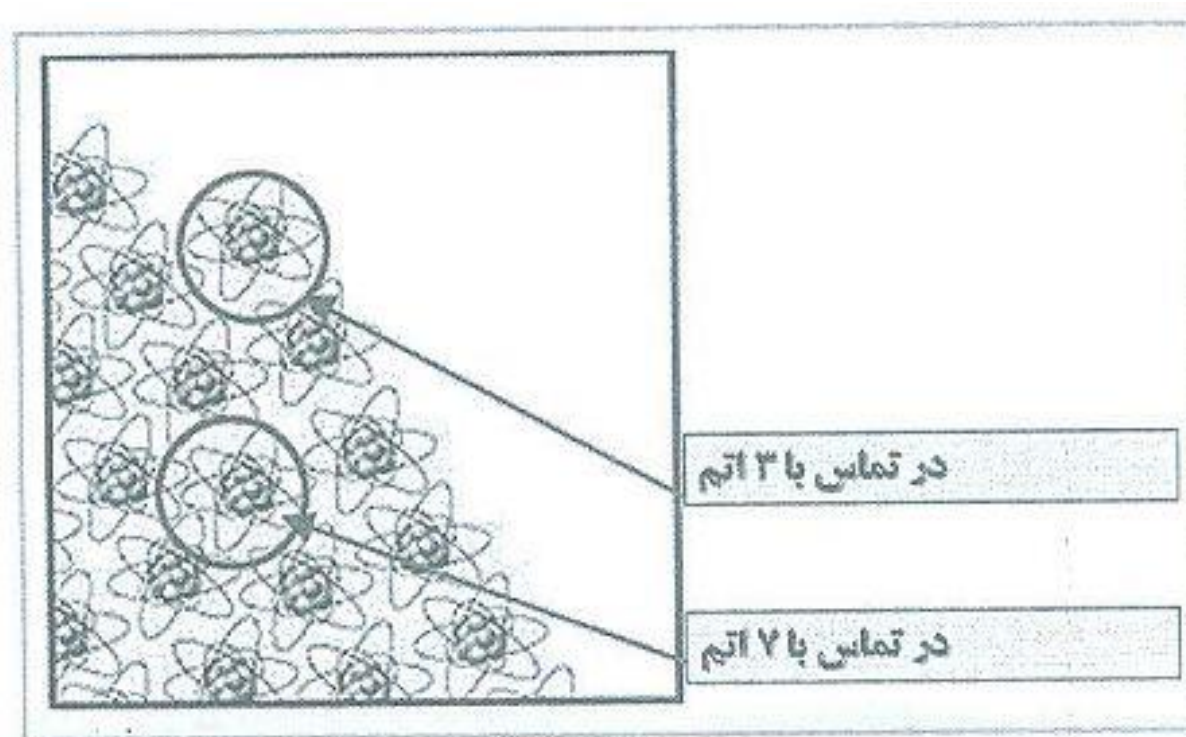
در ادامه نقش هر یک از این عوامل را در پیدایش خواص متفاوت مواد در مقیاس نانو توضیح می دهیم:

با ریزشیدن ابعاد جسم نسبت مساحت به حجم آن افزایش می‌یابد (شکل ۱). هر چه ریزشیدن بیشتر باشد، این نسبت افزایش بیشتری می‌یابد. با افزایش سطح تعداد اتم‌هایی که روی سطح قرار می‌گیرند، بیشتر می‌شود. در علم فیزیک و شیمی بین اتم‌هایی که روی سطح یک جسم هستند و اتم‌هایی که در داخل آن هستند، تفاوت وجود دارد. اتم‌هایی که در داخل ماده هستند به دلیل عدد همسایگی بیشتر (تعداد اتم‌های اطراف آن‌ها بیشتر است)، ظرفیتشان کامل است و تمایلی به انجام واکنش ندارند. اما اتم‌هایی که روی سطح هستند به دلیل اینکه با تعداد اتم‌های کمتری در ارتباط هستند، ممکن است تعدادی پیوند ناقص یا کامل نشده داشته باشند. بنابراین واکنش‌پذیری آن‌ها نسبت به اتم‌های داخل ماده بیشتر است. با ریزشیدن ابعاد ماده و رسیدن به ابعاد نانو، سطح ماده و به تبع آن اتم‌های روی سطح ماده نیز بسیار زیاد افزایش می‌یابد و در نتیجه ماده به شدت ناپایدار می‌شود. همان‌طور که می‌دانید در طبیعت تمام موجودات به سمتی می‌روند که پایدار باشند و سطح انرژی کمتری داشته باشند. ماده‌ای که به ابعاد نانو رسیده، به دلیل ناپایداری بسیار زیاد تمایل دارد با روش‌های مختلف به سمت پایداری برود که این پایداری شدن منجر به تغییر خواص می‌شود. یکی از این روش‌ها تغییر آرایش اتم‌ها است. همان‌طور که قبلاً هم توضیح داده شده بود، با تغییر اندک چیدمان اتم‌ها (تغییر در طول پیوند یا زاویه پیوند)، خواص مواد نیز متفاوت می‌شود.

افزایش نسبت سطح به حجم ذره مکعبی شکل با کاهش اندازه آن



شکل ۱

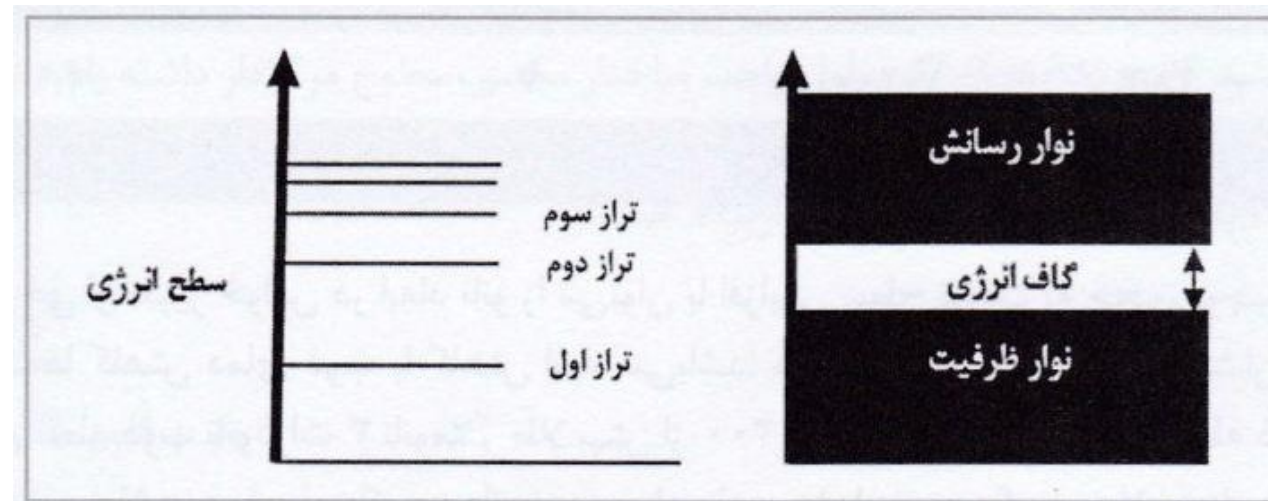


تفاوت اتم‌های روی سطح و داخل ماده

علت برخی از تغییر خواص در ابعاد نانو را می توان با افزایش سطح نسبت به حجم، توجیه کرد. یکی از این پدیده ها کاهش دمای ذوب با کاهش ابعاد است. به عنوان مثال دمای نقطه ذوب نانوذرات ۳ نانومتر طلا بیش از ۳۰۰ درجه پایین تر از دمای نقطه ذوب طلا در ابعاد معمولی است. همان طور که می دانید، در دمای ذوب مقدار انرژی گرمایی لازم برای ماده فراهم می شود تا کل پیوند بین اتم ها در حالت جامد شکسته شود و ماده تبدیل به مایع شود. وقتی ابعاد ماده ریز می شود و به ابعاد نانو می رسد، به دلیل افزایش سطح و اتم های روی سطح، تعداد پیوندهای شکسته شده افزایش می یابد. بنابراین برای شکست تمام پیوندها و تبدیل ماده از جامد به مایع انرژی کمتری نیاز است که منجر به کاهش دمای ذوب می شود .

همانطور که ذکر شد دومین عاملی که منجر به تغییر خواص مواد در مقیاس نانو می شود کوانتومی بودن ساختار انرژی آنها است:

کوانتوم، در لغت به معنی گسسته است. در فیزیک کمیت‌ها به دو دسته پیوسته و گسسته (کوانتومی) تقسیم می‌شوند. کمیات پیوسته هر مقدار عددی را می‌توانند داشته باشند، مانند تعداد افراد یک کلاس. از کمیت‌های فیزیکی پیوسته می‌توان به سرعت، انرژی جنبشی، نیرو، اصطکاک و ... و از کمیت‌های فیزیکی گسسته می‌توان به بار الکتریکی که مضرب صحیحی از بار الکتریکی یک الکترون است اشاره کرد. هر ماده‌ای که اطراف ما وجود دارد یک ساختار انرژی منحصر به فرد دارد و ساختار انرژی مواد مختلف با یکدیگر متفاوت است. ساختار انرژی اتم‌ها متشکل از ترازهای انرژی بوده اما ساختار انرژی مواد ماکروسکوپی و معمولی به صورت نوار انرژی است که در شکل زیر نشان داده شده است. در اتم‌های مختلف فاصله بین ترازها با یکدیگر متفاوت است و در مواد معمولی، پهنای باندهای انرژی و پهنای منطقه ممنوعه (گاف انرژی) با یکدیگر متفاوت است.



بسیاری از خواص مواد تابع ساختار انرژی آن است و با تغییر ساختار انرژی، خواص نیز تغییر می‌کند. در فیزیکی که در ابعاد معمولی وجود دارد و به عنوان فیزیک کلاسیک معروف است (همین فیزیکی که در دبیرستان می‌خوانیم)، انرژی و اکثر کمیت‌ها، مقادیری پیوسته بوده و هر مقداری می‌توانند داشته باشند، برای مثال انرژی جنبشی یک انسان در حال حرکت می‌تواند ۱، ۱.۵، ۲.۷ و یا هر مقدار دیگری ژول باشد. حال فرض کنید، می‌خواهیم یک ماده معمولی با ابعاد مشخص را ریز کنیم و به ابعاد نانو برسانیم. هنگامی که یک ماده ریز می‌شود، در واقع اتم‌های آن کاهش می‌یابد. اتمی که از ماده جدا می‌شود، تراز انرژی مربوط به آن نیز از ساختار نواری جدا می‌شود. زیر یک ابعاد مشخص (معمولاً زیر ۱۰۰ نانومتر) تعداد اتم‌ها و ترازهای انرژی به قدری کم می‌شود که دوباره نوارهای انرژی تبدیل به تراز انرژی می‌شود. پس با ریز شدن و رسیدن به ابعاد نانو علاوه بر افزایش بسیار زیاد سطح نسبت به حجم، دومین اتفاقی که می‌افتد، گسستگی نوارهای انرژی و تبدیل به تراز انرژی است. حال دیگر کمیتی مانند انرژی یک الکترون هر مقداری نمی‌تواند داشته باشد و باید انرژی آن به اندازه ترازهای انرژی باشد. از این‌رو به فیزیکی که در این ابعاد (ابعاد نانو) و ابعاد زیر آن یعنی ابعاد مولکولی و اتمی صادق است، فیزیک کوانتوم و یا فیزیک گسستگی می‌گویند.

برخی از تغییر خواص در ابعاد نانو مانند افزایش قدرت جذب امواج الکترومغناطیس یا تغییر رنگ، با گسسته شدن ترازهای انرژی توجیه می‌شود.

بنابر آنچه گفته شد:

در مقیاس نانو اشیاء شروع به تغییر رفتار می کنند. بدین مفهوم که در این مقیاس برخی روابط فیزیکی که برای مواد معمولی کاربرد دارند نقض می شوند. (به عنوان مثال قانون اهم در مقیاس نانو صادق نیست)

در مقیاس نانو برخی خواص فیزیکی و شیمیایی مواد تغییر می کنند.

خواص فیزیکی : رنگ، شفافیت، خواص الکتریکی، خواص مغناطیسی، سختی، حلالیت، نقطه ذوب و ...

خواص شیمیایی : سرعت واکنش، واکنش پذیری و ...

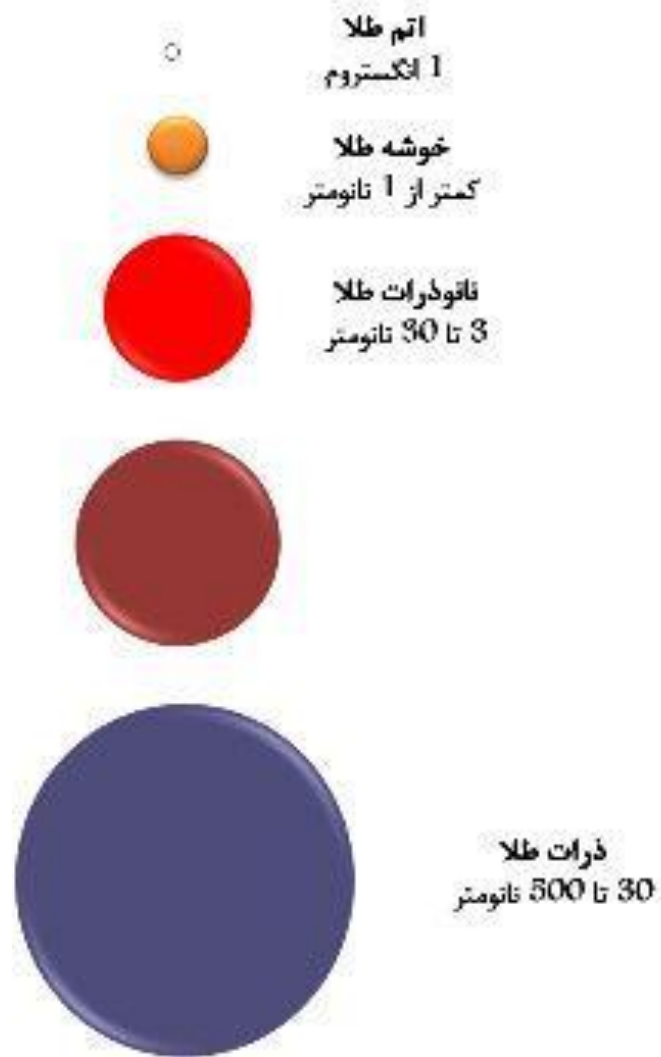
خواص مواد

تجربه چند هزار ساله زندگی انسان به او نشان داده که در شرایط عادی، ویژگی‌های یک ماده خاص تا حد قابل قبولی ثابت است و به این دلیل است که ما می‌توانیم مواد را از روی خواصشان شناسایی کنیم. موضوع جذابیت مقیاس نانو نیز مربوط به خواص مواد است. یافته‌های دانشمندان نشان می‌دهد که خواص مواد در مقیاس نانو بسیار متفاوت از مقیاس ماکرو است. به عبارت دیگر اگر ذرات یک ماده خاص را در حد چند نانومتر (۱ تا ۱۰۰ نانومتر) کوچک کنیم، این ذرات ویژگی‌های متفاوتی با ذرات بزرگ اولیه خواهند داشت. این در حالی است که کوچک کردن ذرات یک تغییر فیزیکی است و ما انتظار نداریم که با این تغییر فیزیکی، ویژگی‌های اصلی ماده تغییر کند. این امر سبب گردیده مقیاس نانو بیش از سایر مقیاس‌ها مورد توجه قرار گیرد.

- رنگ مواد در مقیاس نانو

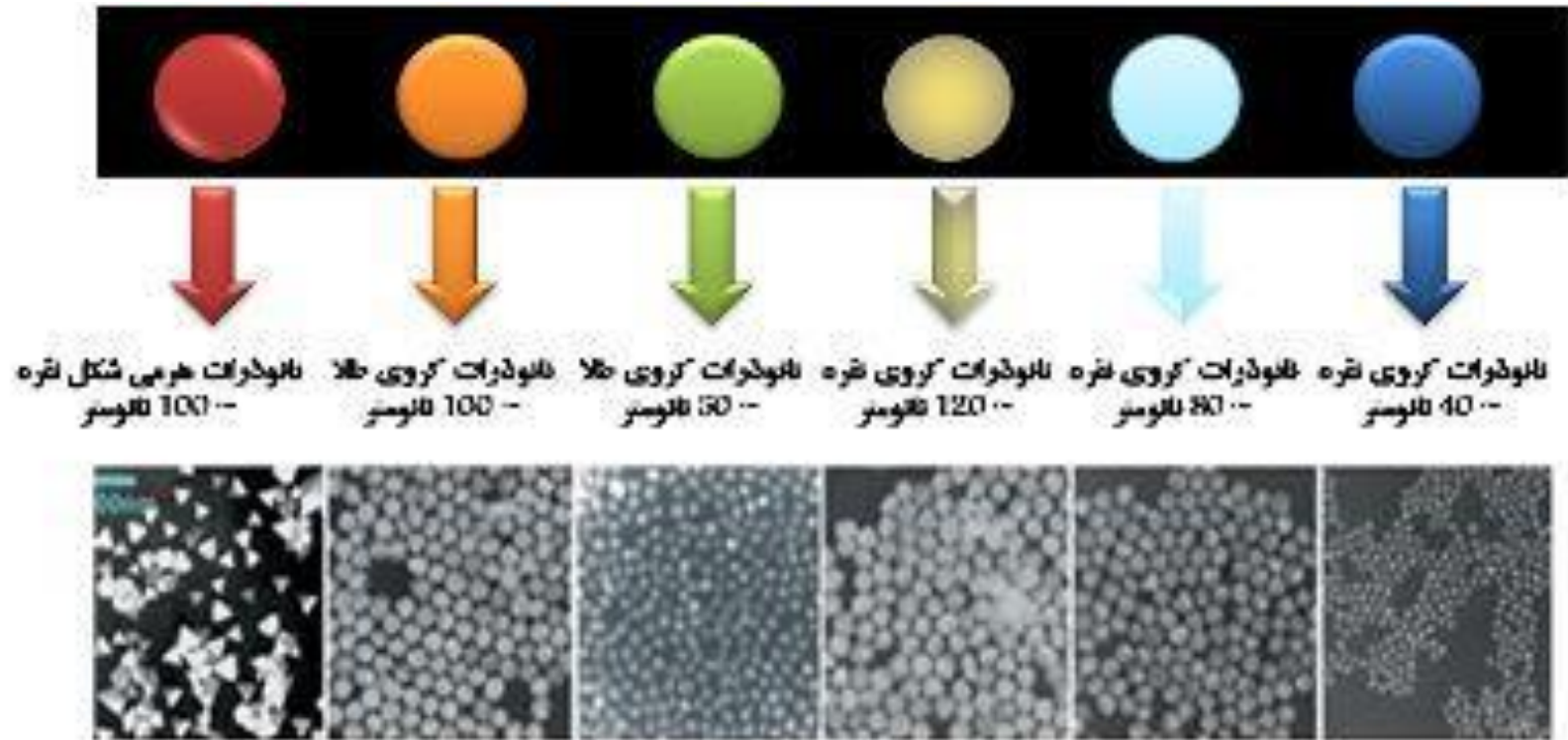


حتما بارها خرده‌های یک شیشه شکسته شده را دیده‌اید. ذرات حاصل از شکستن یک شیشه هر چه قدر هم که کوچک باشند، باز به بی‌رنگی و شفافیت شیشه اولیه هستند. اما این قاعده در مقیاس نانو صادق نیست. یعنی موادی وجود دارند که رنگ ذرات چند نانومتری آنها، با رنگ ذرات بزرگ‌ترشان متفاوت است. طلا و نقره شناخته شده‌ترین نمونه‌های این مواد هستند. شکل (الف) نمودار تغییرات رنگ ذرات طلا را بر حسب اندازه آنها نشان می‌دهد. این پدیده در دنیای ماکرومقیاس ما یک اتفاق غیر معمول است اما از آن غیرعادی‌تر این است که نانو ذرات نقره با تغییر شکل هندسی هم تغییر رنگ می‌دهند. شکل (ب) رنگ ذرات نقره و طلا را در شکل‌های هندسی مختلف نشان می‌دهد.



شکل الف





شکل ب

- تغییر شفافیت مواد در مقیاس نانو

شفافیت، یک خاصیت فیزیکی است و نشان‌دهنده میزان توانایی یک ماده در عبود دادن نور مرئی از خود است.



شفافیت، یک خاصیت فیزیکی است و نشان‌دهنده میزان توانایی یک ماده در عبور دادن نور مرئی از خود است. یک پرتو نور در برخورد با سطح ماده می‌تواند از آن عبور کند، جذب آن گردد یا بازتاب شود. اگر ماده‌ای پرتوهای نور را جذب کند و یا آنها را بازتاباند، نور را مسدود کرده است. مواد مختلف بسته به عملکردشان در برابر تابش نور، می‌تواند کاربردهای فراوانی داشته باشد. به عنوان مثال اکسید روی و اکسید تیتانیوم نور ماورای بنفش را کاملاً جذب می‌کنند و نور مرئی را بازتاب می‌کنند. این مواد که به رنگ سفید دیده می‌شوند، گزینه‌های بسیار مناسبی برای کرم‌های ضد آفتاب هستند. البته افراد بسیاری رنگ سفیدی را که این کرم‌ها بر روی پوست ایجاد می‌کنند، دوست ندارند. خوشبختانه این مشکل را می‌توان با کوچک کردن اندازه ذرات این مواد حل کرد. نانوذرات اکسید روی و اکسید تیتانیوم، با وجود اینکه نور ماورای بنفش را کاملاً جذب می‌کنند، اما برخلاف ذرات بزرگتر کاملاً شفاف هستند. البته این امر ناشی از عبور نور مرئی از این ذرات نیست، بلکه به سبب آن است که اندازه نانوذرات اکسید روی و اکسید تیتانیوم کوچک‌تر از طول موج نور مرئی (۴۰۰-۷۰۰ نانومتر) است و از این رو این ذرات توانایی بازتابش نور مرئی را ندارند.



شعله ور شدن سدیم در تماس با آب

- تغییر واکنش پذیری مواد در مقیاس نانو

واکنش پذیری مواد در مقیاس نانو افزایش چشمگیری پیدا می کند

- استفاده از نانو ذرات طلا به عنوان کاتالیزگر
- استفاده از نانو ذرات آلومینیوم به عنوان سوخت موشک.....
- استفاده از نانو کاتالیزورها

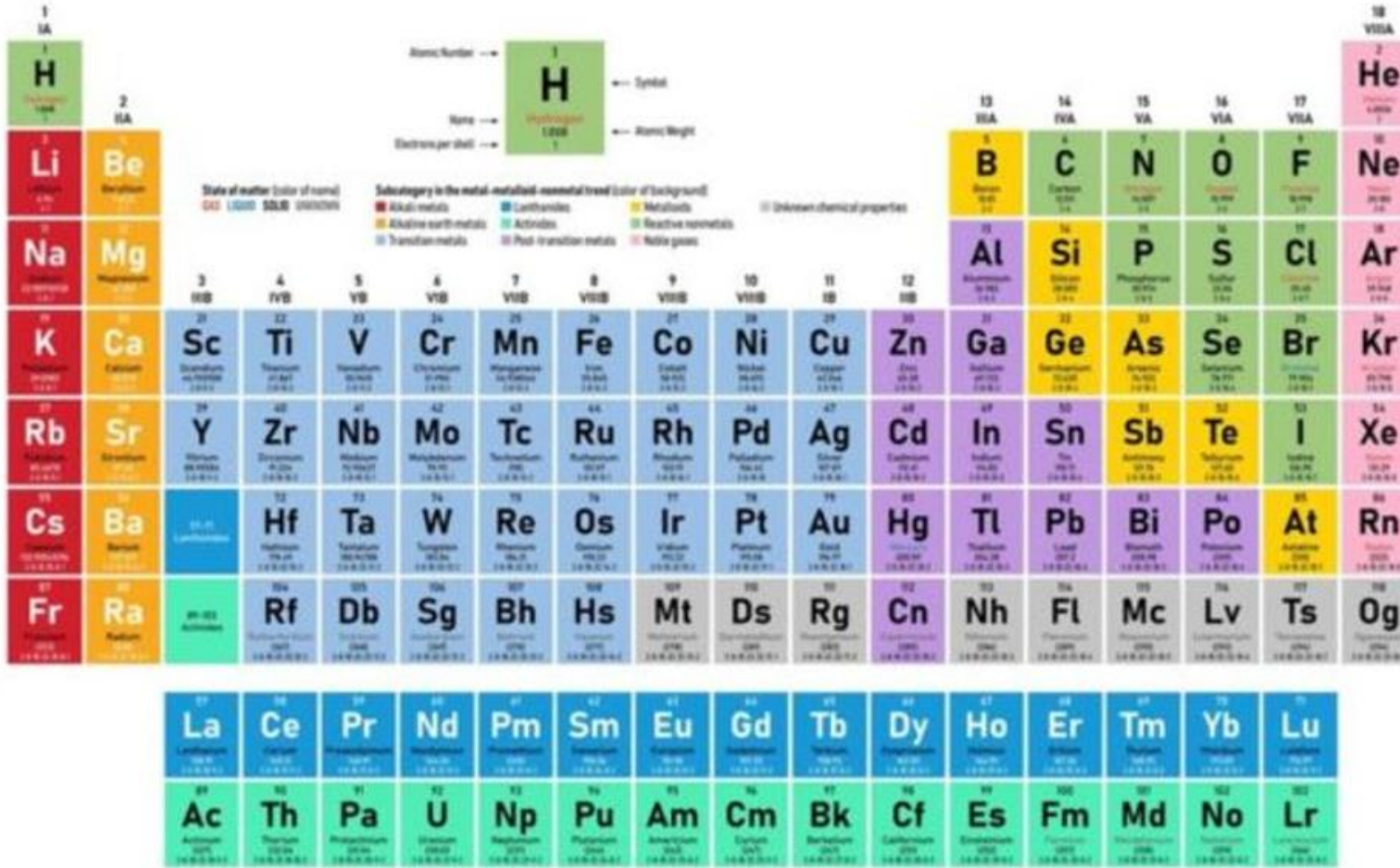
خواص شیمیایی یک ماده، خواصی هستند که به طور مستقل نمی‌توان آنها را اندازه‌گیری کرد. به این معنا که مقدار یک کمیت شیمیایی در طی واکنش و برهم‌کنش یک ماده با مواد دیگر مشخص می‌شود. واکنش‌پذیری یا تمایل یک ماده برای واکنش با سایر مواد، از جمله مهم‌ترین خواص شیمیایی است. بیشتر ما صحنه شعله‌ور شدن سدیم، لیتیم یا پتاسیم را در تماس با آب دیده‌ایم. همه این‌ها عناصری هستند که به شدت واکنش‌پذیرند. تا آنجا که نمی‌توان آنها را مانند سایر عناصر در تماس با هوا نگه داشت. اما در مقابل با انداختن یک انگشت طلا در یک لیوان آب اتفاقی نمی‌افتد و یا پنجره‌های آلومینیومی بدون هرگونه مشکلی در مجاورت هوا استفاده می‌شوند (البته این به مدد لایه مقاوم اکسیدی است که بر روی سطح آلومینیوم تشکیل می‌شود). اما همین مواد در مقیاس نانو رفتار متفاوتی از خود نشان می‌دهند.

واکنش‌پذیری مواد در مقیاس نانو افزایش چشمگیری پیدا می‌کند. در این مقیاس ذرات طلا نه تنها واکنش‌پذیری بالایی دارند، بلکه برای افزایش سرعت واکنش مواد دیگر (به عنوان کاتالیزگر) نیز استفاده می‌شوند. نانوذرات آلومینیوم در هوا آتش می‌گیرند و می‌توان از آنها به عنوان سوخت موشک استفاده کرد. افزایش واکنش‌پذیری مواد در این مقیاس، امکان ساخت کاتالیزگرهای بسیار قوی‌تری را برای ما فراهم کرده است. تا آنجا که پیش‌بینی می‌شود بتوانیم با استفاده از نانوکاتالیزگرها واکنش‌های بازگشت‌ناپذیر بسیاری را (مانند تشکیل گازهای سمی در دما و فشار محیط برگشت‌پذیر کنیم).

آنچه گفته شد تنها مثال‌های محدودی از تغییر ویژگی‌های یک ماده در مقیاس نانو است. نقطه ذوب، خواص حرارتی، خواص الکتریکی، خواص مکانیکی و ده‌ها خاصیت فیزیکی و شیمیایی شناخته شده دیگر نیز در این مقیاس تغییر می‌کنند. گویا دیگر نمی‌توانیم بدون در نظر گرفتن اندازه ذرات یک ماده، آنرا از روی خواصش شناسایی کنیم. برخی برای حل این مشکل پیشنهاد داده‌اند که یک بُعد دیگر به جدول تناوبی مندلیف اضافه کنیم. بدین معنی که برای مشخص کردن خواص یک عنصر، علاوه بر اینکه باید نام آن عنصر و جایگاه آن را در جدول مندلیف مشخص کنیم، لازم است که معلوم کنیم خواص عنصر را در چه ابعادی می‌خواهیم.

اضافه کردن بعدی دیگر به جدول تناوبی مندلیف!!

Periodic Table of the Elements



ما در دنیای ماکرومقیاس اطرافمان، مواد را با توجه به خواصشان دسته‌بندی می‌کنیم و سپس متناسب با این خواص، آنها را برای انجام کارهای مختلف انتخاب می‌کنیم. برای ساخت پنجره از شیشه استفاده می‌کنیم، زیرا شفاف است و نور را از خود عبور می‌دهد؛ برای ساخت زیورآلات ماندگار از طلا استفاده می‌کنیم، زیرا واکنش‌پذیری پایینی دارد و اکسید نمی‌شود؛ برق را با رشته‌های مسی انتقال می‌دهیم چرا که پس از طلا و نقره بیشترین ضریب انتقال الکتریکی را در بین عناصر مختلف دارد و از آنجا که فولاد یکی از سخت‌ترین مواد دنیای ماست، ابزارهای بزرگی صنعتی‌مان را از آن می‌سازیم.

اهمیت و ضرورت مقیاس نانو

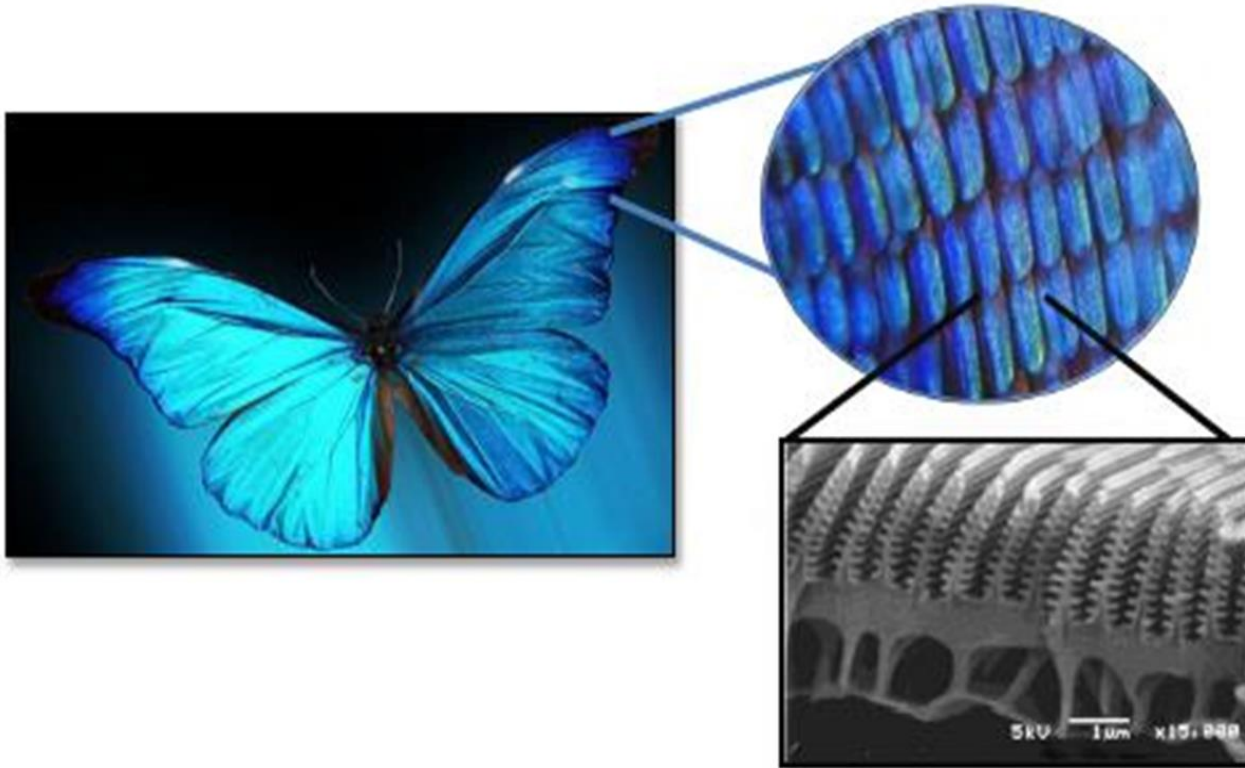
- ۱- سطح اشغال شده به ازای واحد حجم در نانو مواد بیشتر از سطح اشغال شده به وسیله ساختارها با اندازه میکرونی در همان حجم است. (عاملی مهم و مطلوب برای استفاده در نانوکامپوزیت، فعالیت کاتالیزوری، دارو رسانی)
- ۲- با طراحی مواد در مقیاس نانو، تغییر خواص میکروسکوپی آن ماده نظیر ظرفیت بار، دمای ذوب و.. امکان پذیر می شود.
- ۳- مواد و سامانه های زیستی بطور اجتناب پذیر با مقیاس نانو ارتباط دارند.
- ۴- در کاربردهای پزشکی مثل دارو رسانی و تصویر برداری، اندازه ذرات سهم مهمی در تاثیر و موقعیت معالجه دارد. (درمان سرطان)

زیست فناوری به معنای استفاده مستقیم یا غیرمستقیم از موجودات زنده یا بخشهایی از ساختار آنها به شکل طبیعی یا تغییر شکل یافته برای خدمت رسانی به بشریت تعریف شده است. سابقه زیست فناوری به ۶۰۰۰ سال قبل از میلاد برمی گردد. زمانی که سومریان الکل را به شیوه تخمیری تهیه نمودند. در سال ۱۹۴۷ زیست فناوری صنعتی با تولید صنعتی پنی سیلین متحول شد. انقلاب زیست فناوری با کشف آنزیم های خاص و به کارگیری فنون جدید مهندسی ژنتیک نظیر فناوری DNA نو ترکیب در قرن بیستم فراگیر و جهانی شد. یکی از مهمترین دلایل پیشرفت زیست فناوری اختراع میکروسکوپ الکترونی بوده است. با استفاده از میکروسکوپ برای اولین بار در سال ۱۹۴۵ ساز و کار سلول و اجزای مختلف سلولی برای بشر شناخته شد و مسیر برای جستجو و ورود به دنیای ریز میکروارگانیسمها گشوده شد...

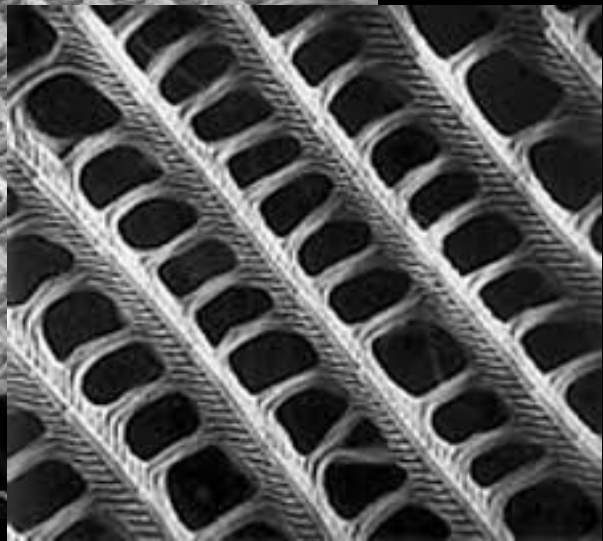
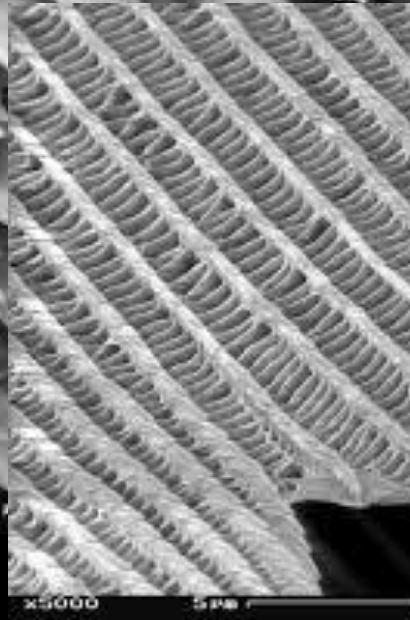
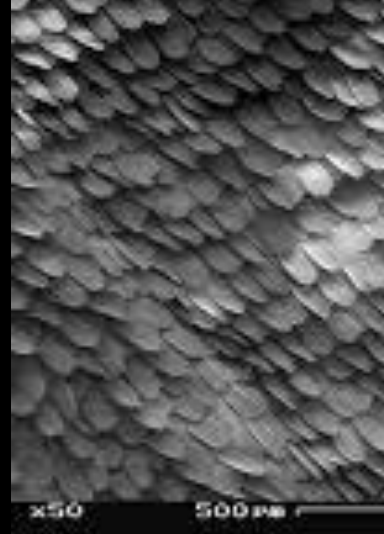
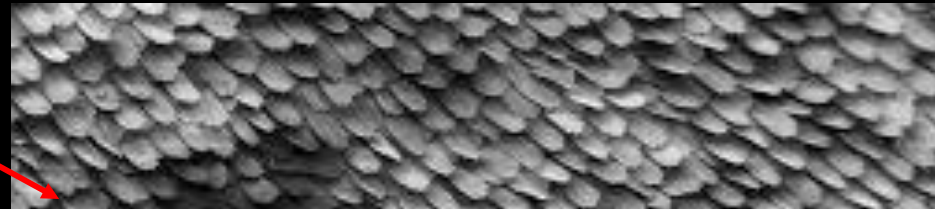
Nanotechnology And Biotechnology

ارتباط زیست فناوری و نانوفناوری

زیست فناوری (biotechnology) به معنای استفاده مستقیم یا غیرمستقیم از موجودات زنده یا بخشهایی از ساختار آنها به شکل طبیعی یا تغییر شکل یافته برای خدمت رسانی به بشریت تعریف شده است.

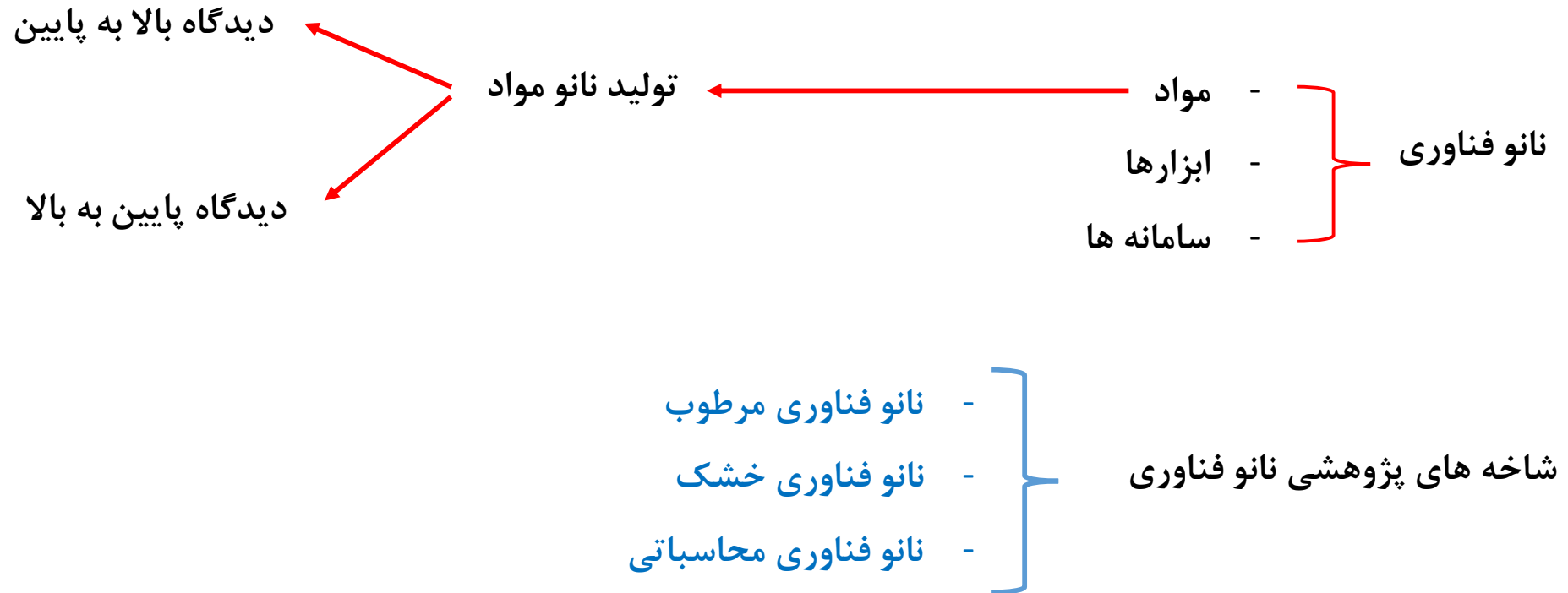


❖ یکی از مهمترین دلایل پیشرفت زیست فناوری اختراع میکروسکوپ الکترونی بوده است.



مقدمه ای بر نانو تکنولوژی

زمینه های مختلف مطالعه نانو فناوری



نانو فناوری در سه دسته مواد، ابزارها و سامانه ها بررسی می شود. در حال حاضر، نانوفناوری در زمینه مواد، پیشرفت های بیشتری نسبت به دو دسته دیگر داشته است. از دیدگاه دانشمندان نانوفناوری می توان مواد را با دو دیدگاه بالا به پایین و پایین به بالا تولید کرد. در نگرش بالا به پایین، مواد با فرآیندهای مکانیکی، فیزیکی و شیمیایی آنقدر خرد می شوند که در مقیاس نانو قرار می گیرند. برعکس در دیدگاه پایین به بالا، با کنار هم قرار دادن اتم ها، نانو ساختارهای هدفدار با خواص فیزیکی و شیمیایی جدید ایجاد می شوند. البته از نانو ساختارها می توان میکرو ساختارهای پیچیده و موثر با خواص و عملکردهای متفاوت تهیه نمود.

شاخه های پژوهشی نانو فناوری را می توان به سه دسته تقسیم نمود. این سه شاخه بهم مربوط هستند و پیشرفت در یک شاخه می تواند در شاخه های دیگر نیز موثر باشد.

نانو فناوری مرطوب: این نوع نانو فناوری به مطالعه سامانه های زنده و زیست محیطی به ویژه در محیط آبی می پردازد. این شاخه شامل علوم زیستی، زیست محیطی، پزشکی و دارویی و بطور کلی علوم مرتبط با حیات است.

نانو فناوری خشک: این شاخه از نانوفناوری برگرفته از علوم پایه فیزیک و شیمی است و کاربرد مواد نانویی در الکترونیک، مغناطیس و ابزارهای نوری، ساختارهای کربنی، سیلیکونی، مواد غیرآلی، فلزی و غیره را بررسی می کند. برای مثال طراحی و ساخت میکروسکوپ هایی که بتوان با آنها مواد را در ابعاد نانو متر دید در این شاخه بررسی می شوند.

نانوفناوری محاسباتی: این شاخه از نانوفناوری به مطالعه مدل سازی و شبیه سازی نانوساختارها، فرآیندها و واکنش های اتم ها و مولکول ها می پردازد و سبب کاهش زمان پیشرفت نانوفناوری خشک از طریق نانومحاسبات می شود که تاثیر آن بر نانو فناوری مرطوب نیز قابل انکار است، زیرا زمان طولانی لازم است تا نانو فناوری مرطوب به صورت کاربردی در آید.