



622/E2

පරිගණක රසායනය

සුනේත් රාජපක්ෂ

රසායන විද්‍යා අධ්‍යයනය, ශ්‍රී ජයවර්ධනපුර විශ්වවිද්‍යාලය, ගංගොඩවිල, නුගේගොඩ

රසායන විද්‍යාව අප හට හුරුපුරුදු විෂය ධාරාවක් වුවාට, පරිගණකය ආධාරයෙන් සිදු කරනු ලබන රසායන විද්‍යාව තවමත් බොහෝ ශ්‍රී ලාංකිකයන් හට නුපුරුදු නූතන විෂය ධාරාවකි. ආරම්භයේ දී ඉතා කුඩා රසායනික සංසිද්ධි අධ්‍යයනය සඳහා පරිගණකය භාවිත කළ අතර, මෑතකාලීනව ඉතාම සංකීර්ණ සංසිද්ධීන් අධ්‍යයනය සඳහා පරිගණකය භාවිතා කිරීමක් දැකගත හැකිය. රසායන විද්‍යාවේ ඉතා කුඩා අතු ශාඛාවක් ලෙස සෙමෙන් වර්ධනය වීමට පටන් ගත් පරිගණක රසායන විද්‍යාව අද වන විට ඉතා පුළුල් විෂය ධාරාවක් බවට පත්වී අවසානය.

පරිගණකය හරහා සිදුකරන අධ්‍යයනයන්හිදී පළමුව තමා අධ්‍යයනය කරනු ලබන්නේ කුමක්ද, කුමක් සඳහා ද යන්න පිළිබඳව ඉතා පැහැදිලි අවබෝධයක් ලබාගත යුතුය. දෙවනුව ඒ සඳහා සුදුසු ආකෘතියක් (model) පරිගණකය ආධාරයෙන් නිර්මාණය කර එය සුදුසු කාල පරාසයක සමාකරණය (simulation) කළ යුතුය. කරනු ලබන අධ්‍යයනය මත පරිගණක රසායනය තවත් කුඩා කොටස් වලට වර්ගීකරණය කළ හැක. ගණිතමය ආකෘති නිර්මාණය සහ සමාකරණය (Mathematical modeling and simulations) එහි එක් ප්‍රධාන අංශයකි. මෙහිදී වාලක රසායනය (chemical kinetics) හා සම්බන්ධ සංසිද්ධීන් ගණිතමය සංකල්ප මත ආකෘති කර අධ්‍යයනය කිරීම බහුලව සිදු කරනු ලබයි. පරිගණක රසායනය යටතට ගැනෙන තවත් ප්‍රධාන අංශයක් වනුයේ අණුක ආකෘති නිර්මාණය සහ සමාකරණයයි (molecular modeling and simulations). අධ්‍යයනය කරනු ලබන පද්ධතියෙහි සංකීර්ණ භාවය සහ අදාළ ගණනය කිරීමේ නිවැරදි තාවය මත, අණුක ආකෘති නිර්මාණය සහ සමාකරණය ප්‍රධාන ආකාර කිහිපයකි. ක්වොන්ටම් පරිගණනය සහ සමාකරණය (quantum computing and simulations) හා අණුක ගතික සමාකරණය (molecular dynamics simulations) ඉන් ප්‍රධානය. පරීක්ෂණාගාර මට්ටමින් අධ්‍යයනය කිරීමට ඉතා අපහසු සංකීර්ණ ජීව විද්‍යාත්මක පද්ධති සහ සංකල්ප මෙම ක්‍රම මගින් සාපේක්ෂව අඩු කාලයකින් අධ්‍යයනය කරගත හැක.

තවමත් ශ්‍රී ලංකාවේ ඉහළ අවධානයක් දිනා නොගත්තත් පරිගණක රසායන විද්‍යාව ලෝකය පුරා ඉතා ඉහළ පිළිගැනීමක් ඇති පරීක්ෂණ මාධ්‍යකි. සංකීර්ණ පද්ධතිය අධ්‍යයනය සඳහා සුපිරි පරිගණක බොහෝ කාලයක සිට භාවිතා වන අතර, ලංකාව වැනි දියුණු වෙමින් පවතින, අඩු ආදායම් රටකට සුපිරි පරිගණක භාවිතා කිරීම කළ නොහැකිය. නමුත් මෑතකදී දියුණු කරන ලද graphic processing unit (GPU) භාවිතයත් සමඟ ඉතා සංකීර්ණ පද්ධති අධ්‍යයනය සඳහාද desktop පරිගණක භාවිතා කිරීමට විද්‍යාඥයන් හට අවස්ථාව උදාවිය. මෑතකාලීනව පරිගණක වල සිදුවන ඉතා සීග්‍ර දියුණුව සමඟ මෙම අංශයේද ඉහළ දියුණුවක් නුදුරු අනාගතයේ දී ලොව පුරා අපේක්ෂා කළ හැකි අතර ඒ සඳහා ශ්‍රී ලාංකික ශිෂ්‍ය ප්‍රජාව සුදානම් කිරීම අප සතුව ඇති බැඳරුම් වගකීමකි.

*suneth@sjp.ac.lk