



dr inż. Krzysztof Kolasiński

Rozmowa z autorem pracy: „Modelowanie mikroskopii bramki skanującej w układach otwartych z dwuwymiarowym gazem elektronowym”.

Proszę opowiedzieć o początkach Pana zainteresowania fizyką i informatyką. Jak doszło do tego, że zdecydował się Pan na studia III stopnia?

Programowaniem interesuję się od dawna, zwłaszcza w kontekście rozwiązywania różnego rodzaju problemów czy przeprowadzania symulacji komputerowych zjawisk fizycznych. Fizyka komputerowa, którą zajmowałem się podczas mojego doktoratu, jest w pewnym sensie połączeniem obu tych dziedzin. W jej ramach fizyka dostarcza listę ciekawych problemów do rozwiązania, a informatyka – listę narzędzi. Dlatego też zdecydowałem się na kontynuację mojej kariery naukowej w kierunku, który mnie szczególnie interesuje.

Pana doktorat porusza problematykę związaną z techniką mikroskopii bramki skanującej (MBS) i, jak Pan sam zauważa, jest to stosunkowo nowa technika. Czy może nam Pan ją przybliżyć?

Zgadza się, technika ta jest stosunkowo młoda. Pierwsze eksperymenty przeprowadzone z wykorzystaniem MBS miały miejsce w okolicy 2001 roku, tymczasem znany wszystkim mikroskop optyczny pochodzi z XVI wieku. Technika ta nie ma jednak wiele wspólnego z tym popularnym urządzeniem, ponieważ wykorzystuje zupełnie inny mechanizm i jest ograniczona tylko do urządzeń przewodzących prąd. Dodatkowo, temperatura pomiaru musi być bliska zeru bezwzględnemu, a wszystko po to, aby możliwa była obserwacja zjawisk kwantowych.

Sama idea bramki skanującej działa w oparciu o tak zwany mikroskop sił atomowych. W technice tej wykorzystuje się bardzo cienkie ostrze – jego końcówka może mieć rozmiar kilku nanometrów – którym to bezpośrednio bada się powierzchnię próbki przez – kolokwialnie to ujmując – „dotknięcie” jej powierzchni. Mierząc odchylenie, jakie jest potrzebne, aby „dotknąć” powierzchnię ostrzem w danym punkcie, możemy badać topografię próbki z ogromną dokładnością. W MBS wykorzystuje się identyczny układ, ale do ostrza przykładają się napięcie elektryczne. Zgromadzone w ten sposób na ostrzu elektrony oddziałują elektrostatycznie z elektronami znajdującymi się w próbce. Oddziaływanie to prowadzi do zmiany mierzalnej wartości oporu w funkcji położenia ostrza. O ile mikroskop sił atomowych dostarcza nam informacje o tym jak wygląda powierzchnia próbki, to MBS pozwala nam zagłądać pod nią, dzięki czemu możemy dowiedzieć się, jak elektrony poruszają się wewnątrz układów nisko wymiarowych.

W swojej pracy doktorskiej zajmowałem się przeprowadzaniem podobnych „doświadczeń”, ale wyłącznie za pomocą symulacji komputerowych. Podejście teoretyczne pozwala bowiem na badanie układów w środowisku całkowicie kontrolowanym i odtwarzalnym. Jednym z tematów mojej rozprawy doktorskiej była interpretacja wyników otrzymywanych właśnie za pomocą MBS.

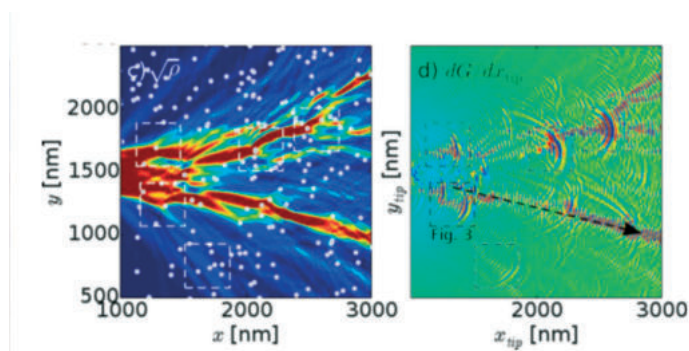
W swojej pracy proponuje Pan również oryginalną metodę liczenia transportu kwantowego, która w określonych warunkach zapewnia – i tu posłużę się cytatem z Pana pracy – „50-krotne przyspieszenie względem standardowego podejścia oraz doskonałą zgodność z teorią i eksperymentem”.

Tak, w swojej pracy doktorskiej zajmowałem się problemem transportu kwantowego. W szczególnym przypadku, który mnie dotyczył, zagadnienie to sprowadzało się do rozwiązania dużego układu równań liniowych postaci $Ax=b$, gdzie macierz A problemu jest macierzą rzadką. To znaczy, że znaczna część jej elementów jest równa zero. Rozważane przeze mnie macierze miały rozmiar od kilkudziesięciu do kilkuset tysięcy wierszy. Jednorazowe rozwiązanie takiego problemu, przy użyciu dedykowanych do tego problemu procedur numerycznych, zajmuje kilka sekund. Problem pojawia się w momencie, kiedy potrzebujemy wykonać bardzo podobne rachunki kilkaset albo nawet kilka tysięcy razy. Wtedy czas obliczeń znacząco się wydłuża. W naszej pracy pokazaliśmy, że jeżeli macierz A zmienia się nieznacznie, tzn. zmianie ulega niewielka liczba jej elementów, np. fragment jej diagonal, to jesteśmy w stanie znaleźć dokładne wyrażenie na rozwiązanie problemu $Ax=b$ generowanego przez nasz problem fizyczny, bez konieczności ponownego odwracania macierzy A . O ile zmiana w macierzy A nie jest zbyt duża, metoda ta pozwala na znaczne przyspieszenie rachunków. Jeżeli liczba zmodyfikowanych elementów macierzy A była mała, czyli rzędu 100-1000, to rozwiązanie problemu transportu zajmowało nam około 50 razy mniej czasu.

Które z zasobów Cyfronetu przysłużyły się najbardziej Pana pracy?

Podczas mojego doktoratu w głównej mierze korzystałem z zasobów superkomputera Zeus, a w następnej kolejności z Prometheusa. Programy pisałem w języku FORTRAN oraz korzystałem głównie z pakietu numerycznego Intel MKL, SuperLU, PARDISO i MUMPS.

Dziękuję za rozmowę.



Po lewej stronie: symulowana gęstość elektronowa (jej pierwiastek) w układzie z dwuwymiarowym gazem elektronowym, po prawej: otrzymana w wyniku symulacji mapa MBS dla tego układu