

# Superpočítače pomáhají vědcům při zkoumání vlastností materiálů

IT4Innovations národní superpočítačové centrum v Ostravě slouží k výzkumným účelům. Některé ze zdejších výzkumných projektů však mohou posloužit i obráceně, například k výzkumu vlastností magnetoopticky aktivních materiálů a jejich následného využití k dalšímu zdokonalování výpočetní a komunikační techniky.

Projekt „IT4Innovations národní superpočítačové centrum - cesta k exascalae“ je zaměřen na modernizaci výzkumné infrastruktury IT4Innovations a rozvoj vlastního výzkumu za účelem udržení vysoké technologické úrovně HPC (High Performance Computing) v České republice především v porovnání s evropskými zeměmi. Projekt běží od roku 2017 a bude ukončen v roce 2021. Vlastní výzkum se v rámci tohoto projektu realizuje ve třech výzkumných programech.

S ohledem na téma tohoto vydání se v následujících řádcích stručně zaměříme na Výzkumný program vedený pod názvem Modelování fotonických

a spin-fotonických struktur, který se zabývá magnetoopticky aktivními materiály, novými terahertzovými zdroji a modelováním fotonických a spin-fotonických struktur.

## MAGNETOOPTICKY AKTIVNÍ MATERIÁLY

Optické vlastnosti magnetoopticky aktivních materiálů jsou funkcí magnetizace  $M$  daného materiálu, tzn. do určité míry také funkcí vnějšího magnetického pole. Lineárně polarizované světlo se po průchodu či odrazu od takového materiálu stává elipticky polarizovaným (obr. 1). Tomuto jevu se říká mag-

## IT4Innovations

Projekt je zaměřen na modernizaci výzkumné infrastruktury IT4Innovations a rozvoj vlastního výzkumu za účelem udržení vysoké technologické úrovně HPC (High Performance Computing) v České republice.

netooptický Kerrův jev (QMOKE) a lze jej využít například k výzkumu feromagnetických materiálů, které jsou dnes základním stavebním prvkem vysokokapacitních pevných disků. Dalším využitím je například detekce spintronických a spinkaloritronických jevů, kterým je v posledních letech věnována značná pozornost.

Jeden z úspěchů týmu Laboratoře pro modelování pro nanotechnologie IT4Innovations na tomto poli byl rozvoj tzv. kvadratického MOKE (QMOKE), což je příspěvek k celkovému MOKE signálu, který je závislý na magnetizaci v druhém řádu, tzn. úměrný  $M^2$ .

*Pokračování na str. 5*

# Superpočítače pomáhají...

*Dokončení ze str. 1*

QMOKE je jednak důležitý pro správnou interpretaci všech MOKE dat, ale také nachází využití při charakterizaci tzv. anti-feromagnetických materiálů. Ty se mohou stát budoucím médiem pro ukládání dat. Tým působící při Vysoké škole báňské na Technické univerzitě Ostrava (VŠB-TUO) úspěšně vyvinul a aplikoval techniku QMOKE spektroskopie, která dokáže separovat tento příspěvek a určit jeho původ v tenzoru permitivity materiálu ve viditelném spektru s přesahem do UV a IR části spektra. Takto získaná experimentální data pak dokážeme navíc popsat teoretickými výpočty z prvních principů (tzv. ab-initio), kde je mnohdy zapotřebí využít výpočetního výkonu HPC.

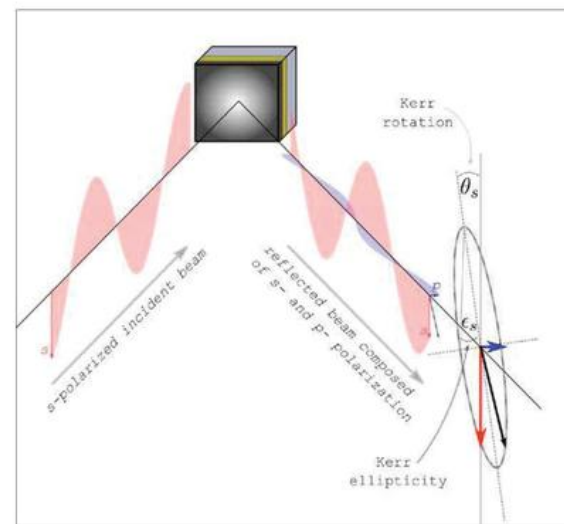
## NOVÉ TERAHERTZOVÉ ZDROJE

Terahertzové (THz) záření je část spektra elektromagnetických vln s vlnovou délkou v rozmezí cca. 0,1-1 mm. Má širokou škálu aplikací, kde jako příklad můžeme uvést vysokorychlostní bezdrátovou komunikaci, bezpečnostní skenery (např. na letištích), astrofyziku a charakterizace materiálů.

V IT4Innovations navrhuji zdroje a detektory THz záření. Jako jeden z úspěchů lze uvést vývoj NH3 molekulárního THz laseru.

## MODELOVÁNÍ FOTONICKÝCH A SPIN-FOTONICKÝCH STRUKTUR

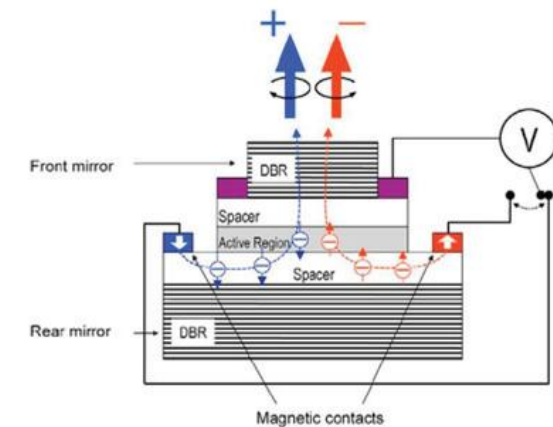
Příkladem (spin-)fotonických struktur je spin-vertical-cavity surface-emitting laser (spin-VCSEL). VCSELs jsou fundamentální zařízení ve vys-



Obr. 1: Lineárně s-polarizované světlo se po odrazu od magnetoopticky aktivního materiálu stává elipticky polarizovaným, což je popsáno skrze Kerrovu rotaci a Kerrovu elipticitu

korychlostní optické komunikaci. V IT4Innovations se zabývají návrhem a optimalizací spin-VCSELů, což jsou lasery, u kterých se ke generaci světla využívá nejenom náboje elektronu, ale také právě jeho spinu (obr. 2). Návrh a optimalizace těchto struktur je výpočetně velmi náročná a vyžaduje využití HPC. Využití spin-VCSELů v optické komunikaci tak slibuje podstatné navýšení rychlosti přenosu dat.

**Karel Král**  
S využitím materiálů VŠB-TUO



Obr. 2: Náčrt struktury spin-VCSELu. Aktivní část laseru je uzavřena mezi dvě zrcadla (DBR = Dielectric Bragg Reflector). Polarizace generovaného světla je pak odvislá od spinu pumpovaných elektronů

## IT4INNOVATIONS NÁRODNÍ SUPERPOČÍTAČOVÉ CENTRUM

IT4Innovations provozuje nejvýkonnější a nejmodernější superpočítačové systémy (HPC) v ČR a na základě výzkumné excelence k nim poskytuje otevřený přístup. Počítačové simulace jsou často levnější, rychlejší a bezpečnější či příznivější pro životní prostředí než experiment. Mnohdy jsou dokonce jedinou možností, zejména pokud experiment není možné realizovat. Základní služby se skládají z poskytování optimalizovaného superpočítačového prostředí, tj. jádrohořiny superpočítače, softwarové licence a datové úložště potřebné k realizaci výpočtů. Služby

s přidanou hodnotou jsou založeny na expertize a náleží mezi ně uživatelská a aplikační podpora, příprava a optimalizace paralelních kódů, vzdělávací aktivity, vlastní výzkum v oblasti superpočítání a zajišťování kontaktního bodu pro mezinárodní HPC infrastrukturu. IT4Innovations, CESNET a CERIT-SC tvoří základní pilíře e-infrastruktury ČR a slouží jako základna pro ostatní výzkumné infrastruktury ČR. Jako člen panevropské e-infrastruktury PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) IT4Innovations zajišťuje přístup ke službám této e-infrastruktury.