

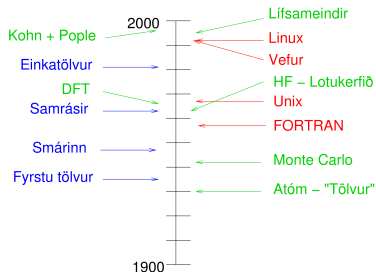
# *Eðlisvísindi í tölvum*

Viðar Guðmundsson

Raunvísindastofnun  
Háskóli Íslands  
vidar@raunvis.hi.is

Undur veraldar, október, 2005

## Gróf tímasetning

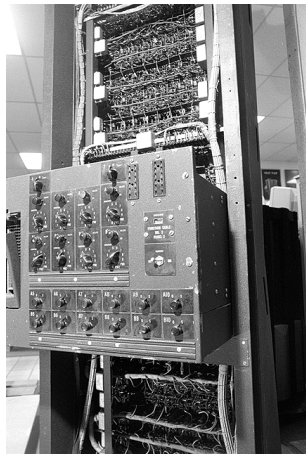


## SAGE, Mynd: Michael Dubinsky



1950+, 51000 lampar

## ENIAC, Mynd: Michael Dubinsky



1940+, 18000 lampar

## Cray-2, Mynd: Michael Dubinsky, 2 Gflop/s



8 örgjörvar með vigureinigum, 1985

## Bjölfur, 400 Gflop/s



130 Intel þyrping, RH 2004

## Nanó, 10 Gflop/s



16 DEC Alpha þyrping, RH 1999

## Hvers vegna?

- BlueGene/L: 136.8 TFlop/s
- Pflop/s innan skamms! 1 Pflop/s = þúsund  $\times$  milljón  $\times$  milljón kommutöluaðgerðir/sekúndu
- Á öflugri þyrpingu er venjulega nokkuð löng biðröð og verk taka frá nokkrum mínútum upp í mánuði á þó nokkrum örgjörvum!
- Algengt er að í reikniverkefni felist 1 Tflop - 1 Pflop!
- Hvers vegna?
- Hvað er verið að reikna?
- Hvernig eru verk unnin?

## Hreyfilýsing rafeinda í sameind

$$H\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) = E\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z)$$

$$H = \sum_{i=1}^Z \left[ \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{\kappa r_i} \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

$|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z)|^2$ : Líkindadreifing  $Z$  rafeinda í sameind

$E$ : Heildarorka rafeindanna

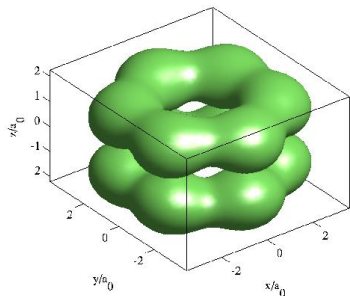
$H$ : Orkuvirki = Hreyfiorka + stöðuorka + víxlverkunarorka

## Nákvæm lausn

- **Lítill sameind með 100 rafeindir**
- Notum skammtafræði
- Lágmarkunaraðferð → jafngilt lágmarkun falls í  $10^{150}$  víddum
- Rafeindir þekkjast ekki í sundur, þær eru allar eins
- Línuleg afleiðujafna í 300 víddum og  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z)$  hefur  $10^{100}$  þætti minnst
- Vitum að lausnin er til, en náum aldrei í hana
- Lausnin hefur fleiri þætti en öll atóm í alheimi,  $10^{80}$
- Gengur aldrei fyrir fleiri en 10 rafeindir!

## P. Hohenberg - W. Kohn - L.J. Sham, 1964-5

- Varpa verkefninu nákvæmlega á aðra jöfnu
- Ólínuleg jafna í 3 víddum fyrir  $\psi(\mathbf{r})$
- Einfalt að reikna 3D þéttleika allra rafeindanna,  $|\psi(\mathbf{r})|^2$
- Þekkjum ekki alla liði jöfnunar. . .
- Vitum ekki hvort lausn er til, en getum leitað hennar



Rafeindapéttleiki efsta setna  
ástandsins í bensen-sameind,  
C6H6, (42 rafeindir)

# Nobelsverðlaun



## The Nobel Prize in Chemistry 1998

"for his development of the density-functional theory"

"for his development of computational methods in quantum chemistry"



**Walter Kohn**

● 1/2 of the prize  
USA

University of California  
Santa Barbara, CA,  
USA

b. 1923  
(in Vienna, Austria)



**John A. Pople**

● 1/2 of the prize  
United Kingdom

Northwestern  
University  
Evanston, IL, USA

b. 1925  
d. 2004

## DFT

- DFT hefur leitt til feikilegra framfara í reikningum
- Náðst hefur að reikna ýmsa eiginleika stórra lífsameinda
- Óþekktir liðir í DFT jöfnum koma úr **Monte-Carlo Reikningum**



## Skoðum jöfnuna aftur

$$H\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) = E\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z)$$

$$H = \sum_{i=1}^Z \left[ \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{\kappa r_i} \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

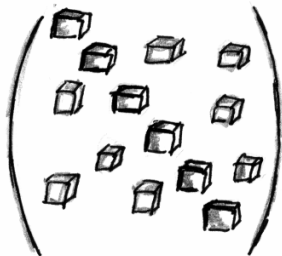
- Enginn getur séð fyrir eiginleika lausnar án reikninga!
- Skoðum það ferli nánar myndrænt
- Lausn DFT-jafnanna er í raun **tilraunastærðfræði**
- Getum aðeins borið saman við mæliniðurstöður ← **eðlisfræði**
- Spennandi, erfitt og skemmtilegt viðfangsefni

## Nánari skoðun

Hægt er að útsetja jöfnurnar sem óendanlega stórt tvívítt fylki ( $\infty \times \infty$ )

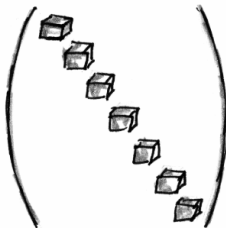
### Fylki

Víxlverkun rafeindanna býr til stök utan hornalínu



### Hornalínufylki

Ef fylkið er á hornalínuformi má lesa orkuróf rafeindanna beint úr því, lausn fundin!



## Ummyndun

Ef við finnum ummyndun  $T$  ( $\dim [T] = \infty \times \infty$ ) sem varpar fylkinu næstum á hornalínuform erum við búin að finna lausn

## Lausn

The diagram shows the equation  $T = T^+ + \epsilon$ . Each term is enclosed in large parentheses.  $T$  contains a scattered collection of small 3D cubes.  $T^+$  contains the same cubes arranged in a diagonal line from the top-left to the bottom-right.  $\epsilon$  contains the remaining scattered cubes.

## Túlkun

- Nýja hornalínufylkið lýsir næstum frjálsum eindum → hvaða eindir?
- Veikar víxlverkunarleyfar → líftími nýju eindanna
- **Sýndareindir**, skoðum dæmi

# Tæknilegt

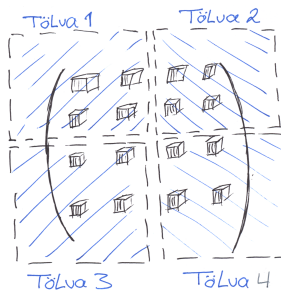
## Stýfing

- Stýfa þarf fylkið í endanlega stærð
- Nákvæmni könnuð með mismunandi stærðum
- Stökin eru oft mjög tímafrek í reikningum



- Linux
- FORTRAN
- MPI

## Samhliðavinnsla



Ef stökin eru óháð má reikna þau á mismunandi vélum

**Forritun – aflúsun – sannreynsla**

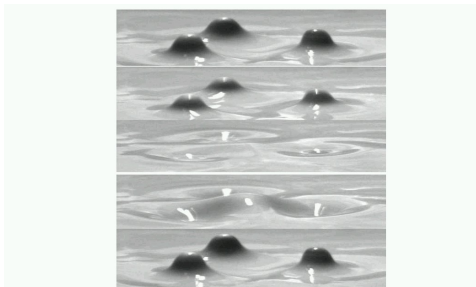
## Sýndareindir

- Nýja fylkið lýsir frjálsum nýjum sýndareindum
- Leifarfylkið setur nákvæmni skilgreiningar eða líftíma

## Eiginleikar

- Sýndareindirnar hafa ekki eiginleika rafeindanna sem við byrjuðum með
- Skoðum nokkur dæmi. . .

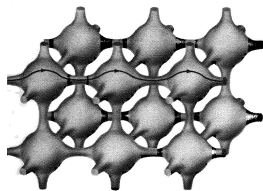
## Leirbað



A triad of oscillons in a colloidal suspension. These stationary structures form when a colloid consisting of tiny clay particles suspended in a fluid is vibrated vertically

# Rafeindir í kristalli

## Rafeindaástönd í kristalli

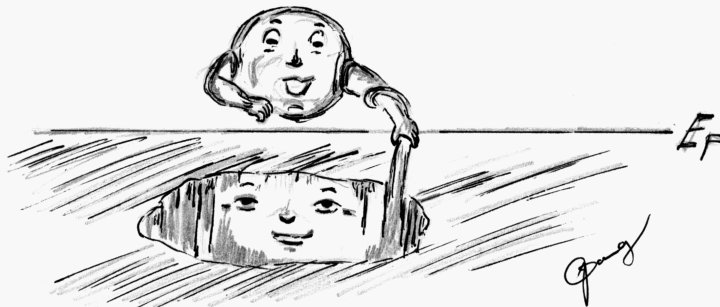


## Sýndareindir

- Rafeindir + áhrif frá kristalli = sýndareind með virkan massa  $m^*$
- Í GaAs kristalli er  $m^* = 0.067m_e$
- $m^*$  getur verið neikvæður!

# Rafeindir í málmi

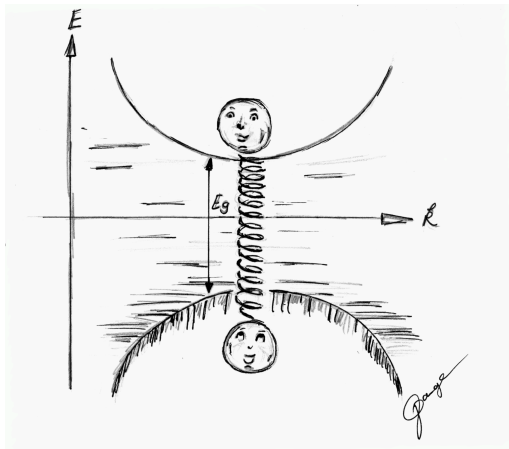
Leiðnirafeindir í málmi, (kulgas)



Rafeindir (fermíeindir) → óhlaðnar þéttleikaeindir (bóseindir)

# Rafeindir í hálfleiðurum, (hlýgas)

## Rafeindir og holur

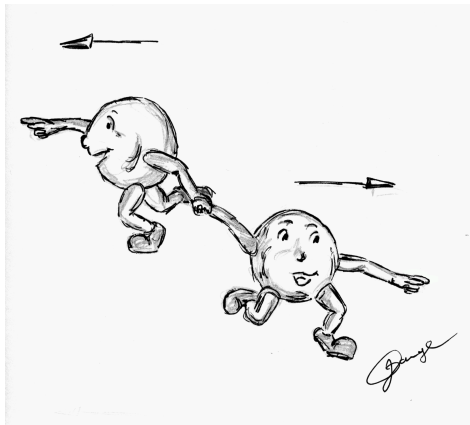


Rafeindir + holur (fermíeindir)  $\rightarrow$  óhlaðnar örveindir (bóseindir)



# Rafeindir í ofurleiðara

## Cooper-pör

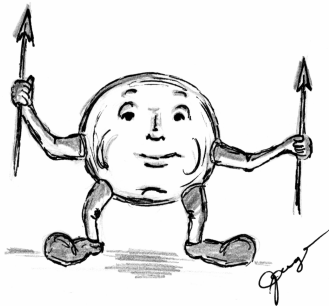


Rafeindir (fermíeindir) + hljóðeindir (bóseindir)

→ óhlaðin Cooper-pör (bóseindir). **Ummyndunin  $T$  er óþekkt!**

# Rafeindir í tvívíðu rafeindagasi í hálfleiðara

Samsettar fermíeindir, (Rafeindagasi  $\rightarrow$  vökvi)



**Brotin einingarhleðsla!** Ummyndunin  $T$  er óþekkt, en nákvæmir reikningar fyrir fáar eindir sýna þessa hegðun

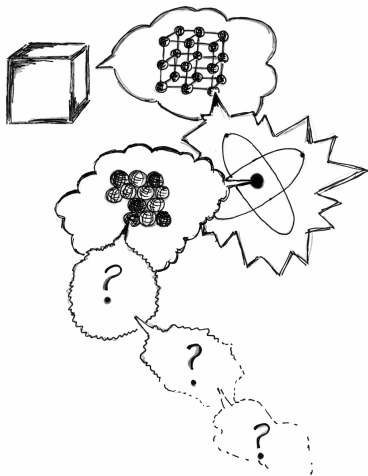


- Allar sýndareindirnar hafa uppgötvast í tilraunum... með hjálp frá líkönum
- Í atómi eru sýndareindirnar „veikt víxlverkandi rafeindir á hveli” ← lotukerfið
- Mismunandi áreiti → mismunandi sýndareindir

**Oft er er  $T$  óþekkt, eða leiðin frá upprunalega líkaninu að líkaninu með sýndareindunum**

# Lærdómur

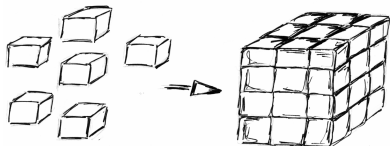
## Smættarhyggja



- **Jafnvel þó við þekkjum hreyfijöfnur á einum stærðarskala getur verið að þær segi ekkert um hvað gerist á stærri skala!**
- **Safneðlisfræðin gefur okkur líka gagndæmi**
- Áhrif milli stærðarskala eru í báðar áttir, upp og niður

# Sjálfsprotnir eiginleikar

## Flóknari kerfi



- Við könnum hvernig eiginleikar kerfis breytast þegar einingum þess fjölga
- Oft spretta fram nýir og óvæntir eiginleikar
- Hreyfijöfnur segja lítið án mikilla **reikninga** og samanburðar við **tilraunir**

# Sýndareindir

## Enn flóknari kerfi



- Sýndareindir eru einingar grunn- eða örvaðs ástands fjöleindakerfis
- Þær eru náttúrulegu einingarnar sem við sjáum í kerfinu

# Ýmsar aðrar aðferðir til lausnar og lýsingar á flóknum kerfum

## Safneðlisfræði

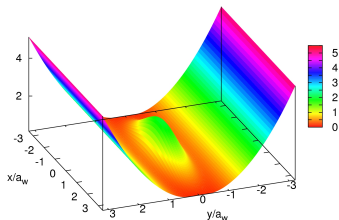
- Margar aðferðir til lýsingar á eiginleikum safna
- Skölun, endurstuðlun, ...
- Fasahvörf
- Bylting upp úr 1960
- Jafnvægi – ójafnvægi

## Monte Carlo

- Slægar tölfræðilegar aðferðir til að finna líklegustu ástöndin í stóru safni ástanda
- Reiknar margvið heildi og margfaldar summur
- Stikar í DFT reikninga

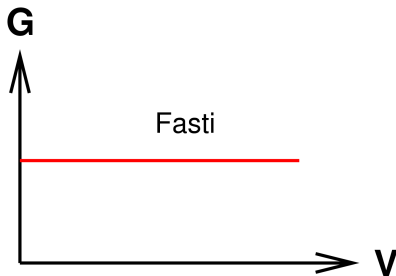
# Lítið dæmi um óvæntar niðurstöður

Langur vír með hól í miðju



Breidd vírs  $\approx 150\text{-}220\text{ nm}$   
Þverstætt segulsvið  $B$

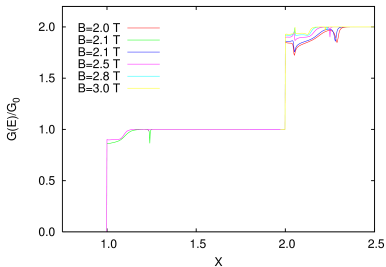
Ómsk leiðni?





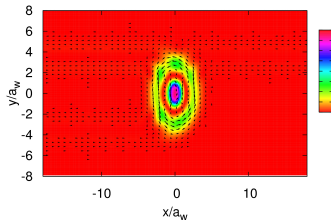
# Leiðni skammtavírs með mættishól

Leiðnin er ekki ómsk



Breidd vírs  $\approx 150$ - $220$  nm

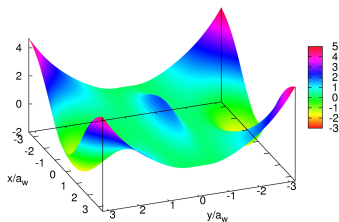
Péttleiki og straumur



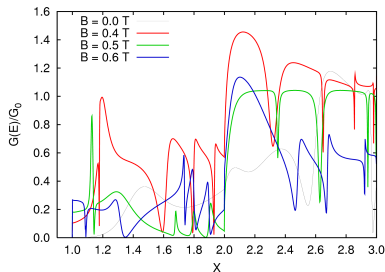
Herma, bundin rafeind um hól!

# Vír með mættishól og tvo dali

## Kerfið



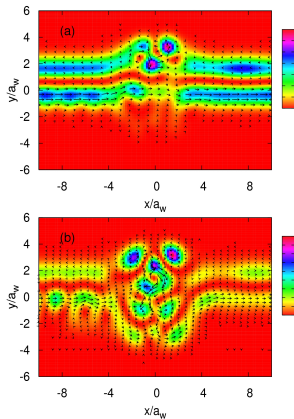
## Flókin leiðni



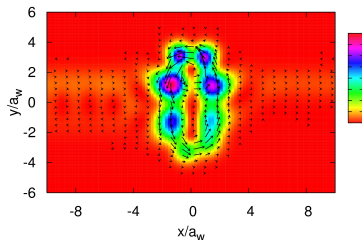
Fjöldi herma, mjög breytilegar með segulsviði

# Péttleiki og straumur rafeinda

## Leiðandi ástönd



## Herma



Hönnun stöðugra nanókerfa?  
Vélbúnaður í skammtatölvur

# Hvert stefnir?

## Framtíðarhorfur

- Eru eðlisvísindin að verða fullbúin?
- **Við erum rétt að byrja!**
- Flókin kerfi, nýjar hugmyndir
- Spennandi og erfið viðfangsefni
- Vaxandi þörf fyrir flókna líkanagerð og reikninga
- Við sjáum framtíðina ekki fyrir!

## Samstarfsmenn

- Chi-Shung Tang
- Andrei Manolescu
- Wing Wa Yu
- Jens Hjörleifur Bárðarson
- Ingibjörg Magnúsdóttir
- Sigríður Sif Gylfadóttir
- Gabriel Vasile
- Sigurður I. Erlingsson
- Yu-Yu Lin
- Valeriu Moldoveanu
- Marian Nita