

Infrastruktura badawcza Instytutów Fizyki WFiA

W niniejszym załączniku opisujemy syntetycznie infrastrukturę badawczą Instytutu Fizyki Teoretycznej (infrastruktura obliczeniowa) oraz Instytutu Fizyki Doświadczalnej (infrastruktura eksperymentalna oraz obliczeniowa). Nie opisujemy infrastruktury badawczej Instytutu Astronomicznego będącego w strukturze WFiA, jako że instytut ten nie bierze udziału w kształceniu na kierunku ISSP.

Infrastruktura do badań eksperymentalnych WFiA

Infrastruktura do badań eksperymentalnych wykorzystywana jest przez 4 zakłady Instytutu Fizyki Doświadczalnej: Zakład Elektroniki Emisyjnej (ZEE), Zakład Fizyki Jądrowej i Dielektryków (ZFJD), Zakład Nanooptyki i Nanostruktur (ZNN) oraz Zakład Spektroskopii Elektronowej (ZSE), w strukturze którego działa grupa EC-STM. Te zakłady IFD prowadzą badania z zakresu fizyki i fizykochemii powierzchni ciał stałych, fizyki dielektryków, badania materii skondensowanej metodami spektroskopii jądrowych.

Ponadto w IFD prowadzone są również teoretyczne badania z zakresu fizyki i fizykochemii powierzchni ciał stałych, nanostruktur oraz złączy molekularnych przy zastosowaniu zaawansowanych metod obliczeniowych oraz badania z zakresu dydaktyki fizyki – odpowiednio w Zakładzie Fizyki Powierzchni i Nanomateriałów (ZFPN) oraz w Zakładzie Nauczania Fizyki (ZNF).

Badania właściwości fizykochemicznych ciał stałych prowadzone są przy użyciu spektroskopowych i mikroskopowych metod doświadczalnych w różnych środowiskach: w środowisku ultrawysokiej próżni, w cieczach (roztworach) oraz w powietrzu. W badaniach stosowane są m.in. skaningowa mikroskopia tunelowa (STM), mikroskopia sił atomowych (AFM), dyfrakcja niskoenergetycznych elektronów (LEED), spektroskopia fotoelektronów wzbudzonych promieniowaniem rentgenowskim (XPS) i ultrafioletowym (UPS), spektroskopia elektronów Augera (AES), kierunkowa spektroskopia Augerowska (DAES), kierunkowa spektroskopia elektronów rozproszonych elastycznie (DEPES), termicznie stymulowana desorpcja (TDS), spektrometria mas (MS), pomiar zmian pracy wyjścia ($\Delta\phi$), woltamperometria cykliczna (CV).

Do prowadzenia tych badań IFD posiada:

- Kompleksowo wyposażone Laboratorium EC-STM (elektrochemiczny STM): dwa mikroskopy EC-STM do badań w roztworach, system dozowania argonu do mikroskopów, system oczyszczania i uzdatniania wody, dwa potencjostaty, ultraczuła elektroniczna waga analityczna, systemy trawienia i pokrywania dielektrykiem ostrzy STM etc.
- 4 zaawansowane systemy ultra-wysokopróżniowe (UHV) do pomiarów z wykorzystaniem metody spektroskopii fotoelektronów rentgenowskich (XPS), różnie wyposażone zależnie od głównej tematyki prowadzonych badań (komory preparacyjne, analizatory AES, kamery LEED i pomniejsze elementy).
- 3 ultra-wysokopróżniowe systemy skaningowej mikroskopii tunelowej (STM), wyposażone stosownie do wiodącej tematyki badawczej w analizatory AES, kamery LEED, kwadrupolowe spektrometry masowe itp.

- 2 ultra-wysokopróżniowe systemy mikroskopii sił atomowych (AFM), doposażone w podstawowe techniki pomocnicze (AES, LEED)
- 1 ultra-wysokopróżniowy niskotemperaturowy (100 K), szybki skaningowy mikroskop tunelowy (STM)
- 1 ultra-wysokopróżniowy system do pomiarów technikami kierunkowej spektroskopii Augerowskiej DAES, kierunkowej spektroskopii elektronów elastycznie rozproszonych elastycznie DEPEs oraz termicznie stymulowanej desorpcji (TDS).
- 1 ultra-wysokopróżniowy system do badań zmian pracy wyjścia metodą Kelwina wyposażony w kamerę LEED oraz spektrometr masowy
- 1 wysokopróżniowy mikroskop fotoemisyjny
- 2 mikroskopy sił atomowych do badań w powietrzu

W badaniach materii skondensowanej za pomocą spektroskopii jądrowych stosowane są metody eksperymentalne oparte na anihilacji pozytonów i efekcie Mössbauera, do których ZFJD posiada spektrometr mössbauerowski oraz spektrometr czasów życia pozytonów wraz ze stosowną bazą do preparacji próbek. ZFJD prowadząc swoje badania również wykorzystuje infrastrukturę badawczą Wydziału Chemii UWr oraz wrocławskiego Instytutu Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN.

Badania w dziedzinie fizyki dielektryków prowadzone są przy użyciu aparatury do badań dielektrycznych i dylatometrycznych oraz mikroskopu do obserwacji kryształów w świetle spolaryzowanym.

W bieżącym roku ZFJD otrzymał finansowanie w ramach Funduszu Aparatury Badawczej IDUB na zakup zintegrowanego i zautomatyzowanego systemu do pomiaru właściwości fizycznych w przedziale temperatur 1,85–1000 K oraz w zewnętrznym polu magnetycznym o indukcji do 9 Tesli (kwota dofinansowania 5 250 000 PLN, realizacja do końca 2024 r.), a także stanowiska do wykorzystania związków wrażliwych na tlen i wilgoć w nowych materiałach funkcjonalnych, które obejmować będzie młynec planetarny oraz komorę rękawicową (glove box) (kwota dofinansowania 100 000 PLN, realizacja do końca 2023 r.).

Infrastruktura obliczeniowa WFiA

W Instytucie Fizyki Teoretycznej (IFT) prowadzone są głównie badania o naturze teoretyczno-obliczeniowej, chociaż warto zaznaczyć, że kilku pracowników IFT bierze udział w dużych eksperymentach cząstkowych oraz jądrowych, takich jak eksperyment T2K w Japonii, czy NA61/Shine w CERN. Do prowadzenia badań pracownicy IFT głównie potrzebują zasobów komputerowych, w szczególności dostępu do komputerów dużej mocy. W związku z tym wydział zapewnia dostęp, na miejscu, do kilku małych klastrów obliczeniowych. Kadra IFT wykorzystuje te zasoby w badaniach z zakresu fizyki neutrin, gwiazd neutronowych, dynamiki płynów czy optyki kwantowej. Zasoby obliczeniowe wykorzystywane są do analiz Monte Carlo, symulacji przepływów płynów, czy modelowania układów fizycznych przy pomocy głębokich sieci neuronowych. W ostatnich latach w ramach IFT i współpracy z fizykami z Ołomuńca tworzone jest laboratorium optyki kwantowej. Spodziewamy się uruchomić na wiosnę 2024 roku, jego pierwsze podstawowe elementy zostały już zakupione.

Wydział utrzymuje dwie serwerownie obliczeniowe, które pełnią także rolę węzłów sieciowych i utrzymują serwisy www, oraz inne serwery wykorzystywane przez pracowników wydziału. W opisie wymieniamy tylko urządzenia obliczeniowe, pomijamy resztę infrastruktury.

Instytut Fizyki Teoretycznej

Infrastruktura obliczeniowa IFT mieści się w serwerowni na IV piętrze budynku przy pl. Maksa Borna 9.

Serwer Zero:

10 węzłów obliczeniowych - Sun Fire X2200:

- 20x Quad-Core AMD Opteron(tm) Processor 2384
- 176 GB RAM

Serwer Rei:

2 węzły obliczeniowe - Fujitsu CX2550M1

- 4x Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620 v3 @ 2.40GHz
- 128 GB RAM

Zainstalowane komercyjne oprogramowanie:

- kompilator intel Fortran (2 licencje)

- Matlab < R2013

- Wolfram Mathematica 11.00

Ponadto wielu pracowników ma do dyspozycji stacje robocze CPU lub GPU, które znajdują się w ich gabinetach.

Instytut Fizyki Doświadczalnej

Infrastruktura obliczeniowa IFD mieści się w serwerowni na III piętrze w budynku przy pl. Maksa Borna 9 i jest wykorzystywana głównie przez Zakład Fizyki Powierzchni i Nanomateriałów (ZFPN)

2 węzły obliczeniowe Supermicro:

2x Intel Xeon E5 v2 Family 10 cores (20 rdzeni obliczeniowych na serwer)

120 GB RAM

2 węzły obliczeniowe SUN Fire X2200

2x Quad-Core AMD (8 rdzeni obliczeniowych na serwer)

16 GB RAM

Oprogramowanie do obliczeń:

VASP, Wien2K, SIESTA

Ponadto wielu pracowników ma do dyspozycji stacje robocze CPU lub GPU, które znajdują się w ich gabinetach.

Ogólnouczelniana infrastruktura obliczeniowa

Z końcem semestru letniego roku akademickiego 2022/23 pracownicy IFT testowali możliwości dwóch małych klastrów obliczeniowych, które będą oddane do użytku pracowników UWr. Są to:

- klaster SLURMowy składający się z głównego node'a kontrolującego oraz 3 node'ów obliczeniowych, każdy po 10 wirtualnych rdzeni CPU. W zależności od potrzeb maszyny zostaną rozrzucone na hosty z procesorami Intel(R) Xeon(R) Gold 5320 CPU @ 2.20GHz lub Intel(R) Xeon(R) Silver 4210 CPU @ 2.20GHz, przy czym fundamentalne znaczenie ma ilość rdzeni przypisanych do maszyny.
- klaster GPU z 1-2 kartami dedykowanymi do obliczeń machine learning. Rodzaj karty: NVIDIA, Tesla A10 PCIe Computational Accelerator.

Obecnie (październik 2023 r.) prace wdrożeniowe nad klastrami prowadzi Dział Usług Informatycznych UWr.

Zewnętrzna infrastruktura obliczeniowa

Pracownicy WFiA korzystają z dostępu do zasobów dużych centrów komputerowych w kraju i za granicą w ramach indywidualnych grantów obliczeniowych:

- Wrocławskie Centrum Sieciowo-Superkomputerowe (WCSS) – <https://wcsc.pl/>
- Akademickie Centrum Komputerowe Cyfronet AGH – <https://www.cyfronet.pl/>
- PLGrid – <https://www.plgrid.pl/>
- ICM – https://kdm.icm.edu.pl/Zasoby/komputery_w_icm.pl/
- Lustre Cluster at GSI, Darmstadt – <https://hpc.gsi.de/virgo/preface.html#>