

Elektrosztatikus mérés szimulációja multiprocesszoros környezetben

KÉSZÍTETTE: BAKRÓ NAGY ISTVÁN

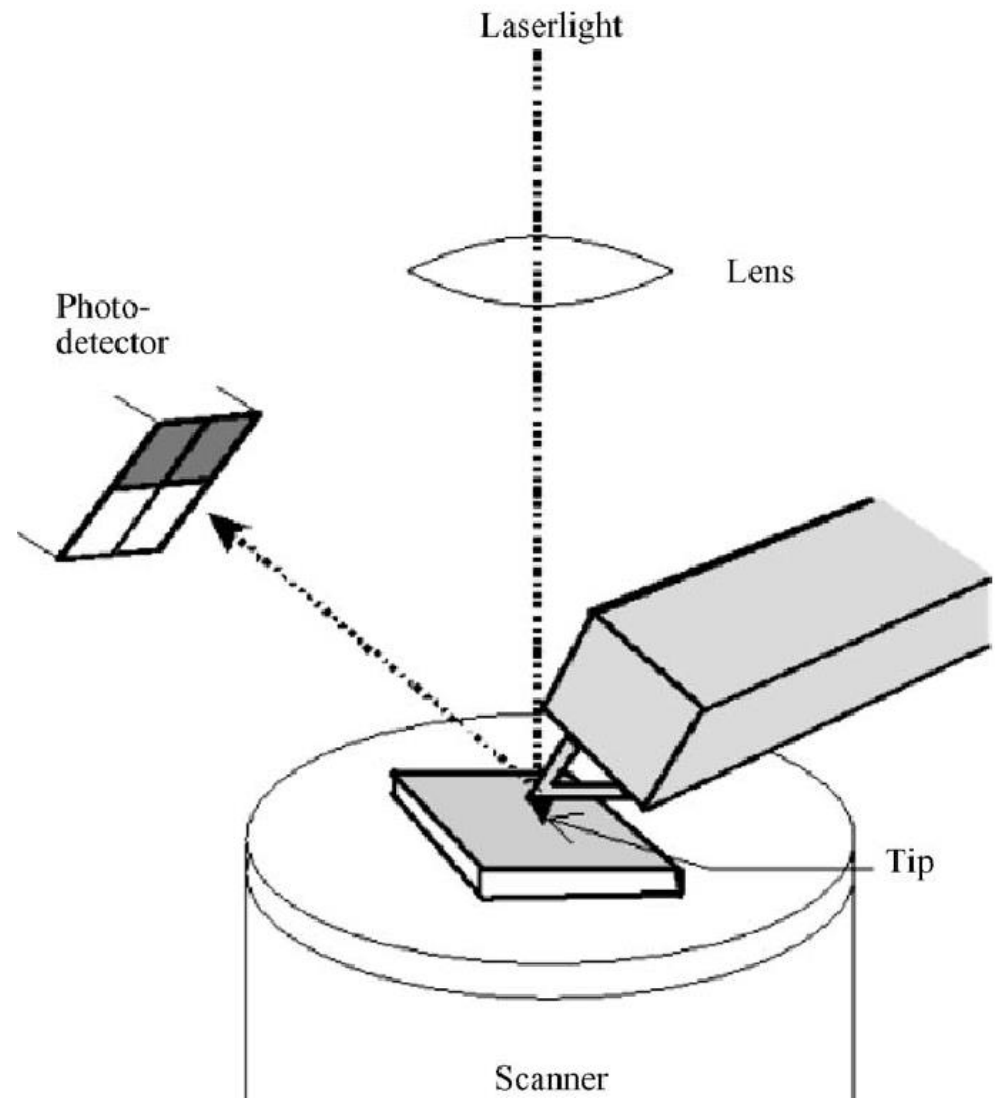
KONZULENS: REICHARDT ANDRÁS (BME SZHVT)

Áttekintés

- Az Atomerő mikroszkóp bemutatása
- Minta töltéssűrűségének mérése
- Kritikus a kapacitás értéke
- Szimuláció matematikai formalizálása
- Az OpenCL keretrendszer architektúrája
- Szimulátor megépítése során figyelembe vett megfontolások
- Eredmények
- További feladatok

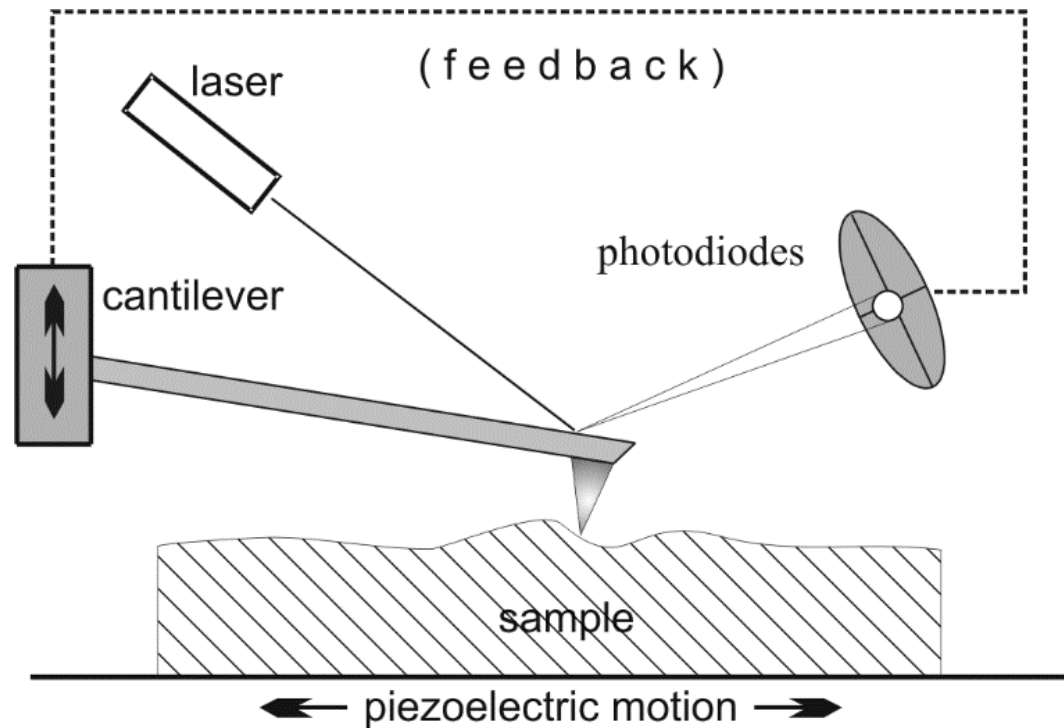
Az AFM apparátusa

- Minta mozgatása indirekt piezoelektromossággal
- Tű elmozdulásának mérése
- Tűre ható erő származtatása az elmozdulásából

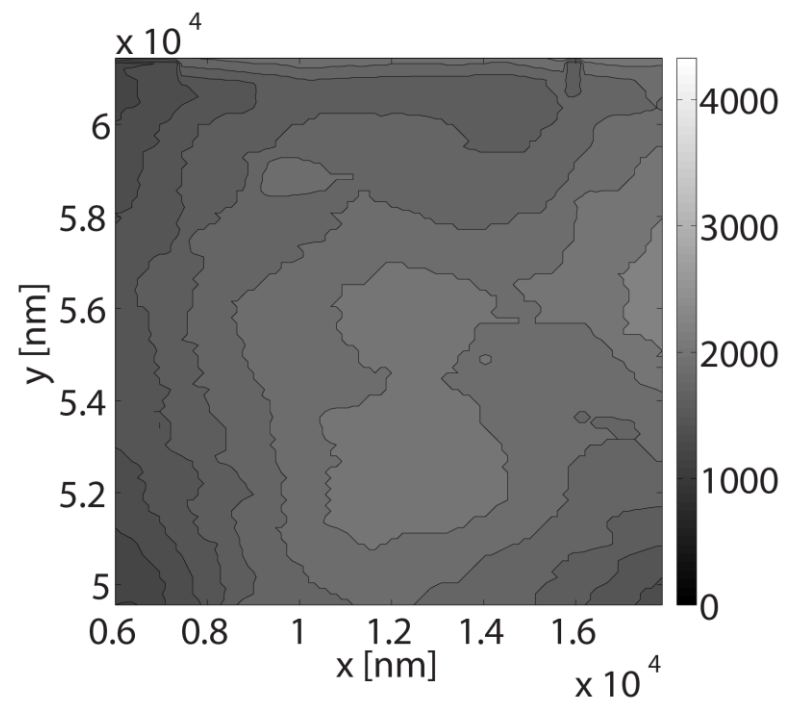
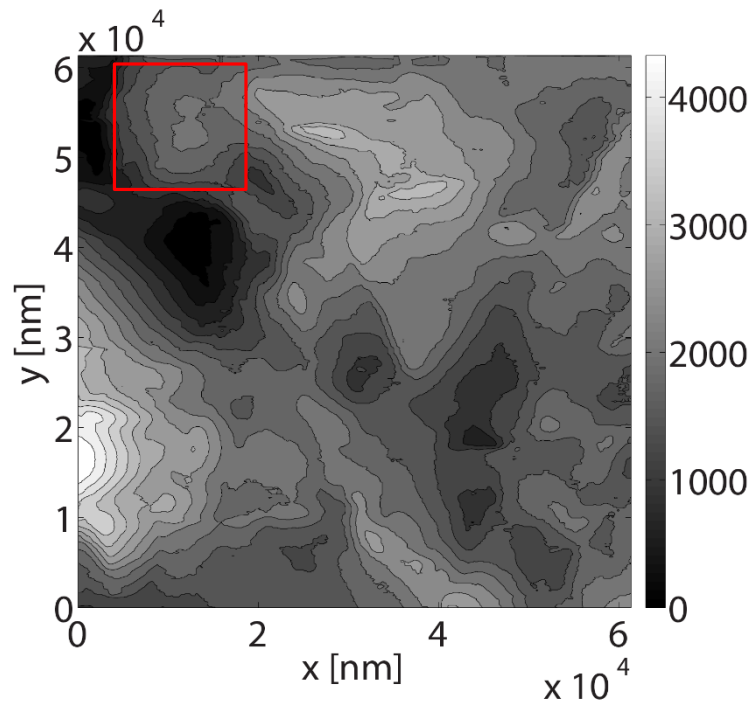


Töltéssűrűség mérése Dual-scan metódussal

1. Felületi topológia mérése kontakt módban

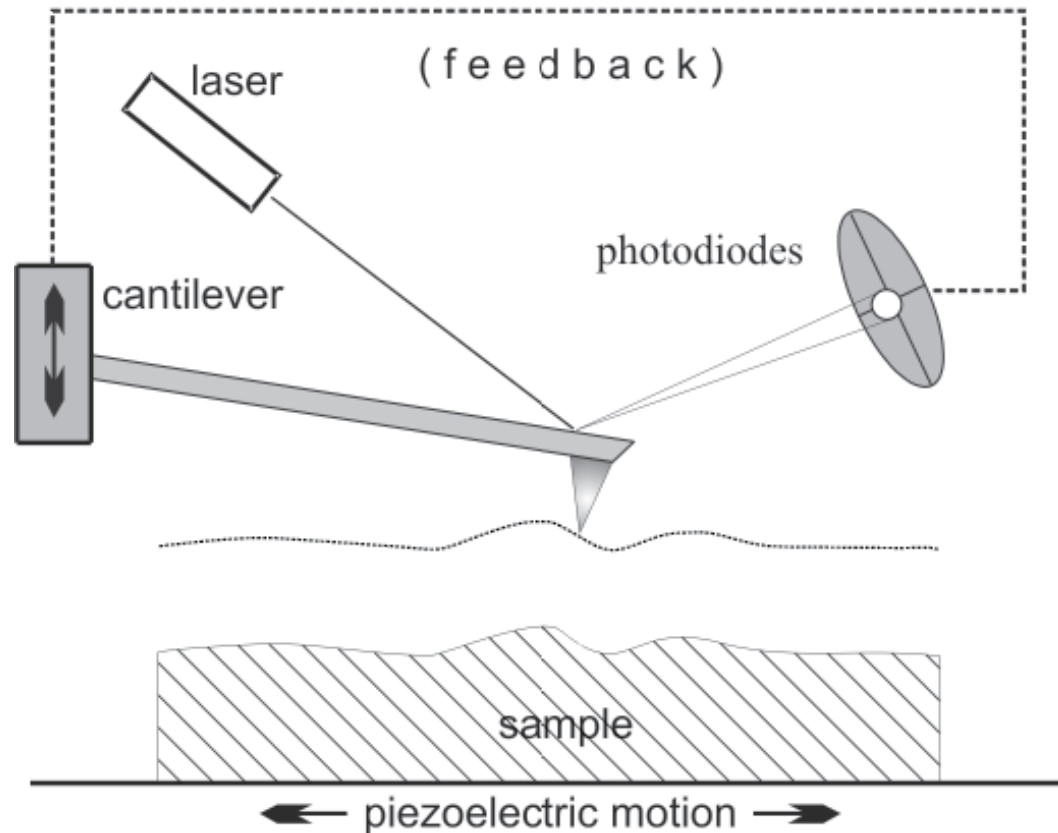


Felületi topológia



Töltéssűrűség mérése Dual-scan metódussal

1. Felületi topológia
mérése
kontakt módban
2. A felülettől állandó
magasságra emelése
tű potenciáljának
megemelése és
kopogtató üzemmódba
kapcsolás
3. „Tapogatás” közben a
tűre ható erő mérése



Töltéssűrűség mérése Dual-scan metódussal

TÚRE HATÓ ERŐ KOMPONENSEI

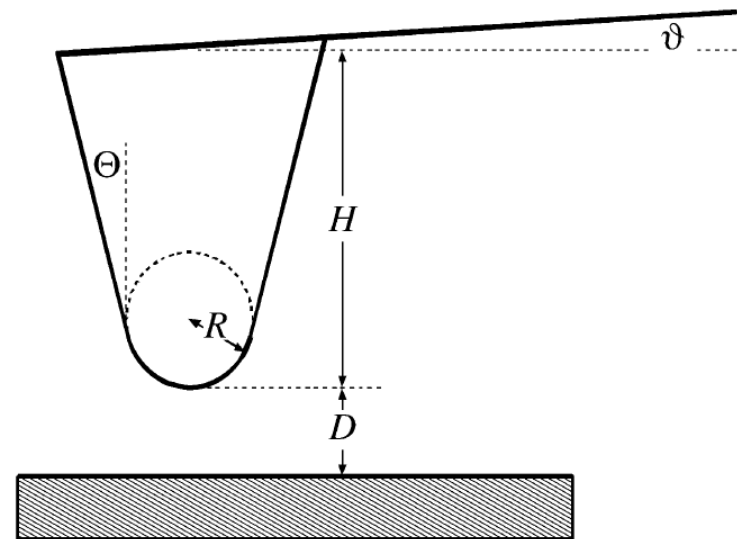
- *Van der Waals erő*: $\sim 1/r^6$
állandó távolság \rightarrow konstans erő
- *Elektrosztatikus erő*:
minta-tű elrendezésből adódó
kapacitás elektródái közötti erő
Számítása: analitikusan, **numerikusan**
- *Minta töltéssűrűsége általi erő*:
a mérendő mennyiség!

Töltéssűrűség mérése Dual-scan metódussal

TÚRE HATÓ ERŐ KOMPONENSEI

- *Van der Waals erő*: $\sim 1/r^6$
állandó távolság \rightarrow konstans erő
- *Elektrosztatikus erő*:
! minta-tű elrendezésből adódó
kapacitás elektródái közötti erő
Számítása: analitikusan, **numerikusan**
- *Minta töltéssűrűsége általi erő*:
a mérendő mennyiség!

KAPACITÁS ANALITIKUS MODELLJE



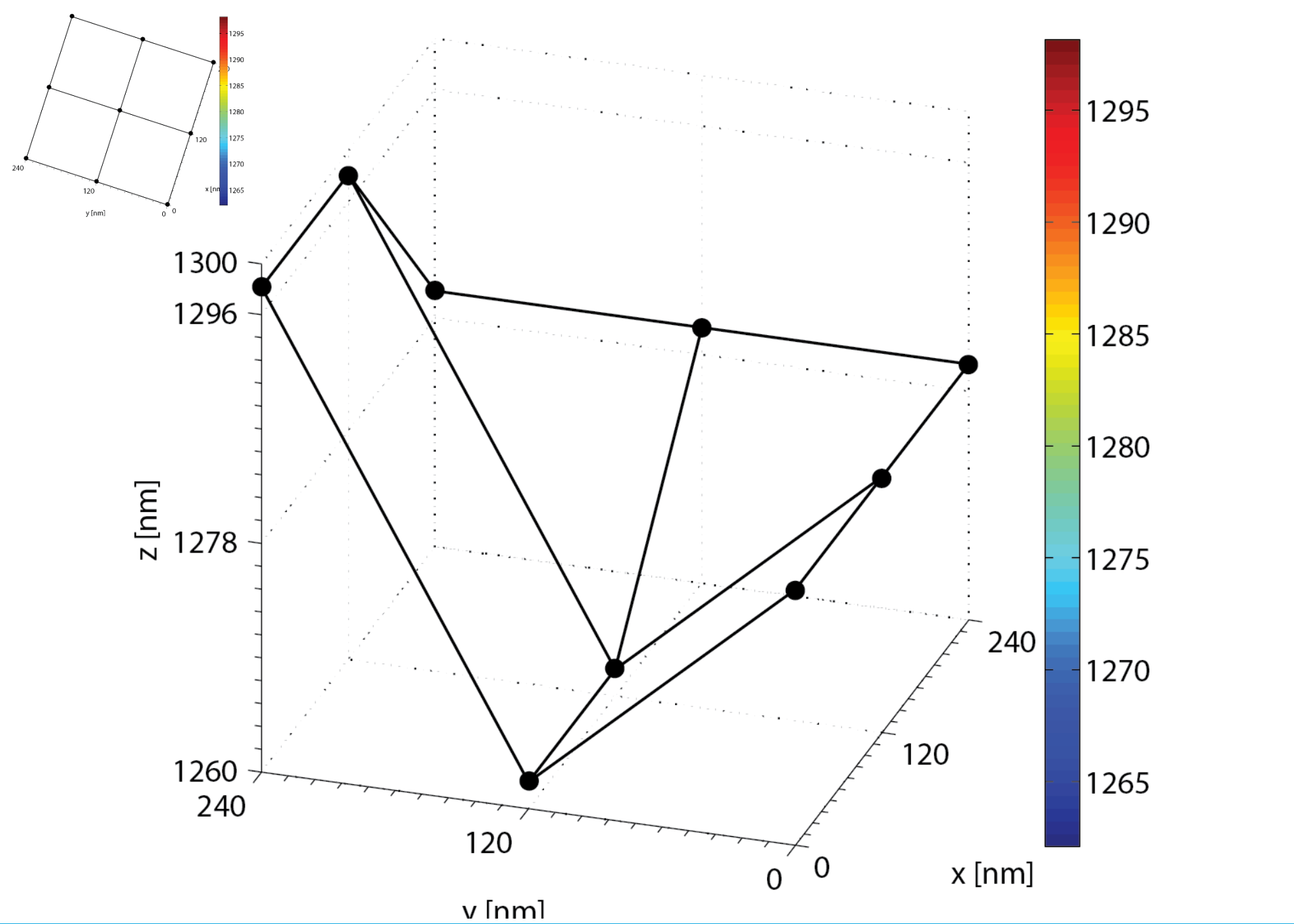
$$F_s = -\frac{dE}{dD} = -\frac{d(CV^2/2)}{dD} = -\frac{1}{2} \frac{dC}{dD} V^2$$

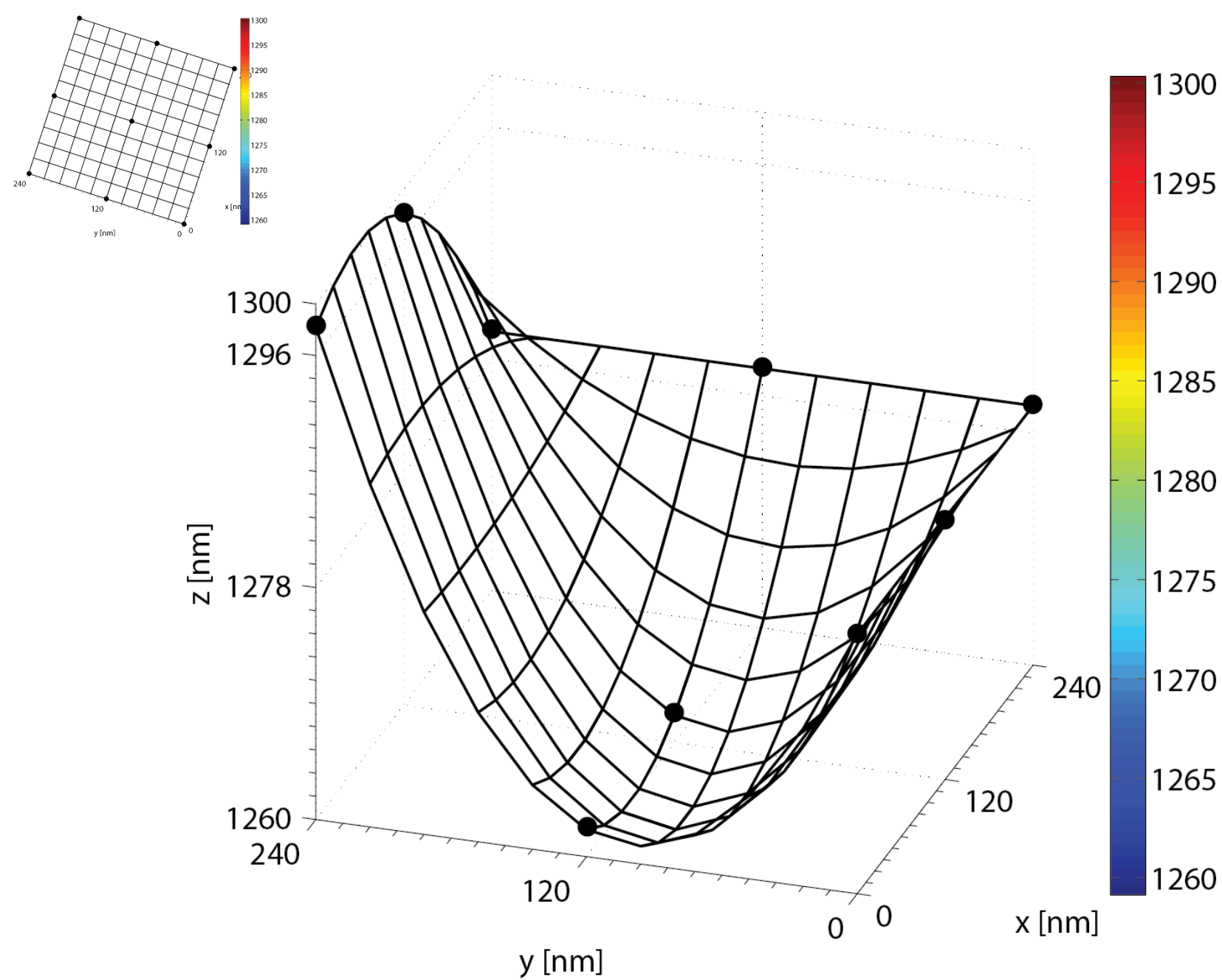
Matematikai modell formalizálása

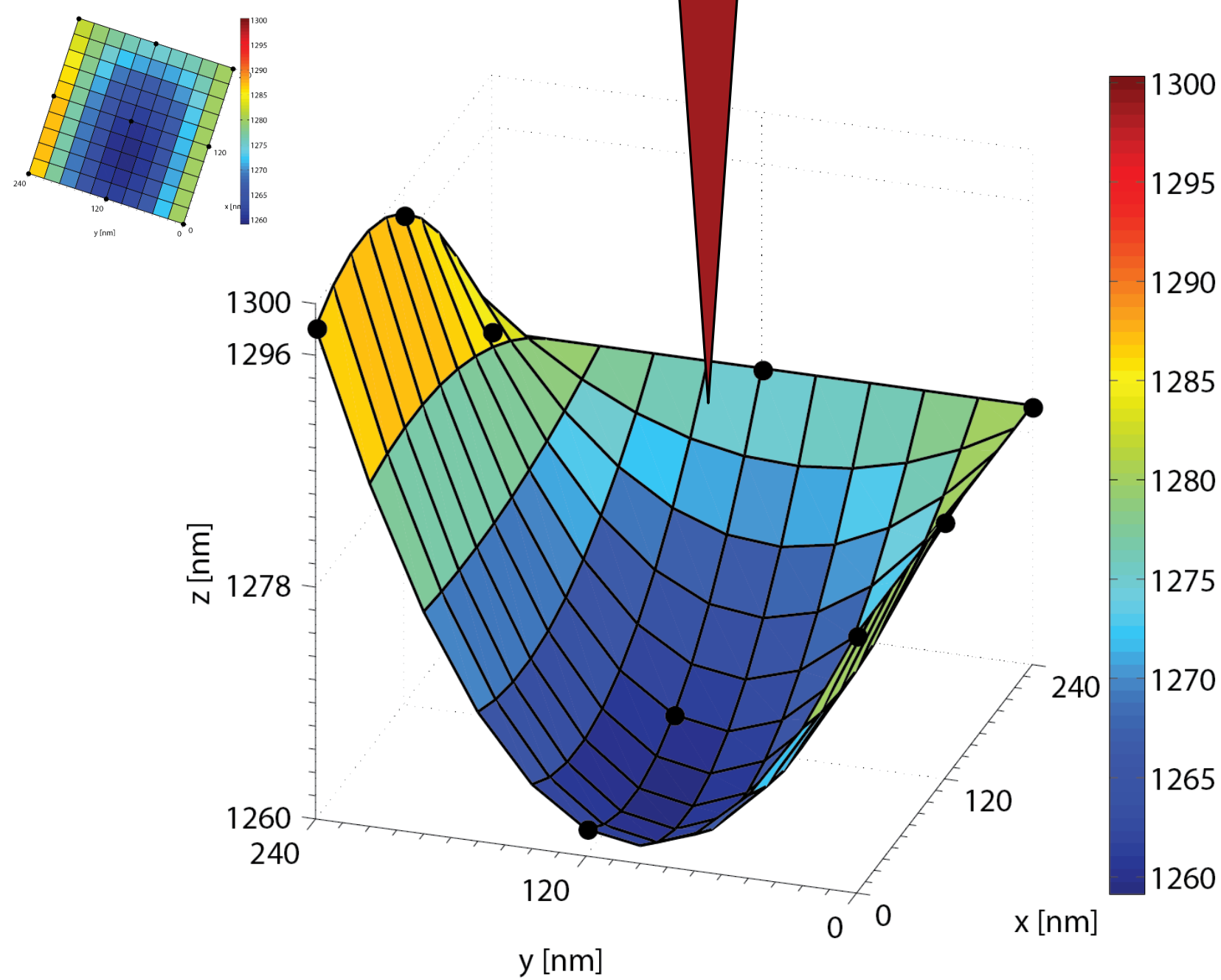
- Laplace egyenlet $\Delta V(x, y, z) = 0$
- Diszkretizálás a véges differenciák módszerének használata végett
- Nem egyenközű háló, ami az AFM felbontására illeszkedik, de interpolációval javítok rajta.

$$d_x = d_y = 120 \text{ nm} \gg d_z = 10 \text{ nm}$$

- Dirichlet feltétel a tűn (V_{tu}) és a mintán ($V_s = 0$)
- Neumann feltétel a többi felületen
- Szimulálandó tér méretének dinamikusan kell változnia
 - Elektrosztatikus erő $1/r^2 \rightarrow$ Csak a szomszédos pontokat veszem figyelembe (3×3)
 - Magasság „hirtelen” változik \rightarrow magasabb szimulációs tér

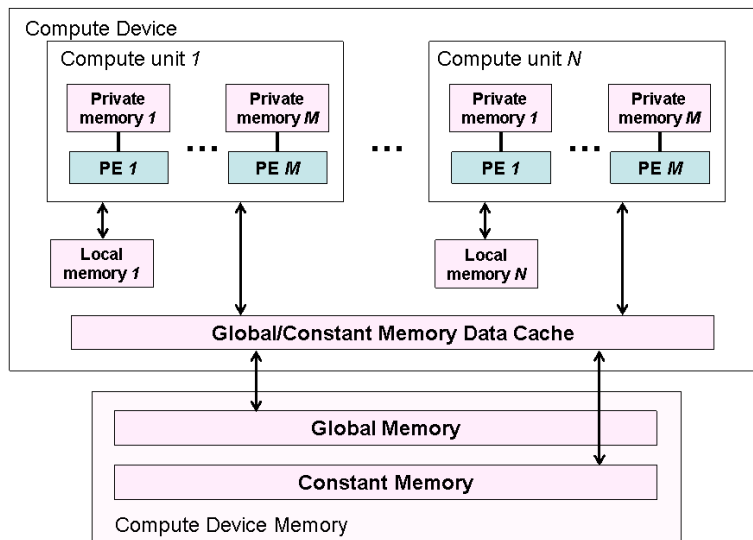






OpenCL keretrendszer

OPENCL ARCHITEKTÚRA



OPENCL MEMÓRIASZINTEK

	Méret	Sebesség
Host – memória	4< GByte	Kernel előtt & után
Globális	~1-4 GByte	Lassú
Lokális	16-32 Kbyte	Gyors
Privát	~ byte	Regiszter

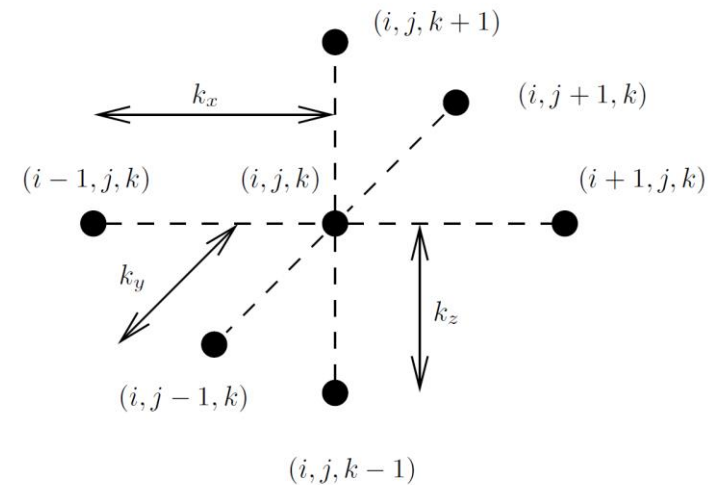
Memóriaszervezés az iteratív megoldás során

- Interpoláció során:

- A topológia részekre bontom és egy work-item-hez rendelem
- A work-item-ek egy work-group-ba csoportosítom → átlapolódás nem okoz gondot

- Szimuláció során:

- Függőlegesen haladok az iterációval
- Adott sor + alatta, felette lévő sor kerül a lokális memóriába a diszkretizálás végett
- Az iteráció végett a potenciál előző és következő értékét tartalmazza.



Eredmények

	Globális tranzakciók száma	Lokális tranzakciók száma	Futási idő	Fajlagos futási idő
Globális memória	$12 \times 12 \times 32.3$	0	5990 <i>ms</i>	410 ms
Lokális memória, ha befér	$12 \times 12 \times 32.3$	$0.48 \times 12 \times 12 \times 30$	2530 <i>ms</i>	170 ms
Lokális memória cachelés	$12 \times 12 \times 32.3$	$2.08 \times 12 \times 12 \times 30$	510 <i>ms</i>	3.5 ms

További feladatok

- Töltéssűrűség számítása
- Validáció
- Iteratív megoldó helyett direkt megoldó alkalmazása
- Tű formájának modellezése
- Kis vezetőképeségű minta és tű modellezése

HIVATKOZÁSOK

- [1] G. Binnig, C. F. Quate, and C. Gerber, „Atomic force microscope,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 56, pp. 930–933, Mar 1986. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.56.930>
- [2] B. Vasić, M. Kratzer, A. Matković, A. Nevosad, U. Ralević, D. Jovanović, C. Ganser, C. Teichert, and R. Gajić, „Atomic force microscopy based manipulation of graphene using dynamic plowing lithography,” *Nanotechnology*, vol. 24, no. 1, p. 015303, 2013. [Online]. Available: <http://stacks.iop.org/0957-4484/24/i=1/a=015303>
- [3] H.-J. Butt, B. Cappella, and M. Kappl, „Force measurements with the atomic force microscope: Technique, interpretation and applications,” *Surface Science Reports*, vol. 59, no. 1–6, pp. 1 – 152, 2005. [Online]. Available: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167572905000488>
- [4] Y. Martin, C. C. Williams, and H. K. Wickramasinghe, „Atomic force microscope–force mapping and profiling on a sub 100 Å scale,” *Journal of Applied Physics*, vol. 61, no. 10, pp. 4723–4729, 1987. [Online]. Available: <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jap/61/10/10.1063/1.338807>
- [5] H.-J. Butt, „Measuring electrostatic, van der waals, and hydration forces in electrolyte solutions with an atomic force microscope,” *Biophys J.*, vol. 60(6), p. 1438–1444., 1991. [Online]. Available: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC1260203/>
- [6] S. Hudlet, M. Saint Jean, C. Guthmann, and J. Berger, „Evaluation of the capacitive force between an atomic force microscopy tip and a metallic surface,” *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, vol. 2, no. 1, pp. 5–10, 1998. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1007/s100510050219>
- [7] Khronos OpenCL Working Group, *The OpenCL Specification, version 1.0*, 6 August 2010. [Online]. Available: <http://www.khronos.org/registry/cl/specs/opencl-1.0.pdf>