

# **Klastr DORJE**

**SGI Altix ICE 8200  
2008 - 2014**



**Jana Uhlířová, Jiří Chudoba (editoři)**

**FZÚ AV ČR, v. v. i.  
Praha 2014**

Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i., Pod Vodárenskou věží 2, 182 21 Praha 8



© J. Uhlířová, J. Chudoba (editoři), 2014

**ISBN 978-80-905962-0-7**

## Obsah

1. Úvod.....	4
2. HW a SW vybavení, rozšiřování klastru.....	5
2.1 Hardwarové vybavení.....	5
2.2 Softwarové vybavení.....	5
2.3 Rozšiřování klastru.....	7
3. Provoz.....	8
4. Odstávky.....	10
5. Servisní zásahy.....	12
6. Uživatelská podpora.....	13
7. Statistiky.....	14
7.1 Spotřeba zdrojů – vytížení klastru.....	14
7.2 Počet spuštěných úloh.....	17
7.3 Čekací doba úloh.....	18
7.4 Doba běhu úloh.....	19
7.5 Úlohy podle počtu použitých výpočetních uzlů a výpočetních jader.....	20
7.6 Počet uživatelů.....	22
8. Nové výpočetní prostředky jako náhrada klastru Dorje.....	23
9. Řešená problematika z oblasti fyziky pevných látek.....	24
9.1 Oddělení teorie kondenzovaných látek.....	25
9.2 Oddělení magnetik a supravodičů.....	28
9.3 Oddělení tenkých vrstev a nanostruktur.....	32
9.4 Oddělení strukturní analýzy.....	36
9.5 Oddělení optických materiálů.....	38
9.6 MFF UK – spolupráce s Oddělením magnetik a supravodičů.....	40
Příloha A.....	42
Příloha B.....	44
Příloha C.....	45

## 1. Úvod

Klastr Dorje byl zakoupen v listopadu 2008 jako nová výpočetní kapacita pro náročné vědecké výpočty v oblasti fyziky pevných látek. Ve své době byl jedním z nejvýkonnějších superpočítačů v České republice. Jeho teoretický výkon činil 5,1 TeraFlops a reálný, naměřený 4,2 TeraFlops.

Klastr byl umístěn ve velké serverovně na pracovišti Slovanka. Jeho jméno Dorje [:dordže:] pochází z tibetštiny. Toto slovo se používá k označení rituálního žezla, v překladu znamená diamantový klín.

Jednalo se o vysoce výkonný systém založený na systému **SGI Altix ICE 8200**, který dodala společnost SILICON GRAPHICS, s.r.o. Původní sestava se skládala ze 64 výpočetních uzlů a ze 3 servisních serverů. Každý výpočetní uzel byl osazen 2 čtyřjádrovými procesory typu Intel Xeon E5420, 2,50 GHz a pamětí o velikosti 8 GB. Celkem bylo pro vědecké výpočty k dispozici 512 výpočetních jader. Výpočetní uzly byly propojeny vysoce propustnou sítí InfiniBand (20 Gbit/s) a jako bezdiskové sdílely jeden centrální diskový prostor o velikosti 6 TB.

Po instalaci a testech byl klastr slavnostně uveden do provozu na jaře roku 2009. O zahájení provozu superpočítače informovala i reportáž TV Prima v hlavní zpravodajské relaci, seznam zpráv z dalších médií je na webových stránkách Výpočetního střediska <sup>[1]</sup>. Bez větších problémů a téměř nepřetržitě klastr fungoval až do konce září 2014, kdy byl jeho provoz oficiálně ukončen.

Zakoupení klastru bylo financováno Grantovou agenturou Akademie věd České republiky v rámci programu Nanotechnologie pro společnost, projekt „*Funkční hybridní nanosystémy polovodičů a kovů s organickými látkami*“ (KAN400100701), a Grantovou agenturou České republiky, projekt „*Nečistoty a defekty v magnetitu*“ (202/08/0541). Provoz klastru byl podporován z prostředků Fyzikálního ústavu.

Celkem za dobu provozu bylo spuštěno 130 tisíc úloh, což v průměru představuje 22,5 tisíce úloh ročně, tj. okolo 1 900 úloh měsíčně. Propočítalo se přes 15,5 milionu hodin strojového času, tj. 650 tisíc dnů, resp. 1 783 let.

Výsledky výpočtů, provedených na klastru Dorje, byly zveřejněny ve více než sto deseti vědeckých publikacích.

Hlavním administrátorem klastru byla po celou dobu provozu Jana Uhlířová. Na návrzích nastavení, jejich implementaci a na řešení provozních událostí se podíleli tito bývalí i současní pracovníci Výpočetního střediska pod vedením Jiřího Chudoby: Michael Krátký, Jan Švec, Jiří Horký, Marek Eliáš, Marek Sirový, Aleš Prchal a Tomáš Kouba.

---

[1] <http://www.farm.particle.cz/twiki/bin/view/VS/VsPrezentace>

## 2. HW a SW vybavení, rozšiřování klastru

### 2.1 Hardwarové vybavení

Původní systém *SGI Altix ICE 8200* se skládal ze 4 IRU (Individual Rack Unit) a ze třech serverů určených pro správu a řízení klastru. Každé IRU obsahovalo 16 výpočetních uzlů - bladů. Každý výpočetní uzel byl osazen 2 čtyřjádrovými procesory typu Intel Xeon E5420, 2,50 GHz a pamětí o velikosti 8 GB. Celkem bylo v tomto systému pro vědecké výpočty k dispozici 64 výpočetních uzlů, tj. 512 výpočetních jader.

Jednotlivé výpočetní uzly byly bezdiskové. Centrální datová oblast byla původně tvořena diskovým polem *SGI InfiniteStorage 220* o velikosti 6 TB (18 disků o velikosti 400 GB).

Výpočetní uzly byly zapojené do dvou nezávislých, vysoce propustných sítí InfiniBand typu 4x DDR o rychlosti 20 Gbit/s. Jedna síť byla primárně určena pro přenosy dat mezi výpočetními uzly a diskovým polem, druhá síť byla vyhrazena pro MPI komunikaci mezi jednotlivými výpočetními uzly při běhu paralelních úloh.

Teoretický výkon celého klastru představoval 5,1 TeraFlops, reálný naměřený 4,2 TeraFlops. V *HEPSPEC2006* testech byla naměřena hodnota 67,5 na jeden výpočetní uzel, tj. 8,43 na jedno výpočetní jádro. Celkový příkon při plné zátěži činil 17 kW.

### 2.2 Softwarové vybavení

Klastr běžel pod operačním systémem *SLES (SUSE Linux Enterprise Server)* se softwarovým rozšířením *SGI ProPack* a *SGI Foundation Software*. Celý systém se administroval pomocí nástroje *SGI Tempo*. Stav serverů a výpočetních uzlů byl monitorován pomocí nástroje *Ganglia*.

Na klastru byl nainstalován Intelovský překladač *Fortran*, *MKL* knihovny a *OpenMPI*. Úlohy se spouštěly přes frontový systém *Torque* a plánovač *Maui*. Mezi uživatelské aplikace patřily např. programy *wien2k*, *vasp*, *fireball* a *alps*. K dispozici byla i řada grafických nástrojů jako např. *xmgrace* a *xcrysden*.



*Obr. 1: Pohled do vnitřku racku*

## 2.3 Rozšiřování klastru

### Rok 2009

V únoru byly dokoupeny 2 hot spare disky pro diskové pole *SGI InfiniteStorage 220*. V červnu byly zakoupeny a namontovány vodou chlazené zadní dveře SGI racku. V důsledku stavebních úprav v serverovně bylo vodní chlazení uvedeno do provozu až koncem července. V červenci se rozšířila paměť v polovině výpočetních uzlů, v každém z 8 GB na 24 GB. Týkalo se všech uzlů v IRU0 a IRU1. Celková velikost paměti se tak zdvojnásobila na hodnotu 1 TB. Klastr se stal nehomogenním, a to si vyžádalo založení další fronty ve frontovém systému.

### Rok 2010

V červnu došlo k rozšíření paměti v druhé polovině výpočetních uzlů (IRU2 a IRU3), opět z 8 GB na 24 GB a klastr byl znovu homogenní. Celková velikost paměti dosáhla hodnoty 1,5 TB.

### Rok 2011

V listopadu skončila tříletá záruka na původní diskové pole *SGI InfiniteStorage 220*, a proto bylo zakoupeno a nainstalováno nové diskové pole *SGI InfiniteStorage 5000* s využitelnou kapacitou 14 TB (24 disků o velikosti 900 GB) a servisní server typu *SGI Altix XE 270*. Do tohoto nového diskového prostoru byly přesunuty domovské adresáře uživatelů.

### Rok 2013

V únoru byl klastr rozšířen o dva nové výpočetní uzly - servery *SGI UV20*. Každý server byl osazen 4 šestijádrovými procesory typu Intel Xeon E5-4617, 2,9 GHz a paměti o velikosti 256 GB.

**Tab. 1:** Přehled rozšiřování klastru

Rok	Rozšíření
2009	2 hot spare disky do diskového pole <i>SGI IS220</i>
	Vodou chlazené zadní dveře SGI racku
	Paměti do poloviny výpočetních uzlů
2010	Paměti do druhé poloviny výpočetních uzlů
2011	Diskové pole <i>SGI IS5000</i> a server <i>SGI Altix XE 270</i>
2013	2 výpočetní uzly <i>SGI UV20</i>

### 3. Provoz

Provoz klastru byl velmi stabilní, bez větších SW nebo HW závad. Podrobnější informace o odstávkách a servisních zásazích jsou uvedené v samostatných kapitolách.

#### **Stručný přehled provozu v jednotlivých letech**

##### *Rok 2008*

Dodávka klastru se uskutečnila koncem října. V listopadu technici společnosti SILICON GRAPHICS, s.r.o. provedli instalaci klastru a zaškolili administrátory. Následovalo období testování.

##### *Rok 2009*

V prvním čtvrtletí pokračoval na klastru testovací provoz. Byla provedena reinstalace frontového systému *Torque* a *OpenMPI* a byl doinstalován plánovač *Maui*. V důsledku čekání na instalaci vodního chlazení byl provoz klastru střídavě omezen na polovinu nebo na tři čtvrtiny výpočetních uzlů. Na plný výkon byl klastr spuštěn až koncem července, kdy bylo zprovozněno vodní chlazení. Vodou chlazené zadní dveře SGI racku byly dokoupeny dodatečně na přelomu května a června. V červenci proběhlo rozšíření paměti u poloviny výpočetních uzlů (IRU0 a IRU1). Za celý rok se spustilo přes 12 tisíc úloh a propočítalo více než 1,5 milionu hodin strojového času.

##### *Rok 2010*

Provoz klastru byl částečně omezen jeden týden v červenci, kdy došlo k poruše vodní klimatizace, a celý měsíc září, kdy probíhala rekonstrukce transformační stanice v areálu Slovanka. V červnu byla rozšířena paměť u druhé poloviny výpočetních uzlů (IRU2 a IRU3) a klastr se opět stal homogenním systémem s celkovou velikostí paměti 1,5 TB. Celkem bylo spuštěno více než 17 tisíc úloh a propočítáno okolo 2,5 milionu hodin strojového času.

##### *Rok 2011*

Provoz klastru byl omezen pouze v době, kdy probíhala instalace nového diskového pole *SGI InfiniteStorage 5000* a přesouvaly se domovské adresáře uživatelů. Za celý rok se spustilo 16,5 tisíce úloh a propočítalo více než 2,7 milionu hodin strojového času.

##### *Rok 2012*

Vyskytla se pouze jedna dvoudenní odstávka během pravidelné roční údržby transformační stanice. Celkem bylo spuštěno 38,4 tisíce úloh a propočítáno okolo 2,3 milionu hodin strojového času.

##### *Rok 2013*

Provoz proběhl bez větší odstávky. V únoru byly zakoupeny dva vysoce výkonné výpočetní uzly *SGI UV20*, Tyto výpočetní uzly byly v listopadu z klastru odebrány a přepojeny do prostředí *MetaCentra*. Uživatelé si tak mohli otestovat nové prostředí, do kterého byl ještě v prosinci pořízen nový výpočetní klastr *Luna2013* jako budoucí nástupce klastru *Dorje*. Za celý rok se spustilo téměř 30 tisíc úloh a propočítalo 2,9 milionu hodin strojového času.

##### *Rok 2014*

Od ledna začali uživatelé postupně využívat nové výpočetní prostředky – nový klastr *Luna2013*. Oba systémy běžely souběžně až do konce září, kdy byl provoz klastru *Dorje* oficiálně ukončen. Za období leden - září bylo spuštěno 15 tisíc úloh a propočítáno 1,4 milionu hodin strojového času.



## Monitorování provozu klastru

Stav serverů a výpočetních uzlů byl monitorován pomocí nástroje *Ganglia*. Zároveň běželo logování do centrálního syslogu. Případné problémy byly odchyťovány pomocí nastavených filtrů a zasílány administrátorovi emailem. To zajišťovalo promptní řešení.



Obr. 2: Přehled zatížení jednotlivých výpočetních uzlů pomocí nástroje Ganglia

## 4. Odstávky

K delším odstávkám klastru za dobu jeho provozu docházelo pouze výjimečně. Zpravidla se jednalo o jednodenní až dvoudenní odstávky v důsledku pravidelné roční údržby transformační stanice, v důsledku oprav klimatizačních jednotek nebo při úpravách elektroinstalace v serverovně.

Občas také proběhly úplné nebo částečné odstávky v rozsahu desítek minut nebo jednotek hodin kvůli upgradu softwaru.

### **Přehled odstávek**

#### *Rok 2009*

V únoru v důsledku poruchy jedné vzduchové klimatizační jednotky a v důsledku čekání na instalaci vodního chlazení byly vypnuté výpočetní uzly v jednom nebo ve dvou IRU. Tato odstávka trvala šest měsíců. Všechna 4 IRU byla zapnuta až v červenci po zprovoznění vodního chlazení. V září proběhla oprava vzduchové klimatizace, provoz v serverovně byl částečně omezen. Na klastru bylo vypnuto 16 výpočetních uzlů po dobu jednoho dne. V říjnu se uskutečnila ještě jedna oprava vzduchové klimatizace, opět se omezoval provoz v serverovně. Na klastru bylo vypnuto 18 výpočetních uzlů po dobu jednoho dne. V prosinci v serverovně vyhořely dvě 100 A pojistky. Oprava elektroinstalace si vyžádala vypnutí celého klastru po dobu jednoho dne.

#### *Rok 2010*

Na červen byla naplánována pravidelná roční údržba transformační stanice. Byla vypnuta polovina výpočetních uzlů. Odstávka trvala dva dny. V červnu proběhl upgrade paměti na druhé polovině výpočetních uzlů, provoz klastru byl na jeden den přerušen. V červenci došlo k závadě na vodní klimatizaci. Ta si vyžádala vypnutí čtvrtiny výpočetních uzlů po dobu jednoho týdne. V srpnu se uskutečnila revize elektroinstalace v serverovně, byla vypnuta polovina výpočetních uzlů po dobu jednoho dne. V září a v říjnu probíhala rozsáhlá rekonstrukce transformační stanice v areálu Slovanka. Zároveň došlo k závadě na UPS. Nejdříve bylo vypnuto 28 výpočetních uzlů, o několik dnů později ještě dalších 16. Odstávka trvala tři týdny.

#### *Rok 2011*

V listopadu v důsledku instalace nového diskového pole *SGI InfiniteStorage 5000* a přesunu domovských adresářů uživatelů byly všechny výpočetní uzly ve stavu offline po dobu jednoho dne.

#### *Rok 2012*

V červnu došlo k plánované odstávce celé serverovny v důsledku pravidelné roční údržby transformační stanice v areálu Slovanka. Během této odstávky také proběhlo stěhování serverů do nové serverovny oddělení SAVT a připojení nové UPS. Celý klastr byl vypnutý po dobu dvou dnů.

#### *Rok 2013*

Klastr fungoval celý rok bez jediné odstávky.

#### *Rok 2014*

V červenci vzhledem k velmi malému vytížení klastru byla vypnuta čtvrtina výpočetních uzlů. V září byl klastr v důsledku poruchy řadiče v diskovém poli *SGI InfiniteStorage 5000* dva dny nedostupný. Na konci září byl provoz klastru oficiálně ukončen.

Pozn.: Při pravidelné roční údržbě transformační stanice v květnu 2011 a v květnu 2013 byl klastr napájen z náhradního zdroje – z diesel agregátu. Jeho provoz nebyl omezen.

**Tab. 2: Přehled větších odstávek**

<b>Rok</b>	<b>Důvod</b>	<b>Počet vypnutých uzlů</b>	<b>Délka odstávky</b>
<b>2009</b>	Omezený provoz před instalací vodního chlazení	16-32	6 měsíců
	Oprava klimatizace	16	2 dny
	Oprava elektroinstalace v serverovně	64	1 den
<b>2010</b>	Pravidelná roční údržba trafostanice	32	2 dny
	Upgrade paměti v polovině uzlů	64	1 den
	Porucha vodní klimatizace	16	1 týden
	Rekonstrukce trafostanice	28-44	3 týdny
<b>2011</b>	Instalace nového diskového pole <i>SGI IS5000</i>	64	1 den
<b>2012</b>	Pravidelná roční údržba trafostanice	64	2 dny
<b>2014</b>	Velmi malé vytížení klastru	16	2 měsíce
	Porucha řadiče v diskovém poli <i>SGI IS5000</i>	64	2 dny

## 5. Servisní zásahy

Po celou dobu provozu klastru byla velmi dobrá spolupráce se servisními techniky společnosti SILICON GRAPHICS, s.r.o. Setkávali jsme se s rychlou odezvou, s konstruktivním přístupem k řešení problémů, vstřícností a ochotou. Několik úkonů bylo provedeno i nad rámec záruky.

**Tab. 3:** Přehled výměn vadného HW v jednotlivých letech provozu

Rok	Výměna vadného HW	Počet ks
2008	základní deska výpočetního uzlu	1
2009	disk v diskovém poli SGI IS220	2
	základní deska výpočetního uzlu	1
2010	základní deska výpočetního uzlu	1
	paměť 2GB ve výpočetním uzlu	7
	paměť 4GB ve výpočetním uzlu	1
2011	disk v diskovém poli SGI IS220	2
	baterie v diskovém poli SGI IS220	2
	paměť 2GB ve výpočetním uzlu	2
2012	disk v diskovém poli SGI IS5000	1
	paměť 2GB ve výpočetním uzlu	3
2013	disk v diskovém poli SGI IS220	3
	paměť 4GB ve výpočetním uzlu	2
2014	disk v diskovém poli SGI IS5000	1
	disk v diskovém poli SGI IS220	1

**Tab. 4:** Přehled výměn podle typu HW

Typ HW	Počet ks
Disk v diskovém poli SGI IS220	8
Disk v diskovém poli SGI IS5000	2
Základní deska výpočetního uzlu	3
Paměť 2GB ve výpočetním uzlu	12
Paměť 4GB ve výpočetním uzlu	3
Baterie v diskovém poli SGI IS220	2

## 6. Uživatelská podpora

Podrobná dokumentace a návody byly pravidelně aktualizovány na *TWiki* stránkách Výpočetního střediska.

Pro rychlé zjištění obsazenosti klastru byly na login serveru nainstalovány pomocné skripty. Tyto skripty vypisovaly přehled uzlů, které byly částečně nebo úplně volné, resp. částečně nebo plně obsazené, počet běžících a čekajících úloh a okamžitý přehled obsazení klastru podle jednotlivých uživatelů.

Dále bylo možné sledovat vytížení klastru na monitorovacích grafech. Grafy byly vytvořené pomocí nástroje *RRD Tool*. Aktualizace grafů probíhala každých pět minut. Grafy zobrazovaly počet volných a obsazených CPU, počet běžících a čekajících úloh a podrobnější rozpis obsazených CPU (výpočetní uzly ve stavu offline, down, node-exclusive). K dispozici byly grafy dvouhodinové, denní, týdenní, měsíční a roční.

Každý uživatel byl také členem diskuzní skupiny *vs-dorje*. Prostřednictvím tohoto mailing listu byli uživatelé informováni o novinkách, o plánované odstávce, apod.

Pro dotazy, požadavky a hlášení problémů byla určena samostatná fronta *fzu* v *Request Tracking (RT) systému* provozovaném sdružením CESNET. Tento způsob ale využívalo velmi málo uživatelů. Zpravidla uživatelé kontaktovali přímo administrátora klastru emailem nebo telefonicky.

Stav klastru a jeho vytížení byl diskutován na pravidelných týdenních schůzích administrátorů Výpočetního střediska.

### **Setkání uživatelů klastru**

Setkání uživatelů se za dobu provozu klastru uskutečnilo pouze třikrát.

V březnu 2009 proběhlo za účasti zástupců společnosti SILICON GRAPHICS, s.r.o. slavnostní uvedení klastru do provozu.

Druhé setkání se odehrálo v lednu 2011. V první části byly předneseny informace o dosavadním provozu klastru, potom obchodní zástupce společnosti SILICON GRAPHICS, s.r.o. seznámil uživatele s možnostmi dalšího rozšíření klastru.

Poslední setkání se uskutečnilo při příležitosti ukončení provozu klastru v říjnu 2014.

## 7. Statistiky

### 7.1 Spotřeba zdrojů – vytížení klastru

Ve všech statistikách představuje hodnota *walltime* reálnou spotřebu zdrojů ve smyslu **(čas ukončení úlohy – čas spuštění úlohy) \* počet použitých výpočetních jader**

Do této hodnoty nejsou zahrnuté alokované, ale nevyužívané CPU v důsledku úlohy typu „*node exclusive*“. Tyto informace bohužel nebyly v záznamech, ze kterých byly statistiky zpracovávány, uvedené.

V daném měsíci se vždy zpracovávaly úlohy, které byly v tomto měsíci ukončené. Pokud tedy úloha běžela déle než jeden měsíc, je započítávána až v měsíci, kdy doběhla. Z tohoto důvodu může být procentuální měsíční využití klastru více než 100 %.

**Tab. 5:** Spotřeba zdrojů v jednotlivých měsících za období leden 2009 – září 2014

walltime [hod]

Dorje	2009	2010	2011	2012	2013	2014
leden	0	219 250	317 561	210 987	229 898	217 752
únor	13 753	293 243	227 926	192 844	382 555	251 360
březen	50 960	270 729	243 297	219 982	245 482	159 558
duben	109 308	164 942	243 217	123 261	181 943	138 045
květen	106 480	194 319	172 497	196 606	241 363	114 402
červen	124 265	251 746	256 668	149 939	212 501	139 649
červenec	178 663	159 178	204 891	128 237	233 299	32 207
srpen	175 566	162 061	211 916	181 825	202 291	202 020
září	190 576	157 727	164 256	176 853	180 569	176 553
říjen	210 257	252 321	202 898	233 408	265 871	-
listopad	172 260	181 909	312 110	251 938	268 665	-
prosinec	181 807	229 539	170 686	185 295	274 995	-
<b>Celkem</b>	<b>1 513 895</b>	<b>2 536 964</b>	<b>2 727 923</b>	<b>2 251 175</b>	<b>2 919 432</b>	<b>1 431 546</b>

Za celé období provozu klastru bylo propočítáno 13 380 935 hodin strojového času, tj. 557 539 dnů, tj. 1 527 let.

Pokud započítáme i obsazená výpočetní jádra z úloh typu „*node-exclusive*“, která představují přibližně 10-15 %, potom získáme hodnotu **15 617 962 hodin**, tj. 650 748 dnů, tj. **1 783 let**. V průměru potom vychází 2 716 167 propočítaných hodin ročně, tj. 226 347 hodin měsíčně.

Detailní grafy s rozlišením alokovaných výpočetních jader v úlohách typu „*node-exclusive*“ jsou v příloze A.

**Tab. 6:** Celkový propočítaný čas a využití kapacity klastru v jednotlivých letech provozu (včetně „*node-exclusive*“)

Dorje	2009	2010	2011	2012	2013	2014
walltime [hod]	1 513 895	3 062 564	3 297 323	2 951 975	3 273 179	1 519 026
Využití [%]	44,9	77,2	73,5	65,8	72,9	47,9

**Tab. 7:** Využití kapacity klastru v jednotlivých měsících za období leden 2010 – září 2014 (vyjádřeno v %)

Dorje	2010	2011	2012	2013	2014
leden	57,5	83,4	55,4	60,4	57,2
únor	85,2	66,2	54,1	107,3	70,5
březen	71,1	63,9	57,8	64,4	41,9
duben	44,7	66,0	33,4	49,4	37,5
květen	51,0	45,3	51,6	62,2	30,0
červen	68,3	67,4	40,7	52,7	37,9
červenec	44,7	53,8	33,7	58,3	8,4
srpen	42,5	55,6	47,7	48,6	70,7
září	65,8	43,1	48,0	45,0	63,8
říjen	66,2	53,3	61,3	65,2	-
listopad	49,3	81,9	68,3	72,6	-
prosinec	60,2	44,8	48,6	72,2	-

Do statistik byly započítány následující delší odstávky:

*Rok 2009*

- 6 měsíců vypnuta polovina uzlů

*Rok 2010*

- 1 týden vypnuta čtvrtina uzlů

- 3 týdny vypnuta polovina uzlů

*Rok 2014*

- 2 měsíce vypnuta čtvrtina uzlů



## 7.2 Počet spuštěných úloh

**Tab. 8:** Počet úloh spuštěných v jednotlivých měsících za období leden 2009 – září 2014

Úlohy	2009	2010	2011	2012	2013	2014
leden	7	1 081	1 335	2 399	1 547	1 745
únor	445	1 305	1 512	2 754	1 818	2 533
březen	719	1 133	1 248	2 126	2 123	3 575
duben	795	1 154	1 649	1 452	2 329	1 246
květen	990	2 011	1 677	2 008	2 164	1 927
červen	1 133	1 025	1 300	1 335	2 183	1 283
červenec	1 036	1 365	862	8 093	3 743	1 201
srpen	1 799	1 219	1 303	1 715	2 964	971
září	1 352	720	1 474	1 561	3 197	800
říjen	1 418	1 340	1 366	10 859	2 705	-
listopad	1 361	2 916	1 364	2 005	2 872	-
prosinec	1 022	2 360	1 580	2 093	1 966	-
<b>Celkem</b>	<b>12 077</b>	<b>17 629</b>	<b>16 670</b>	<b>38 400</b>	<b>29 611</b>	<b>15 281</b>

Celkem za dobu provozu bylo spuštěno **129 668 úloh**, což v průměru představuje 22 551 úloh ročně, tj. 1 879 úloh měsíčně.

### 7.3 Čekací doba úloh

Úlohy, které se po zadání do fronty ihned nerozběhly a čekaly, zpravidla tvořily pouze jednotky procent všech spuštěných úloh, výjimečně překročily deset procent (viz měsíční statistiky). Ve většině případů se jednalo o úlohy, které požadovaly celý výpočetní uzel, případně několik uzlů.

**Tab. 9:** Procentuální zastoupení čekajících úloh v jednotlivých měsících za období leden 2009 – září 2014

Úlohy	2009	2010	2011	2012	2013	2014
leden	0	3,3	3,3	9,2	6,3	5,4
únor	0,9	3,3	8,8	2,3	4,2	4,6
březen	4,9	2,4	6,6	2,9	2,4	7,9
duben	1,6	0,5	8,9	3,8	1,1	0,4
květen	4,6	2,2	7,1	4,8	3,4	3,6
červen	3,0	6,6	11,1	3,0	11,3	4,8
červenec	6,5	0,4	2,4	0,1	4,6	6,3
srpen	0,5	2,1	8,8	1,9	9,2	14,1
září	7,5	7,1	6,7	3,1	6,5	6,0
říjen	1,6	2,6	20,5	0,8	11,6	-
listopad	3,1	5,7	14,5	6,2	3,3	-
prosinec	1,9	4,8	8,7	1,2	2,4	-

**Tab. 10:** Průměrné procentuální zastoupení čekajících úloh a průměrná doba čekání v jednotlivých letech provozu

Úlohy	2009	2010	2011	2012	2013	2014
Čekající úlohy [%]	3,2	3,5	9,1	2,2	5,5	5,8
Průměrná doba čekání	8 min	8 min	10 min	4 min	8 min	8 min
Průměrná maximální doba čekání	13 hod	19 hod	12 hod	14 hod	17.5 hod	16 hod

## 7.4 Doba běhu úloh

Výrazně převažovaly úlohy, které doběhly do 24 hodin (okolo 90 %). Úlohy, které běžely déle než 1 týden, představovaly pouze několik procent všech spuštěných úloh.

**Tab. 11:** Procentuální zastoupení úloh, které doběhly do 24 hodin, a úloh, které běžely déle než 1 týden (sledováno od roku 2011)

Úlohy	2011	2012	2013	2014
Do 24 hodin [%]	84,9	89,8	90,7	90,1
Více než 7 dnů [%]	3,9	1,9	1,6	1,6

Detailní grafy jsou uvedené v příloze C.

## 7.5 Úlohy podle počtu použitých výpočetních uzlů a výpočetních jader

Úlohy, které běžely na více výpočetních uzlech, představovaly 13 % všech spuštěných úloh a propočítaly 35,4 % celkové spotřeby strojového času. Nejčastěji běžely na 2, 4 nebo 8 výpočetních uzlech. Mezi největší úlohy patřily úlohy spuštěné na 16 nebo 20 výpočetních uzlech.

Úlohy, které běžely v rámci jednoho výpočetního uzlu, představovaly 87 % celkového počtu spuštěných úloh a spotřebovaly 64,6 % celkového množství propočítaného času.

Podrobnější údaje jsou uvedené v grafech v příloze B.

Poměr mezi počtem úloh, které byly spuštěné na jednom nebo na více výpočetních jádrech, se v jednotlivých letech lišil (např. 1:2, 2:3, 3:4). Pouze v roce 2012 byl počet jednoprocesorových úloh vyšší. Avšak v souhrnu za celou dobu provozu bylo množství jednoprocesorových a víceprocesorových úloh téměř vyrovnané.

**Tab. 12:** Počet úloh podle počtu alokovaných výpočetních uzlů v jednotlivých letech provozu

Úlohy	1 uzel	2 uzly	3 uzly	4 uzly	5 uzlů	6 uzlů	7 uzlů	8 uzlů	9 uzlů	10	>10
2009	9 534	952	510	378	346	236	34	61	27	4	1
2010	14 846	1 055	570	781	191	100	42	73	5	5	1
2011	14 141	1 248	139	837	36	358	0	319	2	83	414
2012	34 208	1 905	328	1 206	48	195	3	681	9	90	200
2013	26 995	939	318	655	98	166	3	295	6	60	198
2014	13 548	524	405	341	8	152	0	78	42	19	159
<b>Celkem</b>	<b>113 272</b>	<b>6 623</b>	<b>2 270</b>	<b>4 198</b>	<b>727</b>	<b>1 207</b>	<b>82</b>	<b>1 507</b>	<b>91</b>	<b>261</b>	<b>973</b>

**Tab. 13:** Srovnání spotřeby zdrojů podle úloh, které běžely na jednom nebo na více výpočetních uzlech (vyjádřeno v %)

Dorje	2009	2010	2011	2012	2013	2014	Celkem
1 uzel	71,4	62,2	61,6	59,1	71,8	61,7	64,6
více uzlů	28,6	37,8	38,4	40,9	28,2	38,3	35,4

**Tab. 14:** Počet jednoprosesorových a víceprocesorových úloh v jednotlivých letech provozu

Úlohy	1 CPU	>1 CPU
2009	4 471	7 606
2010	8 480	9 058
2011	6 451	10 219
2012	26 439	11 961
2013	12 366	17 245
2014	4 785	10 496
<b>Celkem</b>	<b>62 992</b>	<b>66 585</b>

## 7.6 Počet uživatelů

*Tab. 15: Narůstající počet uživatelů*

<b>Uživatelé</b>	<b>2008</b>	<b>2009</b>	<b>2010</b>	<b>2011</b>	<b>2012</b>	<b>2013</b>	<b>2014</b>
<b>Počet nových</b>	5	11	5	4	7	3	2
<b>Celkový počet</b>	5	16	21	25	32	35	37

## 8. Nové výpočetní prostředky jako náhrada klastru Dorje

V prosinci 2013 proběhl nákup nových výpočetních prostředků jako budoucí náhrada klastru Dorje.

Nový klastr, pojmenovaný **Luna2013**, je integrovaný do prostředí MetaCentra. Skládá se ze 47 výpočetních uzlů typu SuperMicro SuperServer 6017R-NTF. Každý výpočetní uzel je osazen 2 osmijádrovými procesory Intel Xeon E5-2650 v2, 2,6 GHz, pamětí o velikosti 96 GB a lokálním diskem o velikosti 800 GB. Výpočetní uzly jsou propojené sítí InfiniBand typu 4x QDR (40 Gbit/s). Celkem je pro vědecké výpočty k dispozici 752 výpočetních jader a 4,5 TB paměti. Teoretický výkon celého klastru činí 15,6 TeraFlops.

Uživatelé využívají klastr Luna2013 od ledna 2014.

**Tab. 16:** Porovnání klastru Dorje a klastru Luna2013

	<b>Klastr Dorje</b>	<b>Klastr Luna2013</b>
Počet uzlů	64	47
Počet procesorů	128	96
Počet výpočetních jader (CPU)	512	752
Velikost RAM	1,5 TB	4,5 TB
Typ procesoru	Intel Xeon E5420 2,5 GHz	Intel Xeon E5-2650 v2 2,6 GHz
Počet CPU na 1 uzlu	8	16
Velikost RAM na 1 CPU	3 GB	6 GB
Propojení uzlů	Infiniband 4x DDR (20 Gbit/s)	Infiniband 4x QDR (40 Gbit/s)
HEPSPEC2006 na 1 CPU	8,4	19,2
Teoretický výkon klastru	5,1 TeraFlops	15,6 TeraFlops
Rok pořízení	listopad 2008	prosinec 2013

## 9. Řešená problematika z oblasti fyziky pevných látek

Klastr byl určen pro náročné vědecké výpočty v oblasti fyziky pevných látek. Hlavní témata řešených problematik jsou shrnuta v následujících zprávách. Zprávy obsahují také seznamy publikací, ve kterých jsou zveřejněné výsledky z výpočtů provedených na klastru Dorje.

Oddělení teorie kondenzovaných látek - RNDr. František Máca, CSc.

Oddělení magnetik a supravodičů - Ing. Pavel Novák, CSc., DSc.

Oddělení tenkých vrstev a nanostruktur - Mgr. Martin Ondráček, Ph.D.

Oddělení strukturní analýzy - RNDr. Ondřej Šipr, CSc.

Oddělení optických materiálů - Mgr. Oleksandr Romanyuk, Ph.D.

MFF UK - RNDr. Vojtěch Chlan, Ph.D., spolupráce s Oddělením magnetik a supravodičů



## 9.1 Oddělení teorie kondenzovaných látek

*František Máca*

Významným projektem řešeným na klastru dorje je hledání nových materiálů pro budoucí aplikace v tzv. spinové elektronice – teoretická podpora experimentů a vývoje technologií oddělení spintroniky a nanoelektroniky. Dnes známé spintronické součástky, používané například v čtecích hlavách pevných disků nebo paměťových čípech, jsou založeny na feromagnetech. V těchto materiálech mají spiny elektronů tendenci orientovat se jedním směrem, proto se materiál navenek chová jako silný magnet. Existuje ovšem mnohem větší rodina materiálů, ve kterých se spiny elektronů v okolí jedné skupiny atomů v krystalové mříži orientují jedním směrem a v okolí jiné skupiny atomů opačným směrem. Tyto tzv. antiferomagnety jsou atraktivní mj. tím, že své magnetické chování projevují jen uvnitř krystalu, zatímco navenek se chovají jako nemagnetické. Proto se antiferomagnetické látky na dálku vzájemně magneticky neovlivňují, což je cenná vlastnost zvláště s ohledem na hustotu součástek v dnešních integrovaných obvodech. Pro výzkum spintroniky a její možné aplikace v oblasti senzorů a počítačových mikrosoučástek se tak před námi otevřela zcela nová oblast antiferomagnetických materiálů s kovovými a polovodičovými vlastnostmi, mnohem širší a bohatší než kovové feromagnety, na které se až doposud spintronické součástky omezovaly. Cílem výše zmíněného projektu je systematicky vyhledávat nové materiály a analyzovat nové jevy vhodné pro takovéto využití.

Jiným zajímavým projektem je teoretické studium magnetických vlastností uměle připravených tenkých vrstev a nanostruktur. Počítačové simulace umožňují dnes hledat např. optimální chemické složení či geometrickou kompozici systémů o vlastnostech využitelných v praktických aplikacích. Cílem základního výzkumu je vytipovat reálné struktury technologicky zajímavých vlastností, které lze v laboratorních podmínkách připravit moderními povrchovými depozičními technikami. Na takto vytvořených vzorcích jsou pak ověřovány predikované vlastnosti. Numerické simulace dnes umožňují systematicky vyhledávat nové materiály a analyzovat nové jevy vhodné pro praktické využití.

Sloučeniny těžkých kovů vykazují širokou škálu jevů díky přítomnosti elektronů s vysokým orbitálním momentem. Řada těchto materiálů byla studována ve spolupráci s experimentálními skupinami z Univerzity Karlovy a z ITU v Karlsruhe. Jedním ze zkoumaných jevů byla nekonvenční supravodivost intermetalické sloučeniny PuCoGa<sub>5</sub>. Pomocí spektroskopických měření takzvané Andrejevovy reflexe byla určena symetrie parametru uspořádání supravodivého stavu této látky. Zjištěná symetrie odpovídá Cooperovým pářům vázaným magnetickými interakcemi, což je překvapivý výsledek, neboť PuCoGa<sub>5</sub> jinak nevykazuje makroskopické magnetické chování. Tento zdánlivý rozpor lze vysvětlit na základě dynamické kompenzace mikroskopických magnetických momentů, jež vyplývá z našich kvantově mechanických výpočtů elektronové struktury této sloučeniny.

Byly též studovány galvanomagnetické vlastnosti magnetických materiálů se složitou mřížkovou strukturou, jako např. residuální odpor, magnetoresistence, a anomální Hallův odpor, vyžadující zahrnutí relativistických korekcí, a vliv teploty na ně.

*Seznam publikací:*

1. A.B. Shick, F. Máca, and A.I. Lichtenstein: Magnetic anisotropy of single 3d spins on CuN surface, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 172409, p1-4.
2. A.B. Shick, F. Máca, and A.I. Lichtenstein: Magnetic anisotropy of single Co atom on CuN surface, *J. Appl. Phys.* **105** (2009) 07C309, p1-3.
3. J. Kudrnovský, F. Máca, I. Turek, and J. Redinger: Substrate-induced antiferromagnetism of a Fe monolayer on the Ir(001) surface, *Phys. Rev. B* **80** (2009) 064405, p1-8.
4. M. Ondráček, O. Bengone, J. Kudrnovský, V. Drchal, F. Máca, and I. Turek: Magnetic phase stability of monolayers: Fe on a  $TaxW_{1-x}(001)$  random alloy as a case study, *Phys. Rev. B* **81** (2010) 064410, p1-8.
5. R. Bouzerar, F. Máca, J. Kudrnovský, and L. Berquist: Effect of P-anion co-doping on the Curie temperature of GaMnAs diluted magnetic semiconductors, *Phys. Rev. B* **82** (2010) 035207, p1-6.
6. M. Kopecký, J. Kub, F. Máca, J. Mašek, O. Pacherová, A.W. Rushforth, B.L. Gallagher, R.P. Campion, V. Novák and T. Jungwirth: Detection of stacking faults breaking the [110]/[1-10] symmetry in ferromagnetic semiconductors (Ga,Mn)As and (Ga,Mn)(As,P), *Phys. Rev. B* **83** (2011) 235324, p1-7.
7. A. B. Shick, J. Ruzs, J. Kolorenč, P. M. Oppeneer, and L. Havela: Theoretical investigation of electronic structure, electric field gradients, and photoemission of PuCoGa<sub>5</sub> and PuRhGa<sub>5</sub> superconductors, *Phys. Rev. B* **83** (2011) 155105, p1-7
8. F. Máca, J. Mašek, O. Stelmakhovych, X. Martí, H. Reichlová, K. Uhlířová, P. Beran, P. Wadley, V. Novák and T. Jungwirth: CuMn-V compounds: a transition from semimetal low-temperature to semiconductor high-temperature antiferromagnets, *J. Magn. Magn. Mater.* **324** (2012) 1606-1612.
9. D. Daghero, M. Tortello, G.A. Ummarino, J.-C. Griveau, E. Colineau, R. Eloirdi, A. B. Shick, J. Kolorenč, A.I. Lichtenstein, and R. Caciuffo, Strong-coupling d-wave superconductivity in PuCoGa<sub>5</sub> probed by point-contact spectroscopy, *Nature Communications* **3** (2012) 786, p1-8.
10. F. Máca, J. Kudrnovský, V. Drchal and J. Redinger: Influence of oxygen and hydrogen adsorption on the magnetic structure of an ultrathin iron film on an Ir(001) surface, *Phys. Rev. B* **88** (2013) 045423, p1-7.
11. A. B. Shick, J. Kolorenč, J. Ruzs, P. M. Oppeneer, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, and R. Caciuffo, Unified character of correlation effects in unconventional Pu-based superconductors and  $\delta$ -Pu, *Phys. Rev. B* **87** (2013) 020505(R), p1-5.
12. A. B. Shick, J. Kolorenč, L. Havela, T. Gouder, and R. Caciuffo, Nonmagnetic ground state of PuO<sub>2</sub>, *Phys. Rev. B* **89** (2014) 041109(R), p1-4.
13. K. Sato, L. Bergqvist, J. Kudrnovsky, P.H. Dederichs, O. Eriksson, I. Turek, B. Sanyal,

- G. Bouzerar, H. Katayama-Yoshida, V.A. Dingh, T. Fukushima, H. Kizaki, and R. Zeller: First principles theory of dilute magnetic semiconductors, *Rev. Mod. Phys.* **82** (2010) 1633-90.
14. S. K. Bose, J. Kudrnovsky, V. Drchal, and I. Turek: Magnetism of mixed quaternary Heusler alloys:  $(\text{Ni}_{1-x}\text{Tx})_2\text{MnSn}$  ( $\text{T}=\text{Cu},\text{Pd}$ ) as a case study, *Phys. Rev. B* **82** (2010) 174402.
  15. J. Kudrnovsky, S. Khmelevskiy, I. Turek, and V. Drchal: Effects of atomic and magnetic order on electronic transport in Pd-rich PdFe alloys, *Phys. Rev. B* **84** (2011) 214436 (8 pages).
  16. I. Turek, J. Kudrnovsky, and V. Drchal: Ab initio theory of galvanomagnetic phenomena in ferromagnetic metals and disordered alloys, *Phys. Rev. B* **86** (2012) 014405.
  17. J. Kudrnovsky, V. Drchal, I. Turek, S. Khmelevskiy, J.K. Glasbrenner, and K.D. Belashchenko: Spin-disorder resistivity of ferromagnetic metals: the disordered local moment approach, *Phys. Rev. B* **86** (2012) 144423.
  18. Y.O. Kvashnin, S. Khmelevskiy, J. Kudrnovsky, A.N. Yaresko, L. Genovese, and P. Bruno: Noncollinear magnetic ordering in compressed FePd<sub>3</sub> ordered alloy: A first principles study, *Phys. Rev. B* **86** (2012) 174429.
  19. J. Kudrnovsky, V. Drchal, and I. Turek: Anomalous Hall effect in stoichiometric Heusler alloys with native disorder: A first-principles study, *Phys. Rev. B* **88** (2013) 014422.
  20. X. Marti, I. Fina, C. Frontera, Jian Liu, P. Wadley, Qing He, R. Paull, J. Clarkson, J. Kudrnovsky, I. Turek, J. Kuneš, Jiun-Haw Chu, Di Yi, Ch. Nelson, Long You, E. Arenholz, S. Salahuddin, J. Fontcuberta, T. Jungwirth, and R. Ramesh: Room-temperature antiferromagnetic memory resistor, *Nature Materials* **13** (2014) 367-374.
  21. J. Kudrnovsky, V. Drchal, and I. Turek: Galvanomagnetic properties of partially ordered L10 FePt alloys, *Phys. Rev. B* **89** (2014) 224422.

## 9.2 Oddělení magnetik a supravodičů

*Pavel Novák*

Výpočetní klastr DORJE byl významným prostředkem při výzkumu elektronové struktury, magnetických a optických vlastností pevných látek v oddělení magnetismu a supravodivosti. Výsledky jsou shrnuty ve 41 člancích publikovaných v impaktovaných mezinárodních časopisech a byly předneseny na řadě konferencí, workshopů a seminářů.

Větší část prací je aplikací teorie funkcionalu spinové hustoty implementovanému v programu WIEN2k. Velká pozornost byla věnována kobaltitům s perovskitovou krystalovou strukturou [1, 5, 9, 13, 14, 16, 18, 19, 26, 32, 41]. Do této tematiky patří i práce [6, 15].

Další obsáhlou skupinu tvoří práce vytvořené ve spolupráci se skupinou prof. Holsy (Universita Turku, Finsko), které objasňují luminiscenci oxidů obsahujících vzácné zeminy [11, 12, 17, 23, 24, 31, 35-39].

Vynikající úroveň mají práce zabývající se systémy se silně korelovanými elektrony [2-4, 7-10, 20-21, 25, 27, 29, 40].

Výsledky na světové úrovni přinesla rovněž spolupráce se skupinou jaderné magnetické rezonance na Matematicko fyzikální fakultě UK [22, 30, 33-34].

### *Seznam publikací:*

1. Z. Jirak, J. Hejtmanek, K. Knizek, P. Novak, E. Santava, H. Fujishiro, Magnetism of perovskite cobaltites with Kramers rare-earth ions, *J. Appl. Phys.* 115 (2014) 17E118
2. R. Arita, J. Kuneš, P. Augustinský, A. V. Kozhevnikov, A. G. Eguluz, and M. Imada, Mott versus Slater-Type Metal-Insulator Transition in Sr<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub> and Ba<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub>. *JPS Conf. Proc.* 3 (2014) 013023
3. X. Marti, I. Fina, C. Frontera, Jian Liu, P. Wadley, Q. He, R. J. Paull, J. D. Clarkson, J. Kudrnovský, I. Turek, J. Kuneš, D. Yi, J-H. Chu, C. T. Nelson, L. You, E. Arenholz, S. Salahuddin, J. Fontcuberta, T. Jungwirth, and R. Ramesh, Room-temperature antiferromagnetic memory resistor. *Nature Materials* 13 (2014) 367
4. J. Kunes and P. Augustinsky, Excitonic Instability at the Spin-State Transition in the Two-Band Hubbard Model. *Phys. Rev. B* 89 (2014) 115134
5. K. Knížek, Z. Jiráček, P. Novák, C. de la Cruz, Non-collinear magnetic structures of TbCoO<sub>3</sub> and DyCoO<sub>3</sub>. *Solid State Sci.* 28 (2014) 26 - 30.
6. P. Novák, V. Nekvasil, K. Knížek, Crystal field and magnetism with Wannier functions: Orthorhombic rare-earth manganites. *J. Magn. Mater.* 358-359 (2014) 22
7. M. Brasse, L. Chioncel, J. Kunes, A. Bauer, A. Regnat, C. G. F. Blum, S. Wurmehl, C. Pfleiderer, M. A. Wilde, and D. Grundler, De Haas-van Alphen effect and Fermi surface properties of single-crystal CrB<sub>2</sub>. *Phys. Rev. B* 88 (2013) 155138
8. Qing Li, Guixin Cao, Satoshi Okamoto, Jieyu Yi, Wenzhi Lin, Brian C. Sales, Jiaqiang Yan, Ryotaro Arita, Jan Kunes, Anton V. Kozhevnikov, Adolfo G. Eguluz, Masatoshi Imada,

- Zheng Gai, Minghu Pan, and David G. Mandrus, Atomically resolved spectroscopic study of Sr<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub>: Experiment and theory. *Sci. Rep.* 3 (2013) 3073
9. P. Augustinsky, V. Krapek, and J. Kunes, Doping Induced Spin State Transition in LaCoO<sub>3</sub>: Dynamical Mean-Field Study. *Phys. Rev. Lett.* 110 (2013) 26720
  10. Pavel Augustinsky and Jan Kunes, Improved Green's Function Measurement for Hybridization Expansion Quantum Monte Carlo. *Comput. Phys. Commun.* 184 (2013) 2119
  11. Hermi F. Brito, Maria C. F. C. Felinto, Jorma Hölsä, Taneli Laamanen, Mika Lastusaari, Marja Malkamäki, Pavel Novák, Lucas C. Rodrigues, and Roberval Stefani. DFT and synchrotron radiation study of Eu<sup>2+</sup> doped BaAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>. *Opt. Mater. Express* 2 (2013) 420
  12. Hermi F. Brito, Maria C.F.C. Felinto, Jorma Hölsä, Taneli Laamanen, Mika Lastusaari, Pavel Novák, Luiz A.O. Nunes, Lucas C.V. Rodrigues. Defects and charge compensation in CdSiO<sub>3</sub>: A DFT and synchrotron study. *Physics Procedia* 44 (2013) 1
  13. Z. Jiráček, J. Hejtmánek, K. Knížek, M. Maryško, P. Novák, E. Šantavá, T. Naito, H. Fujishiro. Ground-state properties of the mixed-valence cobaltites Nd<sub>0.70</sub>Sr<sub>0.3</sub>CoO<sub>3</sub>, Nd<sub>0.7</sub>Ca<sub>0.3</sub>CoO<sub>3</sub> and Pr<sub>0.7</sub>Ca<sub>0.3</sub>CoO<sub>3</sub>. *J. Phys.-Condens. Mat.* 25 (2013) 216006.
  14. K. Knížek, J. Hejtmánek, M. Maryško, P. Novák, E. Šantavá, Z. Jiráček, T. Naito, H. Fujishiro, C. de la Cruz. Spin-state crossover and low-temperature magnetic state in yttrium-doped Pr<sub>0.7</sub>Ca<sub>0.3</sub>CoO<sub>3</sub>. *Phys. Rev. B* 88 (2013) 224412
  15. P. Novák, K. Knížek, J. Kuneš, Crystal field parameters with Wannier functions: Application to rare-earth aluminates. *Phys. Rev. B* 87 (2013) 205139
  16. P. Novák, K. Knížek, M. Maryško, Z. Jiráček and J. Kuneš. Crystal field and magnetism of Pr<sup>3+</sup> and Nd<sup>3+</sup> ions in orthorhombic perovskites. *J. Phys.-Condens. Mat.* 25 (2013) 44600.
  17. J. Hölsä, T. Laamanen, M. Lastusaari, P. Novák. Isolated Defects in Sr<sub>2</sub>MgSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub>: A DFT Study. *Physics Procedia* 29 (2012) 76
  18. V. Křápek, P. Novák, J. Kuneš, D. Novoselov, Dm. M. Vortin, V. I. Anisimov. Spin state transition and covalent bonding in LaCoO<sub>3</sub>. *Phys. Rev. B* 86 (2012) 195104
  19. J. Kunes, V. Krapek, N. Parragh, G. Sangiovanni, A. Toschi, and A. V. Kozhevnikov, Spin state of negative charge-transfer material SrCoO<sub>3</sub>. *Phys. Rev. Lett.* 109 (2012) 117206
  20. K. Byczuk, J. Kunes, W. Hofstetter, and D. Vollhardt, Quantification of correlations in quantum many-particle systems. *Phys. Rev. Lett.* 108 (2012) 087004
  21. R. Arita, J. Kunes, A. V. Kozhevnikov, A. G. Eguiluz, M. Imada, Ab initio Studies on the Interplay between Spin-Orbit Interaction and Coulomb Correlation in Sr<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub> and Ba<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub>. *Phys. Rev. Lett.* 108 (2012) 086403
  22. R. Řezníček, V. Chlan, H. Štěpánková, P. Novák and M. Maryško. Magnetocrystalline anisotropy of magnetite. *J. Phys. C* 24 (2012) 055501

23. H. Brito, J. Hassinen, J. Hölsä, H. Jungner, T. Laamanen, M. Lastusaari, M. Malkamäki, J. Niittykoski, P. Novák, L. Rodrigues. Optical Energy Storage Properties of Sr<sub>2</sub>MgSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub>:Eu<sup>2+</sup>,R<sup>3+</sup> Persistent Luminescence Materials. *J. Therm. Anal. Calorim.* 105 (2011) 657
24. J. Holsa, T. Laamanen, M. Lastusaari, P. Novák. Defect aggregates in the Sr<sub>2</sub>MgSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub> persistent luminescence material. *J. Rare Earths* 29 (2011) 1130
25. Jan Kunes and Vlastimil Krapek, Disproportionation and Metallization at Low-Spin to High-Spin Transition in Multiorbital Mott Systems. *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011) 256401
26. M. Maryško, Z. Jiráček, K. Knížek, P. Novák, J. Hejtmánek, T. Naito, H. Sasaki, and H. Fujishiro. Thermally and field driven spin-state transitions in (Pr<sub>1-y</sub>Y<sub>y</sub>)Ca<sub>0.3</sub>CoO<sub>3</sub>. *J. Appl. Phys.* 109 (2011) 07E127
27. S. Tanaka, H. Moriya, H. Tsuchiura, M. Divš, P. Novák. First principles study on the local magnetic anisotropy near surfaces of Dy<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B and Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B magnets. *J. Appl. Phys.* 109 (2011) 07A702
28. V. Chlan, P. Novák. Ab-initio calculation of electronic structure of partially inverted manganese ferrite. *J. Magn. Magn. Mater.* 322 (2010) 1056
29. Jan Kunes, Efficient treatment of two-particle vertices in dynamical mean-field theory. *Phys. Rev. B* 83 (2011) 085102
30. V. Chlan, P. Novák, H. Štěpánková, R. Řezníček, K. Kouřil, A. Kozłowski. Electronic structure and hyperfine fields in non-stoichiometric magnetite above the Verwey transition. *J. Magn. Magn. Mater.* 322 (2010) 1079
31. J. Hassinen, J. Holsa, T. Laamanen, M. Lastusaari, P. Novák. Electronic structure of defects in Sr<sub>2</sub>MgSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub>:Eu<sup>2+</sup>,La<sup>3+</sup> persistent luminescence material. *J. Non-Cryst. Solids* 356 (2010) 2015
32. K. Knížek, J. Hejtmánek, P. Novák, Z. Jiráček. Charge transfer, valence, and the metal-insulator transition in Pr<sub>0.5</sub>Ca<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub>. *Phys. Rev. B* 81 (2010) 155113
33. P. Novák, V. Chlan. Contact hyperfine field at Fe nuclei from density functional calculations. *Phys. Rev. B* 81 (2010) 174412
34. P. Novák, V. Chlan, K. Knížek. Giant Magnetoelectricity in Aluminium Substituted Y-Hexaferrites. *Acta Phys. Polon. A* 118 (2010) 723
35. T. Aitasalo, J. Hassinen, J. Hölsä, T. Laamanen, M. Lastusaari, M. Malkamäki, J. Niittykoski, P. Novák. Synchrotron radiation investigations of the Sr<sub>2</sub>MgSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub>:Eu<sup>2+</sup>,R<sup>3+</sup> persistent luminescence materials. *J. Rare Earths* 27 (2009) 529
36. J. Holsa, M. Kirm, T. Laamanen, M. Lastusaari, J. Niittykoski, P. Novák. Electronic structure of the Sr<sub>2</sub>MgSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub>:Eu<sup>2+</sup> persistent luminescence material. *J. Lumin.* 129 (2009) 1560

37. J. Holsa, T. Laamanen, M. Lastusaari, M. Malkamaki, J. Niittykoski, P. Novák. Synchrotron radiation spectroscopy of rare earth doped persistent luminescence materials. *Radiat. Phys. Chem.* 78 (2009) S11
38. J. Holsa, T. Laamanen, M. Lastusaari, M. Malkamaki, P. Novák. Persistent luminescence; Quo vadis? *J. Lumin.* 129 (2009) 1606
39. J. Hölsä, T. Laamanen, M. Lastusaari, J. Niittykoski, P. Novák. Electronic structure of the SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>:Eu<sup>2+</sup> persistent luminescence material. *J. Rare Earths* 27 (2009) 550
40. K. Klier, P. Novák, A.C. Miller, J.A. Spirko, M.K. Hatalis. Electronic structure of CeF<sub>3</sub> and TbF<sub>3</sub> by valence-band XPS and theory. *J. Phys. Chem. Solids* 70 (2009) 1302
41. K. Knížek, Z. Jiráček, J. Hejtmánek, P. Novák, Wei Ku. GGA+U calculations of correlated spin excitations in LaCoO<sub>3</sub>. *Phys. Rev. B* 79 (2009) 014430

### 9.3 Oddělení tenkých vrstev a nanostruktur

Martin Ondráček

Klastr Dorje naše skupina využívala zejména k výpočtům elektronové a atomární struktury povrchů a atomárních klastrů (v rámci teorie DFT). Výpočty byly zaměřeny na řešení problémů současně studovaných pomocí experimentálních metod mikroskopie atomárních sil (AFM) a rastrovací tunelové mikroskopie (STM). Jednalo se o simulování interakce sondy mikroskopu se studovaným povrchem, určení stability studovaných povrchů apod. Studovanými systémy byly zejména grafén a povrchy křemíku s adsorbovanými molekulami a nanostrukturami.

*Seznam publikací:*

1. P. Merino, M. Švec, J.I. Martinez, P. Jelínek, P. Lacovig, M. Dalmiglio, S. Lizzit, P. Soukiassian, J. Cernicharo, J.A. Martin-Gago  
Graphene etching on SiC grains as a path to interstellar polycyclic aromatic hydrocarbons formation  
Nat. Commun. 5 (2014) 3054(1) - 3054(9).
2. P. Mutombo, O. Romanyuk  
Ab initio density functional theory study of non-polar (10-10), (11-20) and semipolar {20-21} GaN surfaces  
J. Appl. Phys. 115 (2014) 203508-1 - 203508-5.
3. J. Onoda, M. Ondráček, A. Yurtsever, P. Jelínek, Y. Sugimoto  
Initial and secondary oxidation products on the Si(111)-(7x7) surface identified by atomic force microscopy and first principles calculations  
Appl. Phys. Lett. 104 (2014) 133107(1) - 133107(4).
4. E. J. Spadafora, J. Berger, P. Mutombo, M. Telychko, M. Švec, Z. Majzik, A. B. McLean, P. Jelínek  
Identification of Surface Defects and Subsurface Dopants in a Delta-Doped System Using Simultaneous nc-AFM/STM and DFT  
J. Phys. Chem. C 118 (2014) 15744 - 15753.
5. M. Švec, P. Hapala, M. Ondráček, P. Merino, M. Blanco-Rey, P. Mutombo, M. Vondráček, Y. Polyak, V. Cháb, J. A. Martín Gago, P. Jelínek  
Silicene versus two-dimensional ordered silicide: Atomic and electronic structure of Si-( $\sqrt{19} \times \sqrt{19}$ )R23.4°/Pt(111)  
Phys. Rev. B 89 (2014) 201412(1) - 201412(5).
6. M. Telychko, P. Mutombo, M. Ondráček, P. Hapala, F.C. Bocquet, J. Kolorenč, M. Vondráček, P. Jelínek, M. Švec  
Achieving High-Quality Single-Atom Nitrogen Doping of Graphene/SiC(0001) by Ion Implantation and Subsequent Thermal Stabilization  
ACS Nano 7 (2014) 7318 - 7324.
7. E. Abad, J. P Lewis, V. Zobač, P. Hapala, P. Jelínek, J. Ortega  
Calculation of non-adiabatic coupling vectors in a local-orbital basis set



- J. Chem. Phys. 138 (2013) 154106(1) - 154106(8).
8. J. Berger, M. Švec, M. Müller, M. Ledinský, A. Fejfar, P. Jelínek, Z. Majzik  
Characterization of the mechanical properties of qPlus sensors  
Beilstein J. Nanotechnol. 4 (2013) 1 - 9.
  9. P. Hapala, K. Kůsová, I. Pelant, P. Jelínek  
Theoretical analysis of electronic band structure of 2- to 3-nm Si nanocrystals  
Phys. Rev. B 87 (2013) 195420(1) - 195420(13).
  10. Z. Majzik, B. Drevniok, W. Kamiński, M. Ondráček, A. B. McLean, P. Jelínek  
Room Temperature Discrimination of Adsorbed Molecules and Attachment Sites on the  
Si(111)- $7 \times 7$  Surface Using a qPlus Sensor  
ACS Nano 7 (2013) 2686 - 2692.
  11. P. Sobotík, M. Setvín, P. Zimmermann, P. Kocán, I. Ošťádal, P. Mutombo, M. Ondráček,  
P. Jelínek  
Emergence of state at Fermi level due to the formation of In-Sn heterodimers on Si(100)-  
 $2 \times 1$   
Phys. Rev. B 88 (2013) 205406(1) - 205406(7).
  12. Y. Sugimoto, M. Ondráček, M. Abe, P. Pou, S. Morita, R. Pérez, F. Flores, P. Jelínek  
Quantum Degeneracy in Atomic Point Contacts Revealed by Chemical Force and  
Conductance  
Phys. Rev. Lett. 111 (2013) 106803(1) - 106803(5).
  13. Y. Sugimoto, A. Yurtsever, M. Abe, S. Morita, M. Ondráček, P. Pou, R. Pérez, P. Jelínek  
Role of Tip Chemical Reactivity on Atom Manipulation Process in Dynamic Force  
Microscopy  
ACS Nano 7 (2013) 7370 - 7376.
  14. A. J. Weymouth, D. Meuer, P. Mutombo, T. Wutscher, M. Ondráček, P. Jelínek, F. J. Giessibl  
Atomic Structure Affects the Directional Dependence of Friction  
Phys. Rev. Lett. 111 (2013) 126103(1) - 126103(4).
  15. A. Yurtsever, Y. Sugimoto, H. Tanaka, M. Abe, S. Morita, M. Ondráček, P. Pou, R. Pérez,  
P. Jelínek  
Force mapping on a partially H-covered Si(111)- $(7 \times 7)$  surface: Influence of tip and surface  
reactivity  
Phys. Rev. B 87 (2013) 155403(1) - 155403(10).
  16. P. Mutombo, N. Balázs, Z. Majzik, A. Berkó, V. Cháb  
Theoretical study of the adsorption of rhodium on a TiO<sub>2</sub> (1 1 0)- $1 \times 1$  surface  
Appl. Surf. Sci. 258 (2012) 4478 - 4482.
  17. M. Ondráček, C. González, P. Jelínek  
Reversal of atomic contrast in scanning probe microscopy on (111) metal surfaces  
J. Phys.-Condens. Mat. 24 (2012) 084003(1) - 084003(7).
  18. M. Ondráček, P. Mutombo, Z. Chvoj, A. G. Mark, Z. Chromcová, A.B. McLean, P. Jelínek

- Stability, interaction and influence of domain boundaries in Ge/Si(111)- $5 \times 5$   
J. Phys.-Condens. Mat. 24 (2012) 445003 - 445016.
19. M. Setvín, P. Mutombo, M. Ondráček, Z. Majzik, M. Švec, V. Cháb, I. Ošťádal, P. Sobotík, P. Jelínek  
Chemical Identification of Single Atoms in Heterogeneous III-IV Chains on Si(100) Surface by Means of nc-AFM and DFT Calculations  
ACS Nano 6 (2012) 6969 - 6976.
20. Pavel Shukryna, Pingo Mutombo, Martin Švec, Michael Hietschold, Vladimír Cháb  
Tantalum induced butterfly-like clusters on Si (111)- $7 \times 7$  surface: STM/STS study at low coverage  
Surf. Sci. 606 (2012) 356 - 361.
21. M. Švec, P. Merino, Y. J. Dappe, C. González, E. Abad, P. Jelínek, J. A. Martín-Gago  
van der Waals interactions mediating the cohesion of fullerenes on graphene  
Phys. Rev. B 86 (2012) 121407(R) - 121412(R).
22. A. Yurtsever, D. Fernandez-Torre, C. Gonzalez, P. Jelinek, P. Pou, Y. Sugimoto, M. Abe, R. Perez, S. Morita  
Understanding image contrast formation in TiO<sub>2</sub> with force spectroscopy  
Phys. Rev. B 85 (2012) 125416(1) - 125416(9).
23. A. Campbellová, M. Ondráček, P. Pou, R. Pérez, P. Klapetek, P. Jelínek  
'Sub-atomic' resolution of non-contact atomic force microscope images induced by a heterogeneous tip structure: a density functional theory study  
Nanotechnology 22 (2011) 295710(1) - 295710(7).
24. Z. Majzik, W. Kamiński, A.J. Weymouth, M. Vondráček, V. Zobač, M. Švec, A. Berkó, A.B. McLean, K.C. Prince, P. Jelínek, and V. Cháb  
An Investigation of Ethylene Attachment to Si(111)- $7 \times 7$  in the Restatom-Adatom Bridging Geometry: Electronic and Vibrational Properties  
J. Phys. Chem. C 115 (2011) 21791 - 21799.
25. M. Ondráček, P. Pou, V. Rozsival, C. González, P. Jelínek, R. Pérez  
Forces and Currents in Carbon Nanostructures: Are We Imaging Atoms?  
Phys. Rev. Lett. 106 (2011) 176101(1) - 176101(4).
26. M. Ternes, C. González, Ch. P. Lutz, P. Hapala, F.J. Giessel, P. Jelínek, A.J. Heinrich  
Interplay of Conductance, Force, and Structural Change in Metallic Point Contacts.  
Phys. Rev. Lett. 106 (2011) 016802(1) - 016802(4).
27. L. Wang, H. Wang, P. Hapala, L. Zhu, L. Ren, X. Meng, J. P. Lewis, F.-S. Xiao  
Superior catalytic properties in aerobic oxidation of olefins over Au nanoparticles on pyrrolidone-modified SBA-15  
J. Catal. 281 (2011) 30 - 39.
28. W. Kaminski, W. Rozsival, P. Jelínek  
Theoretical study of electronic and transport properties of PPy-Pt(111) and PPy-C(111):H interfaces

- J. Phys.-Condens. Mat. 22 (2010) 045003(1) - 045003(10).
29. S. Lindsay, J. He, O. Sankey, P. Hapala, P. Jelínek, P. Zhang, S.Chang, S. Huang  
Recognition tunneling  
Nanotechnology 21 (2010) 262001(1) - 262001(12).
30. M. Ondráček, O. Bengone, J. Kudrnovský, V. Drchal, F. Máca, I. Turek  
Magnetic phase stability of monolayers: Fe on  $\text{Ta}_{1-x}\text{W}_x(001)$  random alloy as a case study  
Phys. Rev. B 81 (2010) 064410(1) - 064410(8).
31. C.Sánchez-Sánchez, C.González, P.Jelínek, J.Méndez, P.L.deAndres, J.A. Martín-Gago,  
M.F. López  
Understanding atomic-resolved STM images on  $\text{TiO}_2(110)-(1 \times 1)$  surface by DFT  
calculations.  
Nanotechnology 21 (2010) 405702(1) - 405702(10).
32. R. Bechstein, C. González, J. Schütte, P. Jelínek, R. Pérez, A. Kühnle  
'All-inclusive' imaging of the rutile  $\text{TiO}_2(110)$  surface using NC-AFM.  
Nanotechnology 20 (2009) 505703(1) - 505703(7).
33. M. Švec, V. Dudr, M. Vondráček, P. Jelínek, P. Mutombo, V. Cháb, F. Šutara, V. Matolín,  
K. Prince  
Intra-atomic charge re-organization at the Pb Si interface: Bonding mechanism at low cover.  
Surf. Sci. 603 (2009) 2861 – 2869.

## 9.4 Oddělení strukturní analýzy

Ondřej Šipr

*Řešená problematika:*

1. Studium magnetokrystalické anizotropie monovrstev a adsorbovaných atomů na površích ušlechtilých kovů.
2. Magnetické vlastnosti polovodiče ZnO s příměsemi mědi.
3. Mnohačásticové efekty v rentgenových absorpčních spektrech 3d tranzitivních kovů.
4. Magnetismus shluků Rh atomů.

*Publikace:*

1. Magnetocrystalline anisotropy energy for adatoms and monolayers on non-magnetic substrates: where does it come from?  
O. Šipr, S. Bornemann, H. Ebert, and J. Minár  
J. Phys.: Condens. Matter, Vol. 26, No. 19, 196002 (2014) (12 pages)
2. Co monolayers and adatoms on Pd(100), Pd(111), and Pd(110): Anisotropy of magnetic properties  
O. Šipr, S. Bornemann, H. Ebert, S. Mankovsky, J. Vackář, and J. Minár  
Physical Review B, Vol. 88, No. 5, 064411 (2013) (14 pages)
3. Local structure and magnetism of Cu-doped ZnO via Cu K-edge XAS and XMCD: theory and experiment  
O. Šipr, J. Vackář, P. S. Vachhani, R. K. Ramamoorthy, G. Dalba, A. K. Bhatnagar and F. Rocca  
J. Phys.: Conf. Ser., Vol. 430, 012128 (2013) (6 pages)
4. Cu doped ZnO pellets: study of structure and Cu specific magnetic properties  
P. S. Vachhani, G. Dalba, R. K. Ramamoorthy, F. Rocca, O. Šipr and A. K. Bhatnagar  
J. Phys.: Condens. Matter, Vol. 24, No. 50, 506001 (2012) (7 pages)
5. Many-body effects in x-ray absorption and magnetic circular dichroism spectra within the LSDA+DMFT framework  
O. Šipr, J. Minár, A. Scherz, H. Wende and H. Ebert  
Physical Review B, Vol. 84, No. 11, 115102 (2011) (9 pages)
6. Zn K edge and O K edge x-ray absorption spectra of ZnO surfaces: implications for nanorods  
O. Šipr and F. Rocca  
J. Phys.: Condens. Matter, Vol. 23, No. 31, 315501 (2011) (6 pages)
7. Intrinsic orbital and spin magnetism in Rh clusters on inert xenon matrices  
V. Sessi, K. Kuhnke, J. Zhang, J. Honolka, K. Kern, C. Tieg, O. Šipr, J. Minár, and H. Ebert

Physical Review B, Vol. 82, No. 18, 184413 (2010) (5 pages)

8. Magnetic anisotropy of Fe and Co adatoms and monolayers: Need for a proper treatment of the substrate

O. Šipr, S. Bornemann, J. Minár, and H. Ebert

Physical Review B, Vol. 82, No. 17, 174414 (2010) (8 pages)

## 9.5 Oddělení optických materiálů

Oleksandr Romanyuk

### Projekty a problematika:

1. Společný projekt AV ČR - DFG (Spolková republika Německo)  
*Interface and surface structure study of heteroepitaxial AlSb(001) and InSb(001) on Si(001) grown by molecular-beam epitaxy (MBE).*  
O. Romanyuk (2009-2010)
2. Projekt č. P204/10/P028 Grantové agentury AV ČR  
*Ztráty energie elektronů u povrchů pevných látek*  
O. Romanyuk (2010-2011)
3. M100101201, Program interní podpory projektů mezinárodní spolupráce AV ČR  
*Použitelnost nepolárních a semipolárních povrchů GaN pro biofunkcionalizace*  
O. Romanyuk (2012-2015)

### Publikace:

1. O. Romanyuk, W. Braun, F. Grosse  
*Ab Initio Study of GaSb(001)-c(2 x 10) and (2 x 10) Reconstructions*  
e-Journal Surf. Sci. Nanotech. 7 (2009) 429.
2. O. Romanyuk, F. Grosse, W. Braun  
*Stoichiometry and Bravais lattice diversity: An ab initio study of the GaSb(001) surface*  
Phys. Rev. B 79 (2009) 235330.
3. O. Romanyuk, F. Grosse, W. Braun  
*Ab initio study of one-dimensional disorder on III-V semiconductor surfaces*  
Phys. Stat. Sol. (c) 7 (2010) 330.
4. O. Romanyuk, F. Grosse, A. Proessdorf, W. Braun, H. Riechert  
*Stabilization of semiconductor surfaces by configurational entropy.*  
Phys. Rev. B 82 (2010) 125315.
5. I. Bartoš, O. Romanyuk  
*Layer-resolved photoelectron diffraction from Si(001) and GaAs(001)*  
J. Electr. Spec. Rel. Phen. 185 (2012) 512.
6. O. Romanyuk, P. Jiříček, T. Paskova  
*Quantitative low-energy electron diffraction analysis of the GaN(000-1) (1x1) reconstruction*  
Surf. Sci. 606 (2012) 740.
7. O. Romanyuk, P. Jiříček, T. Paskova  
*Atomic and electronic structure of N-terminated GaN(000-1) (1x1) surface*

- Journal of Physics: Conference Series 389 (2012) 012013.
8. O. Romanyuk, T. Hannappel, F. Grosse  
*Atomic and electronic structure of GaP/Si(111), GaP/Si(110), and GaP/Si(113) interfaces and superlattices studied by density functional theory.*  
Phys. Rev. B 88 (2013) 115312.
  9. O. Romanyuk, P. Jiríček, P. Mutombo, T. Paskova, I. Bartoš  
*Surface analysis of free-standing GaN substrates with polar, nonpolar, and semipolar crystal orientations*  
Proceedings of SPIE 8625 (2013) 862521.
  10. O. Romanyuk, P. Jiríček, T. Paskova, I. Bieloshapka, and I. Bartoš  
*GaN polarity determination by photoelectron diffraction*  
Appl. Phys. Lett. 103 (2013) 091601.
  11. I. Bartoš, O. Romanyuk  
*Polarity of wurtzite crystals by photoelectron diffraction*  
Appl. Surf. Sci. (2014), in print, <http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2014.01.038>
  12. P. Mutombo, O. Romanyuk  
*Ab initio density functional theory study of non-polar (10-10), (11-20) and semipolar {20-21} GaN surfaces*  
J. Appl. Phys. 115 (2014) 203508.

## 9.6 MFF UK – spolupráce s Oddělením magnetik a supravodičů

Vojtěch Chlan

Využívání klastru Dorje mi bylo umožněno dr. Pavlem Novákem pro spolupráci na společných projektech v letech 2008-2011 (projekt IAA100100803 - Magnetoelektrické ferity, a projekt GA202/08/0541 - Nečistoty a defekty v magnetitu ) a 2013-dosud (projekt GA13-11473S - Magnetické, feroelektrické a relaxační vlastnosti a jejich souvislost v relaxorových multiferoikách perovskitového typu).

Mnou řešená problematika se v drtivé většině týkala magnetických či multiferoických oxidů železa, ve smyslu počítání jejich elektronové struktury pomocí WIEN2k a výpočtů hyperjemných polí a dalších parametrů relevantních pro srovnání s experimenty spektroskopie jaderné magnetické rezonance (NMR). Velmi okrajově jsem počítal také struktury jiných látek, např. intermetalika Fe<sub>3</sub>Al, HoCo<sub>2</sub> apod.

Výpočty prováděné na klastru Dorje byly součástí několika publikací:

1. V. Chlan, K. Kouřil, H. Štěpánková, R. Řezníček, J. Englisch, *Acta Physica Polonica A* 126, 42 (2014).
2. P. Křišťan, V. Chlan, H. Štěpánková, R. Řezníček, P. Görnert, and P. Payer, *Acta Physica Polonica A* 126, 138 (2014).
3. R. Řezníček, V. Chlan, H. Štěpánková, P. Novák, and M. Maryško, *Journal of Physics Condensed Matter* 24 (2012).
4. V. Chlan, H. Štěpánková, R. Řezníček, and P. Novák, *Solid state nuclear magnetic resonance* 40, 27 (2011).
5. V. Procházka, H. Štěpánková, V. Chlan, J. Tuček, J. Čuda, K. Kouřil, J. Filip, and R. Zbořil, *Journal of Physics Condensed Matter* 23 (2011).
6. K. Kouřil, V. Chlan, H. Štěpánková, A. Telfah, P. Novák, K. Knížek, Y. Hiraoka, and T. Kimura, *Acta Physica Polonica A* 118, 732 (2010).
7. P. Novák, V. Chlan, and K. Knížek, *Acta Physica Polonica A* 118, 723 (2010).
8. P. Novák and V. Chlan, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 81, 174412 (2010).
9. K. Kouřil, V. Chlan, H. Štěpánková, P. Novák, K. Knížek, J. Hybler, T. Kimura, Y. Hiraoka, and J. Buršík, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 322, 1243 (2010).
10. V. Chlan, P. Novák, H. Štěpánková, R. Řezníček, K. Kouřil, and A. Kozłowski, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 322, 1079 (2010).
11. V. Chlan and P. Novák, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 322, 1056 (2010).



Výpočty z Dorje byly také důležitou částí mé doktorské disertační práce <sup>[1]</sup>, obhájené na MFF v roce 2010.

---

[1] <https://is.cuni.cz/webapps/zzp/detail/42085/>

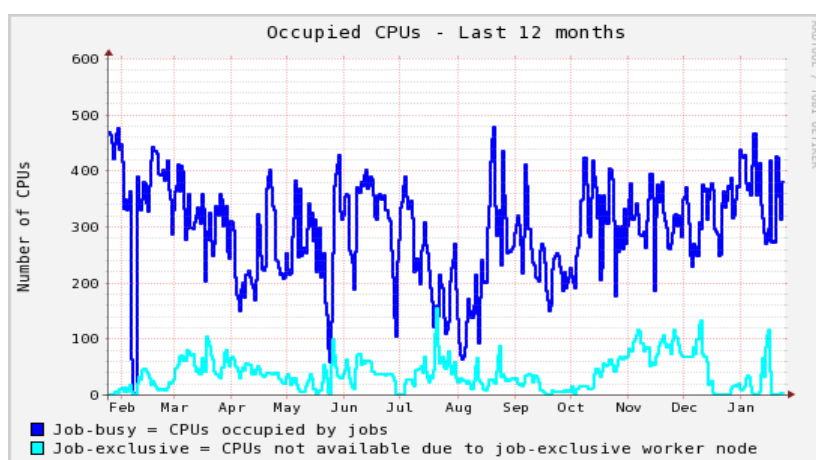
## Příloha A

### Klastr Dorje – obsazení s rozlišením alokace CPU typem úloh „node-exclusive“ (2010 - 2014)

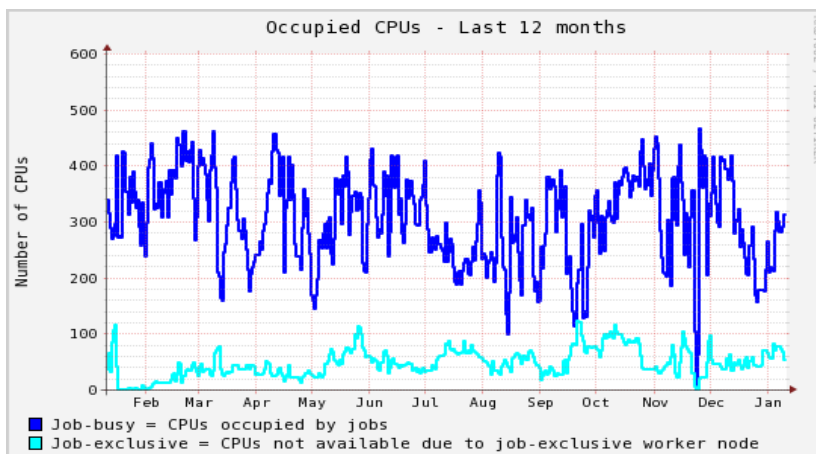
**Tmavě modrá** - alokované a využitě CPU (odpovídá hodnotám ze statistiky)

**Světle modrá** - nevyužitě, ale alokované CPU v důsledku požadavku „node-exclusive“

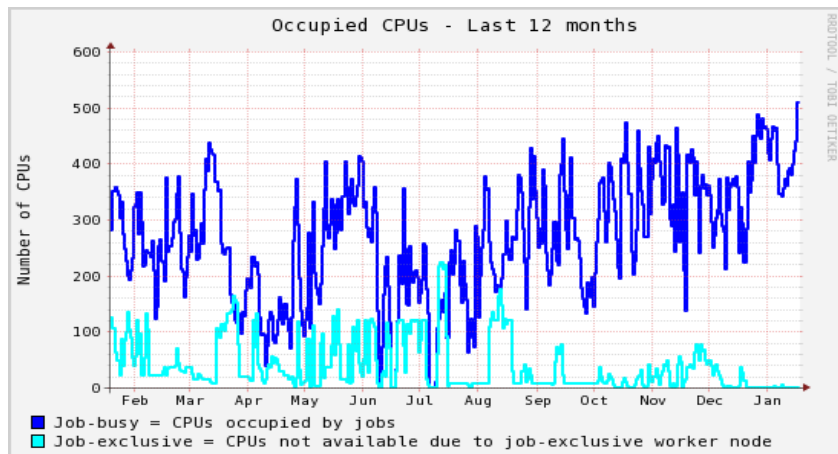
2010



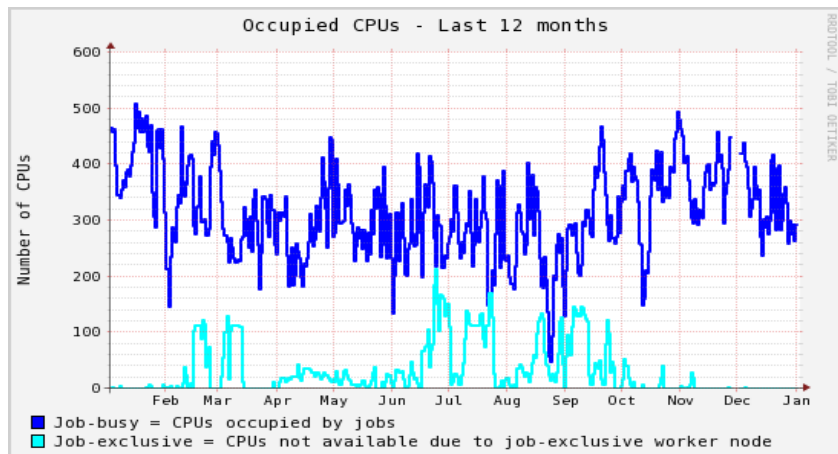
2011



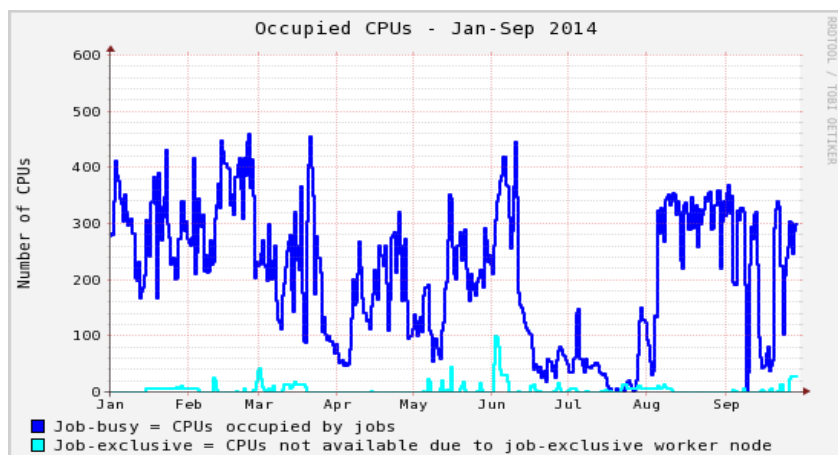
2012



2013



2014

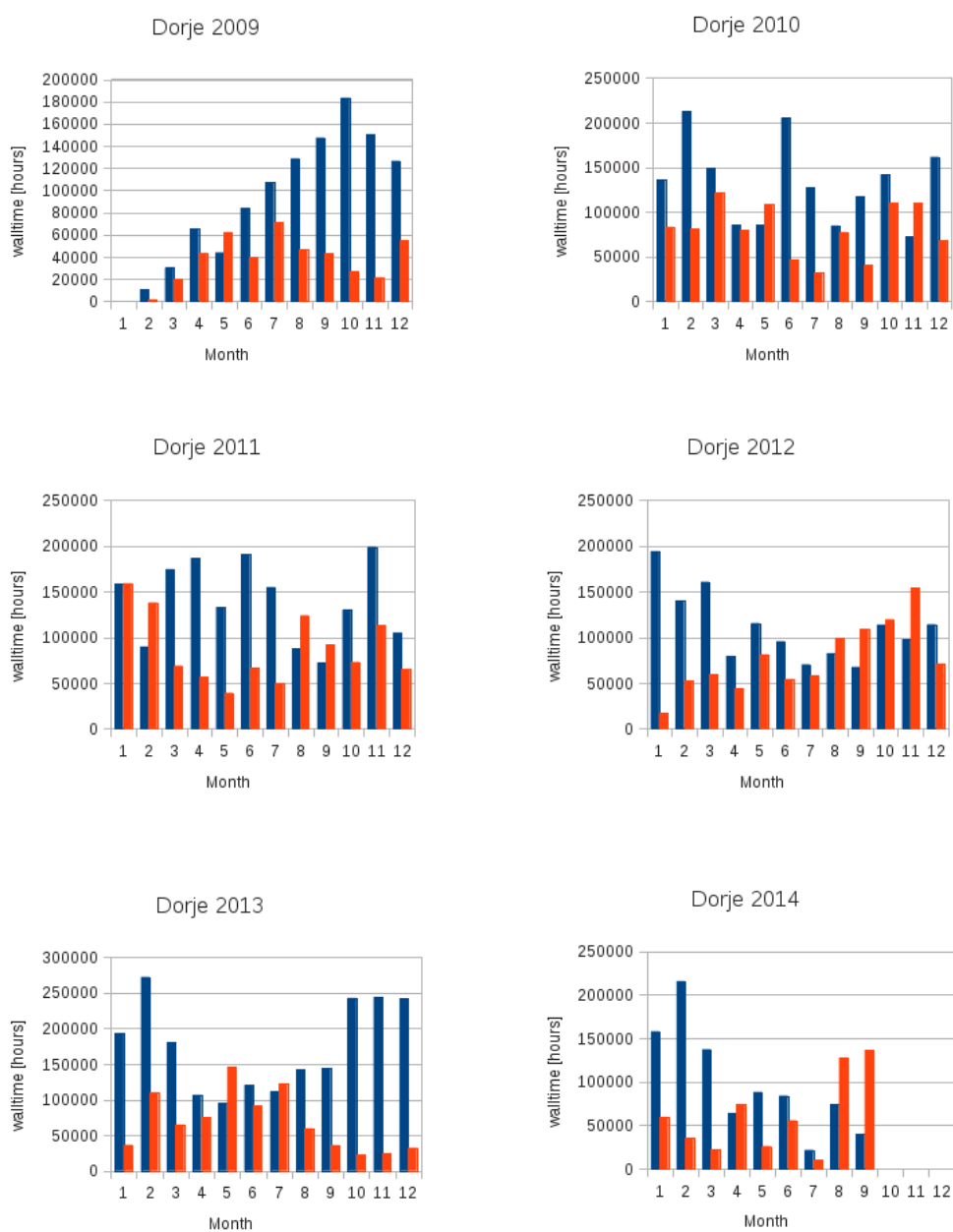


## Příloha B

### ***Klastr Dorje – srovnání propočítaného času podle úloh, které běžely na jednom nebo na více výpočetních uzlech (2009 - 2014)***

**Červená** – propočítaný čas úlohami běžícími na více výpočetních uzlech

**Modrá** – propočítaný čas úlohami běžícími na jednom výpočetním uzlu

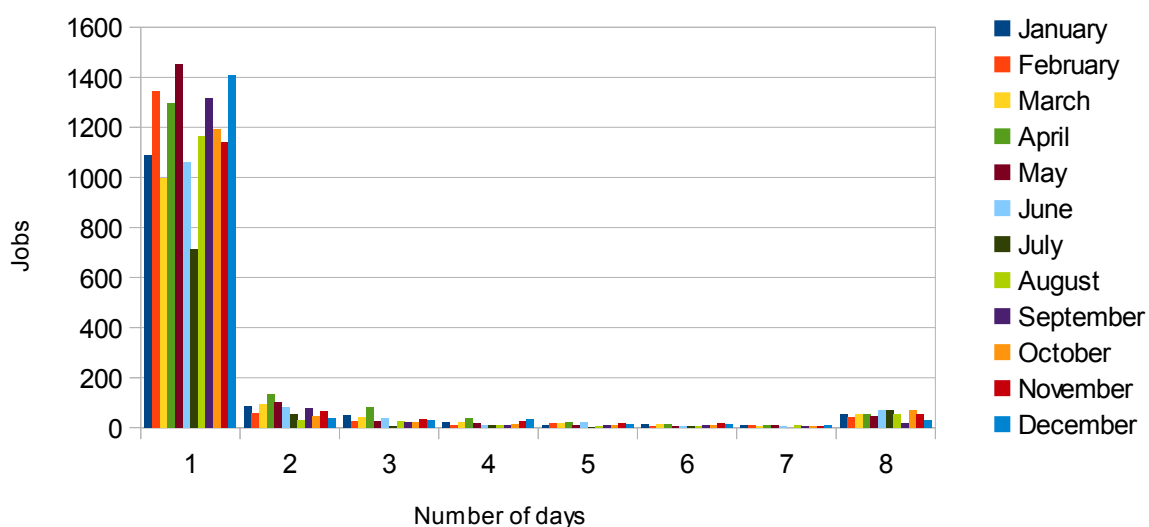


## Příloha C

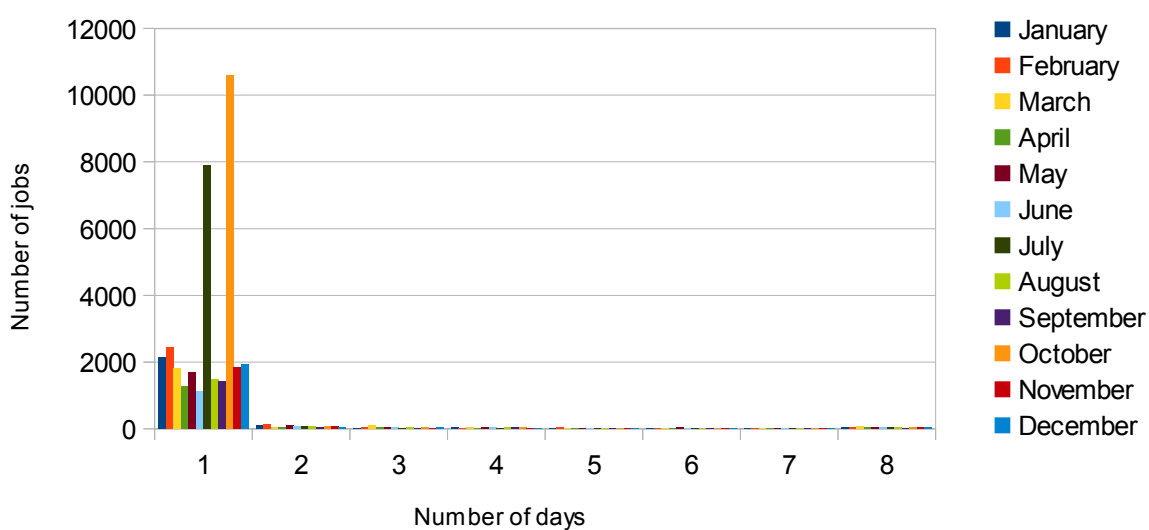
### Klastr Dorje – přehled úloh podle doby běhu (2011 - 2014)

jednotka = 1 den

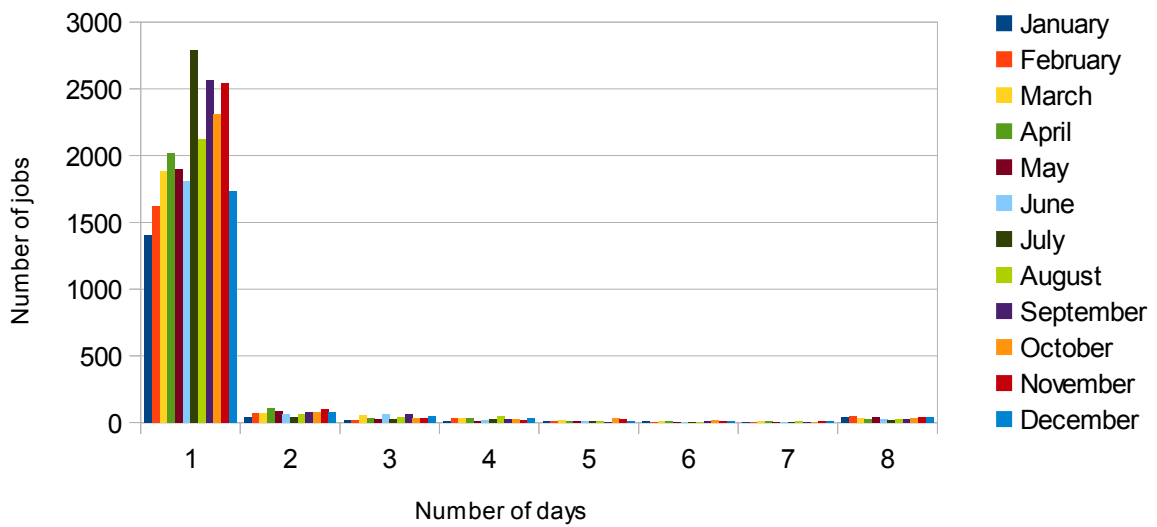
Dorje 2011 - walltime



Dorje 2012 - walltime



### Dorje 2013 - walltime



### Dorje 2014 - walltime

