

УДК: 621.385.833.2:537.622.4

## Сверхмасштабируемое моделирование магнитных состояний и реконструкция типов упорядочения массивов наночастиц

В. Ю. Капитан<sup>a</sup>, А.А. Перетяцько, Ю. П. Иванов,  
К. В. Нефедев<sup>b</sup>, В. И. Белоконь

Дальневосточный федеральный университет, Школа Естественных наук,  
Россия, 690950, Владивосток, ул. Суханова, 8-43

E-mail: <sup>a</sup> kvyd@live.ru, <sup>b</sup> knefedev@phys.dvgu.ru

Получено 05 сентября 2011 г.

Рассматриваются два возможных вычислительных метода интерпретации экспериментальных данных, полученных методами магнитно-силовой зондовой микроскопии. Развитие методов моделирования и реконструирования распределения макроспинов проводится с целью изучения процессов перемагничивания наночастиц в упорядоченных двумерных массивах. Предлагаются подходы к разработке сверхмасштабируемых высокопроизводительных алгоритмов, предназначенных для параллельного исполнения на суперкомпьютерных кластерах для решения прямой и обратной задачи моделирования магнитных состояний, типов упорядочения и процессов перемагничивания наносистем с коллективным поведением. Результаты моделирования согласуются с результатами эксперимента.

Ключевые слова: магнито-силовая микроскопия, магнитные состояния, высокопроизводительные параллельные вычисления, сверхмасштабируемость

### Superscale simulation of the magnetic states and reconstruction of the ordering types for nanodots arrays

V. U. Kapitan, A. A. Peretyat'ko, U. P. Ivanov, K. V. Nefedev, V. I. Belokon

<sup>1</sup> Far Eastern Federal University, School of Natural Science, Sukhanova str., 8-43, Vladivostok, 690950 Russia

**Abstract.** — We consider two possible computational methods of the interpretation of experimental data obtained by means of the magnetic force microscopy. These methods of macrospin distribution simulation and reconstruction can be used for research of magnetization reversal processes of nanodots in ordered 2D arrays of nanodots. New approaches to the development of high-performance superscale algorithms for parallel executing on a supercomputer clusters for solving direct and inverse task of the modeling of magnetic states, types of ordering, reversal processes of nanosystems with a collective behavior are proposed. The simulation results are consistent with experimental results.

Keywords: Magnetic-force microscopy, magnetic states, high performance calculations, superscaling

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2011, vol. 3, no. 3, pp. 309–318 (Russian).

Работа проводилась при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2013 годы» ГК № 07.514.11.4013, ГК № 02.740.11.0549 и ГК № 14.740.11.0289 в рамках федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России».

## Введение

Благодаря прогрессу в развитии высокоразрешающих методов зондовой магнитно-силовой микроскопии и высокопроизводительных суперкомпьютерных методов, наномасштабные структуры в настоящее время являются предметом интенсивных исследований. Такие наноструктуры интересны с точки зрения приложений, поскольку могут быть использованы для производства элементов памяти случайного доступа (MRAM) и высоко интегрированных магнитно-электронных приборов [Baraton, 2002], а также для применения в спинтронике [Zutic et al., 2004]. С фундаментальной точки зрения интерес к нанoarхитектурам определяется сложностью построения физики коррелированного состояния, в частности, сегодня остаются открытыми вопросы, например, о переходе от индивидуального поведения изолированной магнитной наночастицы к коллективному поведению наносистемы в целом, о роли, которую играет магнитостатическое взаимодействие для осуществления такого перехода [Norpoth et al., 2007], и о механизмах обращения намагниченности [Wang et al., 2009; Wang et al., 2008]. Неоспорим тот факт, что резкий скачок в области информационных технологий связан также и с успехами в исследованиях магнитных частиц, и очевидно, что дальнейшее развитие магнитной логики будет связано с использованием магнитных наноструктур [Heinze et al., 2011].

Магнитно-силовая микроскопия (МСМ) используется производителями носителей информации в качестве одного из методов исследования наноструктур. Такие исследования проводятся с целью минимизации рабочей области, соответствующей одному биту информации, обеспечения помехоустойчивости, уменьшения шума при записи и считывании информации, а также разработки новых принципов и устройств магнитной записи. Для комплексных теоретических и экспериментальных исследований нанoarхитектур широкие возможности сегодня предоставляет современная высокопроизводительная вычислительная техника, позволяющая выполнить проверку и дать оценку адекватности, точности и приемлемости общепринятых моделей в численных экспериментах, получить данные о магнитных состояниях, типах упорядочения, о коллективном поведении [Nefedev et al., 2011]. Поэтому интерес к исследованиям методами моделирования МСМ-экспериментов, как ансамблей, так и отдельных ферромагнитных наночастиц — деталей для наноконструирования, понятен [Andersson et al., 1997; Cowburn, 2002].

В данной работе рассматриваются теоретические обоснования для разработки высокопроизводительных сверхмасштабируемых вычислительных алгоритмов моделирования и реконструкции МСМ-изображений, предназначенных для параллельного исполнения на суперкомпьютерном оборудовании. Приводятся результаты численного моделирования магнитно-силового эксперимента, полученные с помощью авторского экспериментального образца программного обеспечения суперкомпьютерного (СК) кластера.

## Модель МСМ-эксперимента

Математическая модель и алгоритм компьютерного моделирования изображений магнитно-силовой микроскопии, основанные на формализме Брауна, учитывающие форму и магнитные свойства магнитожеской МСМ-иглы кантилевера (зонда) и исследуемого образца, были описаны в работе [Овчинников, Бухарев, 2001].

Сдвиг фаз

$$\Delta\varphi \approx \frac{\partial F_{z_j}}{\partial z_j}, \quad (1)$$

измеряемый в МСМ-эксперименте, прямо пропорционален  $z$ -компоненте градиента силы

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}E = -\sum_{j=1}^{N_t} \sum_{i=1}^{N_s} \vec{\nabla} \overline{M}(\vec{r}_{ij}) \overline{H}(\vec{r}_{ij}) \quad (2)$$

магнитостатического (диполь – дипольного) взаимодействия образца и иглы, где  $N_t$  — количество элементов дискретизации зонда, а  $N_s$  — количество элементов дискретизации наноточки. Энергия системы магнитных моментов зонда во внешнем поле, созданном магнитными диполями наноточки, находящимися на расстоянии  $r_{ij}$  друг от друга, в декартовой системе координат:

$$E = \sum_{j=1}^{N_t} \sum_{i=1}^{N_s} \left( \frac{m_{x_i} m_{x_j} + m_{y_i} m_{y_j} + m_{z_i} m_{z_j}}{r_{ij}^3} - \frac{3(m_{x_i} x + m_{y_i} y + m_{z_i} z)(m_{x_j} x + m_{y_j} y + m_{z_j} z)}{r_{ij}^5} \right). \quad (3)$$

Модель предполагает учет геометрии и формы используемых в МСМ-эксперименте взаимодействующих наноточки и зонда, рис. 1.

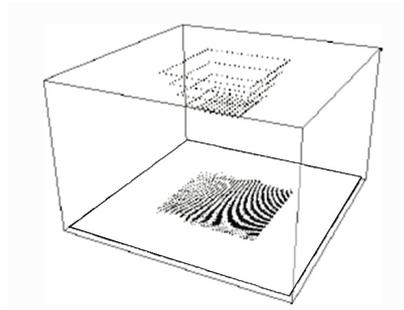


Рис. 1. Модель иглы кантилевера и наноточки

Предполагается, что каждый элемент дискретизации иглы независимо магнитостатически взаимодействует со всеми элементами дискретизации образца, и наоборот. В случае, когда магнитные диполи зонда  $\vec{m}_j = (m_{z_j})$  имеют только компоненту  $z$ , отличную от нуля,  $\vec{m}_{x_j} = \vec{m}_{y_j} = 0$ ,  $\vec{m}_{z_j} = 1$  (в безразмерных единицах).

$$\sum_{j=1}^{N_t} \sum_{i=1}^{N_s} \left[ \begin{aligned} & -\frac{15zx(3x^2 + 3y^2 - 4z^2)}{(x^2 + y^2 + z^2)^{9/2}} m_{x_i} - \frac{15zy(3x^2 + 3y^2 - 4z^2)}{(x^2 + y^2 + z^2)^{9/2}} m_{y_i} + \\ & + \frac{3(3x^4 + 3y^4 - 24y^2z^2 + 8z^4 + 6x^2(y^2 - 4z^2))}{(x^2 + y^2 + z^2)^{9/2}} m_{z_i} \end{aligned} \right] = \sum_{j=1}^{N_t} \frac{dF_{z_j}}{dz_j}, \quad (4)$$

где  $x = x_i - x_j$ ,  $y = y_i - y_j$ ,  $z = z_i - z_j$ . Распределение значений градиента силы взаимодействия в пространстве задается системой линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N_t} (a_{11} m_{x_1} + a_{12} m_{y_1} + a_{13} m_{z_1} + \dots + a_{1(N_s-2)} m_{x_{N_s}} + a_{1(N_s-1)} m_{y_{N_s}} + a_{1N_s} m_{z_{N_s}}) = b_1 \\ \dots \\ \sum_{j=1}^{N_t} (a_{n1} m_{x_1} + a_{n2} m_{y_1} + a_{n3} m_{z_1} + \dots + a_{n(N_s-2)} m_{x_{N_s}} + a_{n(N_s-1)} m_{y_{N_s}} + a_{nN_s} m_{z_{N_s}}) = b_n. \end{cases} \quad (5)$$

Компоненты  $(a_{ij})$  при заданном значении векторов зонда определяются расстоянием между выбранным макроспином зонда  $\{0, 0, m_{z_j}\}$  и макроспином наноточки  $\{m_{x_i}, m_{y_i}, m_{z_i}\}$ . Для построения МСМ-изображения распределение значений градиентов силы магнитостатического взаимодействия  $(b_k)$  представляется в виде значений «температуры» пикселей в каждой из  $n$ -точек двумерного пространства.

Моделирование распределения МСМ-контраста, которое позволит получить информацию о величине и знаке взаимодействия зонда заданных размеров и формы с квазидвумерной наночастицей, может быть использовано для интерпретации экспериментальных данных только в случае, если имеется предположение об определенной конфигурации макроспинов, т. е. о распределении их по направлениям в пространстве. Расчет магнитного состояния наночастицы, а также массива наночастиц обычно производится методами микромагнитного моделирования. В данной работе использовался свободно распространяемый программный пакет The Object Oriented MicroMagnetic Framework (OOMMF) [<http://math.nist.gov/oommf/>], реализующий решение уравнения Ландау–Лившица–Гилберта. При расчетах магнитного состояния использовались следующие параметры: диаметр нанодисков — 600 нм, период массива (расстояние между центрами нанодиска) — 900 нм, намагниченность насыщения  $M_S = 1400$  Гаусс, константа обменного взаимодействия  $A = 2 * 10^{-6}$  эрг/см, размер элементарной ячейки 6 нм и константа одноосной наведенной магнитной анизотропии  $3 * 10^4$  эрг/см<sup>3</sup>. Для приближения моделируемого распределения МСМ-контраста к экспериментально наблюдаемому, кроме точного знания магнитного состояния, также необходим и высокий уровень дискретизации, как зонда, так и наноточки (массива наноточек). В моделировании авторами использовался виртуальный зонд, состоящий из 255 векторов, растровое разрешение МСМ-изображений массивов наноточек 1500 x 1500. Поэтому для построения МСМ-изображений массива наночастиц, взаимодействующих с зондом, использовались методы параллельной алгоритмизации. В случае же моделирования систем наночастиц при уровне дискретизации объектов, обеспечивающих 80 %-ю сходимость расчетного распределения МСМ-контраста с экспериментально наблюдаемым, требования к масштабированию вычислительных мощностей, а также к параллелизации исполняемого кода становятся критическими:

Алгоритм решения прямой задачи МСМ состоит в следующем:

- 1) стандартными средствами (в т. ч. и методами микромагнитного моделирования, например, с помощью пакета OOMMF) строим предполагаемое распределение направлений векторов намагниченности в моделируемом образце. Координаты векторов намагниченности  $\{m_{x_i}, m_{y_i}, m_{z_i}\}$  являются входными данными и используются программой ЭВМ для вычисления распределения яркости пикселей  $(b_k)$ ;
- 2) коэффициенты  $(a_{ij})$  СЛАУ (5) рассчитываются с помощью выражения (4);
- 3) искомые значения градиентов, которые содержатся в векторе свободных членов и затем используются для построения МСМ-контраста, определяются независимо для каждого пикселя МСМ-изображения.

Сверхмасштабируемость алгоритма решения прямой задачи моделирования МСМ-изображения, т. е. масштабирование параллелизации до уровня, заданного произвольным количеством вычислителей, обеспечивается независимостью расчета полей взаимодействия, созданных точечными диполями в заданной точке пространства. Данные о координатах и направлениях макроспинов в наноточке и зонде передаются на отдельные вычислители. Для уменьшения времени счета и эффективного использования вычислительных ресурсов желательно генерировать число процессов, равное числу пикселей МСМ-изображения. Увеличение степени дискретизации модели может потребовать также и параллелизм вычислений «температуры» одного пикселя. Пользователь может породить фактически любое количество вычислительных нитей, которое обычно ограничивается количеством вычислительных ядер. Все результаты

вычислений в конечном итоге собираются и обрабатываются главным процессом. Таким образом, наличие суперпозиции позволяет существенным образом изменять уровень детализации модели с целью достижения заданной степени сходимости экспериментальных и расчетных данных.

На рисунках 2а и 2с представлены распределения векторов намагниченности для круглых частиц и рассчитанные для них с помощью авторского программного обеспечения [Нефедев, Перетяшко, 2010] распределения МСМ-контраста — рис. 2b, 2d, соответственно.

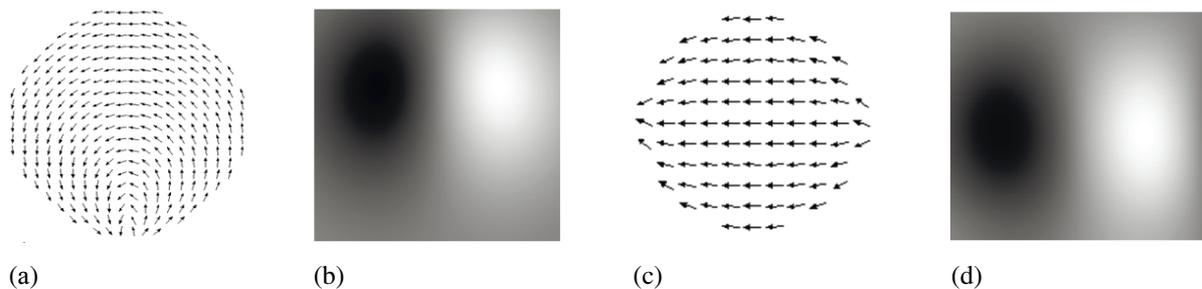


Рис. 2. Конфигурации векторов намагниченности круглой наноточки, а) и с); соответствующие заданным конфигурациям МСМ-изображения, b) и d)

Необходимо отметить, что поиск равновесной конфигурации для модельной наноточки и особенно для системы наночастиц, взаимодействующих посредством дальнего действия обмена, является весьма трудоемкой и нетривиальной задачей. Решение может быть многократно вырождено из-за симметрии задачи. Даже при условии точного определения геометрии взаимодействующих нанообъектов, при достаточно высоком уровне дискретизации очень трудно определить, в каком именно магнитном состоянии находился массив наночастиц и какие типы упорядочения характерны для элементов наноархитектуры при заданном значении внешнего магнитного поля. Увеличение числа моделируемых взаимодействующих элементов в массиве при сохранении уровня дискретизации приводит к тому, что получить решение за реальное время возможно только с помощью высокопроизводительного суперкомпьютерного оборудования.

## Интерпретация экспериментальных данных МСМ

### Моделирование

Процедура подготовки массивов наночастиц кобальта состояла в следующем: изначально были приготовлены пленки Со толщиной 10 нм путем осаждения в сверхвысоком вакууме  $10^{-10}$  Торг на естественно окисленные монокристаллы (100)Si из эффузионных ячеек при комнатной температуре. Сверху полученную пленку Со покрывали слоем Си толщиной 3 нм для предотвращения окисления. Затем из пленочных образцов Со сфокусированным пучком ионов Ga<sup>+</sup> формировали массивы круглых точек. Ток ионной пушки при травлении составлял от 2 пА до 50 пА. Диаметр ионного пучка изменялся в интервале от 11 до 17 нм соответственно. Расчетная глубина травления была 50 нм. В качестве маски использовалось растровое изображение круглых отверстий на поле сканирования. Минимальный размер элемента на изображении составлял от 10 до 30 нм, что больше размеров ионного пучка. Для исключения влияния окружающей сплошной пленки Со на измерения параметров полученных массивов вокруг наноточек производилась «очистка» от магнитного материала пространства в 50 мкм. Очистка производилась при токе ионного пучка 500 пА и 1 нА. В качестве маски использовалось растровое изображение с прямоугольником в центре, закрывающим уже готовый массив точек от воздействия ионного пучка. Получение массива точек выполнялось при увеличениях микроскопа от 7 000 до 15 000х. Структура пленок и массивов исследовалась

методом дифракции быстрых электронов, сканирующей электронной микроскопией и атомно-силовой микроскопией. Для получения изображения магнитной структуры отдельных наноточек использовали МСМ-метод магнитной силовой микроскопии.

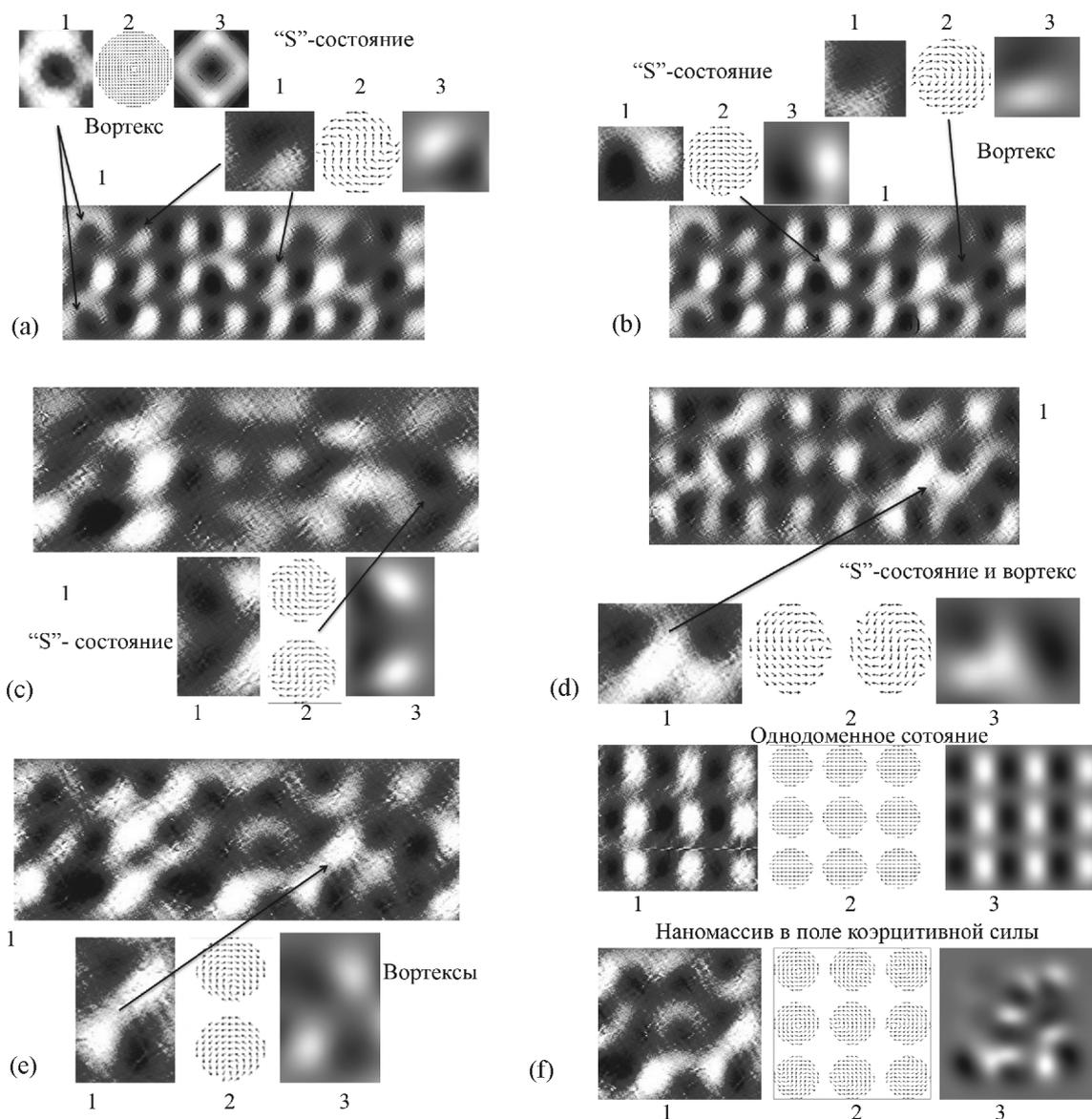


Рис. 3. (a–f) Интерпретация экспериментальных МСМ-изображений магнитной структуры выбранных наноточек методом моделирования магнитного состояния с помощью авторского программного обеспечения для суперкомпьютерного вычислительного кластера. Изображения с индексом «1» — экспериментальные МСМ-изображения, с индексом «2» — конфигурация магнитных диполей, «3» — расчетные МСМ-изображения, соответствующие заданной конфигурации намагниченности. (a–b) Во внешнем магнитном поле  $H = 2H_c$ ; c)  $H = 1.5H_c$ ; d)  $H = H_c$ ; e)  $H = 1.75H_c$

На рис. 3 приведены примеры моделирования магнитных состояний отдельных элементов и их групп при перемагничивании упорядоченного массива квазидвумерных нанодисков кобальта диаметром 600 нм, связанных сильным диполь-дипольным взаимодействием в различных внешних магнитных полях. Интерпретация экспериментальных МСМ-данных маг-

нитных состояний отдельных элементов наносистемы, находящейся в различных магнитных полях, представлена на рисунках 3а–д. Моделирование 3 x 3 магнитной структуры массива наночастиц кобальта в поле насыщения и в поле коэрцитивной силы представлено на рисунке 3е, соответственно. Для упорядоченного однодоменного состояния наблюдается хорошее совпадение моделируемого МСМ-контраста с экспериментально наблюдаемым, чего нельзя сказать о моделировании магнитного упорядочения в поле коэрцитивной силы, где коллективные взаимодействия играют ключевую роль при выборе магнитного состояния системы наночастиц в целом и каждой наночастицы в отдельности. В связи с этим для исследования магнитных состояний и типов упорядочения массивов магнитных наночастиц необходим метод расчета, который в большей мере будет использовать информацию, получаемую из эксперимента.

### Реконструкция

Предлагаемый подход к интерпретации экспериментальных данных, полученных при исследовании магнитных состояний и типов упорядочений массивов двумерных и квазидвумерных магнитных наночастиц методами магнитно-силовой зондовой микроскопии, состоит в решении обратной задачи, т. е. задачи реконструкции распределения направлений векторов намагниченности в образце по известному экспериментально наблюдаемому МСМ-изображению поля, производимому «магнитными зарядами». Общепринято, что невозможно точно определить распределение намагниченности от распределения объемных и поверхностных «зарядов», поэтому в настоящее время отсутствуют решения, позволяющие произвести реконструкцию объемного распределения направлений векторов намагниченности исключительно из поля, которое ими производится [Vellekoop et al., 1998; Csaba et al., 2003]. Однако это не противоречит возможности реконструкции решения для плоской задачи, где объемные заряды отсутствуют в принципе.

Обоснованность реализуемости предлагаемого подхода в феноменологической модели для двумерных и квазидвумерных объектов следует из единственности решения СЛАУ (5). Рассмотрим в качестве примера задачу о двух взаимодействующих магнитных диполях. Зафиксируем первый диполь с вектором намагниченности, например  $\{m_{x_j}, m_{y_j}, m_{z_j}\} = \{0.6, 0.525, 0.6\}$ , в начале декартовой системы координат  $(x, y, z) = (0, 0, 0)$ . Поместим второй диполь с компонентами вектора намагниченности  $\{m_{x_i}, m_{y_i}, m_{z_i}\} = \{0, 0, 1\}$  поочередно в три точки пространства:  $(0, 0, 1)$ ,  $(0, 1, 1)$  и  $(1, 0, 1)$ . Тогда значения градиента силы магнито-статического взаимодействия между ними в этих точках, вычисленные по формуле (4), соответственно равны  $F'(0, 0, 1) = 14.4$ ,  $F'(0, 1, 1) \approx -0.686$ ,  $F'(1, 0, 1) \approx -0.636$ .

Пусть теперь мы знаем значения градиентов и компоненты одного из векторов. Предположим, нам не известны компоненты второго вектора  $\{m_{x_j}, m_{y_j}, m_{z_j}\}$ . Сформируем СЛАУ:

$$\begin{cases} 24m_{z_j} = 14.4, \\ \frac{15(m_{y_j} + m_{z_j})}{16\sqrt{2}} - \frac{27m_{z_i}}{8\sqrt{2}} \approx -0.686, \\ \frac{15(m_{x_j} + m_{z_j})}{16\sqrt{2}} - \frac{27m_{z_i}}{8\sqrt{2}} \approx -0.636, \end{cases} \quad (6)$$

которая однозначным образом позволяет установить направление вектора намагниченности  $\{m_{x_j}, m_{y_j}, m_{z_j}\} \approx \{0.6, 0.525, 0.6\}$ .

Таким образом, задача решается с заданной точностью для точечного диполя и, соответственно, для системы независимых диполей, поскольку для создаваемых полей выполняется принцип суперпозиции. Предлагаемый алгоритм решения обратной задачи МСМ заключается в следующем:

- 1) входными данными программы являются данные, полученные либо магнитно-силовым микроскопом, либо модельное МСМ-изображение, полученное в ходе решения прямой задачи (для «калибровки» виртуального магнитно-силового микроскопа);
- 2) расчет коэффициентов  $(a_{ij})$  системы (5) с использованием (4);
- 3) параллельное решение СЛАУ (5) методом Гаусса с выбором ведущего элемента по строке с целью реконструкции компонент векторов намагниченности  $\{m_{x_j}, m_{y_j}, m_{z_j}\}$ .

Решение СЛАУ методом Гаусса также предоставляет возможности сверхмасштабирования. В случае достижения верхнего предела масштабирования «один процесс — одна строка СЛАУ» номер строки матрицы системы уравнений совпадает с идентификатором процесса. Для ограниченных вычислительных ресурсов количество порождаемых процессов должно быть кратно количеству уравнений и, соответственно, количеству вычислителей (каждый процесс получает соответствующее количество строк матрицы). Рассылка осуществляется циклически. Если первый элемент первой строки равен нулю, то рутовый процесс производит поиск ведущего элемента (коэффициент матрицы СЛАУ, имеющий наибольшее значение по модулю) и меняет его местами с элементом, находящимся на главной диагонали. Данная операция выполняется для того, чтобы на главной диагонали отсутствовали нули. Правило перестановок, позволяющее в конце счета восстановить исходный порядок корней, запоминается. Методом широковещательного обмена строка, над которой осуществили элементарные преобразования, передается в остальные процессы. Каждый процесс, получивший строку и ведущий элемент, производит перестановки по заданному правилу и последующую диагонализацию матрицы. Каждый дочерний процесс рассылает полученное значение неизвестной, индекс которой соответствует выбранному столбцу и строке. В завершение расчетов рутовый процесс восстанавливает исходный порядок корней, используя сохраненную последовательность перестановок.

Единственность решения СЛАУ (5) означает единственность пространственного распределения МСМ-контраста для выбранной конфигурации магнитных векторов и, следовательно, единственность решения обратной задачи – задачи восстановления магнитной конфигурации по известному, экспериментально наблюдаемому распределению МСМ-контраста. Множественность решений системы уравнений означает, что заданному распределению яркости пикселей соответствует несколько возможных конфигураций макроспинов. И отсутствие решений — отсутствие конфигурации макроспинов, соответствующей заданному распределению МСМ-контраста. Точность решения задачи о реконструкции намагниченности экспериментально наблюдаемых данных магнитно-силовой микроскопии реальных магнитных наноточек и их массивов очень сильно зависит от степени приближения рассматриваемой модели к реальности, т. е. фактически от совпадения геометрических характеристик реальной nanoархитектуры и моделируемой, а также степени шума. Сходимость модельных и теоретических представлений о магнитных состояниях и типах упорядочения можно контролировать, в частности, по однодоменному состоянию наноточки или массива наночастиц, которое имеет место в поле насыщения. Для повышения степени приближения требуется в качестве входных данных программы ЭВМ использовать совмещенные экспериментальные данные о распределении МСМ-контраста и данные атомно-силовой микроскопии (АСМ) и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), с помощью которых можно получить точную информацию о геометрии nanoархитектуры и координатах исследуемых наночастиц в массиве.

## Заключение

В данной работе рассмотрено два возможных подхода к исследованию магнитных состояний и типов упорядочения двумерных наноархитектур. Интерпретация экспериментальных данных магнитно-силовой микроскопии возможна путем моделирования МСМ-эксперимента для заданных конфигураций намагниченности отдельных наночастиц и их массивов. Применение методов микромагнитного моделирования позволяет облегчить поиск истинной конфигурации намагниченности. Расчеты магнитных состояний массивов наночастиц требуют высокопроизводительных вычислительных ресурсов. Принцип суперпозиции, используемый в математической модели магнитно-силового эксперимента, позволяет достигать высокой степени масштабирования алгоритма. Результаты МСМ-моделирования простых магнитных состояний наноточек и их массивов с помощью авторского программного обеспечения суперкомпьютерного кластера имеют хорошую сходимость с экспериментальными данными. Однако определение распределения макроспинов является «узким» местом в моделировании магнитно-силового эксперимента, поэтому предлагается использовать для интерпретации экспериментальных данных МСМ-метод реконструкции намагниченности.

Показана возможность решения обратной задачи — задачи о реконструкции намагниченности по известным данным МСМ-эксперимента для двумерных и квазидвумерных наночастиц, а также массивов наночастиц. Предлагаемый алгоритм решения обратной задачи допускает сверхмасштабирование и, соответственно, позволяет резко уменьшить временные затраты на вычисления. Интерпретация экспериментальных данных методом реконструкции предполагает точное знание геометрических параметров моделируемых наночастиц, иглы кантилевера. Поэтому дальнейшее развитие предлагаемого подхода к интерпретации МСМ-данных связано с универсализацией алгоритма реконструкции в части, касающейся более точного учета геометрии наноархитектуры, использования данных силовой и электронной микроскопии.

## Благодарности

Авторы выражают признательность и благодарность профессору Людмиле Алексеевне Чеботкевич за ценные замечания, рекомендации, советы, обсуждение деталей и интересные дискуссии.

## Список литературы

- Andersson J. O., Djurberg C., Jonsson T., Svedlindh P., Nordblad P.* Monte Carlo studies of the dynamics of an interacting monodisperse magnetic-particle system. // *Physical Review B*. — 1997. — Vol. 56. — Pp. 13983–13988.
- Baraton M. I.* Synthesis, Functionalization, and Surface Treatment of Nanoparticles. // *American Science Publishers, Los-Angeles, CA*. — 2002. — 299 p.
- Cowburn R. P.* Magnetic nanodots for device applications. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2002. — Vol. 242–245. — Pp. 505–511.
- Csaba G., Porod W.* Restoration of Magnetization Distributions from Joint Magnetic Force Microscopy Measurements and Micromagnetic Simulations. // *Journal of Computational Electronics*. — 2003. — Vol. 2. — Pp. 225–229.
- Heinze S., Bergmann K., Menzel M., Brede J., Kubetzka A., Wiesendanger R., Bihlmayer G., Blügel S.* Spontaneous atomic-scale magnetic skyrmion lattice in two dimensions. // *Nature Physics*. — 2011. — Vol. 7. — Pp. 713–718.
- Nefedev K., Ivanov Yu., Peretyatko A., Belokon V.* Magnetic States of Nanodot Arrays. Physical and Numerical Experiments. // *Solid State Phenomena*. — 2011. — Vol. 168–169. — Pp. 325–328.

- Norpoth J., Dreyer S., Jooss Ch., Sievers S.* Manipulating the dipolar magnetic interactions in FePt square arrays: The role of edge roughness. // *Journal of Applied Physics*. — 2007. — Vol. 101. — Pp. 09F518–09F521.
- Vellekoop B., Abelman L., Porthun S., Lodder C.* On the determination of the internal magnetic structure by magnetic force microscopy. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 1998. — Vol. 190. — Pp. 148–151.
- Wang T., Pei W. L., Fu Y., Washiya T., Hasegawa T., Saito H., Ishio S., Wang Y., Li F. S., Ariake J.* Magnetization reversal of Co/Cu/Co elliptical elements studied by in-field magnetic force microscope and micromagnetic simulation. // *Journal of Applied Physics*. 2008. Vol. 103. P. 093910.
- Wang T., Wang Y., Fu Y., Hasegawa T., Li F. S., Saito H., Ishio S.* A magnetic force microscopy study of the magnetic reversal of a single Fe nanowire. // *Nanotechnology*. — 2009. — Vol. 20. — P. 105707.
- Zutic I., Fabian J., Das Sarma S.* Spintronics: Fundamentals and applications. // *Review Modern Physics*. — 2004. — Vol. 76. — Pp. 323–410.
- Овчинников Д. В., Бухарев А. А.* Компьютерное моделирование магнитно-силовой микроскопии изображений в рамках статической модели распределения намагниченности и диполь-дипольного взаимодействия. // *Журнал технической физики*. — 2001. — Т. 71. № 8. — С. 85–91.
- Нефедев К. В., Перетяцько А. А.* MFM SIMULATOR 1.0, Программа моделирования магнито-силовых изображений. // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2010615690, от 02.09.2010 г.