

УДК: 537.621: 537.622.4

## Расчет магнитных свойств наноструктурных пленок методом параллельного Монте-Карло

В. Ю. Капитан<sup>1</sup>, К. В. Нефедев<sup>1,2,а</sup>

<sup>1</sup> Дальневосточный федеральный университет,  
Россия, 690950, г. Владивосток, ул. Суханова, д. 8

<sup>2</sup> Институт прикладной математики Дальневосточного отделения Российской академии наук,  
Россия, 690041, г. Владивосток, ул. Радио, д. 7

E-mail: <sup>а</sup> nefedev.kv@dvfu.ru

Получено 28 мая 2013 г.  
После доработки 26 сентября 2013 г.

Изображения рельефа поверхности ультратонких магнитных пленок использовались для Монте-Карло моделирования в рамках ферромагнитной модели Изинга с целью исследования гистерезисных и термодинамических свойств наноматериалов. Для высокопроизводительных вычислений использовался параллельный сверхмасштабируемый алгоритм поиска равновесной конфигурации. Исследовано изменение распределения спинов на поверхности в процессе обращения намагниченности и динамика нанодоменной структуры тонких магнитных пленок под влиянием изменяющегося внешнего магнитного поля.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, сверхмасштабируемый алгоритм, модель Изинга, моделирование РМОКЕ-изображения

## Calculation of magnetic properties of nanostructured films by means of the parallel Monte-Carlo

V.Yu. Kapitan<sup>1</sup>, K.V. Nefedev<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Far Eastern Federal University, 8 Sukhanova St., Vladivostok, 690950, Russia

<sup>2</sup> Institute of Applied Mathematics, Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences, 7 Radio St., Vladivostok, 690041, Russia

**Abstract.** — Images of surface topography of ultrathin magnetic films have been used for Monte Carlo simulations in the framework of the ferromagnetic Ising model to study the hysteresis and thermal properties of nanomaterials. For high performance calculations was used super-scalable parallel algorithm for the finding of the equilibrium configuration. The changing of a distribution of spins on the surface during the reversal of the magnetization and the dynamics of nanodomain structure of thin magnetic films under the influence of changing external magnetic field was investigated.

Keywords: Monte-Carlo method, super-scalable algorithm, Ising model, simulation of PMOKE-images

Citation: Computer Research and Modelling, 2013, vol. 5, no. 4, pp. 693–703 (Russian)

Работа была выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации ГЗ-2013/287, а также при финансовой поддержке гранта Научного фонда ДВФУ № 12-07-13000-18/13.

## Введение

Необходимость теоретического исследования и моделирования физических свойств сверхтонких ферромагнитных пленок обусловлена существованием фундаментальных проблем физики магнитных явлений, а также потребностью в развитии теории ферромагнетизма в целом и гистерезисных явлений в частности. Компьютерная обработка экспериментальных данных и последующее моделирование поведения поверхности магнетика на основе таких данных позволяет получать новую ценную информацию о природе ферромагнетизма и источниках анизотропии, визуализировать и исследовать процессы обращения намагниченности во внешнем магнитном поле. Исследование физических свойств тонких ферромагнитных пленок актуально и с точки зрения их практического применения в микроэлектронике и вычислительной технике, поскольку наноструктурированные магнитомягкие тонкие магнитные пленки являются основными материалами для изготовления элементов магнитной памяти случайного доступа — MRAM [Gallagher et al., 1997; Tehrani et al., 1999; Melo et al., 1997; Voeve et al., 1999; Daughton, 1997]. При моделировании свойств такого типа объектов в первом приближении достаточно хорошие результаты дает микромагнитный подход, см., например, [Харитонский, Фролов, 2012; Харитонский и др., 2010; Харитонский и др., 2012]. Микромагнитное моделирование реализовано в таких известных пакетах как OOMMF [Donahue, 1999] и magpar [Scholz et al., 2003], в которых можно изучать статистические и динамические свойства систем спинов и макроспинов, однако данный подход для определения равновесного состояния обладает рядом вычислительных недостатков, [Беляев и др., 2010].

Уровень развития вычислительной техники и суперкомпьютерных технологий в настоящее время позволяет использовать новые классы алгоритмов для решения сложных задач численного моделирования и оперирования сверхбольшими объемами данных. Степень дискретизации элементов в компьютерной модели ограничивается разрешающей способностью растрового изображения, получаемого с помощью микроскопа.

Целью данной работы являлась разработка компьютерной модели, создание экспериментального образца программного обеспечения (ЭО ПО) суперкомпьютерного кластера на основе сверхмасштабируемого алгоритма параллельного Монте-Карло, предназначенного для обработки данных сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) и атомно-силового микроскопа (АСМ), расчет магнитных свойств нанокластерных квазидвумерных магнетиков, выявление взаимосвязи со структурой, моделирование явлений магнитного гистерезиса с помощью созданного ЭО ПО.

## Сверхмасштабируемость

С. Гейст и Г. Энгелманн [Engelmann, Geist, 2005; Heroux et al., 2006] определили «сверхмасштабируемый алгоритм» как алгоритм, обладающий свойством масштабной инвариантности по отношению как к числу процессов, выполняющих подзадачи основной задачи, так и к числу коммуникаций между ними, а также свойством отказоустойчивости. Инвариантность означает, что отдельные задачи выполняются процессами автономно, а максимальное число взаимодействий между ними фиксировано, в независимости от общего количества процессов, исполняющих приложение. Алгоритм может иметь неопределенное число параллельных процессов, определяющих его структуру, поскольку общее число подзадач в основной задаче не ограничено. При наличии масштабной инвариантности аварийное завершение относительно малого числа отдельных процессов не должно повлиять на результаты выполнения других процессов и выполнение программы в целом. Сверхмасштабируемый алгоритм допускает динамическую генерацию процессов или их замену, т. к. величина информационных зависимостей, требующих взаимодействий между процессами минимизирована. Тем не менее, масштабная инвариантность не гарантирует высокой эффективности для большого и сверхбольшого числа процессоров.

Интересно, что при масштабировании высокоэффективных параллельных приложений может быть получена сверхлинейная зависимость ускорения от числа процессоров [Peretyatko et al., 2011], т. е. превышение значения ускорения, ограниченного законом Амдала. Необходимо отметить, что наличие сверхлинейности ускорения не является единственным, необходимым и достаточным признаком сверхмасштабируемости. Кроме того, эффективность выполнения параллельной программы как показатель полноты использования предоставленных ей ресурсов (загрузка процессора, существование файла подкачки, наличие свободной оперативной памяти и т. д.) не может быть использована и в качестве определяющего признака для того, чтобы можно было считать программу сверхмасштабируемой. Хотя иногда в литературе можно встретить использование понятий «эффективность» и «сверхмасштабируемость» как понятий комплементарных или даже смежных, см. например [Никитенко, 2012].

Возможной причиной сверхлинейности ускорения может быть следующее: параллелизм по данным обеспечивает уменьшение размера блоков данных, отправляющихся в процессорные ядра для вычислений, поэтому значительное дробление может способствовать уменьшению размера блока вплоть до полного размещения в кэше. В ходе работы информационный поток всегда проходит через кэш-память, поэтому процессор обязан ожидать появления необходимых данных в кэше. Если для последовательного кода размер блока данных будет относительно большим для замещения предыдущей строки кэш-памяти, то любое использование строк из кэша потребует дополнительного времени на ожидание появления данных в кэше, т. е. завершения операции кэширования. В параллельной версии кода данные могут быть разделены на блоки, которые как единое целое будут находиться в кэш-памяти, тем самым после загрузки всех строк кэша временных затрат на ожидание можно избежать путем уменьшения относительного размера блока данных. Закон Амдала предполагает, что количество операций, которые нужны для получения результата, а также объем необходимых вычислительных операций остаются постоянными и для последовательной, и для параллельной версий кода. Существование суперлинейного ускорения может быть легко объяснено, если это предположение не удовлетворяется. Если объем команд (и/или данных) последовательных и параллельных кодов отличаются, то закон Амдала не может быть использован, поскольку он устанавливает предел и ограничения на производительность параллельных алгоритмов одного и того же класса, а также не принимает во внимание архитектуру многопроцессорных вычислителей и особенностей алгоритмов кэширования.

Дополнительно к «алгоритмической сверхмасштабируемости» и, как следствие, «сверхмасштабируемости программы ЭВМ» необходимо принимать в расчет и возможности «аппаратной сверхмасштабируемости». Для новых процессоров таковая может быть обеспечена путем введения суперскалярности за счет введения новых команд и новых машинных инструкций, уменьшения времени на обработку команд за счет организации нескольких конвейеров для обработки команд, модернизации кэш-памяти и увеличения ее размера, использования новых низкоуровневых алгоритмов предсказания следующих команд и т. д. То есть даже эффективный параллельный код, исполняемый на процессорах нового поколения с такими же характеристиками, что и в предыдущем поколении, может работать быстрее на несколько десятков процентов.

В данной работе разработан подход, при котором для поиска равновесной, с точки зрения минимума свободной энергии, конфигурации используется сверхмасштабируемый алгоритм, в котором число процессов необходимое для решения основной задачи. В нашем подходе структура алгоритма не накладывала никаких ограничений на число процессов, а возможные ограничения на масштабируемость могут быть обусловлены ограниченностью массива данных, а также наличием необходимых вычислительных ресурсов.

## Модель

Экспериментальный метод получения образцов и магнитометрические данные были опубликованы в работах [Ivanov et al., 2011; Ivanov et al., 2012]. Метод компьютерной обработки

СТМ-изображения и последующего МК-моделирования состоит в том, что на основе растровых изображений строится модельная решетка спинов. Яркость пикселя на СТМ-изображении есть функция расстояния между зондом и поверхностью, поэтому пиксели изображения могут быть использованы для построения модельной решетки с заданным координационным числом и количеством атомных слоев, число которых измеряется экспериментальными методами. Построение модельной решетки описано в работе [Ivanov et al., 2012].

В принципе, моделирование может происходить в рамках любой известной модели, например, модели Изинга или Гейзенберга с определенным значением обменного интеграла. Нами была использована модель Изинга, где каждый спин нанопленки  $S_i$  взаимодействовал посредством прямого обмена со своим ближайшим окружением (максимум с 12 соседями). Для поиска равновесной конфигурации использовался алгоритм Метрополиса, постоянная Больцмана  $k = 1$  и обменный интеграл  $J = 1$ . Переход от используемых в численном моделировании приведенных значений к измеряемым в эксперименте физическим величинам может быть выполнен в соответствие с известным выражением

$$J = \frac{3kT_c}{2zS}(S + 1), \quad (1)$$

где  $z$  — число ближайших соседей,  $T_c$  — температура Кюри,  $S$  — спин иона.

## Параллельный алгоритм Метрополиса

Интеграция подходов Марковской цепочки и Монте-Карло (Markov chain Monte Carlo — MCMC) в алгоритме Метрополиса–Хастингса [Metropolis et al., 1953; Hastings, 1970], а также использование подхода Гиббса [Geman, Geman, 1984; Gelfand, Smith, 1990] способствовали чрезвычайной популяризации программных инструментов анализа сложных статистических моделей. Такие инструменты особенно полезны для проведения численных оценок значений сложных и многомерных интегралов, а также для исследования влияния случайных и неопределенных факторов на поведение модели. Альтернативные методы (например, асимптотическое приближение, традиционное численное интегрирование и др.) не могут быть использованы, поскольку не обеспечивают требуемой точности результатов.

Алгоритм Метрополиса–Хастингса имеет итеративную схему, которая обеспечивает равномерность распределения последовательно генерируемых случайных величин. На каждом шаге алгоритма генерируется новое значение, которое зависит от результата предыдущего шага (марковский процесс). Этот метод однако требует значительных вычислительных затрат особенно для случаев критического замедления, например в точке фазового перехода, или при стремлении температуры к нулю, где требующееся для сходимости число итераций должно быть увеличено на несколько порядков. Поэтому в настоящее время разрабатываются подходы, где параллельная вычислительная схема исполнения статистических алгоритмов метода Монте-Карло может быть использована, см., например, [Kovtanuk et al., 2010; Kovtanuk et al., 2012; Ковтанюк, 2012].

В качестве входных данных для разрабатываемого авторами программного приложения используется пиксельное СТМ-изображение, из которого формировался трехмерный массив, число строк которого было равно числу пикселей обрабатываемого изображения по высоте, а число столбцов ширине картинки, «глубина» задавалась равной числу слоев магнетика в образце (на основе экспериментальных данных). Параллелизм алгоритма реализуется за счет разбиения трехмерного массива спинов на части (плоскости), последующей их рассылки посредством MPI-библиотеки и, соответственно, обработки каждой из плоскостей в отдельном вычислительном процессе. Проход по системе спинов и выполнение МК-шагов производятся в шахматном порядке. Это делается с целью учета граничных условий вычисляемых конфигураций для обрабатываемых плоскостей. В течение МК-операций с частью массива первоначальные значения соседей обрабатываемого спина не изменяются, т. е., для каждого шага тем-

пературы или поля, половина МК-шагов делается сначала для одной половины спинов, а затем для второй половины.

Для моделирования Монте-Карло используется параллельный алгоритм Метрополиса–Хастинга [Metropolis et al., 1953; Hastings, 1970], реализованный следующим образом, см. рисунок 1:

1. В каждый процесс сообщаются данные о числе строк (плоскостей) трехмерного массива спинов. Число строк пропорционально количеству процессов. В используемом подходе, максимальное число процессов для исполнения программы равно одному из линейных размеров СТМ (или АСМ) изображения в пикселях.
2. Для учета ближайшего окружения спинов магнетика, стоящих на границе блоков строк, в каждый процесс направлялись дополнительные строки, содержащие спины на границе плоскости;
3. Рассылка блоков строк осуществляется с помощью in-line функции коллективного обмена данными MPI\_Scatterv — рассылающей части неодинаковой длины из root-процесса в другие процессы, а сборка в один массив в процессе root осуществляется с помощью функции MPI\_Gatherv. Использование данных функций MPI позволяет рассылать по процессам блоки данных различных размеров, см. рисунок 1, так как кроме «основных» блоков данных, которые ограничены фигурными скобками справа, необходимо в каждый процесс отправлять дополнительные строки, содержащие ближайших соседей (NN), размер «расширенных» блоков различен, эти блоки выделены фигурными скобками слева.
4. Поиск равновесной конфигурации производится параллельным методом Монте-Карло с помощью MPI функции MPI\_Reduce с использованием операции MPI\_MIN, которая позволяет из множества сгенерированных конфигураций выбрать конфигурацию, которой соответствует минимум энергии. Данная конфигурация становится стартовой для нового цикла Монте-Карло для всех процессов при следующем значении температуры или внешнего поля. В программе эта возможность реализована таким образом, что возможно в параллельном режиме одновременно генерировать неограниченное количество процессов для поиска равновесной конфигурации, обладающей минимумом энергии. Также использована функция MPI\_Comm\_group, с помощью которой генерируются группы процессов, и в каждой из них независимо осуществляется поиск конфигурации с минимумом энергии, а затем с помощью интеркоммуникаторов осуществляется обмен и поиск конфигурации, обладающей минимумом свободной энергии.

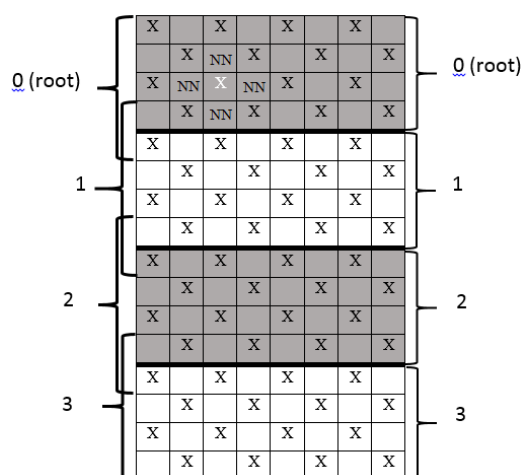


Рис. 1. Схема рассылки блоков строк по процессам (фигурные скобки справа) с учетом граничных условий (фигурные скобки слева). Переворот спинов осуществляется в шахматном порядке. Белым выделен переворачиваемый спин и 4 ближайших соседа (NN) из его плоскости

Для моделирования неравновесных процессов и гистерезисных явлений в монослойных образцах разработанное ЭО ПО позволяет использовать поверхностные спины Изинга моделируемой наноструктуры, т. е. фактически программное обеспечение способно моделировать экспериментальные изображения, получаемые методом полярного магнитооптического эффекта Керра.

Число МК-шагов устанавливалось пропорциональным числу узлов решетки. Размер системы спинов Изинга также может способствовать замедлению движения к равновесию, особенно в области низких температур  $T$ . Поэтому, с целью ускорения получения наиболее вероятной конфигурации, с заданным значением энергии и спинового избытка использовалась параллельная схема вычислений. Сверхмасштабируемость используемых алгоритмов обеспечивается за счет независимых расчетов для каждой строки матрицы, т. е. для каждой строки пикселей СТМ (или АСМ). Использование разбиения задействованных процессов на две группы с помощью функции MPI: MPI\_Comm\_group позволяло также существенно увеличить эффективность счета, которая обеспечивается тем, что каждая группа независимо рассчитывает перемагничивание образца в полях от  $-h$  до  $h$  и соответственно с  $h$  до  $-h$ , сокращая тем самым время выполнение программы в среднем в два раза.

## Критическая концентрация и ферромагнетизм

В работе [Белоконь и др., 2006] авторами был представлен метод расчета критической концентрации, необходимой для фазового перехода к ферромагнетизму в кристаллических решетках с заданным числом ближайших соседей. Приближенные значения критических концентраций магнитных атомов, необходимые для перехода в ферромагнитное состояние, для монослойных и субмонослойных образцов кобальта рассчитывались на основе экспериментальных СТМ-изображений. Для сравнения критические концентрации для перехода в ферромагнитное состояние при  $T = 0$  образцов с различным содержанием магнитных атомов определялись из соотношения  $p_c = 2/z$ , где  $z$  — рассчитанное число ближайших соседей.

Таблица 1. Вычисленные концентрации атомов  $p$  в сравнении с критическими концентрациями ферромагнетика  $p_c$  и температуры Кюри  $T_c$  для образцов с заданным числом монослоев

Число монослоев, ML	Число ближайших соседей	$T_c$	$p$ , at%	$p_c$
1.5 ML	3.615	3.00	0.38	0.55
2.0 ML	6.984	6.15	0.50	0.29
2.5 ML	8.177	7.80	0.63	0.24
3.0 ML	9.308	8.70	0.76	0.21

В таблице 1 приведены расчетные критические концентрации, необходимые для фазового перехода в ферромагнитное состояние. Необходимо отметить, что образец 1.5 ML при низких температурах находится в состоянии кластерного ферромагнетизма, т. к. концентрация атомов магнетика  $p < p_c$  меньше аналитически рассчитанной необходимой критической концентрации ферромагнетика. Это подтверждают и данные о температурной зависимости намагниченности для образцов, и магнитометрические экспериментальные данные о кривых магнитного гистерезиса при комнатной температуре [Ivanov, 2012]. Для всех экспериментальных образцов кластерного кобальта наблюдается широко известная корреляция значения температуры Кюри от среднего числа атомов в первой координационной сфере, рисунок 2.

Отмечающееся на рисунке 2 отклонение в температурном поведении намагниченности для квазидвумерных образцов от аналитически полученного Онзагером решения для двумерных простых квадратных плоских решеток связано с кластерной наноструктурой образцов. Подобное температурное поведение намагниченности монослойных кластеризованных пленок кобальта на Cu(111) наблюдают также авторы работы [Huang et al., 1994].

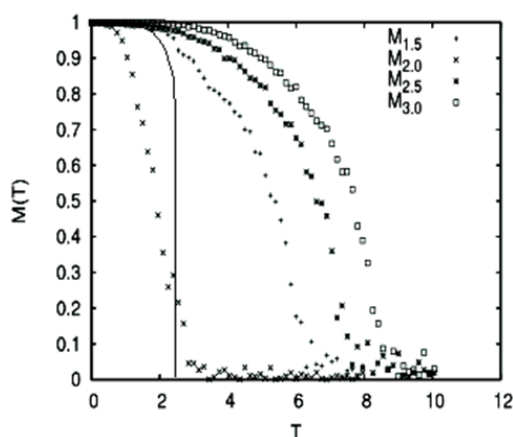


Рис. 2. Температурное разрушение намагниченности для поверхностей ультратонких ферромагнитных наноструктур. Число монослоев образца указано на вкладке. Сплошная линия — температурное поведение намагниченности в решении Онзагера

### Равновесие и критическое поле перемагничивания

В модели Изинга гамильтониан системы спинов Изинга, взаимодействующих с помощью прямого обмена, помещенных во внешнее магнитное поле, учитывает спин-спиновое взаимодействие между ближайшими соседями

$$H = -J \sum_{n, n_0} S_n S_{n+n_0} - h \sum_n S_n, \tag{2}$$

где  $n_0$  — номер вектора ближайших соседей кристаллического узла  $n$ . Статистическая сумма

$$Z_N(h, T) = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_n} \dots \sum_{S_N} \text{Exp} \left[ - \sum_{n, n_0} \frac{H}{kT} \right] \tag{3}$$

содержит информацию обо всех состояниях системы спинов. Вероятность выбранной реализации при температуре  $T$  и внешнем магнитном поле  $h$ , т. е. вероятность одной из  $2^N$  конфигураций определяет фактор Гиббса

$$P_i(h, T) = \frac{\text{Exp} \left[ - \sum_{n, n_0} \frac{H}{kT} \right]}{Z_N(h, T)}. \tag{4}$$

С точки зрения статистической физики, если система ферромагнитно взаимодействующих спинов (положительный обменный интеграл  $J$ ), описываемая с помощью гамильтониана (2), помещена во внешнее магнитное поле, совпадающее по знаку со спиновым избытком, при  $T=0$  она должна находиться в глобальном энергетическом минимуме, что соответствует магнитному состоянию полного упорядочения (ферромагнетизм), и вероятность этого события равна единице, согласно (4), где в знаменателе при предельном переходе можно оставить только главный член (главные члены) суммы, равный числителю. Мгновенная смена знака внешнего поля приведет к мгновенной смене знака спинового избытка для понижения энергии Зеемана и, следовательно, к переходу к симметричной конфигурации, так как в этом случае кратность вырождения наиболее вероятного (в этом случае основного) состояния системы равна двум. При конечной температуре  $T \neq 0$  и  $T < T_c$  изменение знака внешнего магнитного поля также

должно привести к обращению знака спинового избытка. Для бесконечного числа спинов  $N$  при конечной температуре существует неограниченное множество магнитных конфигураций, имеющих один и тот же спиновый избыток и одинаковую энергию, т. е. равную вероятность реализации. Изменение знака поля при  $T \neq 0$  и  $T < T_c$  должно привести к увеличению вероятности симметричных конфигураций с противоположным значением спинового избытка.

Широко известный алгоритм Метрополиса–Гастингса [Hastings,1970], а также другие имеющиеся в настоящее время методы Монте-Карло моделирования, часто используемые для достижения состояния равновесия, подразумевают, что движение системы в пространстве состояний аналогично марковскому процессу, где вероятность каждой последующей конфигурации зависит от предыдущей реализации:

$$P(E_0) \rightarrow P(E_1 \leq E_0) \rightarrow P(E_2 \leq E_1) \rightarrow \dots \rightarrow P(E_{q-1} \approx E_q). \quad (5)$$

Движение к равновесию в таком подходе осуществляется за счет последовательной смены конфигураций (5), обычно путем последовательных переворотов индивидуальных спинов, рисунок 3а, и для больших систем  $q \rightarrow \infty$ . Особенно выражен эффект критического замедления при  $T \rightarrow 0$ . Для ускорения получения равновесия полезно использовать схему параллельной независимой генерации конфигураций в нескольких вычислительных устройствах, где после сравнения энергии в качестве стартовой принимается конфигурация, энергия которой меньше либо равна энергии предыдущей конфигурации. Это позволяет существенно сократить время получения равновесия в исследуемых модельных системах спинов.

Для моделирования гистерезисных явлений в исследуемых монослойных образцах представимом подходе было введено критическое поле обращения спина  $h_s$ . Обращение направления микроскопического магнитного момента происходит при равенстве суммарной энергии парного взаимодействия спинов ближайшего окружения во внешнем магнитном поле и энергии спина в «поле анизотропии». Изменение направления спина зависит от значения поля переключения и температуры, рисунок 3б. Переход в состояние, соответствующее минимуму энергии, возможен только после преодоления потенциального барьера  $E_s$ .

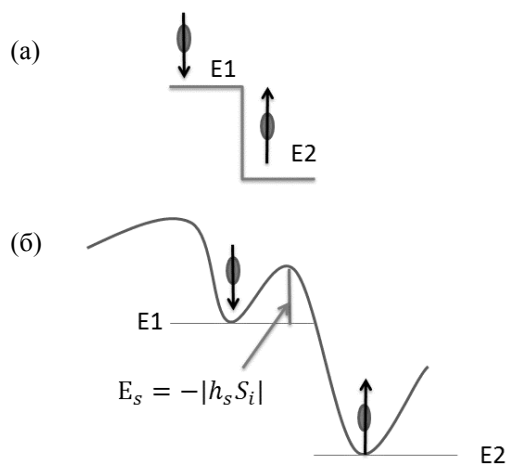


Рис. 3. Варианты перехода спина в состояние с минимумом энергии. (а) без учета поля переключения; (б) с учетом критического поля переключения

Авторский алгоритм моделирования системы спинов Изинга с учетом критического поля переключения состоит в следующем:

1. Рассчитывается энергия взаимодействия спина с его соседями в исходном положении  $E_1$  и в обращенном состоянии  $E_2$ .
2. Определяется вероятность преодоления энергетического барьера  $E_s$

$$p_s = \text{Exp} \left[ -\frac{|S_i h_s|}{kT} \right]. \quad (6)$$



3. Генерируется случайное число в интервале  $(0,1)$ , если оно попадает в интервал  $(0, p_s)$ , то энергетический барьер преодолен, в противном случае флуктуация не принимается.
4. Сравниваются  $E_1$  и  $E_2$ , если  $E_2 < E_1$  происходит переворот спина. В противном случае рассчитывается вероятность переворота  $p_f$ :

$$p_f = \begin{cases} 1, & \text{если } E_2 < E_1, \\ \text{Exp}\left[-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right], & \text{если } E_2 > E_1. \end{cases} \quad (7)$$

5. Генерируется случайное число из интервала  $(0,1)$ , если оно попадает в интервал  $(0, p_f)$ , принимается новая ориентация спина, в противном случае флуктуация не происходит.
6. Переход к следующему спину.

Критическое поле переключения — эффективное поле, поддерживающее направление спина. Для обращения направления вектора магнитного момента необходимо преодолеть энергетический барьер  $E_s$ . Эффективное поле переключения вводится для учета спин-орбитального взаимодействия, которое приводит к явлению анизотропии в макромасштабе. В ультрадисперсных материалах может наблюдаться разброс значений критических полей, так называемый коэрцитивный спектр. В компьютерной модели эпитаксиальной наноструктуры в используемом приближении все спины взаимодействуют с некоторым средним эффективным полем  $h_s$ , поддерживающим направление спина. Переориентация вектора микроскопического магнитного момента происходит при равенстве энергии Зеемана (энергии спина во внешнем поле) и его энергии в эффективном поле переключения. Вероятность переключения тем больше, чем больше температура, поскольку с ростом температуры увеличивается вероятность термодинамических флуктуаций, следовательно, увеличивается вероятность преодоления энергетического барьера, созданного эффективным полем переключения, и, соответственно, увеличивается вероятность покинуть локальный энергетический минимум. В нашей модели использовались следующие значения поля переключения для образцов с различным количеством монослоев: 1.5 ML — 2 г.у, 2.0 ML — 8 г.у, 2.5 ML — 4 г.у, 3.0 ML — 2 г.у. Данные значения поля переключения выбраны для обеспечения качественного согласия с экспериментом.

## Обращение намагниченности во внешнем магнитном поле

Практическая ценность предлагаемого метода также состоит в возможности моделирования изображений, полученных методом параллельного магнитооптического эффекта Керра (РМОКЕ), что позволяет наблюдать магнитные состояния поверхности наноструктуры, рисунок 4. Для моделирования РМОКЕ-изображений используется направление поверхностных спинов. В случае, если направление «вверх» — температура пикселя равнялась «256,256,256», спин вниз — «0,0,0», в модели RGB. Используемый подход к моделированию изображений позволяет исследовать процессы перемагничивания во внешнем магнитном поле.

Численное моделирование петель магнитного гистерезиса и полученные при исследовании разработанной модели данные о распределении намагниченности на поверхности суперпарамагнитных субмонослойных островковых пленок кобальта на меди позволяют провести исследования распределения вероятности магнитных конфигураций и определить траекторию системы в фазовом пространстве в процессе перемагничивания. Что может являться предметом дальнейших исследований.

## Заключение

В данной работе представлен метод компьютерной обработки экспериментальных пиксельных изображений квазидвумерной наноструктурной ферромагнитной пленки, полученных

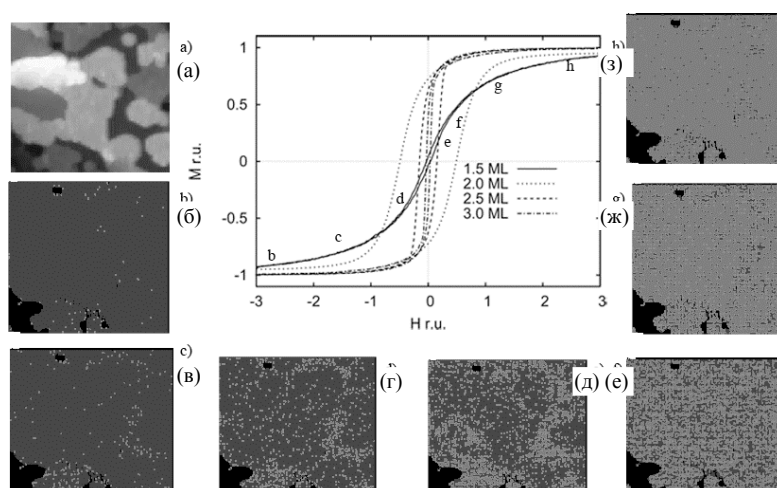


Рис. 4. Модельные петли гистерезиса для образцов от 1,5 ML до 3,5 ML [Ivanov, 2012]; (а) STM-изображение для 1.5 ML образца. (б)–(з) смоделированные РМОКЕ-изображения для образца в 1.5 ML

с помощью сканирующего туннельного микроскопа (атомно-силового микроскопа), а также метод параллельного моделирования Монте-Карло магнитных свойств нанокластерных магнетиков, моделирования явлений магнитного гистерезиса и процессов перемагничивания во внешнем магнитном поле.

Определены условия концентрационных фазовых переходов в ферромагнитное состояние при  $T = 0$ , вычислены критические концентрации  $p_c$ . Результаты моделирования наноструктур и теоретические оценки находятся в качественном согласии с экспериментом. Учет среднего эффективного поля переключения позволяет исследовать явление магнитного гистерезиса в эпитаксиальных магнитных наноструктурах.

## Список литературы

- Белоконь В. И., Нефедев К. В., Савунов М. А. Спиновое стекло с конечным радиусом взаимодействия в модели Изинга // *Физика твердого тела*. — 2006. — Т. 48. — С. 1746–1749.
- Беляев Б. А., Изотов А. В., Лексиков Ан. А. Микромагнитный расчет равновесного распределения магнитных моментов тонких пленок // *Физика твердого тела*. — 2010. — Т. 52. — С. 1549–1556.
- Ковтаниук А. Е. Алгоритмы параллельных вычислений для задач радиационно-кондуктивного теплообмена // *Компьютерные исследования и моделирование*. — 2012. — Т. 4. — С. 543–552.
- Никитенко Д. А., Стефанов К. С., Исследование эффективности параллельных программ по данным мониторинга // *Вычислительные методы и программирование*. — 2012. — Т. 13. — С. 97–102.
- Харитонский П. В., Фролов А. М. Моделирование магнитостатического взаимодействия в многослойных структурах // *Известия вузов, Физика*. — 2010. — №3/2. — С. 197–200.
- Харитонский П. В., Фролов А. М., Боев С. А. Моделирование межслойной магнитостатической энергии в нанокристаллических пленках // *Компьютерные исследования и моделирование*. — 2012. — Т. 4, № 1. — С. 85–90.
- Boeve H., Bruynseraede C., Das J., Dessein K., Borghs G., De Boeck J., Sousa R. C., Melo L. V., Freitas P. P. Technology assessment for the implementation of magnetoresistive elements with semiconductor components in magnetic random access memory (MRAM) architectures // *IEEE Trans. Magn.* — 1999. — Vol. 35. — P. 2820–2825.
- Daughton J. M. Magnetic tunneling applied to memory // *Journal of Applied Physics*. — 1997. — Vol. 81. — P. 3758–3764.
- Donahue M. J., Porter D. G. Interagency Report NISTIR 6376. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (1999).

- Engelmann C. and Geist G. A.* Super-scalable algorithms for computing on 100,000 processors // *Lecture Notes in Computer Science (LNCS). Proceedings of ICCS.* — 2005. — Vol. 3514. — P. 313–320.
- Gallagher W. J., Parkin S. S. P., Lu Yu, Bian X. P., Marley A., Roche K. P., Altman R. A., Rishton S. A., Jahnes C., Shaw T. M., Xiao Gang.* Microstructured magnetic tunnel junctions // *Journal of Applied Physics.* — 1997. — Vol. 81. — P. 3741–3747.
- Gelfand A. E. and Smith A. F. M.* Sampling Based Approaches to Calculating Marginal Densities // *Journal of the American Statistical Association.* — 1990. — Vol. 85. — P. 398–409.
- Geman S., Geman D.* Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions and the Bayesian Restoration of Images // *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence.* — 1984. — Vol. 6. — P. 721–741.
- Hastings W. K.* Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications // *Biometrika.* — 1970. — Vol. 57. — №1. — P. 97–109.
- Heroux M. A., Raghavan P., Simon H. D.* Parallel processing for scientific computing // *SIAM press.* — 2006. — P. 398.
- Huang F., Mankey G. J., Willis R. F.* Interfacial anisotropy and magnetic transition of cobalt films on Cu(111) // *Journal of Applied Physics.* — 1994. — Vol. 75. — P. 6406–6408.
- Ivanov Yu. P., Ilin A. I., Davydenko A. V., Zotov A. V.* Optimal Cu buffer layer thickness for growing epitaxial Co overlayers on Si(111) 7x7 // *Journal of Applied Physics.* — 2011. — Vol. 110. — P. 083505–083511.
- Ivanov Yu. P., Nefedev K. V., Ilin A. I., Kapitan V. Yu.* Ferromagnetism in epitaxial fcc Co films on Si(111)7x7 with Cu buffer layer // *Physics Procedia.* — 2012. — Vol. 23. — P. 128–131.
- Kovtanyuk A. E., Botkin N. D., Hoffmann K. H.* Numerical simulations of a coupled conductive-radiative heat transfer model using a modified Monte Carlo method // *Int. J. Heat and Mass Transfer.* Elsevier. — 2012. — Vol. 55. — P. 649–654.
- Kovtanyuk A. E., Nefedev K. V., Prokhorov I. V.* Advanced Computing Method for Solving of the Polarized-Radiation Transfer Equation // *Lecture Notes in Computer Sciences: Methods and Tools of Parallel Programming Multicomputers,* Springer. — 2010. — Vol. 6083. — P. 268–276.
- Melo L. V., Rodrigues L. M., Freitas P. P.* Novel spin-valve memory architecture // *IEEE Trans. Magn.* — 1997. — Vol. 33. — P. 3291–3295.
- Metropolis N. and Ulam S.* // *J. Amer. statistical assoc.* — 1949. — Vol. 44, no. 247. — P. 335–341.
- Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H., Teller E.* Equations of State Calculations by Fast Computing Machines // *Journal of Chemical Physics.* — 1953. — Vol. 21. — P. 1087–1091.
- Peretyatko A. A., Bogatyrev I. A., Kirienko Yu. V., Nefedev K. V., Belokon V. I.* Rigorous Calculation of the Partition Function for the Finite Number of Ising Spins // *The 4<sup>th</sup> International multi-conference on engineering and technological innovation, Proceedings IMETI-2011.* — 2011. — P. 83–86.
- Scholz W., Fidler J., Schrefl T., Suess D., Dittrich R., Forster H., Tsiantos V.* Scalable parallel micro-magnetic solvers for magnetic nanostructures // *Comp. Mater. Sci.* — 2003. — Vol. 28. — P. 366–383.
- Tehrani S., Chen E., Durlam M., Deherrera M., Slaughter J. M., Shi J., Kerszykowski G.* High density submicron magnetoresistive random access memory // *Journal of Applied Physics.* — 1999. — Vol. 85. — P. 5822–5827.
- Tehrani S., Slaughter J. M., Chen E., Durlam M., Shi J., DeHerrera M.* Progress and outlook for MRAM technology // *IEEE Trans. Magn.* — 1999. — Vol. 35. — P. 2814–2819.