

ИЗУЧЕНИЕ НОВЫХ МАГНИТНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ С ПОМОЩЬЮ КОГЕРЕНТНЫХ МАГНИТОДИНАМИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ*

А.Г. Деменев, *Пермский государственный национальный исследовательский университет*
 Т.С. Белозёрова, *Пермский государственный национальный исследовательский университет*
 Р.С. Пономарев, *Пермский государственный национальный исследовательский университет*
 У.О. Салгаева, *Пермский государственный национальный исследовательский университет*
 А.В. Сосунов, *Пермский государственный национальный исследовательский университет*
 П.В. Харебов, *Пермский государственный национальный исследовательский университет*
 В.К. Хеннер, *Пермский государственный национальный исследовательский университет*

Проведены экспериментальные исследования, направленные на получение и изучение магнитных свойств трехмерных графеновых наноболочек и биметаллических наноструктур. Разработан надежный и недорогой метод получения графеновых наноболочек. Обнаружено скачкообразное изменение направления вектора намагниченности в изученных образцах нанокompозита с биметаллическими частицами Co-Ag при наложении переменного магнитного поля. Показано, что перемагничивание происходит в довольно узком диапазоне величин намагничивающего поля. Теоретические исследования были направлены на разработку представлений о процессах коллективной магнитной релаксации, происходящих в различных типах наноструктур. Успешно применены суперкомпьютеры для изучения магнитодинамики в наноструктурах с помощью компьютерного моделирования. Получены оценки параллельного ускорения и эффективности распараллеливания кода Magnetodynamics-F на мультиядерных и многоядерных процессорах.

Ключевые слова: *наномагниты, молекулярные нанокристаллы, когерентное сверхизлучение, ферромагнитные наноточки, наноструктуры, намагниченность, математическое моделирование, высокопроизводительные вычисления, эффективность распараллеливания, многопоточность, векторизация.*

Цели проекта. Основная цель – исследование магнетизма в парамагнитных и ферромагнитных наноструктурах на основе когерентных магнитодинамических эффектов (КМЭ).

Методы и подходы, использованные в ходе выполнения проекта. В работе ис-

пользовались методы физического эксперимента и теоретического исследования, в т.ч. компьютерного моделирования. В экспериментальной части работы получены и изучены различные типы наноструктур, в т.ч. графеновые квантовые точки, наноленты, магнитные наноточки, маг-

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Пермского края (грант № 13-02-96018).

нитные нанопроволоки, биметаллические наночастицы. Был разработан надежный и недорогой метод получения графеновых наноболочек с заданным размером магнитных наночастиц и количеством графеновых слоев. Изучались методы синтеза магнитных материалов с включением ферромагнитных наноточек.

Для исследования коллективных процессов наномангнитов из пар металлов была выбрана пара металлов Co-Ag (кобальт и серебро), которые не растворяются друг в друге и на основе которых можно получать магнитные квантовые точки с нужными структурными и морфологическими параметрами. Тонкие пленки Co и Ag наносили на поверхность Si, используя метод магнетронного распыления при сверхвысоком вакууме (Ag (300 нм)/Co (5 нм)/SiO₂/Si). Такое сочетание металлов было выбрано, чтобы объединить плазмонный отклик серебра и ферромагнитные свойства кобальта. После осаждения биметаллической тонкой пленки ее облучали с помощью Nd-YAG импульсного лазера для создания термокапиллярного эффекта, инициирующего образование наноточек. Таким образом, был получен массив core-shell ферромагнитных наноточек. Облучение поверхности проводили на воздухе при нормальном падении луча на длине волны 532 нм, с шириной импульса – 2 нс и частотой повторений – 10 Гц. Средняя плотность энергии лазера составляла 80 мДж/см².

Исследование коллективного взаимодействия ферромагнитных наноточек Co-Ag осуществляли с помощью метода регистрации скачков электродвижущей силы (ЭДС) при наложении на объект исследования переменного магнитного поля. Выбрали метод из-за его высокой чувствительности к структурным изменениям образца, высокой точности при измерении ряда магнитных и электрических величин. Регистрацию скачков ЭДС осуществляли с помощью установки (рис. 1), в которой накладной электромагнит создавал магнитное поле в объеме образца с амплитудой 100 А/м. Частота переключения магнитно-

го поля составляла 50 Гц, направление приложенного магнитного поля совпадало с направлением оси исследуемых наноструктур. Перемагничивание в объеме образца было неоднородным.

При наличии более сильного взаимодействия между магнитными моментами ансамбля отдельных наноточек возникают кооперативные явления, ведущие к скачкообразному изменению ориентации векторов намагниченности при изменении направления внешнего магнитного поля. Как следствие, появляется возможность регистрации коллективного эффекта, связанного со значительным усилением магнитных взаимодействий между индивидуальными магнитными моментами наноточек в результате влияния на них внешнего магнитного поля. ЭДС возникает в катушке за счет изменения ориентации индивидуальных векторов намагниченности, которое индуцирует переменный ток в цепи. Магнитное поле, создаваемое этим током, действует на магнитные моменты, меняя свою динамику. Анализ полученного таким образом спектра наведенной ЭДС требует привлечения для его описания двух характеристик: 1) числа скачков ЭДС, приходящихся на единичный объем, участвующий в перемагничивании; 2) частотно-амплитудной характеристики спектра (частотного распределения наведенной ЭДС по амплитудам).

Основные трудности теоретического описания и компьютерного моделирова-

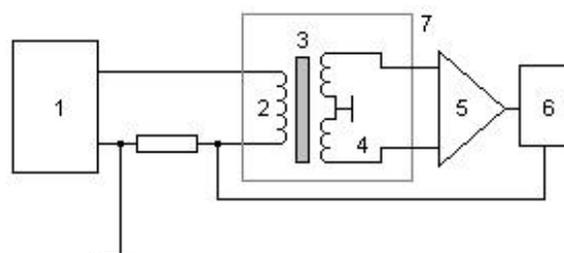


Рис. 1. Принципиальная схема прибора для наблюдения наведенной ЭДС. Цифрами обозначены: 1 – генератор пилообразного напряжения, 2 – намагничивающий соленоид, 3 – исследуемый образец, 4 – измерительная катушка (число витков – 1000), 5 – усилитель сигнала (коэффициент усиления – 1000), 6 – осциллограф, 7 – электромагнитный экран

ния поведения многоспиновых систем вытекают из необходимости реалистичного учета вклада межчастичных взаимодействий, связывающих все спины образца. Диагонализация точного квантового гамильтониана системы тысяч спинов чрезмерно вычислительно трудоемка, т.к. вычислительная сложность решения квантово-механической задачи растет экспоненциально с числом частиц. Поэтому рассматриваемые задачи многоспиновой динамики сводились к решению больших связанных систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

На основе квантового оператора Гамильтона строится классическая функция Гамильтона, получаемая в предельном переходе, где спин частицы S стремится к бесконечности, а постоянная Планка – к нулю, при этом их произведение остается конечным. Вычислительная сложность численного моделирования динамики такой системы прямо пропорциональна числу шагов интегрирования и квадрату числа классических спинов. Для моделирования мы использовали Fortran-программы, на основе много лет развиваемого нами программного кода Magnetodynamics-F. При интегрировании системы уравнений использовались явные схемы типа Рунге-Кутты, имеющие низкие требования к размеру оперативной памяти и допускающие эффективное распараллеливание. Величина допустимого максимального шага интегрирования определялась наиболее быстрой модой осцилляции, потому число таких шагов в расчетах обычно было очень большим.

Выбранные алгоритмы нами распараллеливались так, чтобы задействовать возможности многопоточной и векторной обработки данных в современных суперкомпьютерах. В качестве целевых вычислительных систем для компьютерного моделирования были выбраны наиболее перспективные (на тот период времени) суперкомпьютерные системы с гибридной архитектурой, имеющие двухsocketные вычислительные узлы с процессорами архитектуры Intel Xeon и высокопро-

изводительные графические ускорители архитектуры NVIDIA CUDA.

Для реализации распараллеливания были выбраны перспективные интерфейсы прикладного программирования OpenMP и OpenACC, поддерживающие выполнение параллельного кода на мультиядерных центральных процессорах с векторными расширениями и многоядерных графических ускорителях. При генерации машинного кода набора команд X86-64 с векторными расширениями (SSE4.x или AVX) для мультиядерных центральных процессоров Intel Xeon из OpenMP-версии исходного Fortran-кода использованы актуальные версии наборов оптимизирующих компиляторов Intel Fortran Compiler и PGI Fortran Server для операционной системы Linux. При генерации машинного кода набора команд PTX (Parallel Thread Execution) для мультиядерных графических процессоров NVIDIA CUDA (с Compute capability версий 2.x или 3.x) из OpenACC-версии исходного Fortran-кода использованы актуальные версии наборов оптимизирующих компиляторов PGI Accelerator Fortran для операционной системы Linux. Для запуска расчетов на суперкомпьютерах с разными менеджерами ресурсов (Torque и IBM Platform HPC) использованы соответствующие скрипты управления на языках описания заданий PBS и LSF.

Важнейшие результаты, полученные за отчетный период. Важнейшие результаты физического эксперимента для образцов с биметаллическими наночастицами представлены на рис. 2 и 3. На рис. 2 дано изображение морфологии массива ферромагнитных наноточек Co-Ag, полученных после термической лазерной обработки, и распределение их среднего размера.

В ферромагнитных наноточках Co-Ag, полученных методом термической лазерной обработки при 300 К, обнаружен кооперативный процесс скачкообразного изменения направления векторов намагниченности наноточек. Спектр скачков ЭДС характеризуется узким интервалом значений магнитного поля при перемагничивании, что свидетельствует о наличии неко-

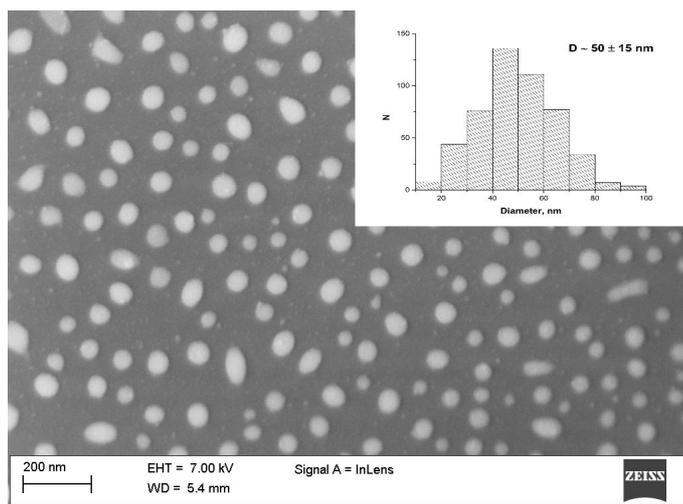


Рис. 2. Микроструктура ферромагнитных наноточек Co-Ag и распределение их среднего размера (на вставке)

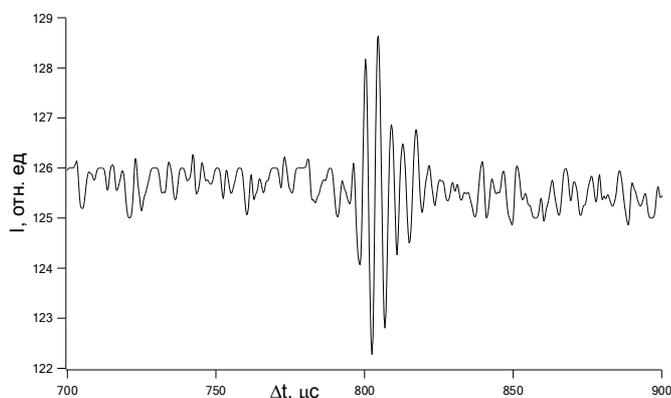


Рис. 3. Изменение намагниченности Co-Ag наноточек под действием внешнего магнитного поля. По оси абсцисс: время развертки действия магнитного поля

торого критического значения приложенного поля, при котором наблюдается скачкообразное изменение направления вектора намагниченности. На рис. 3 показано изменение во времени намагничивающего поля и отвечающее ему изменение ЭДС сигнала датчика для ферромагнитных наноточек Co-Ag. Число скачков наведенной ЭДС, приходящихся на единичный объем, участвующий в перемагничивании, равняется 10, а частота скачков наведенной ЭДС лежит в диапазоне от 200 до 300 кГц.

Важнейшие результаты теоретического исследования связаны с эффективным применением суперкомпьютерных технологий. Разрабатываемый авторский Fortran-код Magnetodynamics-F нами ус-

пешно апробирован при компьютерном моделировании, которое позволяет обеспечить верификацию результатов как теоретическую, так и в натуральных экспериментах, проводимых при участии членов проекта. Нами получены экспериментальные оценки достигаемого ускорения и эффективности распараллеливания при решении типичных задач магнитодинамики с помощью OpenMP-версии кода на мультиядерных процессорах Intel Xeon с векторными расширениями и OpenACC-версии на многоядерных ускорителях NVIDIA Tesla. Мы получили полуэмпирические формулы для оценки зависимости эффективности распараллеливания от числа вычислительных ядер при решении задачи с заданным числом спинов на мультиядерных процессо-

рах архитектуры Intel Xeon с векторными расширениями и на многоядерных ускорителях архитектуры NVIDIA CUDA.

Практическая значимость полученных результатов. Обнаруженный экспериментально кооперативный процесс скачкообразного изменения направления векторов намагниченности наноточек перспективен для использования в нанотехнологиях. Ферромагнитные наноточки, изготовленные путем комбинирования несмешивающихся металлов различных функциональных свойств, могут иметь потенциальное применение для биокатализа, биосенсоров, магнитооптических технологий, улучшения высокоскоростных оптических линий связи и устройств сбора энергии.

Успешно апробированный нами параллельный код Magnetodynamics-F может быть использован для ускоренного решения не только фундаментальных, но и прикладных задач на суперкомпьютерах.

Полученные нами полуэмпирические формулы для оценки эффективности распараллеливания помогут обоснованно выбирать экономически целесообразные (при решении задачи заданного размера) процессоры из числа доступных для использования; спрогнозировать необходимое машинное время для расчетов на выбранном процессоре при изменении числа моделируемых частиц в наноструктуре и числа шагов интегрирования.

Показано, что расчеты, требующие суммарно года машинного времени последовательного счета, могут быть ускоренно получены: в течение месяца – с использованием мультиядерных процессоров; в течение недели – с использованием

графических процессоров.

Показано, что распараллеливание вычислений позволяет увеличить на порядки диапазон размеров магнитных наноструктур и времен магнитодинамики, доступных исследователям для изучения за разумное время.

Дальнейшие перспективы научных исследований связаны с изучением влияния на кооперативные процессы перемагничивания наноструктур: разброса параметров магнитного материала в различных партиях; различных температур подсистем (спиновых, поляритонных, плазмонных, фононных и соответствующих взаимодействий); топологических и геометрических свойств образцов; формы сигналов управляющих магнитных воздействий. В дальнейшем предполагаются: постановка и решение новых задач компьютерного моделирования на суперкомпьютерах; оценка различных показателей эффективности распараллеливания и масштабируемости вычислений при использовании новейших суперкомпьютерных технологий.

Благодарим за предоставленное для физического эксперимента оборудование институт «The Institute for Advanced Materials and Renewable Energy» (IAM-RE) Университета Луисвилля (UoL), штат Кентукки, США. Работа выполнена с использованием высокопроизводительных ресурсов и сервисов Научно-образовательного центра «Параллельные и распределенные вычисления» Пермского государственного национального исследовательского университета, на оборудовании и специальном программном обеспечении, приобретенных по Программе развития ПГНИУ. Благодарим за предоставленные для компьютерного моделирования ресурсы суперкомпьютерных систем «ПГУ-Тесла» и «ПГНИУ-Тесла», с пиковой производительностью 9,0 и 21,5 терафлопс, и за услуги персонала в лице А.С. Белозерова, М.С. Моисеенкова, А.В. Полякова и В.В. Полякова.

Библиографический список

1. Kharebov P.V., Henner V.K., Yukalov V.I. Optimal conditions for magnetization reversal of nanocluster assemblies with random properties // Journal of Applied Physics. – 2013. – Vol. 113. – 043902. (<http://dx.doi.org/10.1063/1.4788766>).
2. Henner V.K., Desvaux H., Belozerova T.S., Marion D., Kharebov P.V., Klots A. Collective effects due to dipolar fields as the origin of the extremely random behavior in hyperpolarized NMR maser: A theoretical and numerical study // Journal of Chemical Physics. – 2013. – Vol. 139. – 144111. (<http://dx.doi.org/10.1063/1.4823823>).
3. Деменев А.Г., Белозерова Т.С., Харебов П.В., Хеннер В.К., Хеннер Е.К. Применение суперкомпьютеров для решения задач магнитодинамики и исследования когерентных процессов в наномангнитных структурах. Информационные технологии и вычислительные системы, Институт

- системного анализа РАН (Москва), ISSN:2071-8632. – 2014. – № 1. – С. 25–34. (http://www.isa.ru/jitcs/images/documents/2014-01/25_34.pdf).
4. Demenev A.G., Belozerova T.S., Kharebov P.V., Henner V.K., Henner E.K. GPU-accelerated modeling of coherent processes in magnetic nano-structures. GPU Technology Conference (GTC) March 24–27, 2014, San Jose, CA, USA. Abstract of the talk. (<http://on-demand-gtc.gputechconf.com/gtc-quicklink/fSzPzto>).
 5. Belozerova T.S., Demenev A.G., Henner V.K., Kharebov P.V., Khenner E.K., Sumanasekera G.U. Use of supercomputer for modeling coherent processes in magnetic nano-structures // Computational Materials Science. – 2015. – Vol. 102. – P. 228–233. (<http://dx.doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.02.013>).
 6. Сосунов А.В., Стивак Л.В., Хеннер В.К., Гамини С. Наведенная ЭДС при перемагничивании в биметаллическом нанокompозите Co-Ag // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2015. – Т. 12. – № 3. – С. 300–304.

INVESTIGATION OF NEW MAGNETIC NANOMATERIALS WITH COHERENT MAGNETODYNAMIC EFFECTS

A.G. Demenev, T.S. Belozerova, R.S. Ponomarev, U.O. Salgaeva,
A.V. Sosunov, P.V. Kharebov, V.K. Henner

Perm State National Research University

Experimental research, aimed at obtaining and studying the magnetic properties of three-dimensional graphene nanoshells and bimetallic nanostructures, has been performed. A reliable and inexpensive method of obtaining graphene nanoshells has been developed. An abrupt change in the direction of the magnetization vector has been detected in the studied nanocomposite samples with bimetallic particles of Co-Ag upon application of an alternating magnetic field. It is shown that magnetization reversal takes place in a fairly narrow range of values of the magnetizing field. Theoretical research was focused on the development of the processes of collective magnetic relaxation occurring in different types of nanostructures. We studied magnetodynamics in nanostructures successfully using computer simulation on supercomputers. The estimates of the parallel acceleration and parallelization efficiency of Magnetodynamics-F code on multi-core and many-core processors were obtained.

Keywords: nanomagnets, molecular nanocrystals, coherent superfluorescence, ferromagnetic nanodots, nanostructures, magnetisation, mathematical modeling, high performance computing, parallelization efficiency, multi-threading, vectorization.

Сведения об авторах

Деменев Алексей Геннадьевич, кандидат физико-математических наук, директор Научно-образовательного центра «Параллельные и распределенные вычисления», доцент кафедры прикладной математики и информатики механико-математического факультета, Пермский государственный национальный исследовательский университет (ПГНИУ), 614990, г. Пермь, ул. Букирева, 15; e-mail: a-demenev@mail.ru

Белозёрова Татьяна Сергеевна, кандидат физико-математических наук, ведущий программист Компьютерного центра механико-математического факультета, ПГНИУ; e-mail: tsbelozerova@yandex.ru

Пономарев Роман Сергеевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики твердого тела физического факультета, ПГНИУ; e-mail: kuperok2003@mail.ru

Салгаева Ульяна Олеговна, инженер научно-исследовательской части, ПГНИУ, e-mail: ulyanasalgaeva@yandex.ru

Сосунов Алексей Владимирович, аспирант кафедры физики твердого тела физического факультета, ПГНИУ; e-mail: alexeisosunov@gmail.com

Харёбов Петр Владимирович, кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры компьютерных систем и телекоммуникаций физического факультета, ПГНИУ; e-mail: kharebov.p@yandex.ru

Хеннер Виктор Карлович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики физического факультета, ПГНИУ; e-mail: vkhenner@yandex.ru

Материал поступил в редакцию 21.10.2016 г.