

磁各项异性计算教程

上周的文章中我们介绍了如何利用 MatCloud+ 计算磁性材料。然而在磁性材料的研究中，磁各项异性(MAE)是一个绕不开的话题，所谓 MAE 指的是材料在不同方向的磁场作用下，其磁化大小不同的性质，其中在相同外磁场作用下，磁化值最大的方向被称为易磁化方向，晶体中也被称为易磁化轴，简称易磁轴。

导致 MAE 的原因有很多，主要可以分为本征和非本征因素，自旋轨道耦合效应(SOC)是磁各项异性出现本征因素，而非本征因素较多，如材料的宏观形状、温度等等。MAE 在实验应用中十分重要，通过改变 MAE 可以改变材料的易磁化轴，从而改变电学器件中的电子输运性能，用这种输运性能的区别可以做出一系列自旋电子学器件。MAE 作为磁性研究的热点之一，第一性原理计算也能给出材料本征 MAE 的准确计算。本次笔者将以 MatCloud+ 平台为载体，详细介绍第一性原理计算 MAE 的方法步骤。

计算模型

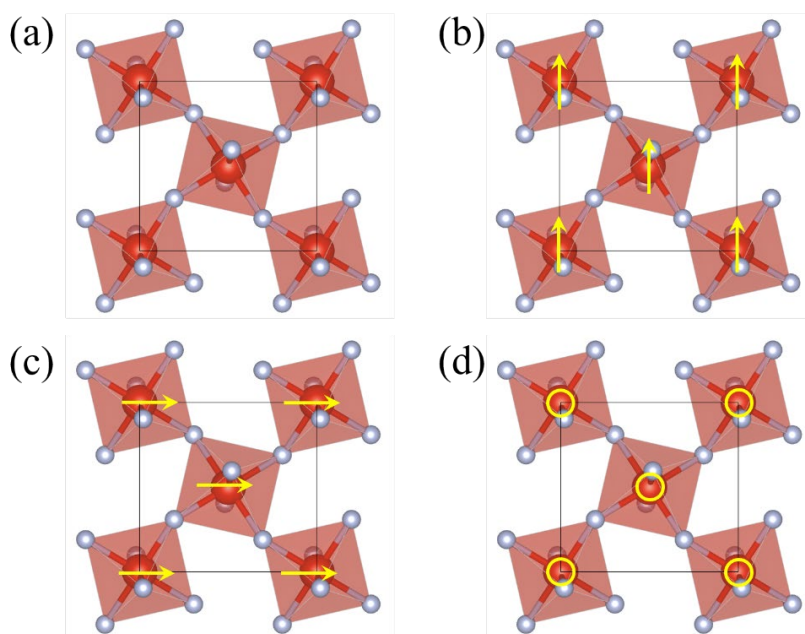


图 1 VF_4 晶体结构示意图(a); VF_4 晶体不同磁矩取向示意图(a)-(d)

本次依旧以前文提到过的 VF_4 结构为基础进行 MAE 计算。在之前的文章中，我们已经证明 VF_4 为反铁磁结构，但由于本次为教学目的，并非真正意义上的科研，因此我们将简化 VF_4 结构为铁磁结构，这样可以减少许多计算量，大家重复

起来也会更加容易。如图 1(a)所示,为单层 VF_4 晶体结构。其单胞由两个 V-F6 八面体构成。为了计算其结构的 MAE,我们将磁轴取向选择为 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 三个取向进行计算,其中 $[100]$ 、 $[010]$ 取向为面内取向, $[001]$ 为面外取向,如图 1(b)-(d)所示,黄色箭头方向为磁矩方向。由于三种磁轴取向的晶体结构是一致的,因此在“结构集”中,只需要导入一个优化好的 VF_4 单胞即可。

计算 MAE 参数设置

由于仅需要比较不同磁轴的能量,这里只需要完成静态计算即可(结构优化工作,这里只强调 MAE 计算,因此不再赘述结构优化的方法)。构建如图 2 所示的计算 workflow。

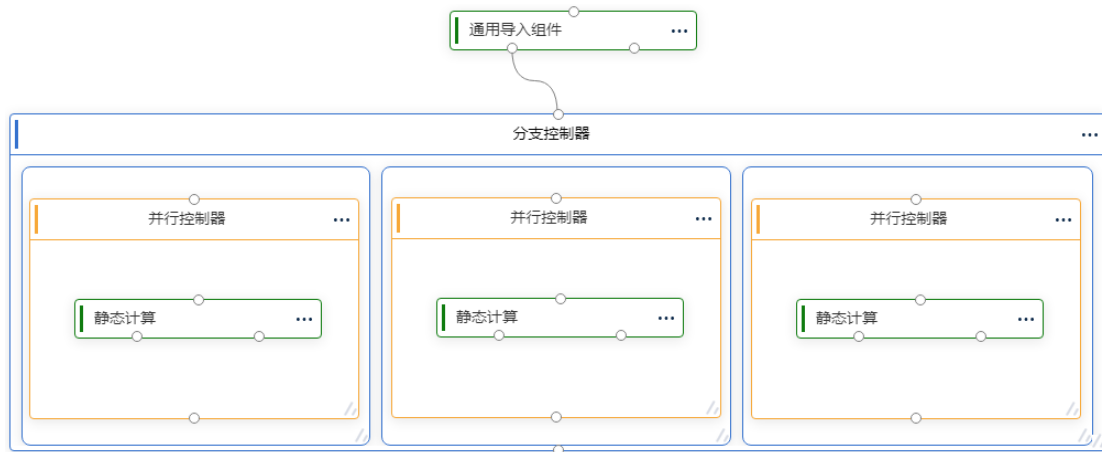


图 2 MAE 计算 workflow

注意, MAE 是一项精确度要求很高的计算工作,不同磁轴取向的结构通常差距只在 10^{-1} meV/atom 级,若计算精度不高,随机扰动就有可能让这一区别变得不可见。因此,我们通常需要设置较高的计算精度。在构建好 workflow 后,如图 3 所示,我们需要对静态计算中的参数进行修改:

在“General Setting”一栏中,如图 3:

- 将“Quality”设置为 Accurate,采用最高计算精度;
- 在“Energy Cutoff”栏中设置为 520 eV 或更高,保证对波函数描述的准确性;
- “Functional”栏不做修改,采用 GGA-PBE 的交换关联函数来描述 VF_4 晶胞是合适的。
- 注意,在“Spin Magnetism”栏中的设置至关重要,首先请开启 Spin Polarized 和 Magnetism 这两个参数,然后对 Magnetism 参数进行设置,这里的设置和之前计算铁磁序的设置有所不同,在 MAE 计算中,不仅要注意磁矩大小,

还需要注意磁矩方向。

- 方向通常用一个三维矢量表示，如 100，代表磁矩沿[100]晶轴排布，由于一个 VF₄ 单胞中，存在两个 V 原子，所以设置为“1 0 0 1 0 0”，而后的 F 原子不表现出磁性，每个 F 原子的磁矩均用 000 来表示，所以这里简写为 24*0，最终“Magnetism”参数设置为“1 0 0 1 0 0 24*0”用以代表磁矩方向延晶体[100]方向排布；当该参数设置为“0 1 0 0 1 0 24*0”则代表磁矩延晶体[010]方向排布；当参数设置为“0 0 1 0 0 1 24*0”则代表磁矩延晶体[001]方向排布，即面外方向。
- 在“Output”参数中，基于计算磁序中同样的原因，这里只打开 CHGCAR 参数。

The image shows a software interface for static calculations, titled "静态计算" (Static Calculation). It features several tabs: "General Setting" (selected), "SCF", "HPC", and "Customized". The interface is divided into several sections, each with a help icon (ⓘ):

- Quality:** A dropdown menu set to "Accurate".
- Energy Cutoff:** A text input field containing "520" with the unit "eV".
- Functional:** A dropdown menu set to "GGA", with "GGA-PBE" selected in a sub-menu. There is also a radio button for "Dispersion Correction".
- Pseudopotentials:** A dropdown menu set to "PAW-PBE", with a "More" button below it.
- Spin & Magnetism:** Two radio buttons are checked: "Spin Polarized" and "Magnetism". Below them is a text input field containing the vector "1 0 0 1 0 0 24*0".
- Strong correction:** A radio button for "LDA+U" is unchecked.
- Charge State:** A dropdown menu set to "Default".
- Output:** Three radio buttons are present: "WAVECAR" (unchecked), "CHGCAR" (checked), and "Bader Charge" (unchecked).

图 3 MAE 静态计算 “General Setting” 项参数设置

“SCF”项参数设置，如图 4 所示：

- 为提高计算精度，“SCF Tolerance”参数设置为 $1\text{E-}7\text{ eV}$ ，在“Max. SCF Cycles”参数中，设置为 100，一般来说是足够的，如果不放心可以放大到 200，即电子步迭代的最大步数。
- “Smearing Width”设置为 0.05，使计算对费米能级处的描述更加准确。
- “SCF K-Points”参数选择“Monkhorst-Pack mesh”并设置为“7 7 1”尽量增加计算精度，当然，如果计算资源有限“5 5 1”的 k 点设置一般来说也满足晶格参数为 5 的绝缘体晶体结构（金属结构需要更多的 k 点）。

The image shows a configuration window for VASP MAE static calculation. It is divided into several sections:

- Convergence Tolerance:** SCF Tolerance is 0.00001 eV/Atom, Max. SCF Cycles is 100, and Min. SCF Cycles is 2.
- Electronic Minimizer:** Blocked Davidson iteration scheme.
- Orbital Occupancy:** Smearing Method is Gaussian smearing, and Smearing Width is 0.05 eV.
- SCF K-Points:** Monkhorst-Pack mesh is selected, with a: 5, b: 5, and c: 1.

图 4 MAE 静态计算“SCF”项参数设置

“HPC”项参数设置，如图 5 所示：

- “VASP 程序调用”中的“VASP 指令”栏一定要选择 `vasp_ncl`，这非常重要，这代表开启 VASP 程序的自旋轨道耦合(SOC)计算,常规的 `vasp_std` 程序并不会考虑 SOC 效应。

The image shows a configuration window for VASP MAE static calculation, specifically the 'HPC' section:

- VASP程序调用:** vasp版本 is 5.4.4, and vasp指令 is vasp_ncl.

图 5 MAE 静态计算“HPC”项参数设置

在所有参数设置完成后，就可以点击“提交”按钮进行计算了。

数据后处理

计算完成后点击后处理即可得到如图 6 所示界面，在第一栏 Input Structure 中给出了结构信息，包括化学组成，空间群，晶格参数等。在 Energy and Convergence 栏里给出了总能大小和是否收敛。在下面还给出了各种输出文件的明细。我们对比三种磁矩方向的能量即可发现，其能量分别为-59.703668 eV，-59.703665 eV，以及-59.68834 eV，对比可知，当磁矩方向延[1 0 0]方向时能量最低，[0 0 1]方向为能量最高的方向。从结果中也不难看出，磁矩的方向对能量的影响并不大，通常都在 meV 量级，因此，一定要注意计算的精确度，这非常重要。

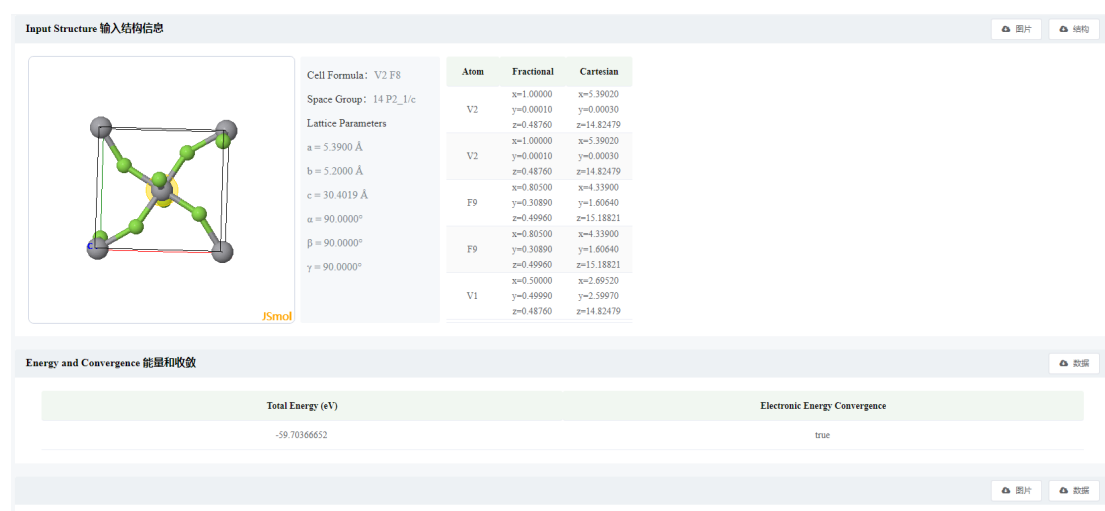


图 6 静态计算后处理界面图

结语

相比于传统 DFT 计算通常只能在 linux 平台下完成，MatCloud+平台表现出了明显的操作性优势，所有参数设置均模块化，图像化。在 MAE 这种高精度依赖性的计算中，优势更明显，由于参数可视化和模块化的存在，大大避免了传统计算中可能出现的参数设置错误而造成机时浪费的问题。在平台上操作，只需要根据计算所需内容，微调参数即可，在提高工作效率的同时，也减小了出错的概

率。

MatCloud+平台地址: <https://www.matcloudplus.com/>

更多 Matcloud+教程可关注 **b 站迈高科技**
更多动态请关注**迈高科技**微信公众号

