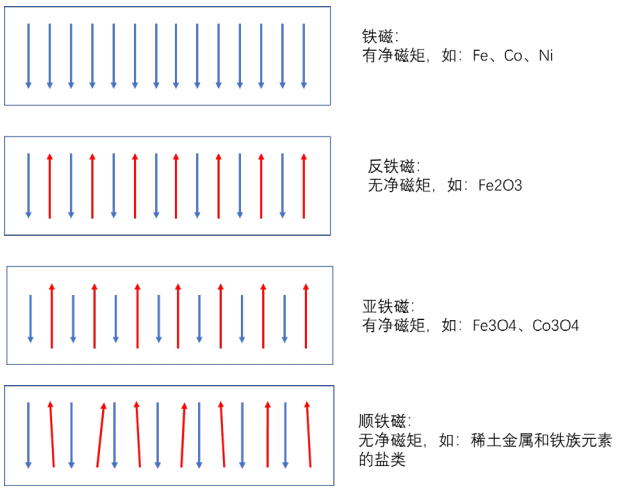
DFT 计算——磁性材料的计算方法

1、磁性材料简介

磁性材料指能对外部磁场产生某种反应的材料，常见的磁性材料有 Fe、Co、Ni 及其合金、稀土元素及其合金。

磁性材料可以根据磁性大小和磁矩方向分为：铁磁性材料、反铁磁材料、亚铁磁材料、顺磁材料，材料的具体磁性都是由电子自旋的贡献所产生的。不同磁性材料的电子自旋的排列方式展示如下：



2、磁性材料的 DFT 计算

不同于非铁磁性材料，在利用 DFT 计算其性质时需要增加以下两个参数：ISPIN 和 MAGMOM。这里需要注意的是 DFT 计算只能对计算体系整体设置总电荷。

(1) ISPIN

当需要考虑材料自旋极化产生的影响时需要设置 ISPIN=2，此时 alpha 和 beta 轨道会分开求解，同时计算所需的时间也是不考虑自旋极化时的一倍。

如果不确定体系是否受自旋极化的影响，可以先设置自旋极化进行计算，之后查看 OSZCAR 文件中的 mag 值。

(2) MAGMOM

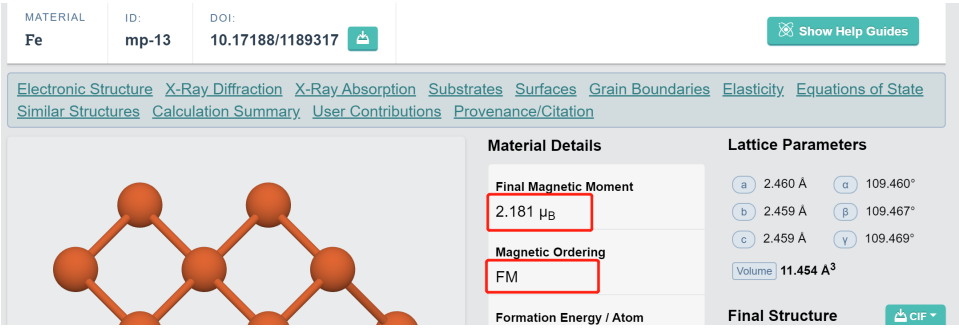
此参数用于对每个原子的初始磁矩进行初始设置。

其设置方法如下：

首先需要 POSCAR 结构源文件查看原子的排列顺序及个数，然后确定哪些原子有磁矩、磁矩是多少。例如原子顺序是：Co N C，而他们的个数分别是 1 2 3，Co 的磁矩是 2，N 和 C 没有磁矩。那：MAGMOM=1*2 2*0 3*0。

或者可以从进行自旋极化的 CHGCAR 或者 WAVECAR 中读取初始电荷密度。

那如何确定原子的磁矩呢？我们可以从 Material Projects 中获取，如 Fe



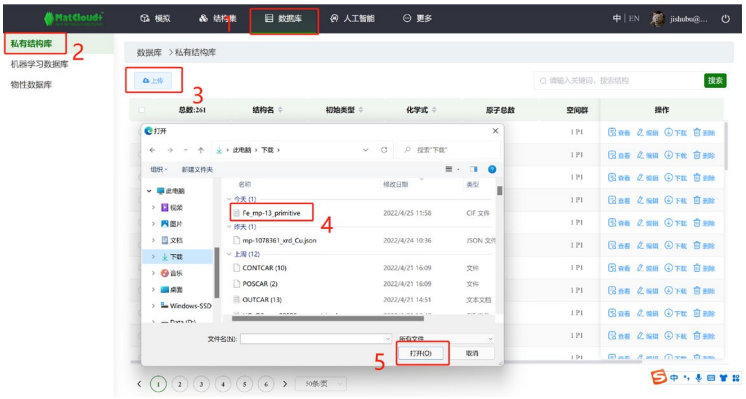
3、 如何在 MatCloud+平台中进行磁性材料的计算

MatCloud+作为国内首家正式上线的材料云计算平台，一直致力于为用户提供更加简便、高效、智能的计算方法。首创拖拽式编程、点选式参数设置方式降低了材料计算和材料数据机器学习的使用门槛，用户仅需要浏览器，就可以在线上开展材料计算和机器学习。

让科研人员更多精力用于材料研究和发现，而不是下载一大堆软件

MatCloud+让用户仅需浏览器 ，就可以开展材料计算， 无需下载任何软件。 下面为大家展示如何在 MatCloud+进行磁性材料的计算：

(1) 首先在 MatCloud+的数据库中将需要计算的结构上传。



(2) 在工作流页面搭建结构优化所需的工作流

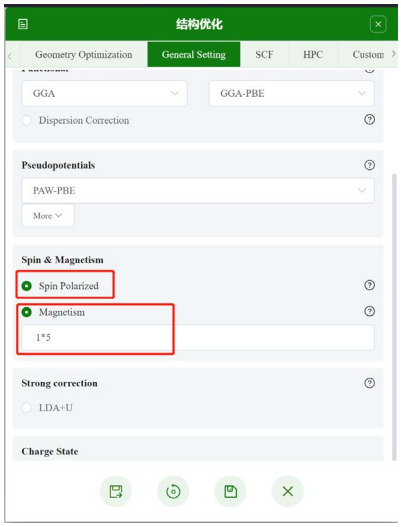
进入工作流搭建页面，在左侧组件处将【通用导入组件】和模拟中的 VASP【结构优化】组件拖拽到左侧空白处。

(3) 组件的参数设置

在【通用导入组件】中将要计算的结构用数据库中导入，然后点击保存。

【结构优化】组件需要在[General Setting]中将“Spin Polarized”打开，并且在“Magnetise”

处设置好每个原子的初猜磁矩。设置好之后点击下部的保存按钮即可。

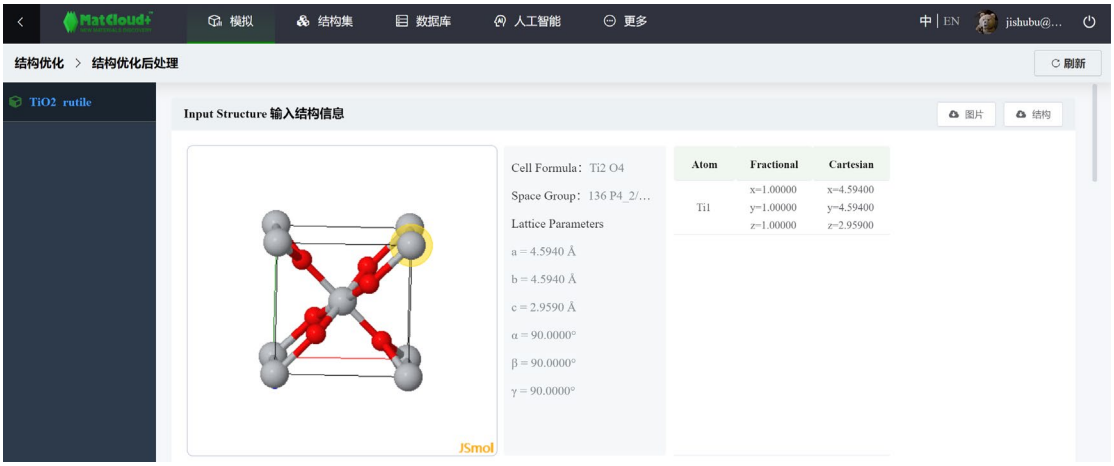


(4) 计算任务提交

不同于 Linux 下的任务提交，用户需要编写脚本调用软件包，然后输入命令提交计算。MatCloud+本身绑定有计算集群， 实现点击即可提交计算任务。

(5) 结果查看和在线可视化

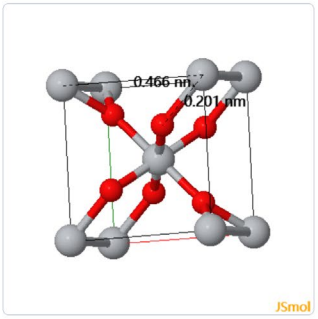
在计算完成后，MatCloud+将各个计算结果直接展示，无语自己进行后处理。对于【结构优化】组件，会直接将优化前后的结构给出，并支持在线查看结构、点击原子获取坐标信息等。



TiO2 rutile

Optimized Structure 优化结构信息

图片 结构



Cell Formula：Ti2 O4

Space Group：136 P4_2/…

Lattice Parameters

a = 4.6554 Å

b = 4.6554 Å

c = 2.9618 Å

α = 90.0000°

β = 90.0000°

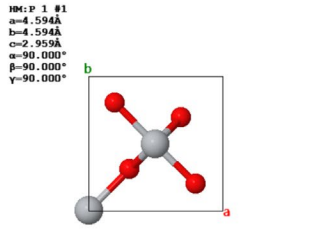
γ = 90.0000°

Atom	Fractional	Cartesian
Ti1	x=1.00000 y=1.00000 z=1.00000	x=4.65540 y=4.65540 z=2.96185

TiO2 rutile

Optimized Trajectory 结构优化轨迹

Frame number: 1 of 5



结构优化 > 结构优化后处理

刷新

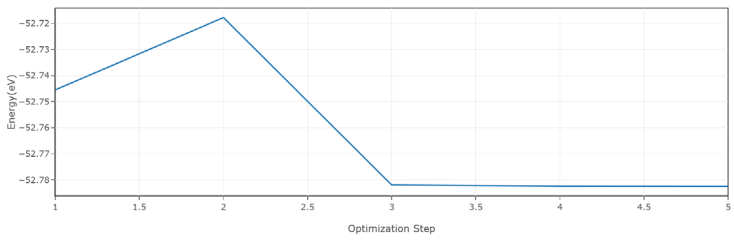
TiO2 rutile

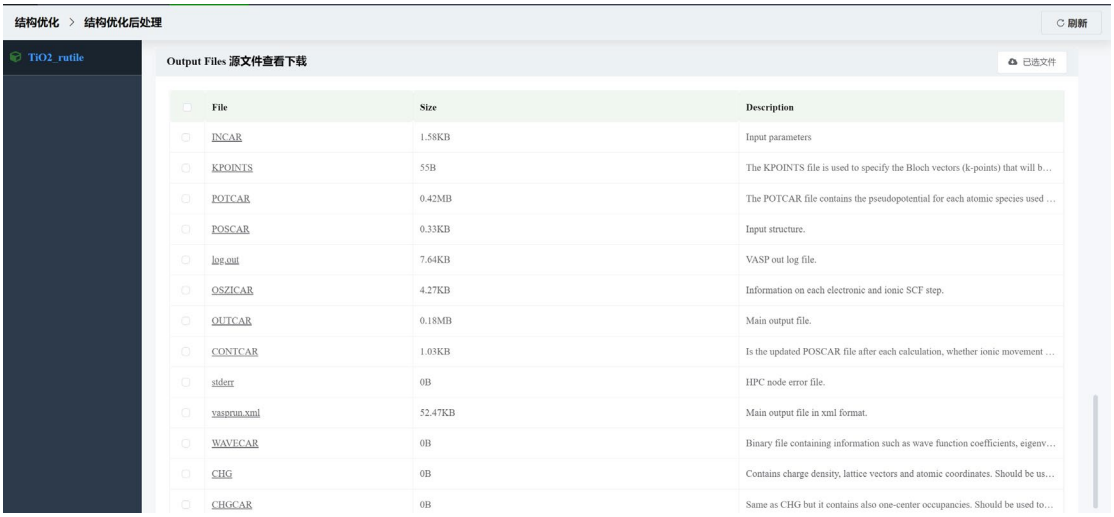
Convergency 收敛信息

数据

Electronic Convergence in Final Ionic Step	Ionic Convergence	Total Convergence
true	true	true

图片 数据





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**