

Суперкомпьютерное моделирование электронных свойств допированного гексаферрита стронция

А.А. Митрофанов, А.А. Елисеев

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова

Магнитотвердые гексагональные ферриты М-типа ($MFe_{12}O_{19}$, где $M=Ba, Sr$) широко применяются в промышленности, в частности для изготовления постоянных магнитов. Основной отличительной особенностью гексаферрита является высокая величина магнитокристаллической анизотропии, что обеспечивает высокую коэрцитивную силу данного материала. В последнее время значительно возрос интерес к наночастицам гексаферрита, что вызвано несколькими уникальными свойствами: анизотропная пластинчатая форма и значительный остаточный магнитный момент. Подобный набор свойств обеспечивает ряд перспективных применений материала: магнитные устройства записи высокой плотности, наноструктуры и нанокомпозиты [1], использующиеся в медицинских целях.

Магнитные свойства подобных соединений сильно коррелируют с характером допирования исходного состава гексаферрита различными металлами. Однако, метод проб и ошибок оказывается слишком трудоемким для экспериментальной оценки свойств и поиска состава с оптимальными свойствами. Выходом оказывается теоретическое моделирование материала [2,3], при помощи расчета электронной структуры наночастицы, связанной с ее геометрией, причем геометрия элементарной ячейки для наночастицы может отличаться от структуры характерной для объемного материала, что накладывает дополнительные ограничения на характер производимых расчетов. В первую очередь для предсказания магнитных свойств данного материала необходимо рассчитать искаженную геометрию элементарной ячейки.

Возможные отличия элементарной ячейки от объемного материала накладывают дополнительные ограничения на использование периодических граничных условий, что выливается в необходимость использования больших вычислительных ресурсов, причем не только в количестве используемых ядер, но и в объеме оперативной памяти на один поток параллельных вычислений.

В данной работе исследовались наночастицы гексаферритов стронция, допированные алюминием до состава $SrAlFe_{11}O_{19}$. Как видно из приведенной формулы замещение в данном случае осуществляется в позиции железо, что, очевидно, оказывает значительное влияние на магнитные свойства результирующего материала. С использованием суперкомпьютерного моделирования методами квантовой химии были рассчитаны пути преимущественного замещения железа на алюминий, получены атомные и электронные структуры получающихся наночастиц и энергии их образования. В работе показано использование сочетания полуэмпирических (MOPAC, PM7) и *ab initio* (ELK, PW; NWChem, DFT) методов квантовой химии для описания свойств наночастиц.ⁱ

Литература:

1. Scheunert, G., et al., A review of high magnetic moment thin films for microscale and nanotechnology applications // Applied Physics Reviews, 2016. Vol. 3, No. 1, P. 44-89.
2. Lusakowski, A., P. Boguslawski, and T. Story, DFT calculations of magnetic anisotropy energy of $Ge_{1-x}MnxTe$ ferromagnetic semiconductor // Journal of Physics-Condensed Matter, 2015. Vol. 27, No. 22, p. 12-24.
3. Illas, F., Ab initio computational models in materials science: A common playground for surface chemistry and solid-state physics // Chemical Engineering Communications, 2008. Vol. 195, No. 11, P. 1465-1476.

ⁱ Работа поддержана грантом РФФИ № 15-03-04277.ⁱ