

hashemifar@cc.iut.ac.ir :

(دریافت مقاله: ۱۳۹۱/۱/۱۷ ؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۱/۱۰/۳۰)

به عنوان ابزار مفیدی برای کنترل جریان‌های اسپین-قطبیده در نانو ساختارهای مغناطیسی بیشتر کرده است. یکی از روش‌های مرسوم برای محاسبه رسانش در رژیم پخشی، مدل نیمه کلاسیک بولتزمن است. اخیراً رسانایی ذاتی غیر عادی هال با استفاده از این مدل در تقریب زمان واهلش به زبان مدرن فاز بری و انحنا بری بیان شده است که در ادامه به آن می‌پردازیم.

در چارچوب نظریه نیمه کلاسیک بولتزمن، رسانایی غیر عادی هال از یک سرعت غیر عادی ناشی می‌شود. سرعت گروه یک بسته موج الکترون به صورت $v_n = \frac{1}{\hbar} \langle u_{nk} | \frac{\partial H}{\partial k} | u_{nk} \rangle$ تعریف می‌شود، که H هامیلتونی سیستم بلوری و u_{nk} قسمت دوره‌ای

اثر هال در مواد فرومغناطیس علاوه بر سهم عادی که ناشی از نیروی لورنتز و متناسب با میدان مغناطیسی خارجی است، شامل سهم دیگری ناشی از برهم‌کنش اسپین مدار و متناسب با مغناطش ذاتی ماده است که از آن به عنوان اثر ذاتی غیر عادی هال یاد می‌شود [۱]. یک سری اثرهای غیر ذاتی نیز وجود دارند که مربوط به پراکندگی‌های نامتقارن ناشی از برهم‌کنش اسپین مدار می‌باشند [۲ و ۳]. رسانایی غیر عادی هال می‌تواند به مقدار قابل توجهی بزرگتر از سهم عادی آن باشد و بنابراین در تعیین چگالی حامل‌ها در مواد فرومغناطیس مهم می‌شود. همچنین این اثر در حسگرهای مغناطیسی، دستگاه‌های حافظه و تحقیق خاصیت آهنربایی در مقیاس‌های نانو کاربرد دارد. پیشرفت‌های اخیر در اسپیترونیک علاقه به اثر غیر عادی هال را

$$\hbar \dot{k} = -eE - \frac{e}{c} v \times B \quad (5)$$

با ترکیب روابط (۳) و (۵) و جایگزینی رابطه حاصل در معادله (۴)، جملات مرتبه صفرم و اول چگالی جریان الکتریکی نسبت به میدان‌های خارجی به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$J_0 = \frac{-e}{(2\pi)^3} \sum_n \int f_n(k) v_n(k) dk, \quad (6)$$

$$J_1 = \frac{-e^2 \tau}{(2\pi)^3 \hbar} \sum_n \int \left(E + \frac{v \times B}{c} \right) \cdot \nabla_k f_n(k) v_n(k) dk. \quad (7)$$

در اثر عادی هال، سرعت $v_n(k)$ تنها شامل جمله $\partial \varepsilon_n / \partial k$ است که فرد بودن آن نسبت به k منجر به صفر شدن انتگرال رابطه (۶) و متعاقباً J_0 می‌شود. بنابراین برای محاسبه رسانندگی عادی هال باید از جملات مرتبه بالاتر J استفاده کرد. اما در مواردی که برهم‌کنش اسپین-مدار قابل اغماض نباشد سرعت $v_n(k)$ علاوه بر جمله $\partial \varepsilon_n / \partial k$ ، شامل $\dot{k} \times \Omega$ نیز هست که الزاماً تابع فردی از k نیست و بنابراین چگالی جریان غیرعادی هال تا مرتبه صفرم نسبت به میدان‌ها از رابطه (۶) به دست می‌آید. این واقعیت، به خودی خود، دلیل موجهی برای بزرگ بودن اثر غیرعادی هال نسبت به اثر عادی است.

اگر میدان الکتریکی اعمالی در جهت x فرض شود با توجه به رابطه $J_y = \sigma_{xy} E_x$ و همچنین رابطه (۶)، رسانایی ذاتی غیر عادی هال تا مرتبه صفرم نسبت به میدان‌ها به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\sigma_{xy} = \frac{-e^2}{(2\pi)^3 \hbar} \sum_n \int f_n(k) \Omega_{n,z}(k) dk, \quad (8)$$

تاکنون کارهایی در زمینه محاسبه رسانایی ذاتی غیر عادی هال با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن و مبتنی بر فرمول‌های کوبو انجام شده است [۵ و ۶] که توافق خوبی با نتایج تجربی داشته‌اند. این محاسبات، گواه بر تغییرات شدید انحنای بری در مواد فرومغناطیس و به‌ویژه وجود دره‌ها و قله‌های تیز برای آن در فضای وارون می‌باشد. بنابراین محاسبه آن و خصوصاً انتگرال‌گیری از این کمیت در فضای وارون نیاز به دقت بسیار بالایی (میلیون‌ها نقطه k در منطقه بریلوئن) دارد. اگر از روش‌های مبتنی بر توابع موج گسترده بلوخ برای محاسبه مستقیم ساختار الکترونی روی میلیون‌ها نقطه k استفاده شود،

تابع موج بلوخ الکترون است. در حضور میدان الکتریکی خارجی، هامیلتونی اختلال مربوطه به صورت $H = -eE \cdot r$ است. با جایگذاری این هامیلتونی در رابطه سرعت گروه، استفاده از معادله دینامیک حرکت در مدل نیمه کلاسیک $\hbar \dot{k} = -eE$ ، شکل عملگری بردار مکان $r = i \nabla_k$ و انجام کمی عملیات جبری، سرعت گروه بسته موج الکترون به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\dot{r}_n = v_n = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial k} - i \dot{k} \times \Omega_n \quad (1)$$

جمله دوم در رابطه فوق سرعت غیر عادی نام دارد که در آن انحنای بری Ω_n ، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\Omega_n = i \nabla_k \times \langle u_{nk} | \nabla_k u_{nk} \rangle \quad (2)$$

به سادگی می‌توان نشان داد که انحنای بری ناوردای پیمانه‌ای است و با توجه به رابطه فوق اگر پیمانه‌ای یافت شود که تابع موج در آن حقیقی باشد، انحنای بری صفر می‌شود. شکست تقارن وارونی زمانی در یک سیستم منجر به موهومی شدن توابع موج و بنابراین غیر صفر شدن انحنای بری می‌شود. برهم‌کنش اسپین-مدار در سیستم‌های نسیتی این امر را ممکن می‌سازد و منجر به یک رسانایی غیر عادی در این مواد می‌شود. برای بررسی اثر غیر عادی هال از تابع توزیع بولتزمن، $f_n(k)$ ، استفاده می‌کنیم که در دمای صفر و در غیاب میدان‌های خارجی بر تابع توزیع فرمی-دیراک منطبق است. اگر سیستم در اثر اعمال میدان‌های خارجی مختل شود تغییرات تابع توزیع بولتزمن در تقریب زمان واهلش و با فرض همگن بودن سیستم به صورت زیر بیان می‌شود [۴]:

$$f_n(k) = f_{0n}(k) - \tau \dot{k} \cdot \nabla_k f_n(k), \quad (3)$$

که در آن $f_{0n}(k)$ تابع توزیع فرمی-دیراک و τ زمان واهلش سیستم است. چگالی جریان الکترونی ناشی از توزیع اختلالی $f_n(k)$ از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$J = \frac{-e}{(2\pi)^3} \sum_n \int f_n(k) v_n(k) dk. \quad (4)$$

در حضور میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی خارجی ضعیف، دینامیک نیمه کلاسیک الکترون تحت نیروی لورنتس به صورت زیر بیان می‌شود:

هامیلتونی در هر نقطه دلخواه از فضای وارون باز تولید می‌شوند:

$$H_{nm}^{(w)}(k) = \sum_R e^{ik \cdot R} H_{nm}(R). \quad (13)$$

مزیت این روش برای محاسبه کمیت‌هایی مثل انحنای بری که به مش‌بندی فوق‌العاده ریز در منطقه بریلون نیاز دارند این است که با استفاده از ساختار الکترونی به دست آمده روی یک مش محدود در فضای وارون، توابع جایگزیده وانیر محاسبه می‌شوند و سپس با استفاده از آنها ساختار نواری در هر نقطه اختیاری k با دقت بالایی درونیابی می‌شود. به این ترتیب با حفظ دقت محاسبات، حجم و زمان مورد نیاز بسیار کاهش می‌یابد. علاوه بر این، همان گونه که در ادامه خواهیم دید، انحنای بری به مشتقات هامیلتونی در فضای وارون نیز بستگی دارد که طبق رابطه (۱۳) به صورت تحلیلی قابل محاسبه هستند.

قبلاً ذکر شد که توابع بلوخ چرخیده ویژه‌حالت‌های هامیلتونی نیستند و بنابراین ماتریس هامیلتونی در پایه آن‌ها باید قطری شود.

$$H^{(H)}(k) = U^+(k)H^{(w)}(k)U(k) \quad (14)$$

و ویژه توابع هامیلتونی از رابطه زیر به دست می‌آیند:

$$\left| u_{nq}^{(H)} \right\rangle = \sum_m \left| u_{mq}^{(w)} \right\rangle U_{mn}(q) \quad (15)$$

سایر کمیت‌ها از جمله انحنای بری باید در پایه این توابع نوشته شود. یک نوع پتانسیل برداری که انحنای بری از کرل آن به دست می‌آید، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$A_{nm,\alpha}^{(w)}(k) = -i \left\langle u_{nk}^{(w)} \left| \partial_\alpha u_{mk}^{(w)} \right. \right\rangle, \quad (16)$$

در پیمانه هامیلتونی داریم:

$$A_{nm,\alpha}^{(H)} = U^+ A_{nm,\alpha}^{(w)} U - i U^+ \partial_\alpha U. \quad (17)$$

با استفاده از قضیه اختلال مرتبه دوم می‌توان نوشت:

$$(U^+ \partial_\alpha U)_{nm} = D_{nm,\alpha}^{(H)} = \begin{cases} \frac{\bar{H}_{nm,\alpha}^{(H)}}{\epsilon_m^{(H)} - \epsilon_n^{(H)}}, & n \neq m \\ 0, & n = m \end{cases} \quad (18)$$

که در این رابطه داریم $\bar{H}_{nm,\alpha}^{(H)} = U^+ \frac{\partial H_{nm}^{(w)}}{\partial k_\alpha} U$

حجم محاسبات بسیار سنگین و زمان مورد نیاز بسیار طولانی می‌شود. یک راه حل کارا برای این مشکل، استفاده از توابع جایگزیده وانیر برای درونیابی نوارهای انرژی روی یک مش بسیار ریز از نقاط k است که در ادامه به این توابع می‌پردازیم.

توابع وانیر از تبدیل فوریه توابع بلوخ به دست می‌آیند:

$$w_n(r-R) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} \psi_{nk}(r) e^{-ik \cdot R} dk. \quad (9)$$

در رابطه فوق، $w_n(r-R)$ تابع وانیر مربوط به یاخته R و عدد کوانتمی مداری n و $\psi_{nk}(r)$ تابع موج بلوخ است. در سال ۱۹۹۷ مارزاریو واندریلت [۷] با اضافه کردن یک تبدیل یکانی به رابطه فوق، ایده توابع وانیر پیشینه جایگزیده را مطرح کردند و راهکاری را برای بهینه‌سازی این تبدیل یکانی در راستای هر چه بیشتر جایگزیده کردن توابع وانیر معرفی کردند. این تبدیل یکانی U_{nm} منجر به چرخش ویژه توابع بلوخ در فضای هیلبرت می‌شود:

$$\psi_{nk}^{(w)}(r) = \sum_m U_{nm} \psi_{mk}(r), \quad (10)$$

توابع بلوخ چرخیده $\psi_{nk}^{(w)}$ هر چند دیگر ویژه حالت‌های هامیلتونی نیستند، اما می‌توانند منجر به توابع وانیر جایگزیده-تری شوند که برای توصیف خواص تراپردی و درونیابی نواری مناسب‌تر هستند.

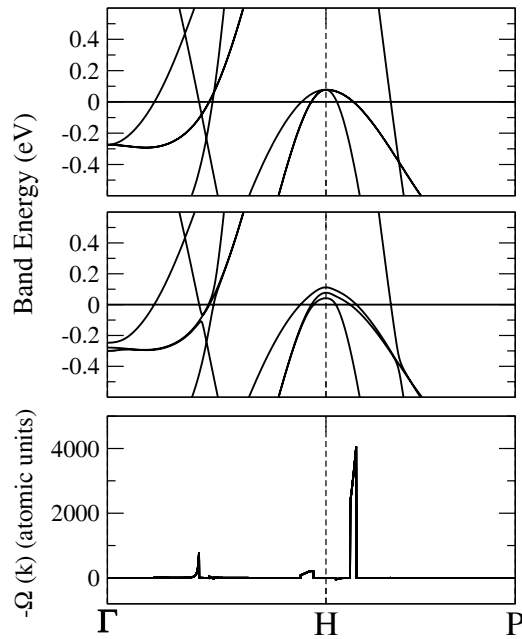
عناصر ماتریس هامیلتونی در پایه توابع بلوخ چرخیده روی نقاط q از یک مش محدود در فضای وارون به صورت زیر است:

$$H_{nm}^{(w)}(q) = \left\langle u_{nq}^{(w)} \left| \hat{H} \right| u_{mq}^{(w)} \right\rangle, \quad (11)$$

که در آن $u_{nq}^{(w)}$ قسمت دوره‌ای تابع موج بلوخ است. از تبدیل فوریه $H_{nm}^{(w)}(q)$ ، عناصر این ماتریس در پایه توابع وانیر به دست می‌آیند:

$$H_{nm}(R) = \frac{1}{N_0} \sum_q e^{-iq \cdot R} H_{nm}^{(w)}(q), \quad (12)$$

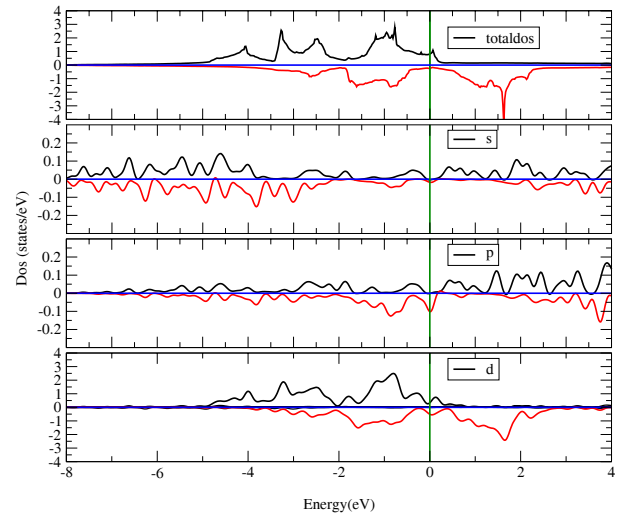
سپس با استفاده از یک تبدیل عکس فوریه، عناصر ماتریس



شکل ۲. منحنی ساختار نواری انبوهه آهن در غیاب برهم کنش اسپین مدار (نمودار بالایی) و منحنی ساختار نواری انبوهه آهن در حضور برهم کنش اسپین مدار (نمودار وسطی) و نمودار انحنای بری در واحد $(a.u.)^2$ (نمودار پایینی).

آهن با ساختار bcc یک فلز فرومغناطیس است و برهم کنش اسپین مدار در آن باعث شکسته شدن تقارن وارونی زمانی شده و یک انحنای بری غیر صفر به دست می آید. محاسبات اولیه توسط کد pwscf [۸] با استفاده از یک شبه پتانسیل کاملاً نسبیته (شامل تصحیح اسپین-مدار) و در تقریب GGA انجام شده است. در شکل ۱ چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اوربیتال‌های s, p, d برای انبوهه آهن رسم شده است. این شکل نشان‌دهنده هیبریدشدگی اوربیتال‌های مذکور در بازه‌هایی از انرژی است و این مسئله ما را در تعیین حدس‌های اولیه توابع وانیر به شکل sp^3d^2 هدایت می‌کند.

در شکل ۲ ساختار نواری انبوهه آهن در غیاب برهم کنش اسپین مدار (نمودار بالایی) و در حضور این برهم کنش (نمودار وسطی) رسم شده است. مقایسه دو نمودار دلالت بر شکافتگی‌های نواری کوچک در نقاطی همانند Γ, H و نقاطی در حد فاصل $\Gamma-H$ و $H-P$ ، که توسط برهم کنش اسپین مدار ایجاد شده‌اند، دارد.



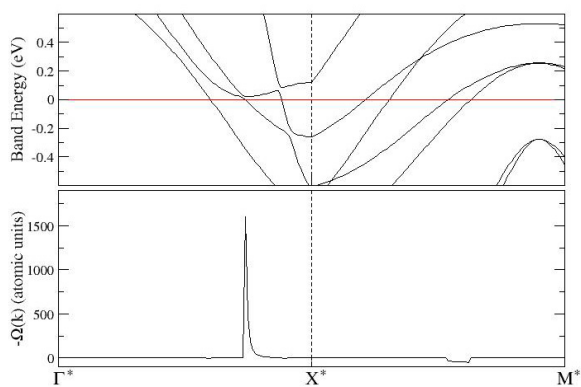
شکل ۱. منحنی چگالی حالت‌های کل انبوهه آهن و چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اوربیتال‌های s, p, d آهن. مقادیر مثبت و منفی DOS به ترتیب متناظر با اسپین بالا و پایین هستند. تراز فرمی بر صفر منطبق شده است.

به همین ترتیب برای انحنای بری کل نوارها در پیمانۀ

هامیلتونی داریم:

$$\Omega_{\alpha\beta}(k) = \sum_n f_n \bar{\Omega}_{nn,\alpha\beta} + \sum_{mn} (f_m - f_n) (D_{nm,\alpha}^{(H)} \bar{A}_{mn,\beta}^{(H)} - D_{nm,\beta}^{(H)} \bar{A}_{mn,\alpha}^{(H)} - i D_{nm,\alpha}^{(H)} D_{mn,\beta}^{(H)}) \quad (19)$$

f_n عدد اشغال نوارها و همان تابع توزیع فرمی دیراک است که در دمای صفر می‌توان آن را با تابع پله‌ای $\theta(\varepsilon_f - \varepsilon)$ جایگزین کرد. بنابراین $f_m - f_n$ هنگامی غیر صفر است که یکی از نوارهای m یا n پر و دیگری خالی باشد. این اتفاق حوالی سطح فرمی رخ می‌دهد. با توجه به روابط (۱۸) و (۱۹) پیش‌بینی می‌شود نقاطی از k که در آنها یک جدایی کوچک بین دو نوار انرژی پر و خالی اتفاق افتاده باشد، سهم اصلی را در انحنای بری دارند. با جایگذاری رابطه (۱۹) در رابطه (۸) رسانایی ذاتی غیر عادی هال برای ماده مورد نظر به دست می‌آید. ما محاسبات خود را بر روی انبوهه آهن با ساختار bcc و انبوهه کبالت با ساختار hcp انجام دادیم. نتایج محاسبات در قسمت بعد آورده شده است.



شکل ۴. نمودار ساختار نواری آلیاژ آهن و کبالت در حضور برهم کنش اسپین مدار (نمودار بالایی) و انحنای بری در واحد $(a.u.)^2$ (نمودار پایینی). نقاط Γ^* ، X^* و M^* همان نقاط Γ ، X و M در مسیر پرتقارن شبکه ساده‌اند که مختصات x ، z آنها به اندازه 0.5 جابه‌جا شده است.

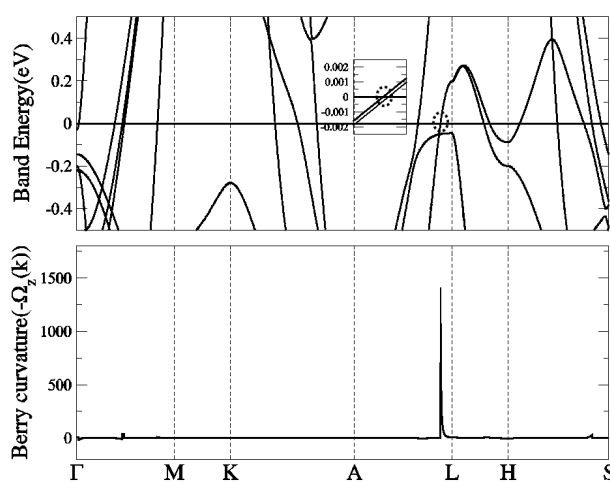
و انحنای بری مربوط به آلیاژ آهن و کبالت در شکل ۴ آورده شده است.

مقدار رسانایی ذاتی غیر عادی هال برای بلور کبالت $484 (\Omega \text{ cm})^{-1}$ و برای آلیاژ آهن و کبالت $780 (\Omega \text{ cm})^{-1}$ به دست آمد. نتایج در جدول ۱ مقایسه شده است.

بررسی و استخراج رسانش غیر عادی هال در چارچوب نظریهٔ ترابرد نیمه‌کلاسیک بولتزمن، نیاز به محاسبهٔ انحنای بری و مشتقات نوارهای انرژی دارد. نمودارهای به دست آمده برای انحنای بری، حاکی از تغییرات شدید و قلّه‌ها و دره‌های تیز برای این کمیت در فضای وارون است به گونه‌ای که انتگرال‌گیری از چنین کمیتی روی منطقهٔ اول بریلوئن، به منظور محاسبهٔ رسانایی، نیاز به یک مش بسیار چگال در فضای وارون دارد. بنابراین استفاده از توصیف‌های ساختار الکترونی مبتنی بر توابع گستردهٔ بلوخ برای استخراج رسانایی غیر عادی هال منجر به محاسبات سنگین و بسیار زمان‌بر می‌شود. توصیف مبتنی بر توابع جایگزیدهٔ وانیر، به دلیل تحلیلی بودن مشتقات انرژی در پایهٔ آنها و همچنین ارائهٔ رهیافتی برای درون‌یابی دقیق نوارهای انرژی روی مش‌بندی بسیار ریز در منطقهٔ اول بریلوئن، توصیف

جدول ۱. رسانایی غیر عادی هال در بلورهای آهن و کبالت در واحد $(\Omega \text{ cm})^{-1}$.

مراجع دیگر	تجربه	این کار	
[۷] ۷۵۱ [۹] ۷۶۴	[۷] ۱۰۳۲	۷۸۰	Fe
---	---	۲۸۰	FeCo
[۱۱] ۴۹۲	[۱۰] ۴۸۰	۴۸۴	Co



شکل ۳. نمودار ساختار نواری انبوههٔ کبالت در حضور برهم‌کنش اسپین مدار (نمودار بالایی) و انحنای بری در واحد $(a.u.)^2$ (نمودار پایینی).

نمودار پایینی در شکل ۲ انحنای بری کل نوارها را نشان می‌دهد. همان‌گونه که انتظار داشتیم، قلّه نمودار انحنای بری در محل شکافتگی ایجاد شده در نوار انرژی توسط برهم‌کنش اسپین مدار در نزدیکی سطح فرمی رخ می‌دهد. با محاسبات انجام شده در این کار، مقدار رسانایی ذاتی غیر عادی هال برای انبوههٔ آهن $780 (\Omega \text{ cm})^{-1}$ به دست آمد. در جدول ۱ این مقدار با نتایج تجربی و نتایج حاصل از محاسبات دیگران مقایسه شده است، که توافق نسبتاً خوبی را با مقدار تجربی نشان می‌دهد.

همچنین محاسبات را برای انبوههٔ کبالت با ساختار hcp و آلیاژ آهن و کبالت با ساختار sc نیز انجام دادیم. ساختار نواری مربوط به کبالت فرومغناطیس در حضور برهم‌کنش اسپین مدار و انحنای بری مربوط به آن در شکل ۳، همچنین ساختار نواری

تطابق نسبتاً خوبی را با نتایج تجربی نشان می‌دهد. با توجه به اینکه در محاسبات انجام شده، اثرهای غیر ذاتی ناشی از پراکندگی‌های نامتقارن اسپینی که در اثر جفت شدگی اسپین مدار به وجود می‌آید، در نظر گرفته نشده است می‌توان نتیجه گرفت عمدهٔ رسانش در حالت انبوهه، رسانش ذاتی است.

مناسبی است که منجر به کاهش حجم و زمان محاسبات لازم برای استخراج انحناهای بری و رسانایی غیر عادی هال می‌شود. در این کار با به کارگیری این روش، انحناهای بری و رسانایی ذاتی غیر عادی هال برای دو بلور آهن و کبالت روی یک مش چگال در فضای وارون محاسبه شدند و نتایج به دست آمده

8. P Giannozzi *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter* **21** (2009) 395502.
9. X Wang, J R Yates, I Souza, and D Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **74** (2006) 195118.
10. T Miyasato, N Abe, T Fujii, A Asamitsu, S Onoda, Y Onose, N Nagaosa, and Y Tokura, *Phys. Rev. Lett.* **99** (2007) 086602.
11. X Wang, D Vanderbilt, J R Yates, and I Souza, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 195109.

1. C M Hurd, “*The hall Effect in Metals and Alloys*” Plenum Press, New York (1972).
2. J Smit, *Physica* (Amsterdam) **24** (1958) 39.
3. L Berger, *Phys. Rev. B* **2** (1970) 4559.
4. G Grosso and G P Parravicini, “*Solid state physics*”, (2000).
5. Z Fang *et al.*, *Science* **302** (2003) 92.
6. Y Yao *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004) 037204.
7. N Marzari and D Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **65** (1997) 12874.