

z.torbatian@ph.iut.ac.ir :

(دریافت مقاله: ۱۳۹۰/۱۱/۲۶؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۱/۴/۴)

k

Al Ag Au Cu Li Pd Pb

هال باید رسانش دستگاه را در حضور و در غیاب میدان مغناطیسی محاسبه کرد. یکی از روش‌های مرسوم برای محاسبه رسانش در قلمرو پخشی، مدل نیمه کلاسیک بولتزمن است [۱] که همان طور که در ادامه خواهیم دید با به کارگیری آن، رسانش به انتگرال‌هایی روی سطح فرمی مربوط می‌شود. در فلزات به دلیل اینکه نوارهای انرژی نزدیک سطح فرمی کاملاً پر نیستند، انتگرال ده ناپیوسته می‌شود و انتگرال‌گیری روی ناحیه اول بریلوئن باید با دقت بیشتری نسبت به عایق‌ها صورت گیرد. علاوه بر این به دلیل ظاهر شدن مشتقات نواری (سرعت گروه و جرم مؤثر) در انتگرالده روابط رسانش، انجام محاسبات ساختار نواری با دقت بالا اهمیت مضاعفی پیدا می‌کند. بنابراین برای دستیابی به نوارهای انرژی، مشتقات مربوطه و انرژی فرمی، به یک سلول بندی بسیار ریز و دقیق در فضای وارون نیاز داریم. این امر منجر به افزایش چشمگیر زمان

خواص ترابرد الکترونی نظیر رسانش، اثر هال و اثرات ترمودینامیک در زمینه طراحی مواد از اهمیت ویژه‌ای برخوردارند. همچنین از اثر هال برای اندازه‌گیری مقاومت مغناطیسی مواد - مقاومت الکتریکی مواد در حضور میدان مغناطیسی - و نیز برای تعیین نوع و چگالی حامل‌ها استفاده می‌شود. برای محاسبه خواص ترابرد الکترونی، نیاز به توصیف فضای حقیقی از رفتار الکترون در بلور داریم. استفاده از توابع موج جایگزیده در فضای حقیقی باعث می‌شود که بتوانیم به هر الکترون یک بسته موج نسبت دهیم و حرکت آن را تحت اعمال میدان‌های مختلف بررسی کنیم. در حالی که توابع بلوخ که ابزار مناسبی برای توصیف فضای وارون از رفتار الکترون‌ها هستند، به دلیل گستردگی در کل بلور گزینه مناسبی برای بررسی خواص ترابرد الکترونی نیستند. برای محاسبه ضریب

شده (U_{nm}) منجر به چرخش ویژه توابع بلوخ در فضای هیلبرت می‌شود:

$$\psi'_{nk}(r) = \sum_m U_{nm} \psi_{mk}(r). \quad (2)$$

با وجود اینکه توابع بلوخ چرخیده (ψ'_{nk}) ویژه‌حالت هامیلتونی نیستند، ولی مطابق بر آنچه در ادامه توضیح خواهیم داد، به کمک آنها می‌توانیم توابع وانیر جایگزیده‌تری تولید کنیم که برای توصیف خواص تراپردی و درون‌یابی نواری مناسب‌تر می‌باشند.

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

$$H_{nm}(q) = \langle u'_{nq} | \hat{H}(q) | u'_{mq} \rangle, \quad (3)$$

که در آن u'_{nq} بخش تناوبی یک تابع بلوخ چرخیده است. با توجه به روابط (۱) و (۲)، با استفاده از تبدیل فوریه، عناصر ماتریس هامیلتونی در پایه توابع وانیر به دست می‌آیند:

$$H_{nm}(R) = \langle no | H | mR \rangle = \frac{1}{N_0} \sum_q e^{-iq \cdot R} H_{nm}(q), \quad (4)$$

که در آن N_0 تعداد نقاط روی مش‌بندی ناحیه بریلوئن می‌باشد. با توجه به این که عنصر ماتریسی $\langle nR' | H | mR \rangle$ تابعی از $(R - R')$ است، در محاسبه ماتریس هامیلتونی در پایه وانیر، یکی از توابع وانیر در مبدأ و دیگری در فاصله R از آن در نظر گرفته می‌شود. با توجه به جایگزیدگی توابع وانیر، عناصر ماتریس فوق با افزایش R به سرعت صفر می‌شوند و عملاً هم پوشانی توابع وانیر تا نزدیکترین همسایه قابل توجه و از همسایه دوم به بعد ناچیز است. این ویژگی قابلیت‌های کاربردی زیادی را به روش توابع وانیر بیشینه-جایگزیده داده است. قابلیت اول درون‌یابی نواری مبتنی بر توابع وانیر است، بدین صورت که می‌توان عنصر ماتریس هامیلتونی را در هر نقطه دلخواه از فضای K با دقت زیاد باز تولید کرد

$$H_{nm}(k) = \sum_R e^{ik \cdot R} H_{nm}(R). \quad (5)$$

با توجه به جایگزیدگی $H_{nm}(R)$ ها، با داشتن تعداد محدودی از آنها می‌توان ساختار الکترونی در هر نقطه دلخواه را با دقت بالا باز تولید کرد.

این ویژگی برای محاسباتی که به جزئیات ریز ساختار

محاسبات در رهیافت مبتنی بر توابع بلوخ می‌شود. به علاوه آنچه نهایتاً در این روش حاصل می‌شود مجموعه‌ای از ویژه مقادیر انرژی بر روی یک مش محدود از نقاط q در فضای وارون است که حاوی اطلاعات کافی در مورد نحوه تلاقی نوارها نمی‌باشد و درون‌یابی و مشتق‌گیری از نوارهای انرژی در نزدیکی نقاط تپه‌گن پر خطا و غیر معتبر است. برای رفع این مشکل می‌توان از توابع جایگزیده وانیر برای توصیف ساختار الکترونی استفاده کرد. درون‌یابی مبتنی بر توابع وانیر از دقت و سرعت بالایی برخوردار است و علاوه بر این مشتقات نواری در فرمالیزم وانیر شکل تحلیلی پیدا می‌کنند.

در این کار با استفاده از کدهای محاسباتی Pwscf [۲] و Wannier90 [۳] توابع وانیر بیشینه جایگزیده را برای انبوه فلزات مکعبی $Al, Ag, Au, Cu, Li, Pd, Pb$ استخراج نموده و سپس در راستای تکمیل کد Wannier90 جهت محاسبه ضریب عادی هال برنامه نویسی کردیم.

در قسمت اول این مقاله به تعریف توابع وانیر بیشینه-جایگزیده [۴] و [۵] و ویژگی‌های مفید آنها برای این کار می‌پردازیم و سپس رهیافت استخراج ضریب عادی هال با استفاده از معادلات نیمه کلاسیک بولتزمن ارائه می‌شود.

توابع وانیر از تبدیل فوریه توابع بلوخ به دست می‌آیند. هر تابع وانیر در یک یاخته واحد که با بردار R مشخص می‌شود، جایگزیده است و تنها دنباله‌ای از آن به سلول مجاور نفوذ می‌کند

$$w_n(r-R) = |Rn\rangle = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} \psi_{n,k}(r) e^{-ik \cdot R} d^3k. \quad (1)$$

در رابطه فوق $w_n(r-R)$ تابع وانیر مربوط به یاخته R ام و عدد کوانتومی مداری n ام، $\psi_{n,k}(r)$ تابع بلوخ، BZ نماد منطقه اول بریلوئن و V حجم بلور است. در سال ۱۹۹۷ مارزاری و اندریلیت [۶] با اضافه کردن یک تبدیل یکانی به رابطه فوق ایده توابع وانیر بیشینه-جایگزیده را مطرح کردند و راهکاری را برای بهینه سازی این تبدیل یکانی در راستای هر چه بیشتر جایگزیده کردن توابع وانیر معرفی کردند. تبدیل یکانی ارائه

نور و $\tau(k)$ زمان واهلش الکترون است. برای حل معادله (۸) تابع f را به صورت $f = f_0 + g(v)$ در نظر می‌گیریم که در آن $g(v)$ انحراف از حالت تعادل، در اثر اعمال میدان‌ها، را اندازه‌گیری می‌کند. در مواردی که میدان مغناطیسی اعمالی کوچک باشد حل معادله (۸) به یک سری بسط برای $g(v)$ منجر می‌شود [۸].

چگالی جریان الکترونی ناشی از توزیع اختلالی f_k به صورت زیر است:

$$J = \frac{-e}{V} \sum_k f_k v_k = \frac{-e}{V} \sum_k g(v) v_k \quad (9)$$

به دلیل این که v_k تابع فردی از k می‌باشد، f_0 در چگالی جریان سهمی ندارد. هنگامی که جملات مرتبه صفرم و اول $g(v)$ در معادله (۹) جایگذاری شود، چگالی جریان به جمله‌هایی از مرتبه اول و دوم از میدان‌ها محدود می‌شود. با در نظر گرفتن $J = (J_x, J_y, J_z)$ و $H = (H_x, H_y, H_z)$ می‌توان رابطه زیر را به صورت زیر نوشت:

$$J_x = \sigma_{xx} E_x + \sigma_{xy} E_y + \sigma_{xz} E_z \quad (10)$$

که در آن σ_{xx} و σ_{xy} به صورت زیر تعریف می‌شوند

$$\sigma_{xx} = q_e^2 \sum_n \int \frac{dk}{(2\pi)^3} \tau_{nk} v_{nk,x}^2 \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right), \quad (11)$$

$$\sigma_{xy} = q_e^2 H_z \sum_n \int \frac{dk}{(2\pi)^3} \tau_{nk}^2 \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) \times (v_{nk,x}^2 \mu_{nk,yy} - v_{nk,x} v_{nk,y} \mu_{nk,xy}). \quad (12)$$

در روابط بالا σ_{xx} رسانش معمولی الکتریکی در غیاب میدان مغناطیسی، و σ_{xy} رسانش هال در حضور میدان مغناطیسی، نامیده می‌شوند.

ضریب هال به صورت $R_H = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx} H}$ تعریف می‌شود. با توجه

به اینکه حجم میانگین هر نقطه در فضای وارون برابر $\frac{(2\pi)^3}{V}$ می‌باشد (V حجم بلور است) انتگرال‌گیری روی فضای وارون در رسانش معمولی و رسانش هال به صورت زیر به جمع روی نقاط k تبدیل می‌شود

$$\sigma_{xx} = \sigma_0 = \frac{1}{V} q_e^2 \sum_{n,k} \tau_{nk} v_{nk,x}^2 \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right), \quad (13)$$

نواری و سطح فرمی حساس هستند و به ساختار نواری روی یک شبکه بسیار ریز از نقاط k نیاز دارد، بسیار راه گشاست. در رهیافت وانیر، می‌توان ابتدا توابع وانیر را با استفاده از یک شبکه محدود از نقاط k با دقت خوبی تولید کرد و سپس با استفاده از درون‌یابی نواری، ساختار نواری را روی یک شبکه بسیار ریز با دقت و سرعت زیادی باز تولید کرد.

قابلیت دوم رهیافت وانیر امکان محاسبه تحلیلی مشتقات نواری با استفاده از رابطه (۵) است

$$\frac{\partial H_{nm}}{\partial k_\alpha} = H_{nm,\alpha}(k) = \sum_R e^{ik \cdot R} i R_\alpha H_{nm}(R), \quad (6)$$

$$\frac{\partial^2 H_{nm}}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} = H_{nm,\alpha\beta}(k) = \sum_R e^{ik \cdot R} (-R_\alpha R_\beta) H_{nm}(R). \quad (7)$$

در رابطه بالا α و β اندیس‌های شمارنده جهت‌های دکارتی (x, y, z) است.

این قابلیت در نزدیکی نقاط تبهگن اهمیت ویژه‌ای پیدا می‌کند، زیرا در این موارد مشتق‌گیری عددی و دیفرانسیلی مبهم و پر خطا می‌شود.

یکی از رهیافت‌های مرسوم برای محاسبه خواص ترابرد الکترونی در قلمرو پخشی روش نیمه‌کلاسیک است که در آن الکترون‌ها همانند ذرات کلاسیکی رفتار می‌کنند و مفاهیم کوانتومی تنها در استخراج رابطه بین انرژی و سرعت و نیز احتمال عبور و بازتاب از مرز مشترک‌ها به کار گرفته می‌شود. از تابع توزیع بولتزمن $f(r, k, t)$ که چگالی الکترون‌ها را در فضای فاز (r, k) و در زمان t مشخص می‌کند، برای توصیف ترابرد استفاده می‌شود. در غیاب میدان‌ها، تابع توزیع الکترونی به صورت تابع توزیع فرمی دیراک بیان می‌شود.

در یک دستگاه همگن در حضور یک میدان الکتریکی ضعیف و یک میدان مغناطیسی، در حالت پایا و در تقریب زمان واهلش، تغییرات تابع توزیع به صورت زیر معین می‌شود [۷]

$$\frac{e}{\hbar} \left[E + \frac{v \times H}{c} \right] \cdot \nabla_k f = -\frac{f - f_0}{\tau(k)}, \quad (8)$$

که در آن v بردار سرعت الکترون، H میدان مغناطیسی، c سرعت

جدول ۱. ضریب هال R_H برحسب $10^{-11} m^2 c^{-1}$ برای هفت فلز مکعبی به روش های مختلف. ستون اول ضریب هال محاسبه شده در چارچوب مدل الکترون آزاد را نشان می دهد.

	الکترون آزاد	این کار	مرجع [۱۲]	مرجع [۱]	تجربه [۸]
Al	-۳/۴	-۳/۳	-۲/۵	-۱/۷	-۳/۴
Pb	-۴/۷	-۱/۷	-	-۲/۴	-۰/۹
Cu	-۷/۳	-۴/۰	-۴/۹	-۵/۲	-۵/۲
Ag	-۱۰/۴	-۷/۵	-	-۸/۵	-۸/۸
Au	-۱۰/۵	-۷/۰	-	-۸/۱	-۷/۲
Pd	-۹/۱	-۱۵/۵	-۱۱/۹	-۱۷/۰	-۷/۶
Li	-۱۳/۲	-۱۰/۰	-۱۲/۷	-۱۲/۸	-۱۵/۰

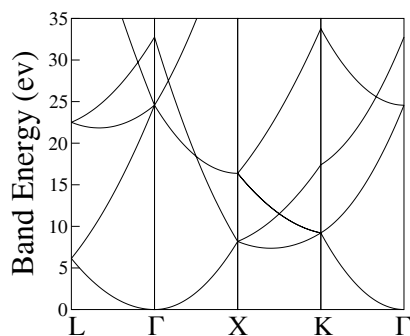
زمان واهلش به صورت توان دوم در رسانش هال σ_H و توان اول در رسانش معمولی σ_0 ظاهر می شود، بنابراین ضریب هال $R_H = \frac{\sigma_H}{\sigma_0^2}$ به مقدار زمان واهلش وابسته نمی باشد و تنها به توزیع $\tau(k)$ روی سطح فرمی (FS) وابسته است. اگر زمان واهلش $\tau(k)$ همسانگرد باشد ضریب هال مستقل از τ می باشد. برای یک سطح فرمی کروی، ضریب هال به فرمول آشنای $R_H^{free} = \frac{-1}{ne}$ برای الکترون های آزاد تبدیل می شود، که در آن n چگالی الکترون ها است. اثر ساختار نواری باعث انحراف ضریب هال از مقدار الکترون آزاد می شود. برای بررسی میزان صحت تقریب زمان واهلش در مورد فلزات مورد مطالعه، شکل سطح فرمی و ساختار نواری این فلزات را مورد بررسی قرار می دهیم. یکی از قابلیت های کد Wannier۹۰ محاسبه و رسم سطح فرمی روی یک مش بندی یکنواخت از فضای وارون است. میزان کروی بودن سطح فرمی می تواند معیاری از میزان صحت تقریب زمان واهلش همسانگرد باشد. همچنین مقایسه ساختار نواری هر فلز با ساختار نواری متناظر با الکترون آزاد در منطقه اول بریلوئن آن فلز، معیاری از صحت تقریب زمان واهلش به دست می دهد. برای رسم ساختار نواری متناظر با الکترون آزاد از رابطه آشنای $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ و نمایش کاهش یافته آن در منطقه اول بریلوئن استفاده کردیم. در ادامه فلزات مورد علاقه را به تفکیک بررسی می کنیم.

$$\sigma_{xyz} = \sigma_H = \frac{1}{V} q_e^2 \sum_{n,k} \tau_{nk}^2 \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) \times \left(v_{nk,x}^2 \mu_{nk,yy} - v_{nk,x} v_{nk,y} \mu_{nk,xy} \right). \quad (14)$$

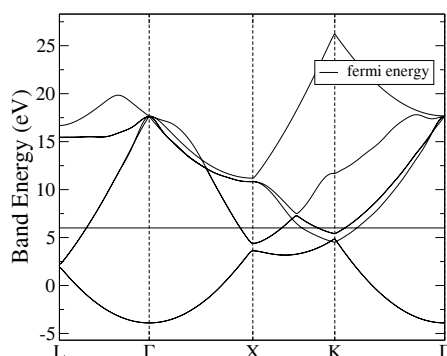
در تقریب زمان واهلش ثابت، با توجه به روابط (۱۳) و (۱۴)، ضریب هال مستقل از زمان واهلش می شود. در دمای پایین $\left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right)$ به صورت $\delta(\varepsilon - \varepsilon_f)$ بیان می شود. پس از تبدیل انتگرال به جمع روی نقاط، تابع دلتا با یک تابع نرمالیزه شده با پهنای غیر صفر نظیر تابع گاوسی، جایگزین می شود. در این کار تابع دلتا با تابع ماتفسل و پکستون [۹] جایگزین شده است.

نتایج مربوط به ضریب هال برای ۷ فلز مکعبی را در جدول ۱ آورده ایم که در همه آنها تقریب زمان واهلش همسانگرد به کار گرفته شده است.

همان طور که مشاهده می شود در فلزات Al, Cu, Ag و Au نتایج به دست آمده سازگار خوبی با نتایج تجربی دارند، در حالی که در موارد دیگر انحراف چشم گیری از مقادیر آزمایشگاهی مشاهده می شود. مسئله سازگاری یا ناسازگاری نتایج محاسباتی با آزمایشگاه ارتباط مستقیمی با تقریب زمان واهلش به کار رفته در نظریه نیمه کلاسیک دارد. به همین دلیل این موضوع را به طور مفصل تری بررسی می کنیم.

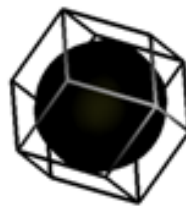


شکل ۲. توصیفی از نوارهای انرژی الکترون آزاد در مسیرهای تقارنی منطقه اول بریلوئن.



شکل ۳. توصیفی از نوارهای انرژی فلز آلومینیم در مسیرهای تقارنی منطقه اول بریلوئن که توسط کد Wannier90 محاسبه شده است.

انرژی آلومینیم در یک مسیر مشخص با نوارهای محاسبه شده برای الکترون آزاد در همان مسیر در شکل های ۲ و ۳ آورده شده است. در مورد فلز آلومینیم نواحی با مقادیر بالای انحنا وجود دارد ولی این انحناها با علامت های مخالف ظاهر می شود و اثر همدیگر را از بین می برند و این باعث می شود مقدار ضریب الکترون آزاد برای آلومینیم توافق خوبی با ضریب هال تجربی داشته باشد. حساسیت زیاد مقدار ضریب هال Al به مقدار ناهمسانگردی زمان واهلش در حضور ناخالصی و یا در دمای بالا در نتایج تجربی مشاهده شده است [۱۱]. اختلالات وارد شده باعث می شود مقدار ضریب هال افزایش یابد و به مقدار مثبت نیز می رسد که آن را می توان به تغییر زمان واهلش بر روی سطح فرمی مربوط کرد. بنابراین تقریب زمان واهلش همسانگرد برای فلزات نزدیک به الکترون آزاد تنها می تواند در یک محدوده معین معتبر باشد و می توان از این تقریب در دماهای پایین استفاده کرد [۱۲]. این بیان کننده این است که پراکندگی ها



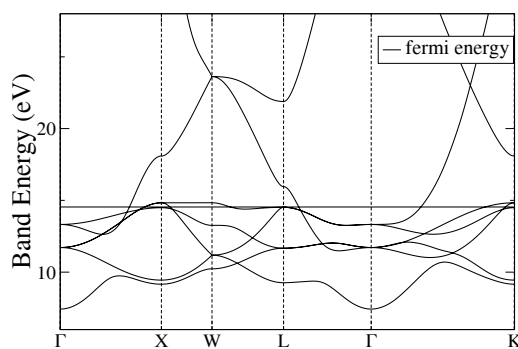
شکل ۱. سطح فرمی فلز لیتیم روی یک مش بندی یکنواخت که توسط کد Wannier90 محاسبه شده است.

همه فلزات قلیایی دارای ساختار bcc هستند و سطح فرمی آنها تقریباً کروی است و ضریب هال برای آنها نزدیک به ضریب هال الکترون های آزاد می باشد. به دلیل کروی بودن سطح فرمی، استفاده از زمان واهلش ناهمسانگرد اثر کوچکی روی ضریب هال فلزات این گروه می گذارد. ما از این گروه به مطالعه فلز Li پرداختیم. در شکل ۱ سطح فرمی مربوط به فلز لیتیم آورده شده است. با وجود کروی بودن سطح فرمی Li، ضریب هال به دست آمده برای این فلز در کار حاضر اختلاف چشم گیری با نتایج تجربی دارد. از آنجایی که فلز Li دارای اربیتال های غیرجایگزیده می باشد، بنابراین به نظر می رسد استفاده از توابع وانیر بیشینه جایگزیده برای این گروه از فلزات مناسب نمی باشد.

(Au Ag Cu)

فلزات نجیب به ویژه مس از فلزاتی هستند که بسیار مورد مطالعه قرار می گیرند. این فلزات دارای ساختار fcc هستند. نتایج ضریب هال الکترون آزاد آنها حدود ۳۰ درصد بزرگتر از مقدار تجربی است. مطالعاتی بر روی مس با در نظر گرفتن زمان واهلش ناهمسانگرد انجام شده است [۱۰]. در این راستا زمان واهلش در ناحیه گردنه τ_1 و در سایر نواحی τ_0 در نظر گرفته شده است. با تغییر τ_1 و محاسبه ضریب هال، نتایج نشان می دهند زمان واهلش ناهمسانگرد اثر کمی روی فلزات نجیب می گذارد. این نتیجه برای Al و Ag تأیید شده است.

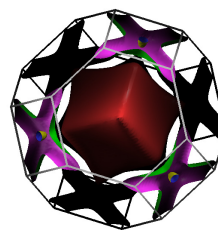
آلومینیم و سرب دارای ساختار fcc هستند و نمونه ای از الکترون آزاد می باشند. برای روشن شدن این مطلب نوارهای



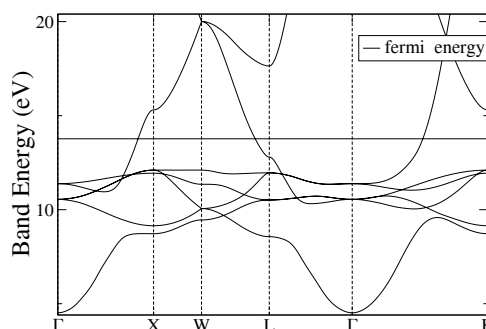
شکل ۶. توصیفی از نوارهای انرژی فلز پلادیم در مسیرهای تقارنی منطقه اول بریلوئن که توسط کد Wannier90 محاسبه شده است.

شده است. همچنین نوار انرژی فلز مس و فلز پلادیم در شکل های ۵ و ۶ آورده ایم. در مورد فلز مس سطح فرمی دور از نوارهای هیبرید شده قرار گرفته است در صورتی که در مورد فلز پلادیم نوار انرژی درون نوارهای هیبریدی قرار گرفته است و باعث می شود که این فلز سطح فرمی پیچیده ای داشته باشد.

به طور خلاصه می توان بیان کرد که ناهمسانگردی τ_k اثر کوچکی روی ضریب هال در فلزات قلیایی و فلزات نجیب می گذارد و این اثر برای Pd بزرگتر می باشد. مقدار ضریب هال محاسبه شده برای Pd اختلاف زیادی با تجربه نشان می دهد. با توجه به بحث انجام شده برای زمان واهلش، رفتن به تقریبی ماورای زمان واهلش ثابت، به ما کمک می کند تا توصیف بهتری از خواص تراپردی Pd داشته باشیم. تقریب زمان واهلش ثابت برای فلزات قلیایی مناسب به نظر می رسد، با این وجود مقدار به دست آمده برای Li اختلاف زیادی با مقدار تجربی نشان می دهد. توابع وانیر برای عنصرهایی که اربیتال جایگزیده ای دارند مناسب تر به نظر می رسد. بنابر نتایج به دست آمده برای فلزات نجیب، که اربیتال های جایگزیده ای d دارند نتایج بهتری به دست آمده است.



شکل ۴. سطح فرمی فلز پلادیم روی یک مش بندی یکنواخت که توسط کد Wannier90 محاسبه شده است.



شکل ۵. توصیفی از نوارهای انرژی فلز مس در مسیرهای تقارنی منطقه اول بریلوئن که توسط کد Wannier90 محاسبه شده است.

در دمای پایین به صورت همسانگرد انجام می شود. کمیت های خاصی نظیر سرعت روی سطح فرمی به مقادیر الکترون آزاد نزدیک می باشد ولی ضریب هال به انحنا سطح فرمی نیز بستگی دارد و این باعث می شود مقدار ضریب هال برای این گروه از مقدار الکترون آزاد منحرف شود.

(Pt Pd Ir Rh)

این چهار فلز دارای ساختار fcc می باشند. به علت اینکه این گروه سطح فرمی پیچیده تری نسبت به سایر فلزات بیان شده دارند، محاسبه ضریب هال برای آنها مشکل تر می باشد و تفاوت زیادی بین مقدار نظری و تجربی به وجود می آید. استفاده از تقریب زمان واهلش ناهمسانگرد باعث می شود که این اختلاف برداشته شود [۱۲]. در شکل ۴ سطح فرمی پلادیم آورده

3. <http://www.wannier.org/>
4. N Marzari, I Souza, and D Vanderbilt, *Scientific Highlight of the Month* 12 (2003) 129.

1. W Schulz, P B Allen, and N Trivedi, *Phy. Rev. B* 45 (1992) 10886.
2. <http://www.pwscf.org/>.

- plenum , New York (1972).
9. M Methfessel and I T Paxton, *Phys. Rev. B* **40** (1989) 3616.
 10. M J G Lee, *Phys. Rev. B* **2** (1970) 250.
 11. K Boning, K Pfander, P Rosner, and M Schluter, *J. Phys. F* **5** (1974) 1176.
 12. J R Yates, X Wang, D Vanderbilt, and I Souza *Phys. Rev. B* **75** (2007) 195121 .
 5. A A Mostofi, J R Yates, Y S Lee, I Souza, D Vanderbilt, and N Marzari, *Comput. Phys. Commun.* **178** (2008) 685.
 6. N Marzari, and D Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **65** (1997) 12874.
 7. G Grosso, “*Solid state physics*”, Academic Press (2000).
 8. C M Hurd, “*The hall effect in metals and alloys*”,