



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

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

Al Ag Au Cu Li Pd Pb

هال باید رسانش دستگاه را در حضور و در غیاب میدان مغناطیسی محاسبه کرد. یکی از روش های مرسوم برای محاسبهٔ 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 می شود. در فلزات به دلیل اینکه نوارهای انرژی نزدیک سطح فرمی کاملاً پر نیستند، انتگرال ده ناپیوسته می شود و انتگرالگیری روی ناحیهٔ اول بریلوئن باید با دقت بیشتری نسبت به عایق ها صورت گیرد. علاوه بر این به دلیل ظاهر شدن مشتقات نواری 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 اندازه گیری مقاومت مغناطیسی مواد – مقاومت الکتریکی مواد در حضور میدان مغناطیسی – و نیز برای تعیین نوع و چگالی حاملها استفاده میشود. برای محاسبهٔ 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 بستهٔ موج نسبت دهیم و حرکت آن را تحت اعمال میدانهای مختلف بررسی کنیم. در حالی که توابع بلوخ که ابزارمناسبی برای توصیف فضای وارون از رفتار الکترونها هستند، به دلیل گستردگی در کل بلور گزینهٔ مناسبی برای بررسی خواص ترابرد الکترونی نیستند. برای محاسبهٔ ضریب

محاسبات در رهیافت مبتنی بر توابع بلوخ می شود. به علاوه آنچه نهایتاً در این روش حاصل می شود مجموعه ای از ویژه مقادیر انرژی بر روی یک مش محدود از نقاط *p* در فضای وارون است که حاوی اطلاعات کافی در مورد نحوهٔ تلاقی نوارها نمی باشد و درونیابی و مشتق گیری از نوارهای انرژی در نزدیکی نقاط تبهگن پر خطا و غیر معتبر است. برای رفع این مشکل می توان از توابع جایگزیدهٔ 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 می کنند.

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

در قــسمت اول ایــن مقالــه بــه تعریـف توابـع وانیـر بیشینه-جایگزیده [۴ و ۵] و ویژگیهای مفید آنها برای این کـار میپردازیم و سپس رهیافت اسـتخراج ضـریب عـادی هـال بـا استفاده از معادلات نیمهکلاسیک بولتزمن ارائه می شود.

توابع وانیر از تبدیل فوریهٔ 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

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

در رابطهٔ فوق (r-R)  $w_n$  تابع وانیر مربوط به یاختهٔ Rام و عدد کوانتومی مداری n ام،  $(r)_{nk}(r)$  بلوخ، BZ نماد منطقهٔ اول بریلوئن و V حجم بلور است. در سال ۱۹۹۷ مارزاری و واندربیلت [۶] با اضافه کردن یک تبدیل یکانی به رابطهٔ فوق ایدهٔ 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

$$\psi_{nk}'(r) = \sum_{m} U_{nm} \psi_{mk}(r) . \tag{7}$$

با وجود اینکه توابع بلوخ چرخیده (  $\psi'_{nk}$ ) ویژهحالت هامیلتونی نیستند، ولی مطابق بر آنچه در ادامه توضیح خواهیم داد، به کمک آنها میتوانیم توابع وانیـر جایگزیـدهتـری تولیـد کنـیم کـه بـرای توصیف خواص ترابردی و درونیابی نواری مناسبتر میباشند.

عناصر ماتریس هامیلتونی در پایهٔ توابع بلوخ چرخیـده و روی نقاط یک مـش محـدود از نقـاط q در فـضای وارون بـه صورت زیر است

$$H_{nm}\left(q\right) = \left\langle u_{nq}' \left| \hat{H}\left(q\right) \right| u_{mq}' \right\rangle,\tag{(7)}$$

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:

$$H_{nm}(R) = < no \mid H \mid mR > = \frac{!}{N_{\circ}} \sum_{q} e^{-iq.R} H_{nm}(q), \quad (\mathfrak{f})$$

که در آن N تعداد نقاط روی مش بندی ناحیهٔ بریلوئن می باشد. با توجه به این که عنصر ماتریسی < nR | H | nR > تابعی از ('R-R) است، در محاسبه ماتریس هامیلتونی در پایه وانیر، یکی از توابع وانیر در مبدأ و دیگری در فاصلهٔ R از آن در نظر گرفته می شود. با توجه به جایگزیدگی توابع وانیر، عناصر ماتریس فوق با افرایش R به سرعت صفر می شوند وعملاً هم پوشانی توابع وانیر تا نزدیکترین همسایه قابل توجه و از همسایهٔ دوم به بعد ناچیز است. این ویژگی قابلیتهای کاربردی زیادی را به روش توابع وانیر بیشینه جایگزیده داده است. قابلیت اول درون یابی نواری مبتنی بر توابع وانیر است، بدین صورت که می توان عنصر ماتریس هامیلتونی را در هر بندین صورت که می توان عنصر ماتریس هامیلتونی را در هر نقطه دلخواه از فضای R با دقت زیاد باز تولید کرد

$$H_{nm}(k) = \sum_{R} e^{ik.R} H_{nm}(R).$$
 ( $\&$ )

با توجه به جایگزیدگی (H<sub>nm</sub>(R ها، با داشتن تعداد محدودی از آنها میتوان ساختار الکترونی در هر نقطهٔ دلخواه را با دقت بالا باز تولید کرد.

این ویژگی برای محاسباتی کـه بـه جزئیـات ریـز سـاختار

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

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

$$\frac{\partial H_{nm}}{\partial k_{\alpha}} = H_{nm,\alpha}(k) = \sum_{R} e^{ik.R} i R_{\alpha} H_{nm}(R), \qquad (9)$$

$$\frac{\partial^{\prime} H_{nm}}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}} = H_{nm,\alpha\beta}\left(k\right) = \sum_{R} e^{ik_{R}} (-R_{\alpha}R_{\beta}) H_{nm}\left(R\right). \quad (\forall)$$

در رابطه بالا ۵ و *β* اندیس های شمارندهٔ جهت های دکارتی (x,y,z) است.

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

یکی از رهیافت. ای مرسوم برای محاسبهٔ خواص ترابرد الکترونی در قلمرو پخشی روش نیمه کلاسیک است که در آن الکترون ها همانند ذرات کلاسیکی رفتار می کنند و مفاهیم کوانتومی تنها در استخراج رابطهٔ بین انرژی و سرعت و نیز احتمال عبور و بازتاب از مرز مشترکها به کار گرفته می شود. از تابع توزیع بولتزمن (r,k,t) که چگالی الکترون ها را در فضای فاز (r,k) و در زمان t مشخص می کند، برای توصیف ترابرد استفاده می شود. در غیاب میدان ها، تابع توزیع الکترونی به صورت تابع توزیع فرمی دیراک بیان می شود.

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 می شود [۷]

$$\frac{e}{\hbar} \left[ E + \frac{v \times H}{c} \right] \nabla_k f = -\frac{f - f_*}{\tau(k)} , \qquad (\Lambda)$$

 $_{\mathcal{D}_{\mathbf{b}}}$  در آن v بردار سرعت الکترون، H میدان مغناطیسی، c سرعت

نور و (k) زمان واهلش الکترون است. برای حل معادلـهٔ (h) تـابع f را به صـورت (v)  $f = f_* + g(v)$  در نظـر مـیگیـریم کـه در آن g(v) انحراف از حالت تعادل، در اثر اعمال میدانها، را اندازهگیـری میکند. در مواردی که میدان مغناطیسی اعمالی کوچـک باشـد حـل معادلهٔ (h) به یک سری بسط برای g(v) منجر میشود [h].

صورت زیر است:  $J = \frac{-e}{V} \sum_{k} f_{k} \quad v_{k} = \frac{-e}{V} \sum_{k} g(v) \quad v_{k} \quad (\mathbf{q})$ 

به دلیل این که k تابع فردی از k میباشد، f در چگالی جریان سهمی ندارد. هنگامی که جملات مرتبهٔ صفرم و اول (۷) در معادلهٔ (۹) جایگذاری شود، چگالی جریان به جملههایی از مرتبهٔ اول و دوم از میدانها محدود میشود. بیا در نظر گروه اول و دوم از میدانها محدود می شود.  $H = (0, 0, H_z) = J = (J_x, 0, 0) = H = 0$  $J_x = \sigma_{xx}E_x + \sigma_{xyz}E_yH_z$ 

که در آن  $\sigma_{xx}$  و  $\sigma_{xyz}$  به صورت زیر تعریف می شوند

$$\sigma_{xx} = q_e^{\tau} \sum_{n} \int \frac{dk}{(\tau \pi)^{\tau}} \tau_{nk} v_{nk,x}^{\tau} \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right), \qquad (11)$$
  
$$\sigma_{xyz} = q_e^{\tau} H_z \sum_{n} \int \frac{dk}{(\tau \pi)^{\tau}} \tau_{nk}^{\tau} \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right) \times \left(v_{nk,x}^{\tau} \mu_{nk,yy} - v_{nk,x} v_{nk,y} \mu_{nk,xy}\right). \qquad (11)$$

در روابط بالا  $\sigma_{xx}$  رسانش معمولی الکتریکی در غیاب میـدان مغناطیسی، و  $\sigma_{xyz}$  رسانش هال در حضور میـدان مغناطیـسی، نامیده میشوند.

م تعریف می شود. با توجه 
$$R_H = \frac{\sigma_H}{\sigma^{\gamma}}$$
 تعریف می شود. با توجه ضریب هال به صورت  $\frac{\sigma_H}{\sigma^{\gamma}}$  تعریف می شود. با توجه به اینکه حجم میانگین هر نقطه در فضای وارون برابر  $V$  می باشد ( $V$  حجم بلور است) انتگرالگیری روی فضای وارون در رسانش معمولی و رسانش هال به صورت زیر به جمع روی نقاط  $k$  تبدیل می شود

$$\sigma_{xx} = \sigma_{\circ} = \frac{1}{V} q_e^{\gamma} \sum_{n,k} \tau_{nk} v_{nk,x}^{\gamma} \left( -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right), \tag{17}$$

	الكترون آزاد	این کار	مرجع [۱۲]	مرجع [۱]	تجربه [٨]
Al	-٣/۴	$-\Upsilon/\Upsilon$	-۲/۵	-1/V	-٣/۴
Pb	- <b>۴</b> /V	-1/V	-	-7/4	- • / ٩
Cu	-V/٣	-¥/ •	-۴/۹	-۵/۲	$-\Delta/\gamma$
Ag	-1°/4	$-V/\Delta$	-	$-\Lambda/\Delta$	$-\Lambda/\Lambda$
Au	-1°/۵	-V/ ∘	-	$-\Lambda/\Lambda$	-V/Y
Pd	-٩/١	$-1\Delta/\Delta$	-11/9	- 1 V/ °	$-V/\hat{P}$
Li	-137/2	- \ • / •	-1Y/V	-17/A	-1Q/°

ستون اول ضریب هال محاسبه شـده در چـارچوب	کعبی به روش های مختلف.	۱۰ <sup>-۱۱</sup> m <sup>r</sup> c <sup>-۱</sup> برای هفت فلز مک	<b>جدول ۱</b> . ضریب هال R <sub>H</sub> برحسب
			مدل الکترون آزاد را نشان مر دهد.

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

در تقریب زمان واهلش ثابت، با توجه به روابط (۱۳) و (۱۴) ضریب هال مستقل از زمان واهلش می شود. در دمای پایین  $(\frac{\partial f}{\partial \varepsilon})$  به صورت  $(r_{\sigma} - \varepsilon) \delta$  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 جـدول ۱ آوردهایم که در همهٔ آنها تقریب زمان واهلش همسانگرد به کـار گرفته شده است.

همان طور که مشاهده می شود در فلزات Ag ، Cu ، Al 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. مسئلهٔ سازگاری یا ناسازگاری نتایج محاسباتی با آزمایشگاه ارتباط مستقیمی با تقریب زمان واهلش به کار رفته در نظریهٔ نیمه کلاسیک دارد. به همین دلیل این موضوع را به طور مفصل تری بررسی می کنیم.

زمان واهلش به صورت توان دوم در رسانش هـال  $\sigma_H$  و تـوان اول در رسانش معمولی  $\sigma_{\circ}$  ظاهر می شود، بنابراین ضریب هال به مقدار زمان واهلش وابسته نمیباشد و تنها به  $R_{H} = \frac{\sigma_{H}}{\sigma^{7}}$ توزيع (t(k) روى سطح فرمى (FS) وابسته است. اگر زمان *τ* واهلـش (*k*) همـسانگرد باشـد ضـريب هـال مـستقل از میباشد. برای یک سطح فرمی کروی، ضریب هال به فرمول آشنای  $\frac{1}{ne} = \frac{-1}{ne}$  برای الکترون های آزاد تبدیل می شود، کـه در آن n چگالی الکترونها است. اثر ساختار نواری باعث انحراف ضريب هال از مقدار الكترون آزاد مي شود. براي بررسي ميزان صحت تقريب زمان واهلش در مورد فلزات مورد مطالعه، شکل سطح فرمی و ساختار نواری این فلزات را مورد بررسی قرار میدهیم. یکی از قابلیتهای کـد •Wannier محاسبه و رسم سطح فرمی روی یک مشبندی یکنواخت ازفضای وارون است. میزان کروی بودن سطح فرمی میتواند معیاری از میـزان صحت تقريب زمان واهلش همسانگرد باشد. همچنين مقايسهٔ ساختار نواری هر فلز با ساختار نواری متناظر با الکترون آزاد در منطقهٔ اول بریلوئن آن فلز، معیاری از صحت تقریب زمان واهلش به دست میدهد. برای رسم ساختار نواری متناظر با الکترون آزاد از رابطـهٔ آشـنای  $\frac{\hbar^{Y}k^{Y}}{Ym}$  و نمـایش کـاهش يافتهٔ آن در منطقهٔ اول بريلوئن استفاده كرديم. در ادامـه فلـزات مورد علاقه را به تفکیک بررسی میکنیم.



**شکل ۱.** سطح فرمی فلز لیتیم روی یـک مـش بنـدی یکنواخـت کـه توسط کد •Wannier۹ محاسبه شده است.

همهٔ فلزات قلیایی دارای ساختار bcc هستند و سطح فرمی آنها تقریباً کروی است و ضریب هال برای آنها نزدیک به ضریب هال الکترونهای آزاد میباشد. به دلیل کروی بودن سطح فرمی، استفاده از زمان واهلش ناهمسانگرد اثر کوچکی روی ضریب هال فلزات این گروه میگذارد. ما از این گروه به مطالعهٔ فلز I پرداختیم. در شکل ۱ سطح فرمی مربوط به فلز لیتیم آورده شده است. با وجود کروی بودن سطح فرمی I ضریب هال به دست آمده برای این فلز در کار حاضر اختلاف چشم گیری با نتایج میباشد، بنابراین به نظر می رسد استفاده از توابع وانیر بیشینه میباشد، بنابراین به نظر می رسد استفاده از توابع وانیر بیشینه جایگزیده برای این گروه از فلزات مناسب نمیباشد.

## (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 ناحیهٔ گردنه ۲۱ و در سایر نواحی ت در نظر گرفته شده است. با تغییر ۲۱ و محاسبهٔ ضریب هال، نتایج نشان می دهند زمان واهلش ناهمسانگرد اثر کمی روی فلزات نجیب می گذارد. این نتیجه برای AI و Ag تأیید شده است.

آلـومینیم و سـرب دارای سـاختار fcc هـستند و نمونـهای از الکترون آزاد میباشند. برای روشن شدن ایـن مطلـب نوارهـای



منطقهٔ اول بريلوئن.



**شکل ۳**. توصیفی از نوارهای انرژی فلز آلومینیم در مسیرهای تقارنی منطقهٔ اول بریلوئن که توسط کد •Wannier محاسبه شده است.

انرژی آلومینیم در یک مسیر مشخص با نوارهای محاسبه شده برای الکترون آزاد در همان مسیر در شکلهای ۲ و ۳ آورده شده است. در مورد فلز آلومینیم نواحی با مقادیر بالای انحنا وجود دارد ولی این انحناها با علامتهای 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 ۲۹ به مقدار داشته باشد. حساسیت زیاد مقدار ضریب هال ۸۱ به مقدار ناهمسانگردی زمان واهلش در حضور ناخالصی و یا در دمای بالا باعث می شود مقدار ضریب هال افزایش یابد و به مقدار مثبت نیز فرمی مربوط کرد. بنابراین تقریب زمان واهلش همسانگرد فرمی مربوط کرد. بنابراین تقریب زمان واهلش همسانگرد برای فلزات نزدیک به الکترون آزاد تنها می تواند در یک محدودهٔ استفاده کرد [۲]. این بیان کنندهٔ این است که پراکندگی ها

شکل ۴. سطح فرمی فلز پلادیم روی یک مش بنـدی یکنواخـت کـه توسط کد Wannier۹۰ محاسبه شده است.



منطقهٔ اول بریلوئن که توسط کد Wannier90 محاسبه شده است.

در دمای پایین به صورت همسانگرد انجام میشود. کمیت های خاصی نظیر سرعت روی سطح فرمی بے مقادیر الکترون آزاد نزدیک میباشد ولی ضریب هال بـه انحنـای سـطح فرمـی نیـز 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، محاسبة ضريب هال براي آنها مشكل تر مي باشد و تفاوت زیادی بین مقدار نظری و تجربی به وجود میآید. استفاده از تقريب زمان واهلش ناهمسانگرد باعث می شود که این اختلاف برداشته شود [١٢]. در شکل ۴ سطح فرمی پلادیم آورده



- 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, Phv. Rev. B 45 (1992) 10886.
- 2. http://www.pwscf.org/.



منطقة اول بريلوئن كه توسط كد Wannier90 محاسبه شده است.

شده است. همچنین نوار انرژی فلز مس و فلز یلادیم در شکلهای ۵ و ۶ آوردهایم. 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 پیچیدهای داشته باشد.

به طور خلاصه می توان بیان کرد که ناهم سانگردی  $au_k$  اثـر

کوچکی روی ضریب هال در فلـزات قلیـایی و فلـزات نجیـب

می گذارد و این اثر برای Pd بزرگتر میباشد. مقدار ضریب هـال

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 میکند تا توصیف بهتری از خواص ترابردی Pd داشته باشیم. تقریب زمان واهلش ثابت

برای فلزات قلیایی مناسب به نظر میرسد، با این وجود مقدار

به دست آمده برای Li اختلاف زیادی با مقدار تجربی نشان

میدهد. توابع وانیر برای عنصرهایی که اربیتال جایگزیدهای

دارند مناسبتر به نظر میرسد. بنابر نتایج به دست آمده برای

فلزات نجیب، که اربیتالهای جایگزیدهای d دارند نتایج بهتری

به دست آمده است.

plenum, New York (1972).

- 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",