

Artículo original

Efecto Hall cristalino en el antiferromagnético colineal no convencional NiF₂

Crystal Hall effect in an unconventional collinear antiferromagnet NiF₂

● Rafael González-Hernández^{1,*}, ● Roberto González¹, ● Libor Šmejkal²

¹ Departamento de Física y Geociencias, Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia.

² Institut für Physik, Johannes Gutenberg Universität Mainz, D-55099 Mainz, Germany

² Institute of Physics, Czech Academy of Sciences, Cukrovarnická 10, 162 00 Praha 6 Czech Republic

Artículo de posesión para admisión de Rafael González-Hernández, como miembro correspondiente a la Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales

Resumen

A lo largo de un siglo, la corriente eléctrica transversal, sin disipación de energía, que genera el efecto Hall continúan desempeñando un papel central en la investigación de materia condensada por su intrigante naturaleza cuántica, relativista y topológica. El efecto Hall anómalo requiere la ruptura espontánea de la simetría de reversión temporal, lo cual es atribuido al ordenamiento magnético de los espines dentro del material cristalino (como es el caso del hierro). Recientemente, se identificó la presencia del efecto Hall anómalo, llamado efecto Hall cristalino, en ciertos materiales antiferromagnéticos no convencionales, donde la ruptura de simetría de inversión temporal es causada por la disposición de los átomos no magnéticos en estructura cristalina antiferromagnética. En el presente trabajo se estudia el efecto Hall cristalino en el fluoruro de níquel (NiF₂) por medio de un análisis de simetría y cálculos de primeros principios. Se encuentra que la conductividad Hall anómala para el NiF₂ podría alcanzar valores cercanos a 700 S/cm. Esta respuesta Hall se obtiene para el eje fácil de magnetización del material; esto no se presenta en otros cristales tipo rutilo estudiados recientemente donde el vector antiferromagnético tiene que reorientarse aplicando un campo externo. Además, se muestra el origen en el espacio recíproco de la conductividad Hall anómala y la manera en que se puede controlar mediante la rotación del vector de Néel, el cual da cuenta del ordenamiento antiferromagnético del material. Nuestros resultados indican que el NiF₂ podría ser un elemento clave en el diseño de futuros dispositivos espintrónicos basados en materiales antiferromagnéticos no convencionales.

Palabras clave: Simulación de materiales; Efecto Hall cristalino; Materiales antiferromagnéticos; NiF₂.

Abstract

Dissipation less transversal Hall currents are intensively researched for more than one century due to their intriguing quantum, relativistic, and topological origin. The spontaneous Hall effect requires time-reversal symmetry breaking, which is induced by the spin ordering and traditionally was attributed to the magnetization in ferromagnetic materials such as iron. Recently, spontaneous, so-called crystal, Hall effect was identified, which is induced by unconventional magnetism arising from the interplay of collinear antiferromagnetism and nonmagnetic crystal structure. Here we study this crystal Hall effect in insulating NiF₂ crystal from the symmetry analysis and first-principle calculations in dependence on elec-

Citación: González-Hernández R, González R, Šmejkal L. Efecto Hall cristalino en el antiferromagnético colineal no convencional NiF₂. Revista de la Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales. 46(180):617-627, julio-septiembre de 2022. doi: <https://doi.org/10.18257/raccefyn.1643>

Editor: Jairo Roa Rojas

***Correspondencia:**

Rafael González-Hernández;
rafaelgonzalezgh@gmail.com

Recibido: 12 de marzo de 2022

Aceptado: 14 de junio de 2022

Publicado en línea: 6 de julio de 2022



Este artículo está bajo una licencia de Creative Commons Reconocimiento-NoComercial-Compartir Igual 4.0 Internacional

tron filling, and we predict spontaneous Hall response can be as large as 700 S/cm. In NiF₂, the antiferromagnetic vector is oriented along the crystal axis conducive for the Hall response. This property is elusive in other recently studied rutile crystals where the antiferromagnetic vector had to be reoriented by the applied field. Additionally, we analyze the momentum space resolved contribution to the spontaneous Hall conductivity and the Neel vector rotation dependence of the effect. Our calculations show that the NiF₂ can be useful element in future spintronics based on unconventional antiferromagnets.

Keywords: Materials simulation, Crystal Hall effect; Antiferromagnetic materials; NiF₂

Introduction

Si se aplica un voltaje a un conductor convencional como el cobre, la corriente fluye en la dirección dada por el campo eléctrico. Y si además se somete a un campo magnético externo, la corriente eléctrica se desvía perpendicularmente. Esta componente adicional se conoce como corriente Hall, en honor al físico Prof. Edwin Hall quien describió por primera vez este fenómeno en 1879 (Hall, 1879). Este efecto se ha utilizado para caracterizar materiales semiconductores, los cuales dieron forma a la electrónica del silicio, base actual de los computadores y teléfonos inteligentes. El profesor Hall también investigó el comportamiento de esta corriente en materiales con una magnetización interna (materiales ferromagnéticos), como el hierro, encontrando que también se produce tal desviación de la corriente esta vez sin necesidad de un campo magnético externo, a lo que llamo efecto Hall anómalo (Hall, 1879). Fenómeno que se ha convertido en una de las piedras angulares para el desarrollo de la magnetoelectrónica, un campo amplio que se extiende desde las tecnologías de sensores hasta las memorias magnéticas. Por otro lado, el descubrimiento de los materiales antiferromagnéticos (AFM), que son mucho más comunes en la naturaleza que los ferromagnéticos, se atribuye al profesor Louis Néel (Premio nobel de Física en 1970 por esta contribución) (Neel, 1970). En estos materiales, los momentos magnéticos de los átomos se orientan en direcciones completamente opuestas. Por lo tanto, los efectos observados en los ferromagnetos se anulan entre sí, incluida la corriente de Hall anómala. Así, los antiferromagnetos en el exterior se comportan como conductores no magnéticos habituales, por tanto, no llaman la atención para aplicaciones en magnetoelectrónica, como el mismo Prof. Néel mencionó en su lectura del premio nobel (Neel, 1970).

El efecto Hall anómalo es un fenómeno que no debería presentarse en materiales antiferromagnéticos o no magnéticos, y ser solo característico de materiales con campos magnéticos internos, como los ferromagnetos (o imanes comunes) (Nagaosa, Sinova, Onoda, MacDonald, & Ong, 2010). Sin embargo, la combinación de factores como la simetría de los átomos no magnéticos dentro de un cristal antiferromagnético reevalúa esta teoría y produce novedosos efectos, como se demostró en el reciente trabajo de Šmejkal *et al* (Šmejkal, González-Hernández, Jungwirth, & Sinova, 2020). En este, se explica la aparición de un efecto Hall anómalo en ciertos materiales antiferromagnéticos colineales, el cual se denomina efecto Hall cristalino. Este fenómeno es el resultado de la combinación de elementos antiferromagnéticos con átomos no magnéticos, que contrario al conocimiento actual, produce una corriente de Hall anómala nunca observada previamente en materiales antiferromagnéticos o cristales no magnéticos independientemente.

La combinación de elementos antiferromagnéticos y no magnéticos ocurre con mucha frecuencia en la naturaleza, como es el caso de los difluoruros de metales de transición, como el MnF₂, FeF₂ y NiF₂ (Corrêa & Výborný, 2018). En particular, el NiF₂ ha llamado la atención de la comunidad científica por tener un ordenamiento antiferromagnético colineal a baja temperatura con una posible señal Hall para el caso donde se inclinan sus momentos magnéticos en la configuración AFM; según el modelo teórico reportado por Chen *et al* (Li, MacDonald, & Chen, 2019). En el presente trabajo, se muestra teórica y computacionalmente que el NiF₂ efectivamente presenta una señal Hall anómala (debida al efecto

Hall cristalino) además de un desdoblamiento de espines en su estructura de bandas. Los resultados del presente estudio contribuyen al campo de la espintrónica antiferromagnética (**Baltz et al.**, 2018), la cual se espera que en futuro revierta creciente demanda de componentes pesados y raros en la magnetoelectrónica convencional, y en cambio, dirigir el interés hacia materiales más abundantes y sostenibles (como el níquel y flúor). Además, la corriente de Hall exhibe una baja disipación de energía eléctrica, posicionándolo estratégicamente como una solución al hecho que las tecnologías de la información se están convirtiendo en la mayor fuente de consumo energético a nivel mundial. Dado que estos materiales no presentan un campo magnético externo, son magnéticamente invisibles, se pueden empaquetar de manera muy compacta y permitir un alto grado de miniaturización para aplicaciones en nanoelectrónica moderna. Estos materiales, previamente pasados por alto, se destacan también en términos de rapidez de cálculo, ya que permiten velocidades de operación mucho más altas que los materiales ferromagnéticos, por lo que las frecuencias de los componentes electrónicos podrían cambiarse del rango de Gigahercios al rango de Terahercios. Por lo que este descubrimiento se posiciona como uno de los más importantes en el nuevo y creciente campo de la magnetoelectrónica antiferromagnética, conocido también como espintrónica antiferromagnética (**Šmejkal, Mokrousov, Yan, & MacDonald**, 2018).

Metodología

En el presente trabajo se realizaron cálculos de primeros principios (o *ab-initio*) utilizando los fundamentos de la teoría funcional de la densidad (DFT) (**Kohn & Sham**, 1965) en el esquema de la aproximación del método del pseudopotencial y ondas planas (**Blöchl**, 1994). Los efectos de intercambio y correlación fueron tratados con la aproximación de gradiente generalizado (GGA) en la parametrización de Perdew, Burke y Ernzerhof (PBE) (**Perdew, Burke, & Ernzerhof**, 1996), tal como está implementado en el código computacional vienna *ab-initio* software package (VASP) (**Kresse & Hafner**, 1993; **Kresse & Furthmüller**, 1996). La función de onda de electrones se expandió en ondas planas hasta una energía de corte de 500 eV y se utilizó una malla de puntos k de $12 \times 12 \times 16$ para describir la primera zona de Brillouin. La interacción de Hubbard para los estados d -Ni se incluyó con un parámetro U de 2.0 eV (**Corrêa & Vyborny**, 2018).

Se utilizó la teoría de la respuesta lineal para obtener el tensor de conductividad eléctrica. Para evaluar la fórmula de Kubo, se empleó el hamiltoniano en el modelo de enlace fuerte $\hat{H}(\mathbf{k})$ construido en la base de las funciones de Wannier maximamente localizadas (MLWF) calculadas a partir de funciones de Bloch del método DFT (**Marzari, Mostofi, Yates, Souza, & Vanderbilt**, 2012; **Mostofi et al.**, 2014). En este formalismo, las componentes de la conductividad Hall se determinan con una integración de la curvatura de Berry ($\Omega^z(\mathbf{k})$) en la primera zona de Brillouin (ZB), usando una malla de puntos k de $320 \times 320 \times 320$ (**Wu, Zhang, Song, Troyer, & Soluyanov**, 2018):

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{\hbar} \int_{ZB} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Omega^z(\mathbf{k}) \quad (1)$$

Con la curvatura de Berry escrita como (**Xiao, Chang, & Niu**, 2010):

$$\Omega^z(\mathbf{k}) = -2\hbar \text{Im} \sum_{n \neq m} \frac{\langle u_{nk} | \hat{v}_x | u_{mk} \rangle \langle u_{nk} | \hat{v}_y | u_{mk} \rangle}{(\epsilon_{nk} - \epsilon_{mk})^2} \quad (2)$$

Donde $\hbar \hat{v}_i = \partial \hat{H}(\mathbf{k}) / \partial k_i$ es la componente i del operador de velocidad, y u_{mk} y ϵ_{nk} son los estados propios y los valores propios del hamiltoniano de enlace fuerte $\hat{H}(\mathbf{k})$, respectivamente.

Resultados y discusión

El fluoruro de níquel (NiF_2) es un material antiferromagnético que crece en una estructura cristalina tipo rutilo, con 2 átomos de Ni y 4 de F en la celda unitaria, como se muestra en la figura 1a. Se observa una estructura tetragonal con parámetros de red optimizados de 4.71 y 3.12 Å, los cuales son muy cercanos a los reportados experimentalmente (Stout & Reed, 1954). En esta figura se muestra la configuración antiferromagnética con momentos magnéticos alineados antiparalelamente y compensados (configuración AFM) en la dirección [100], la cual denominaremos configuración 0° , y corresponde a la fase más estable del material. En la figura 1b se muestra la primera zona de Brillouin para la celda unitaria del NiF_2 , la cual también es una celda tetragonal. Se indican además los puntos de alta simetría que se emplearán en el cálculo de la relación de dispersión electrónica o estructura de bandas.

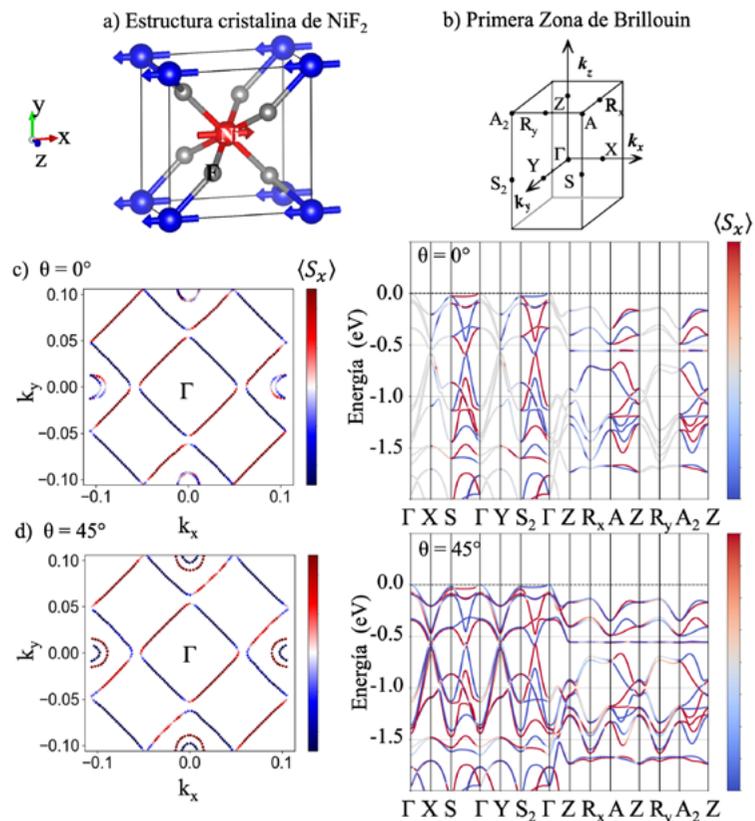


Figura 1. a) Estructura cristalina tipo rutilo y b) primera zona de Brillouin para el material NiF_2 . Superficie de energía constante ($E - E_{\text{Fermi}} = -0.2 \text{ eV}$) en plano $k_z = 0$ y estructura de bandas para el caso del vector de Néel orientado en la c) dirección [100] (configuración 0°) y d) dirección [110] (configuración 45°) incluida la interacción SOC. Se presenta la proyección de la componente S_x del espín en la superficie de energía constante y en las bandas de energía. Las gráficas fueron realizadas usando el código pyprocar (Herath et al., 2020) y la energía de Fermi se ha ajustado a cero en el borde superior de la banda de valencia.

En la figura 1c podemos ver la estructura de bandas electrónica y la proyección de la componente x del espín S_x del átomo de Ni sobre la estructura de NiF_2 , en el caso de la orientación 0° (vector de Néel paralelo al eje x). De esta figura se nota que el material es un compuesto aislante con el máximo de la banda de valencia en el punto Γ . El material presenta

una brecha de energía de aproximadamente 2.75eV, la cual es cercana a la reportada por Cinthia y Karel (**Corrêa & Výborný, 2018**). Vale la pena resaltar que aunque el momento magnético total de la celda es nulo, se presenta un desdoblamiento de las componentes del espín (+S_x y -S_x) en ciertas direcciones de alta simetría, aun sin tener en cuenta la interacción espín-órbita (SOC) dentro de los cálculos. El desdoblamiento del espín en un camino de alta simetría (por ejemplo Γ -S) es compensado por el desdoblamiento opuesto del espín en un camino equivalente (por ejemplo Γ -S₂) como se muestra en la figura 1c y 1d. El desdoblamiento de espín es notorio cuando se calcula la proyección de espín sobre la superficie de energía constantes en el plano $k_z=0$ (ver figura 1). Este fenómeno se ha explicado desde el punto de vista de las simetrías magnéticas y de la interacción de intercambio que estabiliza el estado AFM, lo que produce un novedoso estado magnético en ciertos materiales AFM no convencionales, denominado altermagnetismo (**Šmejkal, Sinova, & Jungwirth, 2021**). Se observa que los desdoblamientos de las componentes de espín en este material son cercanos a ~ 0.5 eV, y son considerables en los caminos de alta simetría Γ -S y A-Z. Este desdoblamiento es mucho más grande que el presentado en el efecto Rashba, donde los desdoblamientos de espín son proporcionales a la interacción SOC y son del orden de décimas de meV (**Manchon, Koo, Nitta, Frolov, & Duine, 2015**). Este es un resultado fundamental para las posibles aplicaciones de estos materiales en el campo de la espintrónica.

Por otro lado, en la figura 1d se presenta la estructura de banda para la configuración AFM cuando el vector de Néel rota 45° respecto al eje x . Se nota un ligero cambio de la estructura electrónica cerca del nivel de Fermi cuando el vector de Néel rota a la dirección [110] en el plano xy (configuración 45°). Se observa un leve desdoblamiento del espín en otras direcciones de alta simetría del material adicionales al caso 0°. Sin embargo, la forma y posición energética de las bandas no se altera considerablemente, lo que indica que las características electrónicas son dominadas por la configuración magnética sin la interacción SOC, como ocurre en otros materiales antiferromagnéticos no convencionales (**Šmejkal et al., 2021**).

Para estudiar el origen del efecto Hall cristalino en el NiF₂ se calculó la densidad de carga de espín ($\rho_{up}(\mathbf{r})-\rho_{dn}(\mathbf{r})$) en el espacio real como se muestra en la figura 2a. Esta densidad es intensa y antiparalela alrededor de los dos átomos de Ni, los cuales generan el antiferromagnetismo dentro de la estructura. Además, se observa una densidad de espín anisotrópica alrededor de los átomos de Ni debido a la presencia del F en la estructura de rutilo. Este comportamiento desaparece al remover los átomos de F, y es parte del mecanismo que genera la ruptura de simetría de reversión temporal en el compuesto de NiF₂ y genera el conocido efecto Hall cristalino (**Šmejkal et al., 2020**). La anisotropía en la densidad de carga de espín no es convencional en todos los antiferromagnetos debido a que ciertas simetrías, que conectan las subredes de los átomos magnéticos dentro del material, hacen que la densidad de espín sea isotrópica para cancelar la magnetización total.

Adicionalmente, para conocer la fuente del efecto Hall cristalino en el espacio recíproco, en la figura 2b se muestra las componentes x y y de curvatura de Berry ($\Omega_x(\mathbf{k})$ y $\Omega_y(\mathbf{k})$) en la primera zona de Brillouin (para el plano $k_z=0$), como se define en la ecuación (2). En esta se puede observar que las posiciones en el espacio k donde la curvatura es más intensa (zonas azules y rojas) se pueden relacionar con los puntos de cruce (o anticruce) en la superficie de energía constante de la figura 1c, los cuales incrementan el valor del denominador en la ecuación (2). Se puede notar que la integral de la curvatura $\Omega_x(\mathbf{k})$ se anula debido a la simetría de las contribuciones positivas (rojo) y negativas (azul) de la misma, haciendo que la componente de la conductividad Hall σ_{zy} se cancele. Por otro lado, la integral de la curvatura $\Omega_y(\mathbf{k})$ es diferente de cero y produce una señal σ_{zx} considerable; de la misma manera que en otros materiales antiferromagnéticos no convencionales como el FeSb₂ (**Mazin, Koepf, Johannes, González-Hernández, & Šmejkal, 2021**) y el RuO₂ (**Šmejkal et al., 2020**).

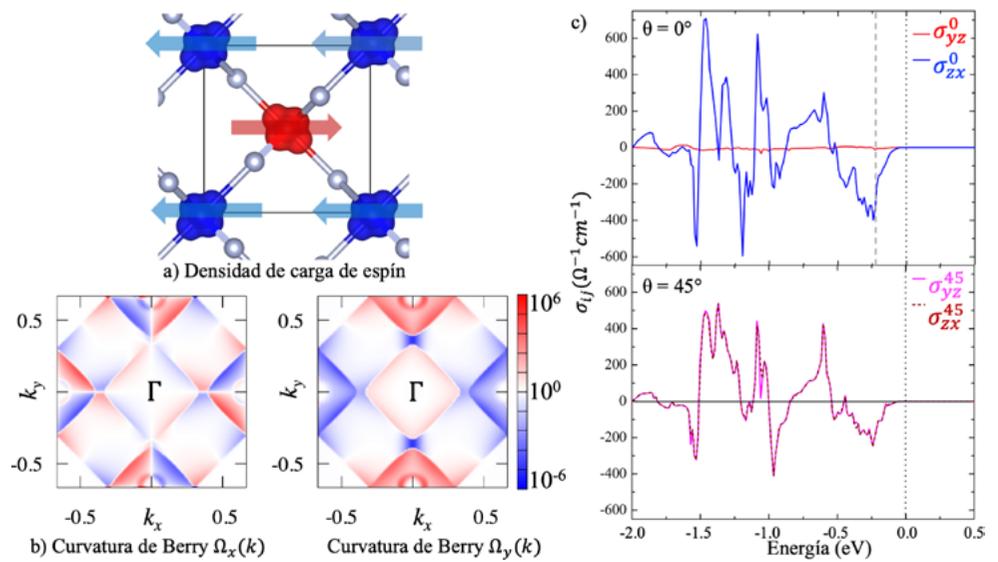


Figura 2. a) Densidad de carga de espín ($\rho_{up}(\mathbf{r})-\rho_{dn}(\mathbf{r})$) en el espacio real y b) componentes $\Omega_x(\mathbf{k})$ y $\Omega_y(\mathbf{k})$ de la curvatura de Berry en el espacio recíproco (plano $k_z=0$) para el material NiF₂ cuando el vector de Néel está orientado en la dirección [100] (configuración 0°) y $E-E_{Fermi}=-0.2\text{eV}$. Conductividad de Hall anómala (σ_{ij}) en función de la energía de Fermi cuando el vector de Néel es paralelo a c) [100] y [110], es decir, las configuraciones 0° y 45°, respectivamente. La densidad de carga de espín fue graficada con el código VESTA (Momma & Izumi, 2011).

En la figura 2c se muestra que la conductividad de Hall anómala (AHC) calculada usando la ecuación (1) en función de la posición del nivel de Fermi, cuando el vector de Néel está orientado 0° respecto al eje x en el material NiF₂. Se nota un valor distinto de cero para la conductividad Hall anómala por debajo del nivel de Fermi, incluso teniendo un momento magnético total nulo por celda unitaria. Por lo tanto, un leve dopaje del material NiF₂ podría inducir valores considerables en el valor de la AHC que están cerca de los cruces (o anticruce) de energía en la estructura de bandas. Estos dopajes se podrían realizar con impurezas atómicas o con vacancias de F en el material NiF₂. Adicionalmente, el efecto Hall cristalino en NiF₂ se podría explorar experimentalmente usando su homólogo magneto-óptico, como en el caso de películas delgadas de SrRuO₃ (Samanta et al., 2020).

A pesar de que el efecto de la interacción SOC es pequeño en el material estudiado, se encontró que el AHC desaparece cuando se apaga el efecto del SOC en el cálculo, como se ha reportado para diversos materiales FM y AFM (Nagaosa et al., 2010). En la figura 2c se observa que la conductividad es distinta de cero para una configuración de 0° en NiF₂ es la componente σ_{zx} del tensor de conductividad Hall, que representa un campo eléctrico aplicado en la dirección z y una señal Hall anómala medida en la dirección x . Para esta componente se obtiene un pico en la conductividad Hall de 400 S/cm por debajo del nivel de Fermi a un valor de -0.25 eV. Para la configuración AFM con un vector de Néel orientado 45° (figura 2c), los valores no nulos de las componentes de la conductividad corresponden a σ_{yz} y σ_{zx} , los cuales son cercanos a 250 S/cm para un nivel de Fermi de -0.25 eV. Estos valores de AHC son similares a los reportados para materiales AFM no colineales como 330 S/cm (Mn₃Ge) (Nakatsuji, Kiyohara, & Higo, 2015) y 312 S/cm (Mn₃Ir) (Chen, Niu, & MacDonald, 2014), y 34 S/cm para materiales AFM colineales como RuO₂ (Šmejkal et al., 2020).

Por otro lado, realizando un análisis de las simetrías magnéticas del material NiF₂ en sus diferentes configuraciones antiferromagnéticas es posible conocer la respuesta del material

NiF ₂ $\mathbf{n} \parallel [100]$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_{xz} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\sigma_{xz} & 0 & 0 \end{pmatrix}$	NiF ₂ $\mathbf{n} \parallel [110]$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_{xz} \\ 0 & 0 & \sigma_{yz} \\ -\sigma_{xz} & -\sigma_{yz} & 0 \end{pmatrix}$
---	--	---	---

Table 1. Análisis de simetría del tensor de conductividad Hall para el material antiferromagnético no convencional NiF₂ para el caso donde el vector de Néel \mathbf{n} esta orientado paralelo a la dirección [100] (configuración de 0°) y en la dirección [110] (configuración de 45°).

ante un campo eléctrico externo (Seemann, Ködderitzsch, Wimmer, & Ebert, 2015). En este sentido cuando se tiene un vector de Néel alineado en las direcciones [100] y [110], las operaciones de simetría del grupo magnético puntual en cada caso son: $Pnn'm'$: $P, G_y, S_{2y}, TC_{2z}, TM_z, TG_x, TS_{2x}$ y $Cmm'm'$: $P, M_{xy}, C_{2xy}, TC_{2z}, TM_z, TM_{xy}, TC_{2xy}$; respectivamente. Donde las operaciones de simetría se denotan por: un plano de deslizamiento G_y (operación espejo en el eje y y con traslación parcial de la celda), un rotación de 180 grados a lo largo del eje z (C_{2z}), un rotación de 180 grados tipo tornillo S_{2y} (rotación C_{2y} combinada con una traslación parcial de la celda) y la operación de reversión temporal T (operación anti-unitaria), la cual esta combinada con otras operaciones de simetría (Šmejkal et al., 2020). Usando solo estas operaciones de simetría fue posible determinar las componentes no nulas del tensor de conductividad Hall (ver tabla 1) y verificar así que las componentes del tensor calculas desde primeros principios (ver figura 2c) son coherentes con los resultados que predicen las operaciones de simetría magnéticas del material.

Finalmente, se realizó un estudio de las propiedades magnéticas y de transporte electrónico cuando se realiza la rotación del vector de Néel en el plano xy para material antiferromagnético NiF₂; estas rotaciones están representadas en las celdas unitarias de la figura 3a. La figura 3b muestran la energía total relativa, las componentes (M_x y M_y) del momento magnético de cada sub-red de átomos de Ni en función de la rotación angular del vector de Néel sobre el plano xy . Podemos notar como la componente M_x (y M_y) de la magnetización se modifican de manera senoidal (y cosenoidal), siendo la magnitud de la misma casi constante a lo largo de toda la rotación. La magnitud de la magnetización es aproximadamente de $1.72 \mu_B$, la cual es cercana al valor de $1.63 \mu_B$ calculado teóricamente por Cinthia y Karel (Corrêa & Vyborny, 2018) y al valor experimental obtenido por Stremper et al (Stremper, Rütt, Bayrakci, Brückel, & Jauch, 2004), con una magnetización de $1.96 \mu_B$. Durante la rotación se preservó el carácter antiferromagnético del material; y como se nota en la tabla 2 se encuentra una contribución muy leve a la magnetización total ($-0.004 \mu_B$) que indican que el NiF₂ es en realidad un material antiferromagnético.

Por otra parte, la energía de anisotropía magnetocristalina (MAE) obtenida en nuestro trabajo es de $2.82 \mu eV$, cercana al valor experimental de Ni-fcc puro reportado por Stearns (Halilov, Perlov, Oppeneer, Yaresko, & Antonov, 1998), que fue de $2.7 \mu eV$. El efecto de la F no es fuerte en los valores de MAE para NiF₂. Sin embargo, la presencia de átomos de F cambia las propiedades magnéticas y transforma el Ni puro de un material metálico ferromagnético a un aislante antiferromagnético en el NiF₂. En la Figura 3b podemos observar que el AHC se puede controlar cuando el vector de Néel gira en el plano xy . Se nota que los diferentes componentes del AHC se intercambian de acuerdo con la simetría del tensor de conductividad Hall, y que estas componentes son diferentes de cero aun cuando la magnitud total de la magnetización de la celda es cero para todas las rotaciones. Además, se observa el cambio de signo de las componentes del AHC cuando se rota 180 grados el vector de Néel; esta rotación es equivalente a invertir las posiciones de los átomos de F en la estructura cristalina de la figura 3a, lo que conecta la respuesta Hall con la configuración magnética y/o la estructural cristalina del material (posición de los átomos no magnéticos). Este ultimo fenómeno hace del efecto Hall cristalino un posible método para invertir cor-

	x	y	z	$M_x(\mu_B)$	$M_y(\mu_B)$	$M_z(\mu_B)$
Ni1	0.000	0.000	0.000	1.727	-0.001	0.000
Ni2	0.500	0.500	0.500	-1.728	-0.001	0.000
Total				0.000	-0.004	0.000

Table 2. Posiciones atómicas (en fracción de la celda unitaria) y componentes de la magnetización local (en μ_B) de los átomos de Ni en la estructura rutilo del NiF_2 . Las componentes totales de la magnetización por celda unitaria para el NiF_2 en el caso donde el vector de Néel \mathbf{n} esta orientado paralelo a la dirección [100] (configuración de 0°).

rientes eléctricas con la rotación del vector de Néel, lo cual lo hace valioso en el nacimiento del campo de la espintrónica antiferromagnética (González-Hernández et al., 2021). De las figuras 3b se puede verificar que el AHC en el NiF_2 no es proporcional a alguna componente remanente de la magnetización de la muestra, lo que indica que el efecto Hall cristalino es robusto y es debido completamente al ordenamiento AFM en la estructura cristalina del material. Para finalizar, cabe resaltar que una de las posibles aplicaciones para el material NiF_2 estarían relacionadas con el reciente descubrimiento de los fenómenos magnetorresistencia gigante y túnel para multicapas de estos antiferromagnetos colineales no convencionales (Šmejkal, Hellenes, González-Hernández, Sinova, & Jungwirth, 2022).

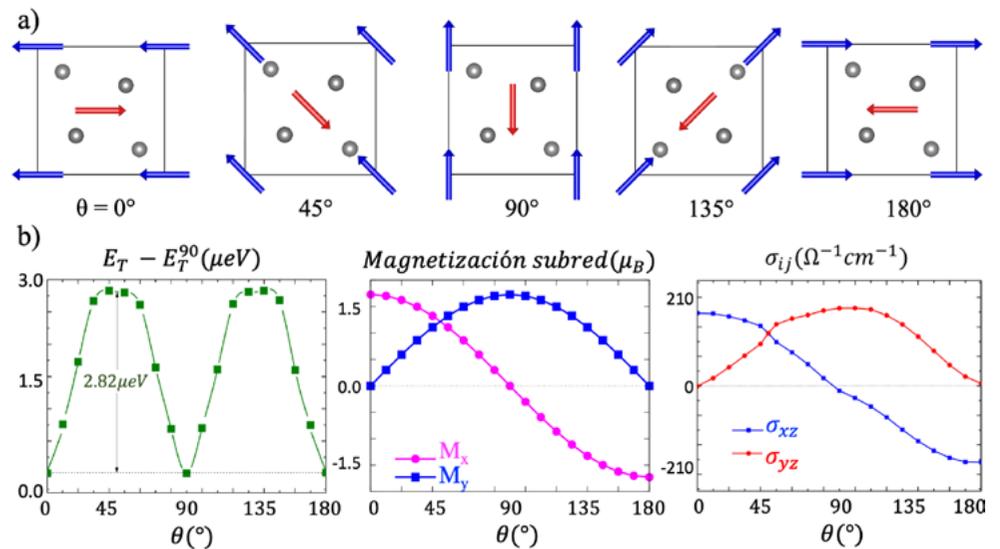


Figura 3. a) Estructuras cristalinas que representan la rotación del vector de Néel (ángulos de 0° , 45° , 90° , 135° y 180°) en la estructura cristalina del material antiferromagnético NiF_2 . b) Energía total relativa (respecto a la configuración de 90°), componentes del momento magnético (M_x y M_y) de cada sub-red de átomos de Ni y conductividad Hall anómala σ_{ij} (calculada para $E=E_F-650 \text{ meV}$) en función de la rotación angular del vector de Néel en el plano xy .

Conclusiones

Se sabe desde hace varias décadas que los materiales no magnéticos y antiferromagnéticos no generan corrientes de Hall individualmente. Sin embargo, en el presente trabajo se encontró que el material antiferromagnético no convencional NiF_2 , con una estructura cristalina tipo rutilo la cual combina átomos no magnéticos y antiferromagnéticos, genera un corriente Hall anómala destacable y posiblemente observable en laboratorios de todo el mundo.

El descubrimiento de este nuevo fenómeno, denominado efecto Hall cristalino, contribuye en la detención de señales Hall en materiales antiferromagnéticos colineales, en los cuales se pensaban estas señales no se podían manifestar. Se encontró que la respuesta Hall puede ser considerable en el material antiferromagnético NiF₂ cuando el vector de Néel está orientado en el plano *xy*. Finalmente, se observó que la señal del efecto Hall cristalino se puede controlar con la rotación del vector Néel en el material NiF₂. Este tipo de estudio se puede extender a otros materiales antiferromagnéticos colineales no convencionales los cuales sorprendentemente son más comunes de lo esperado en la naturaleza y relativamente fáciles de manejar experimentalmente. Cabe resaltar que la corriente de Hall generada exhibe una baja disipación de energía eléctrica, posicionándolo este fenómeno estratégicamente en el creciente campo de la espintrónica antiferromagnética.

Agradecimientos

Expresamos nuestro más sincero agradecimiento al profesor Jairo Sinova de la Universidad de Johannes Gutenberg (JGU) por su tiempo y esfuerzo en la discusión del presente trabajo. Agradecemos a la centro de supercomputación Mogon de la JGU (hpc.uni-mainz.de), a la Universidad del Norte y a la fundación alemana Alexander von Humboldt por su continuo y valioso apoyo.

Contribución de los autores

Todos los autores participaron en la realización de los cálculos, la redacción del artículo y en el diseño de las figuras.

Conflicto de intereses

Los autores declaran no tener conflicto de intereses con respecto al contenido de este artículo.

References

- Baltz, V., Manchon, A., Tsoi, M., Moriyama, T., Ono, T., Tserkovnyak, Y. (2018, Feb). Antiferromagnetic spintronics. *Rev. Mod. Phys.*, *90*, 015005. Retrieved from <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.90.015005> doi: 10.1103/RevModPhys.90.015005
- Blöchl P. E. (1994, December). Projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B* *50*, 17953. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.17953>
- Chen, H., Niu, Q., MacDonald, A. H. (2014, Jan). Anomalous hall effect arising from noncollinear antiferromagnetism. *Phys. Rev. Lett.*, *112*, 017205. Retrieved from <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.017205> doi: 10.1103/PhysRevLett.112.017205
- Correã, C. A., Výborný, K. (2018, Jun). Electronic structure and magnetic anisotropies of antiferromagnetic transition-metal difluorides. *Phys. Rev. B*, *97*, 235111. Retrieved from <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.235111> doi: 10.1103/PhysRevB.97.235111
- González-Hernández, R., Šmejkal, L., Výborný, K., Yahagi, Y., Sinova, J., Jungwirth, T. C. V., Železný, J. (2021, Mar). Efficient electrical spin splitter based on non-relativistic collinear antiferromagnetism. *Phys. Rev. Lett.*, *126*, 127701. Retrieved from <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.126.127701> doi: 10.1103/PhysRevLett.126.127701
- Halilov, S. V., Perlov, A. Y., Oppeneer, P. M., Yaresko, A. N., Antonov, V. N. (1998, Apr). Magnetocrystalline anisotropy energy in cubic Fe, Co, and Ni: Applicability of local-spin-density theory reexamined. *Phys. Rev. B*, *57*, 9557-9560. Retrieved from <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.57.9557> doi: 10.1103/PhysRevB.57.9557
- Hall, E. H. (1879). On a new action of the magnet on electric currents. *American Journal of Mathematics*, *2*(3), 287-292. Retrieved from <http://www.jstor.org/stable/2369245>
- Herath, U., Tavazde, P., He, X., Bousquet, E., Singh, S., Muñoz, F., Romero, A. H. (2020). Pyprocar: A python library for electronic structure pre/post-processing. *Computer Physics Communications*, *251*, 107080. Retrieved from <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465519303935> doi: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2019.107080>

- Šmejkal, L., Hellenes, A. B., González-Hernández, R., Sinova, J., Jungwirth, T. (2022, Feb). Giant and tunneling magnetoresistance in unconventional collinear antiferromagnets with nonrelativistic spin-momentum coupling. *Phys. Rev. X*, *12*, 011028. Retrieved from <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.12.011028> doi: 10.1103/PhysRevX.12.011028
- Kohn, W., Sham, L. J. (1965, Nov). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, *140*, A1133-A1138. Retrieved from <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.140.A1133> doi: 10.1103/PhysRev.140.A1133
- Kresse, G., Furthmüller, J. (1996). Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*, *54*(16), 11169-11186. doi: 10.1103/PhysRevB.54.11169
- Kresse, G., Hafner, J. (1993). Ab initio molecular dynamics for liquid metals. *Phys. Rev. B*, *47*(1), 558-561. doi: 10.1103/PhysRevB.47.558
- Li, X., MacDonald, A. H., Chen, H. (2019). *Quantum anomalous hall effect through canted antiferromagnetism*, *arxiv:1902.10650*.
- Manchon, A., Koo, H. C., Nitta, J., Frolov, S. M., Duine, R. A. (2015, Sep 01). New perspectives for rashba spin-orbit coupling. *Nature Materials*, *14*(9), 871-882. Retrieved from <https://doi.org/10.1038/nmat4360> doi: 10.1038/nmat4360
- Marzari, N., Mostofi, A. A., Yates, J. R., Souza, I., Vanderbilt, D. (2012, Oct). Maximally localized wannier functions: Theory and applications. *Rev. Mod. Phys.*, *84*, 1419-1475. Retrieved from <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.84.1419> doi: 10.1103/RevModPhys.84.1419
- Mazin, I. I., Koepf, K., Johannes, M. D., González-Hernández, R., Šmejkal, L. (2021). Prediction of unconventional magnetism in doped FeSb₂. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, *118*(42), e2108924118. Retrieved from <https://doi.org/10.1073/pnas.2108924118> doi: 10.1073/pnas.2108924118
- Momma, K., Izumi, F. (2011, Dec). Vesta3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data. *Journal of Applied Crystallography*, *44*(6), 1272-1276. Retrieved from <https://doi.org/10.1107/S0021889811038970> doi: 10.1107/S0021889811038970
- Mostofi, A. A., Yates, J. R., Pizzi, G., Lee, Y.-S., Souza, I., Vanderbilt, D., Marzari, N. (2014). An updated version of wannier90: A tool for obtaining maximally-localised wannier functions. *Computer Physics Communications*, *185*(8), 2309-2310. Retrieved from <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S001046551400157X> doi: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2014.05.003>
- Nagaosa, N., Sinova, J., Onoda, S., MacDonald, A. H., Ong, N. P. (2010). Anomalous Hall effect. *Rev. Mod. Phys.*, *82*, 1539-1592. doi: 10.1103/RevModPhys.82.1539
- Nakatsuji, S., Kiyohara, N., Higo, T. (2015, Nov 01). Large anomalous hall effect in a non-collinear antiferromagnet at room temperature. *Nature*, *527*(7577), 212-215. Retrieved from <https://doi.org/10.1038/nature15723>
- Neel, L. (1970, dec). *Magnetism and the local molecular field*. www.nobelprize.org, Nobel Foundation.
- Perdew, J. P., Burke, K., Ernzerhof, M. (1996, Oct). Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.*, *77*, 3865-3868. Retrieved from <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.77.3865> doi: 10.1103/PhysRevLett.77.3865
- Samanta, K., Ležaić, M., Merte, M., Freimuth, F., Blügel, S., Mokrousov, Y. (2020). Crystal hall and crystal magneto-optical effect in thin films of srRuO₃. *Journal of Applied Physics*, *127*(21), 213904. Retrieved from <https://doi.org/10.1063/5.0005017> doi: 10.1063/5.0005017
- Seemann, M., Ködderitzsch, D., Wimmer, S., Ebert, H. (2015, Oct). Symmetry-imposed shape of linear response tensors. *Phys. Rev. B*, *92*, 155138. Retrieved from <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.92.155138> doi: 10.1103/PhysRevB.92.155138
- Šmejkal, L., Mokrousov, Y., Yan, B., MacDonald, A. H. (2018, Mar). Topological antiferromagnetic spintronics. *Nature Physics*, *14*(3), 242-251.
- Stout, J. W., Reed, S. A. (1954, Nov 01). The crystal structure of mnF₂, feF₂, coF₂, niF₂ and znF₂. *Journal of the American Chemical Society*, *76*(21), 5279-5281. Retrieved from <https://doi.org/10.1021/ja01650a005> doi: 10.1021/ja01650a005
- Stremper, J., Rütt, U., Bayrakci, S. P., Brückel, T., Jauch, W. (2004, Jan). Magnetic properties of transition metal fluorides mf₂ (m = Mn, fe, co, ni) via high-energy photon diffraction. *Phys. Rev. B*, *69*, 014417. Retrieved from <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.69.014417> doi: 10.1103/PhysRevB.69.014417

-
- Šmejkal, L., González-Hernández, R., Jungwirth, T., Sinova, J.** (2020). Crystal time-reversal symmetry breaking and spontaneous hall effect in collinear antiferromagnets. *Science Advances*, 6(23), eaaz8809. doi: 10.1126/sciadv.aaz8809
- Wu, Q., Zhang, S., Song, H.-F., Troyer, M., Soluyanov, A. A.** (2018). Wanniertools: An open-source software package for novel topological materials. *Computer Physics Communications*, 224, 405-416. Retrieved from <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465517303442> doi: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2017.09.033>
- Xiao, D., Chang, M.-C., Niu, Q.** (2010, Jul). Berry phase effects on electronic properties. *Rev. Mod. Phys.*, 82, 1959-2007. Retrieved from <https://link.aps.org/> doi:10.1103/RevModPhys.82.1959 doi: 10.1103/RevModPhys.82.1959
- Šmejkal, L., Sinova, J., Jungwirth, T.** (2021). *Altermagnetism: spin-momentum locked phase protected by non-relativistic symmetries*, arxiv:2105.05820.