

بررسی عملکرد نانو ساختار تی-کربن به عنوان ماده جاذب اپتیکی تحت تنش هیدرواستاتیکی

حمیدرضا البرزنیان^{۱*}

۱. گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه پدافند هوایی خاتم الانبیاء(ص)، تهران، ایران

پست الکترونیکی: alborznia_ham@yahoo.com

چکیده

در این تحقیق با استفاده از محاسبات اصول اولیه بر اساس تئوری تابعی چگالی (DFT)، به بررسی عملکرد الکترو اپتیکی نانو ساختار سه بعدی تی-کربن می‌پردازیم. علاوه بر بررسی پایداری دینامیکی و استاتیکی، ساختار بهینه شده یاخته واحد تی-کربن، در راستای یک پژوهش نوین، خواص الکترواپتیکی تی-کربن، تحت تاثیر تنش هیدرواستاتیکی همه جهته بر یاخته واحد تا ۹ گیگاپاسکال با بکارگیری کدهای محاسباتی، شبیه سازی گردیده است. نتایج به دست آمده بیانگر عملکرد قابل قبول این نانوساختار به عنوان یک ماده مناسب جاذب اپتیکی می‌باشد و می‌توان این نانوساختار سه بعدی را جهت استفاده در طراحی قطعات نوآورانه‌ای مانند سنسورهای الکترواپتیکی، دستگاه‌های تشدید نور، آشکارسازهای اپتیکی و سلول‌های خورشیدی پروسیت آلی پیشنهاد داد.

واژه‌های کلیدی: تئوری تابع چگالی، آلترپ کربنی، نانو ساختار سه بعدی تی-کربن، خواص الکترواپتیکی.

۱. مقدمه

آلترپ مکعبی سه بعدی جدید کربن به نام تی-کربن، به عنوان یک نیمه هادی با باندگاف مسقیم معرفی گردیده و با استفاده از نظریه تابعی چگالی^۱ (DFT)، ساختار پاشندگی فونونی، انرژی و خواص الکترونی این نانوساختار برای درک امکان سنجی سنتز این نانو ساختار و کاربرد آن در نانو الکترونیک مورد مطالعه قرار گرفته است [۲۳].

در این مقاله، پس از محاسبه ساختار بهینه شده از یاخته واحد تی-کربن، بر پایه اصول محاسبات اولیه مبتنی به تئوری تابعی چگالی (DFT)، علاوه بر بررسی پایداری فونونی و ساختاری،

فرآوری نانوساختارهای جدید با ویژگی‌های الکترواپتیکی متنوع، می‌تواند نقش مهمی در توسعه ابزارهای الکترونوری نوین داشته باشد. پس از سنتز گرافن در سال ۲۰۰۴ [۱]، خواص منحصر به فرد این ساختار دوبعدی از کربن سبب شد که مطالعات گسترده‌ای جهت پیش یابی و فرآوری انواع نانو ساختارهای دوبعدی و سه بعدی از آلترپ‌های کربن صورت گیرد. در سال‌های اخیر نانو ساختارهای متعددی پیش‌یابی شده و مورد مطالعه قرار گرفته است [۲-۲۲].

^۱ - Density Functional Theory

۳. خواص ساختاری و پایداری

نانوساختار مکعبی سه بعدی تی-کربن دارای گروه فضایی Fd3m، یک نانوساختار بلوری است که با جایگزینی هر اتم کربن در بلور الماس با یک ترا کربن بدست می آید. با توجه به شکل ۱، ثابت های شبکه تی-کربن (a,b,c) با استفاده از حالت ترمودینامیکی معادله بیرج-مورنگان^۷، بهینه گردیده اند [۲۸].

مطابق شکل ۱، بخش (a) نشانگر آرایش یاخته واحد تی-کربن می باشد. بخش (b) چند یاخته $2 \times 2 \times 2$ این کریستال را نمایش می دهد. بخش (c) منحنی انرژی برحسب حجم را برای یاخته واحد تی-کربن را نشان می دهد. نقطه مینیمم این منحنی، بیانگر حجم بهینه شده در حداقل انرژی یاخته واحد می باشد. و در نهایت بخش (d) تصویر، منحنی فشار برحسب حجم برای یاخته واحد تی-کربن (a = b = c) در حالت بهینه برابر $7/52$ آنگستروم می باشد که با استفاده از حالت ترمودینامیکی معادلات بیرج-مورنگان بدست می آیند [۲۸]:

$$E(V) = E_0 + \frac{9B_0V_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right]^3 B_0' \right\} + \frac{9B_0V_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right]^2 \left[6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} \right] \right\} \quad (1)$$

در رابطه (۱)، B_0 مدول ساختار انبوهه و B_0' مشتق مدول ساختار انبوهه نسبت به فشار است. V_0 حجم اولیه، V حجم پایدار برای پارامترهای شبکه بهینه شده (a = b = c) تی-کربن می باشد.

در راستای یک پژوهش نوین، خواص الکترونی و اپتیکی تی-کربن، تحت تاثیر تنش هیدرواستاتیکی^۱ همه جهته بر یاخته واحد تی-کربن، تا فشار ۹ گیگا پاسکال مورد بررسی قرار می گیرد. نتایج نهایی نشان می دهد که با توجه به شرایط لحاظ شده، نانوساختار مورد نظر می تواند در طراحی دستگاه های الکترواپتیکی چند منظوره کارایی داشته باشد. و به عنوان یک ماده مناسب جاذب اپتیکی پیشنهاد گردد.

۲. روش محاسباتی

روش های محاسباتی استفاده شده در این تحقیق بر پایه اصول محاسبات اولیه مبتنی بر تئوری تابعی چگالی می باشد. برای واکاوی پایداری فونونی این نانوساختار از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو^۲ با مش بندی $8 \times 8 \times 8$ استفاده گردیده است. از کدهای محاسباتی WIEN2k برای محاسبه جنبه های الکترونی و نوری این نانوساختار سه بعدی استفاده گردیده است [۲۴]. برای بسط تابع موج کوهن شم^۳، از روش امواج تخت خطی با پتانسیل کامل به علاوه اوربیتال محلی (FPLAPW + LO) استفاده گردیده است. همچنین برای بسط پتانسیل تبدالی همبستگی، روش تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) به کار رفته است [۲۵].

همچنین از تقریب Monkhorst-Pack در منطقه اول بریلوئن و از روش (PBE)^۴ برای محاسبات الکترونی و نوری استفاده گردیده است [۲۶]. پارامترهای ورودی محاسباتی RMTKmax = 7، $G_{max} = 14 \text{ Ry}^{-1} / 2$ ، $l_{max} = 10$ در نظر گرفته شده است. در حالی که در محاسبه ویژگی های الکترونی، انرژی جداسازی هسته از الکترون های لایه ظرفیت ۸- ریدبرگ در نظر گرفته شده است. محاسبات اسپینی بدون قطبش لحاظ گردیده است. همچنین از روابط کرامرز-کرونیک^۵ و روش تقریب فاز تصادفی^۶ (RPA) برای بدست آوردن مولفه های تابع دی الکتریک مختلط این نانوساختار استفاده می شود [۲۷].

1 - Hydrostatic tension

2 - QUANTUM ESPRESSO

3 - Kohn-sham

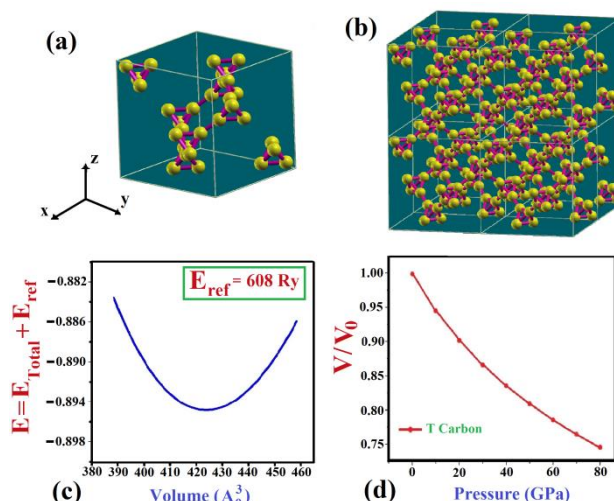
4 - Perdew-Burke-Ernzerhof

5 - Kramers-Kronig

6 - Random Phase Approximation

روش محاسباتی	طول پیوند (آنگستروم)	گاف انرژی (الکترون ولت)	انرژی همبستگی (الکترون ولت)
LDA [۲۲]	۷/۴۴۶	۲/۲۲	۷/۵۷۷
GGA [۲۳]	۷/۵۲۲	۲/۲۵	۶/۵۷۳
PBE-GGA (روش مقاله)	۷/۵۱۹	۲/۲۶	۶/۶۴۵

ساختار پاشندگی فونونی یاخته واحد تی-کربن با استفاده از کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو بر اساس تقریب شبه پتانسیل برای نقاط وارون Γ -L-X-W-K منطقه بریلوئین با مش بندی $8 \times 8 \times 8$ در شکل ۲ رسم گردیده است. مطابق ساختار نوار فونونی بر مبنای تعداد اتم‌های تشکیل دهنده یاخته واحد تی-کربن ($p = 8$) تعداد کل مدهای فونونی ۲۴ مد ($3p$) می باشد. که تعداد مد های نوری ($3p-3$) برابر ۲۱ مد نوری (۷ مد اپتیکی طولی و ۱۴ مد اپتیکی عرضی) و ۳ مد فرکانس پایین، مدهای صوتی می باشد (۱ مد صوتی طولی و ۲ مد صوتی عرضی). همانطور که در نمودار پاشندگی فونونی مشخص است ۲ مد صوتی عرضی در مسیر Γ -L یکسان بوده و دارای یک تبهگنی دو گانه می باشند. عدم وجود مد های منفی در ساختار نوار فونونی نشان دهنده عدم وجود حالت های موهومی در کل منطقه بریلوئین در طیف های فونونی تی-کربن است که بیانگر پایداری جنبشی ساختار می باشد. علاوه بر این، نتایج فونونی به دست آمده در این پژوهش، تطابق قابل قبولی با تحقیقات قبلی دارد [۲۲].



شکل ۱. (a) یاخته واحد (b) چند یاخته (c) منحنی انرژی - حجم (d) منحنی حجم - فشار تی-کربن

پایداری ساختار یاخته واحد با محاسبه انرژی همبستگی بیان می گردد. انرژی همبستگی یاخته واحد تی-کربن با شکل ذیل می باشد:

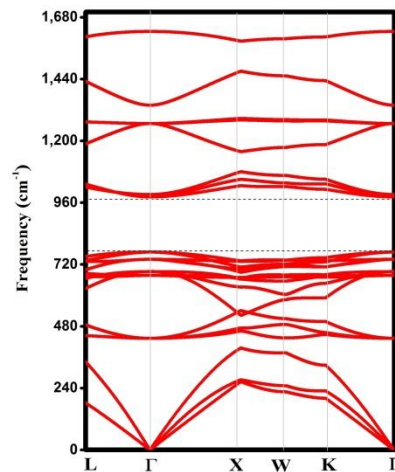
$$E_{coh} = (E_{T-C}^{total} - mE_C) / m \quad (2)$$

که E_{T-C} انرژی کل یاخته واحد تی-کربن، E_C انرژی اتم کربن و همچنین m تعداد اتم های کربن در هر یاخته واحد تی-کربن می باشد. بر اساس محاسبات انجام شده، انرژی همبستگی یاخته واحد تی-کربن برابر ۶/۶۴۵ (الکترون ولت بر اتم) بدست آمده است. که بیانگر ثبات ساختاری خوب این آلترپ کربنی می باشد.

در جدول ۱، نتایج داده های ساختاری محاسبه شده نانوساختار تی-کربن از قبیل: پارامتر های بهینه شده شبکه، انرژی کل، گاف نوار انرژی و انرژی همبستگی در این تحقیق با استفاده از روش تقریبی PBE-GGA بیان شده است و با روش های محاسباتی تحقیقات پیشین مقایسه گردیده است.

جدول ۱. داده های ساختاری محاسبه شده تی-کربن به روش

استفاده شوند. حالت‌های انتقالی لبه، که به عنوان حالت‌های سطحی شناخته می‌شوند، در نزدیکی سطح ماده نیمه‌رسانا قرار دارند. این حالت‌ها به دلیل وجود گستره‌های انرژی کوچک در لبه نوار ظرفیت و لبه صاف و پهن در لبه نوار رسانش شکل می‌گیرند. مطابق شکل ۳، ساختار نوار انرژی تی-کربن دارای این شرایط می‌باشد. بنابراین الکترون‌هایی که در حالت‌های انتقالی لبه قرار دارند، به طور معمول با سطح نانو ساختار تعامل دارند و می‌توانند برای پدیده‌های الکترونیکی مانند رسانش و انتقال جریان الکتریکی مورد استفاده قرار گیرند. برای استفاده از حالت‌های انتقالی لبه در انتقال الکترونیکی، معمولاً تغییرات در ساختار سطح ماده نیمه‌رسانا (مانند تغییرات در فلزات گذار) یا اعمال میدان الکتریکی خارجی صورت می‌گیرد. این تغییرات باعث تغییر در گستره‌های انرژی حالت‌های انتقالی لبه می‌شود و الکترون‌ها را قادر می‌سازد تا به حالت‌های نواری مناسب برای انتقال جریان الکتریکی جابجا شوند. با استفاده از حالت‌های انتقالی لبه، می‌توان جریان الکتریکی را در این ماده نیمه‌رسانا بهبود بخشید و عملکردهای الکترونیکی را بهبود داد علاوه بر این، نانو ساختارهای دارای این حالت‌ها انرژی می‌تواند جهت استفاده در طراحی قطعات نوآرانه‌ای مانند ترانزیستورهای فلز-اکسید، دستگاه‌های تشدید نور و آشکارسازهای اپتیکی نقش مؤثری داشته باشند. محاسبات بر روی چگالی حالات کل و جزئی هر اتم کربن در تی-کربن پیش یابی شده، بیانگر چگالی حالات جزئی یکسان در اوربیتال‌های $2p_x$ ، $2p_y$ و $2p_z$ می‌باشند و سهم اوربیتال‌های $2p$ بیشتر از اوربیتال‌های $2s$ می‌باشد. به طور ویژه، تجزیه و تحلیل تراکم بار نشان می‌دهد که تراکم چگالی الکترونی در اطراف پیوندهای درونی تتراکربن‌ها بسیار بالاتر از پیوندهای بیرونی آنها در ساختار تی-کربن می‌باشد.



شکل ۲. ساختار نواری فونونی تی-کربن

۴. خواص الکترونی

برای مطالعه خصوصیات الکترونی، ابتدا نانو ساختار تی-کربن بهینه شده در شرایط بدون فشار بررسی می‌شود. شکل ۳، بیانگر ساختار نواری انرژی، چگالی حالات کل و جزئی (DOS و PDOS) تی-کربن در شرایط آزاد می‌باشد. بر اساس این تصویر، این نانو ساختار سه بعدی به عنوان یک نیمه هادی گاف مستقیم با مقدار گاف انرژی ۲/۲۶ الکترون ولت، بر روی نقطه Γ شناخته می‌شود. این مقدار گاف بین ساختار نواری انرژی و چگالی حالاتها یکسان است. همچنین این مقدار گاف انرژی در این روش محاسبه، توافق خوبی با مقادیر بدست آمده در پژوهش‌های قبلی دارد [۲۲]. نکته قابل توجه در ساختار نواری این نانو ساختار وجود لبه تیز انرژی نوار ظرفیت و لبه صاف و گستره انرژی نوار رسانش است. الکترون‌ها در یک نیمه‌رسانا می‌توانند به دو حالت انتقالی تقسیم شوند: حالت‌های انتقالی نواری و حالت‌های انتقالی لبه. حالت‌های انتقالی نواری، که به عنوان حالت‌های انرژی آزاد نیز شناخته می‌شوند، در نوار انرژی ماده نیمه‌رسانا قرار دارند. این حالت‌ها به طور معمول توسط الکترون‌ها پر شده و تعداد الکترون‌ها در آنها به تعداد الکترون‌های موجود در ماده نیمه‌رسانا بستگی دارد. الکترون‌هایی که در حالت‌های نواری قرار دارند، به طور کلی به عنوان الکترون‌های پایه شناخته می‌شوند و برای جابجایی و انتقال جریان الکتریکی نمی‌توانند به طور مستقیم

می باشد و بسیاری از ویژگی های اپتیکی نظیر جذب ، بازتابش از این مشخصه بدست می آیند. تابع دی الکتریک مختلط به صورت زیر تعریف می شود:

$$\varepsilon(\omega) = R_{\varepsilon} + iI_{\varepsilon} \quad (3)$$

که R_{ε} و I_{ε} به ترتیب قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مختلط می باشند. با استفاده از رابطه کرامرز- کرونینگ قسمت حقیقی تابع دی الکتریک را می توان برحسب قسمت موهومی آن به صورت زیر نوشت [۲۷]:

$$R_{\varepsilon}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} P_r \int_0^{\infty} \frac{\omega' I_{\varepsilon}(\omega')}{\omega^2 - \omega'^2} \omega' d\omega' \quad (4)$$

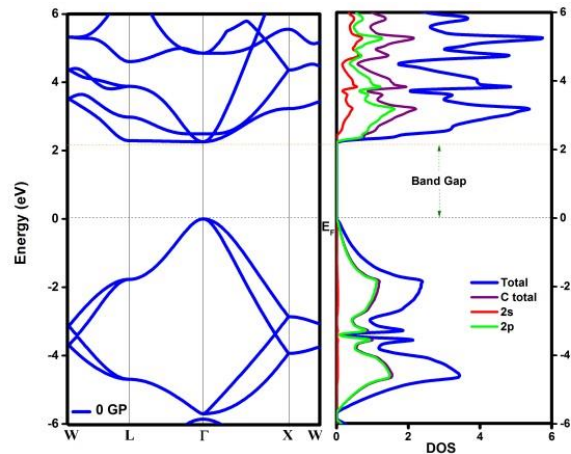
که در آن P_r ، تابع کوشی و I_{ε} ، قسمت موهومی تابع دی الکتریک مختلط است که از رابطه ذیل استنتاج می گردد [۲۹]:

$$I_{\varepsilon} = \frac{\hbar^2 e^2}{\pi^2 m^2 \omega^2} \sum_n \int d_k \langle \psi_{c_k}^{\alpha} | P^{\alpha} | \psi_{v_k}^{\alpha} \rangle \langle \psi_{v_k}^{\beta} | P^{\beta} | \psi_{c_k}^{\beta} \rangle \delta(E_{c_k}^{\alpha} - E_{v_k}^{\beta} - \omega) \quad (5)$$

که در رابطه فوق P ماتریس دوقطبی و V_n و C_n حالت های اولیه و نهایی می باشند. با محاسبه قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مختلط، می توان ویژگی های اپتیکی مانند ضرایب شکست، خاموشی، انعکاس و ضریب جذب هر ساختاری را به سادگی به دست آورد.

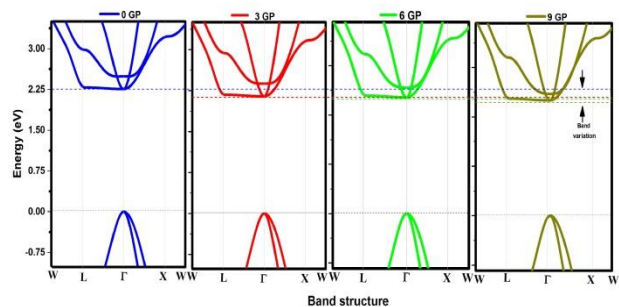
طیف حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مربوط به بلور تی-کربن در جهت Z، در حالت بهینه و تحت فشار تا ۹ گیگا پاسکال، به ترتیب در شکل ۵ و ۶، نشان داده شده است.

با توجه به طیف نمودار بخش حقیقی، در طیف انرژی الی ۱۶ الکترون ولت مقادیر منفی وجود ندارد که بیانگر تداوم ترکیب انتشار در این محدوده است. طیف نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک دارای گاف اپتیکی است که با نتایج به دست آمده از ساختار نواری انرژی سازگاری مناسبی دارد. با افزایش فشار تا ۹ گیگا پاسکال، دامنه طیف بخش حقیقی تابع دی الکتریک اندکی افزایش می یابد و اندکی کاهش در بخش



شکل ۳. ساختار نواری انرژی و چگالی حالات الکترونی (DOS و PDOS) پنتا گرافن در حالت بهینه

ساختار نواری انرژی بلور تی-کربن تحت فشار هیدرواستاتیک تا ۹ گیگا پاسکال در شکل ۴، نمایش داده شده است. در این وضعیت دیده می شود، گاف انرژی کریستال کمی کاهش می یابد و به صورت گاف مستقیم در نقطه Γ باقی می ماند. محاسبات نشان می دهد در اثر اعمال فشارهای ۳، ۶ و ۹ گیگا پاسکال گاف انرژی بلور در حالت آزاد از ۲/۲۶ الکترون ولت به ترتیب به مقادیر ۲/۱۴۳، ۲/۱۲ و ۲/۰۹۹ الکترون ولت کاهش می یابد.



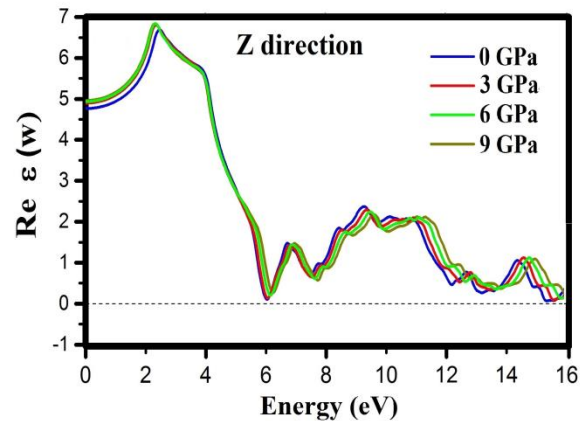
شکل ۴. ساختار نواری انرژی تی-کربن تحت تاثیر تنش فشاری

۵. خواص اپتیکی

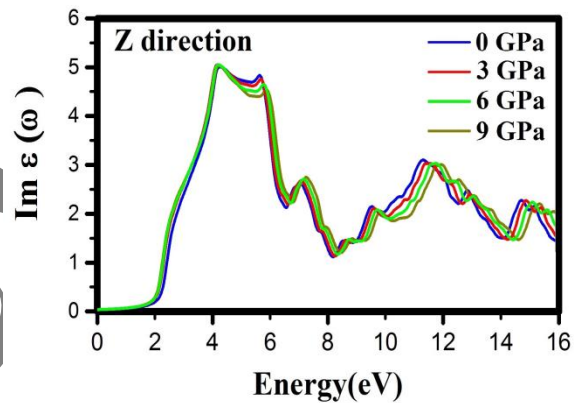
در این بخش، برای درک بهتر رفتار تی-کربن تحت شرایط تنش هیدرو استاتیکی، برخی از جنبه های اپتیکی مهم ساختار در محدوده انرژی الی ۱۶ الکترون ولت، مورد بررسی قرار می گیرد. می توان گفت تابع دی الکتریک مهم ترین مشخصه ساختاری است که بیانگر رفتارهای نوری ماده مقابل تابش نور

محدوده بالای طیف نور مرئی می‌باشد، همچنین دارای شدت جذب نور قابل توجهی در محدوده ۴ الی ۶ الکترون ولت می‌باشد. به نحوی که در محدوده ۵/۷ الکترون ولت دامنه شدت جذب به حدود $0.8 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ می‌رسد. که این میزان جذب در این محدوده انرژی فوتون فرودی، قابل مقایسه و سازگاری با سلولهای خورشیدی پروسکیت آلی است [۳۰]. همچنین باتوجه به شروع آستانه جذب نوری از حدود ۲ الکترون ولت در نمودار جذب که بیانگر تطابق این جنبه نوری با گاف انرژی الکترونی این نیمه هادی می‌باشد، می‌توان این ساختار را به عنوان یک جاذب اپتیکی مناسب جهت استفاده در طراحی سنسورهای الکترونوری معرفی کرد.

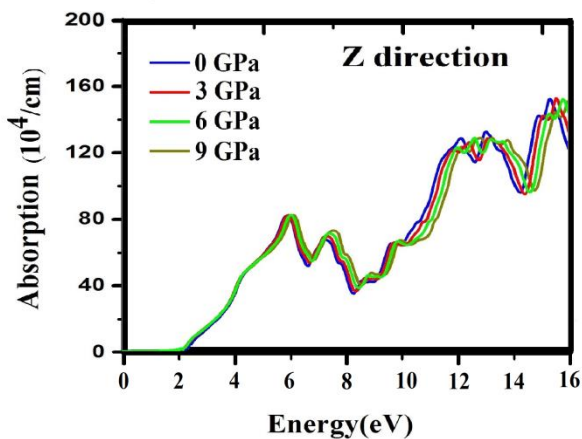
با توجه به این نمودارها، با افزایش فشار تا ۹ گیگا پاسکال بروی بلور، طیف جذب و بازتابش به آهستگی افزایش می‌یابد (تغییر آرام). پیک جذب نسبتاً بالا و بازتابش پایین در محدوده انرژی اپتیکی و بالاتر همراه با تغییرات آرام جنبه های اپتیکی تحت شرایط فشار همه جانبه هیدرواستاتیکی، بیانگر شرایط مطلوب این نانوالترپ کربنی به عنوان یک ساختار جاذب امواج اپتیکی می‌باشد.



شکل ۵. طیف حقیقی تابع دی الکتریک بلور تی-کربن در حالت بهینه و تحت فشار تا ۹ گیگا پاسکال



شکل ۶. طیف موهومی تابع دی الکتریک بلور تی-کربن در حالت بهینه و تحت فشار تا ۹ گیگا پاسکال



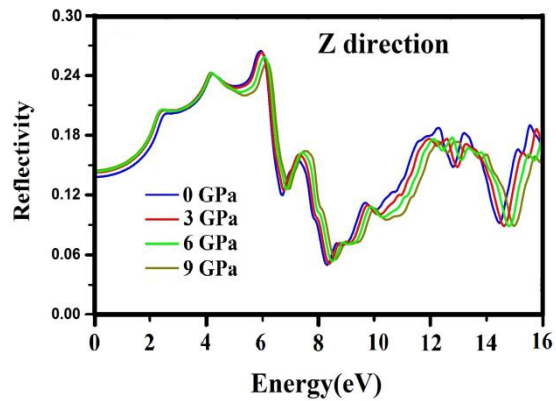
شکل ۷. طیف جذب بلور تی-کربن در حالت بهینه و تحت فشار تا ۹ گیگا پاسکال

موهومی تابع دی الکتریک تحت شرایط اعمالی رخ می‌دهد. به طور کلی، با توجه به اعمال فشار، تغییرات جزئی در پلات‌های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک این ساختار مشاهده می‌شود.

دو ویژگی مهم برای بررسی جنبه های اپتیکی قطعاً جذب و بازتابش می‌باشد. در ادامه این خواص اپتیکی تحت تحت فشار تا ۹ گیگا پاسکال بروی بلور تی-کربن، مورد مطالعه قرار گرفته است. این خواص اپتیکی در جهت قطبش محور Z در شکل ۷ و ۸، ترسیم شده است.

شکل ۷، بیانگر شدت جذب نسبتاً بالای این ساختار در

این نانو ساختار به عنوان یکی از آلترپ های کربن استخراج گردیده است بیانگر توافق جنبه های اپتیکی و الکترونی این نانوماده است. و می توان اظهار داشت این نانو ساختار با توجه به پیک جذب نسبتا بالا و بازتابش پایین در محدوده انرژی امواج اپتیکی همراه با تغییرات آرام جنبه های اپتیکی تحت شرایط فشار همه جانبه هیدرواستاتیکی، شرایط مطلوبی را به عنوان یک ساختار جاذب اپتیکی داراست. همچنین می تواند ماده مناسبی جهت استفاده در طراحی سنسورهای الکترونی و سلول های خورشیدی در شرایط پیش بینی شده در این مطالعه با کاربردهای متنوع باشد.



شکل ۸. طیف بازتابش بلور تی-کربن در حالت بهینه و تحت فشار تا ۹ گیگا پاسکال

۶. نتیجه گیری

به طور خلاصه، در این مقاله ضمن مطالعه شرایط پایداری دینامیکی و استاتیکی نانو ساختار سه بعدی تی-کربن خواص الکترواپتیکی این نانو آلترپ کربنی، تحت تاثیر شرایط فشار هیدرواستاتیکی بر مبنای محاسبات اساسی اولیه در قالب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از نرم افزارهای شبیه سازی و کدهای محاسباتی جهت نتیجه گیری کاربردی مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج خواص الکترونی این نانو ساختار به عنوان یک نیمه هادی با گاف انرژی مستقیم تحت فشار هیدرواستاتیکی از قبیل ساختار نواری و چگالی حالات الکترونی بیانگر کاهش جزئی گاف انرژی در اثر افزایش فشار می باشد. بررسی و تجزیه تحلیل خصوصیات اپتیکی از قبیل جذب و بازتاب، تحت شرایط فشار هیدرواستاتیکی نیز بیانگر تغییرات جزئی و نرم در این جنبه ها می باشد. همچنین رفتارهای که از خواص نوری

دانشگاه

1. K S Novoselov, *et al.*, *Science* **306** (2004) 666.
2. S Okada, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 041408.
3. K S Novoselov, *et al.*, *Nature* **438** (2005) 197.
4. S Balendhran, *et al.*, *Small* **11** (2015) 640.
5. S Zhang, *et al.*, *Nano Lett.* **17** (2017) 3434.
6. H Althib, *et al.*, *Bull. Mater. Sci.* **44** (2021) 254.
7. A Lopez-Bezanilla and P B Littlewood, *J. Phys. Chem.C* **119** (2015)19469.
8. M Benidris, *et al.*, *Bull. Mater. Sci.* **44** (2021) 221.
9. S Yalameha, *et al.*, *2021 Materials Science and Engineering B* **273** (2021) 115430.
10. H Alborznia, *et al.*, *Optik* **180** (2019) 125.
11. H Alborznia, *et al.*, *Journal of Research on Many-body Systems* **11** (2021) 1.
12. S Y Wakhare and M D Deshpande, *Bull. Mater. Sci.* **42** (2019) 206
13. H R Alborznia and S T Mohammadi, *Bull. Mater. Sci.* **44** (2021) 180.
14. F A Celik *Bull. Mater. Sci.* **45** (2022) 108.
15. H R Alborznia and S T Mohammadi, *Iran. J. Phys. Res.* **20** (2020) 259
16. H Alborznia and S T Mohammadi, *Indian J. phys.* **32** (2022) 2.
17. H Alborznia, *Inter. J. Mod. Phys. B.* **38** (2024) 2450085.
18. B Ram and H Mizuseki, *Carbon* **137** (2018) 266.
19. D M Hoat, *et al.*, *Indian J. Phys* **95** (2021) 2365.
20. H Alborznia, *et al.*, *Superlattice Microstruct.* **133** (2019) 106217.
21. H Alborznia, *Surf. Rev. Lett.* **29** (2022) 2250078.
22. X-L Sheng, *et al.*, *Physical Review Letters* **106** (2011) 155703.
23. W Jia-Qi, *et al.*, *J. Phys. Condens. Matter* **28** (2016) 475402.
24. P Blaha, *et al.*, "An augmented planeWave+local orbitals program for calculating crystal properties WIEN2k 13.1", Wien2K users guide, (2013) ISBN 3-9501031-1-2J.P.
25. J P Perdew, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3865.
26. H J Monkhorst and J D Pack, *Phys. Rev. B* **13** (1976) 5188.
27. H Ehrenreich and M H Cohen, *Phys. Rev.* **115** (1959) 786.
28. F Birch, *J. Geophys. Res.: Solid Earth* **91**(1986) 4949.
29. M C Abt, *et al.*, *Physica B: Condens. Matter* **194–196** (1994) 1451.
30. N J Jeon, *et al.*, *Nat. Mater.* **13** (2014) 897.