



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

حمیدرضا البرزیا*

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه پدافند هوایی خاتم الانبیا(ص)، تهران

پست الکترونیکی: h.alborznia@khadu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۳/۰۲/۲۲؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۳/۰۴/۰۶)

چکیده

در این تحقیق، با استفاده از محاسبات اصول اولیه بر اساس تئوری تابعی چگالی (DFT)، به بررسی عملکرد الکترواپتیکی نانوساختار سه بعدی تی-کربن می پردازیم. علاوه بر بررسی پایداری دینامیکی و استاتیکی، ساختار بهینه شده یاخته واحد تی-کربن، در راستای یک پژوهش نوین، خواص الکترواپتیکی، تحت تأثیر تنش هیدرواستاتیکی همه جهته بر یاخته واحد تا ۹ گیگاپاسکال، با به کارگیری کدهای محاسباتی، شبیه سازی شده است. نتایج به دست آمده بیانگر عملکرد قابل قبول این نانوساختار به عنوان یک ماده مناسب جاذب اپتیکی است و می توان این نانوساختار سه بعدی را جهت استفاده در طراحی قطعات نوآورانه ای مانند حسگرهای الکترواپتیکی، دستگاه های تشدید نور، آشکارسازهای اپتیکی و سلول های خورشیدی پروسیت آلی پیشنهاد داد.

واژه های کلیدی: تئوری تابعی چگالی، آلترپ کربنی، نانو ساختار سه بعدی تی-کربن، خواص الکترواپتیکی

۱. مقدمه

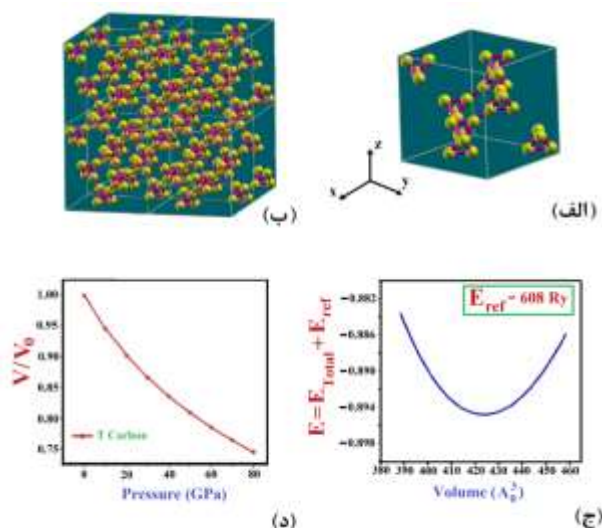
و مورد مطالعه قرار گرفته است [۲-۲۲]

آلترپ مکعبی سه بعدی جدید کربن به نام تی-کربن، به عنوان یک نیمه هادی با گاف انرژی مستقیم معرفی شده 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 بر تئوری تابعی

فراوری نانوساختارهای چلیدبا ویژگی های الکترواپتیکی متنوع، می تواند 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 گسترده ای جهت پیش یابی و فراوری انواع نانو ساختارهای دوبعدی و سه بعدی از آلترپ های کربن صورت گیرد. در سال های اخیر نانو ساختارهای متعددی پیش یابی شده

۱. Density Functional Theory



شکل ۱. (الف) یاخته واحد، (ب) چند یاخته، (ج) منحنی انرژی - حجم و (د) منحنی حجم - فشار تی-کربن.

تصادفی^۷ (RPA) برای به دست آوردن مولفه‌های تابع دی‌الکتریک مختلط این نانوساختار استفاده می‌شود [۲۷].

۳. خواص ساختاری و پایداری

نانوساختار مکعبی سه‌بعدی تی-کربن دارای گروه فضایی Fd3m، یک نانوساختار بلوری است که با جایگزینی هر اتم کربن در بلور الماس با یک تتراکربن به دست می‌آید. با توجه به شکل ۱، ثابت‌های شبکه تی-کربن (a,b,c) با استفاده از حالت ترمودینامیکی معادله بیرچ-مورنگان^۸ بهینه شده‌اند [۲۸].

مطابق شکل ۱، بخش (الف) نشانگر آرایش یاخته واحد تی-کربن است. بخش (ب) چند یاخته $2 \times 2 \times 2$ این کریستال را نمایش می‌دهد. بخش (ج) منحنی انرژی برحسب حجم را برای یاخته واحد تی-کربن نشان می‌دهد. نقطه کمینه این منحنی، بیانگر حجم بهینه شده در حداقل انرژی یاخته واحد است. در نهایت

چگالی (DFT)، علاوه بر بررسی پایداری فونونی و ساختاری، 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 می‌گیرد. نتایج نهایی نشان می‌دهد که با توجه به شرایط لحاظ شده، نانوساختار مورد نظر می‌تواند در طراحی دستگاه‌های الکترواپتیکی چند منظوره کارایی داشته باشد و به عنوان یک ماده مناسب جاذب اپتیکی پیشنهاد شود.

۲. روش محاسباتی

روش‌های محاسباتی استفاده شده در این تحقیق بر پایه اصول محاسبات اولیه مبتنی بر تئوری تابعی چگالی است. برای واکاوی پایداری فونونی این نانوساختار از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو^۲ با مش بندی $8 \times 8 \times 8$ استفاده شده است. از کدهای محاسباتی WIEN2k برای محاسبه جنبه‌های الکترونی و نوری این نانوساختار سه‌بعدی استفاده شده است [۲۴]. برای بسط تابع موج کوهن شم^۳، از روش امواج تخت خطی با پتانسیل کامل به علاوه اوربیتال محلی (FP-LAPW + LO) استفاده شده است. همچنین برای بسط پتانسیل تبادلی همبستگی، روش تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) به کار رفته است [۲۵]. همچنین از تقریب منخوردست-پک^۴ در منطقه اول بریلوئن و از روش (PBE)^۵ برای محاسبات الکترونی و نوری استفاده شده است [۲۶]. پارامترهای ورودی محاسباتی $RMTKmax = 7$ ، $lmax = 10$ ، $Gmax = 14 Ry1/2$ در حالی که در محاسبه ویژگی‌های الکترونی، انرژی جداسازی هسته از الکترون‌های لایه ظرفیت ۸- ریدبرگ در نظر گرفته شده است. محاسبات اسپینی بدون قطبش لحاظ شده است. همچنین از رولبط کرامرز-کرونیگ^۶ و روش تقریب فاز

۱. Hydrostatic tension

۲. Quantum Espresso

۳. Kohn-Sham

۴. Monkhorst-Pack

۵. Perdew-Burke-Ernzerhof

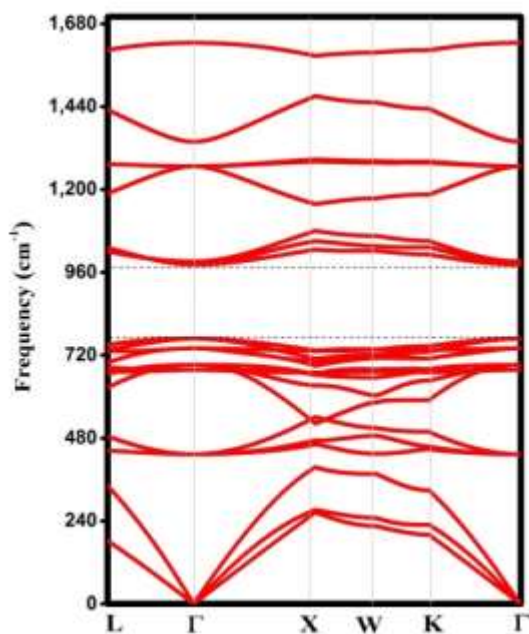
۶. Kramers-Kronig

۷. Random Phase Approximation

۸. Birch-Murnaghan

جدول ۱. داده‌های ساختاری محاسبه شده تی-کربن به روش تقریبی LDA، GGA و PBE-GGA.

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



شکل ۲. ساختار نواری فونونی تی-کربن.

در شکل ۲ رسم شده است. مطابق ساختار نوار فونونی بر مبنای تعداد اتم‌های تشکیل‌دهنده یاخته واحد تی-کربن ($p = 8$)، تعداد کل مدهای فونونی ۲۴ مد ($3p$) است. تعداد مدهای نوری ($3p-3$) برابر ۲۱ مد نوری (۷ مد اپتیکی طولی و ۱۴ مد اپتیکی عرضی) و ۳ مد بسامد پایین مدهای صوتی (۱ مد صوتی طولی و ۲ مد صوتی عرضی) است. همان‌طور که در نمودار پاشندگی فونونی مشخص است ۲ مد صوتی عرضی در مسیر Γ -L یکسان بوده و یک تبهگنی دوگانه دارند. عدم وجود مدهای منفی در ساختار نوار فونونی نشان‌دهنده عدم وجود حالت‌های موهومی در کل منطقه بریلوئین در طیف‌های فونونی تی-کربن است که بیانگر پایداری جنبشی ساختار است. علاوه بر این، نتایج فونونی به‌دست آمده در این پژوهش، تطابق قابل قبولی با تحقیقات قبلی دارد [۲۲].

بخش د تصویر، منحنی فشار برحسب حجم برای یاخته واحد را نشان می‌دهد. پارامترهای شبکه یاخته واحد تی-کربن ($a = b = c$) در حالت بهینه برابر ۷/۵۲ آنگستروم است که با استفاده از حالت ترمودینامیکی معادلات بیرچ-مورنگان به دست می‌آیند [۲۸]:

$$E(V) = E_0 + \frac{9B_0V_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{1/3} - 1 \right]^2 B'_0 \right\} + \quad (1)$$

$$\frac{9B_0V_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{1/3} - 1 \right]^2 \left[6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{1/3} \right] \right\},$$

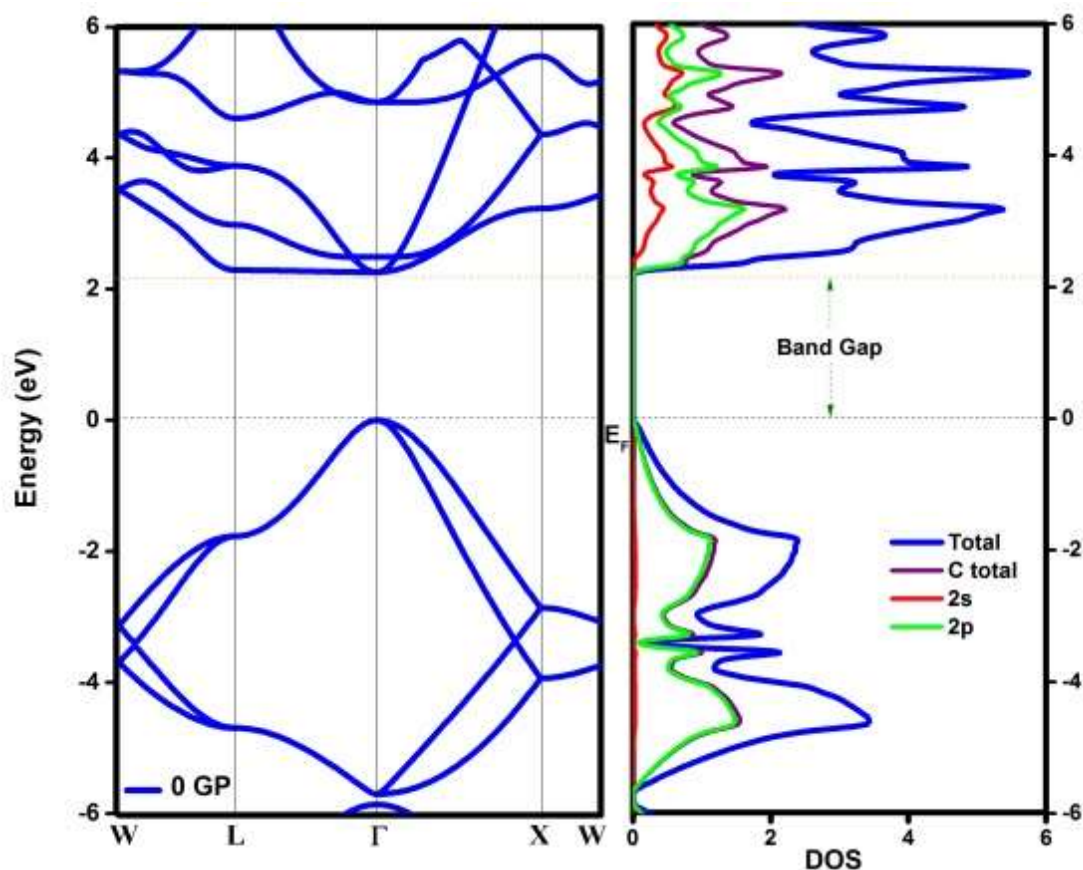
در رابطه (۱)، B_0 مدول ساختار انبوه و B'_0 مشتق مدول ساختار انبوه نسبت به فشار، V_0 حجم اولیه و V حجم پایدار برای پارامترهای شبکه بهینه شده ($a = b = c$) تی-کربن است. پایداری ساختار یاخته واحد با محاسبه انرژی همبستگی بیان می‌شود. انرژی همبستگی یاخته واحد تی-کربن به شکل ذیل است:

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

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

در جدول ۱، نتایج داده‌های ساختاری محاسبه شده نانوساختار تی-کربن از قبیل: پارامترهای 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 روش‌های محاسباتی تحقیقات پیشین مقایسه شده است.

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 $8 \times 8 \times 8$

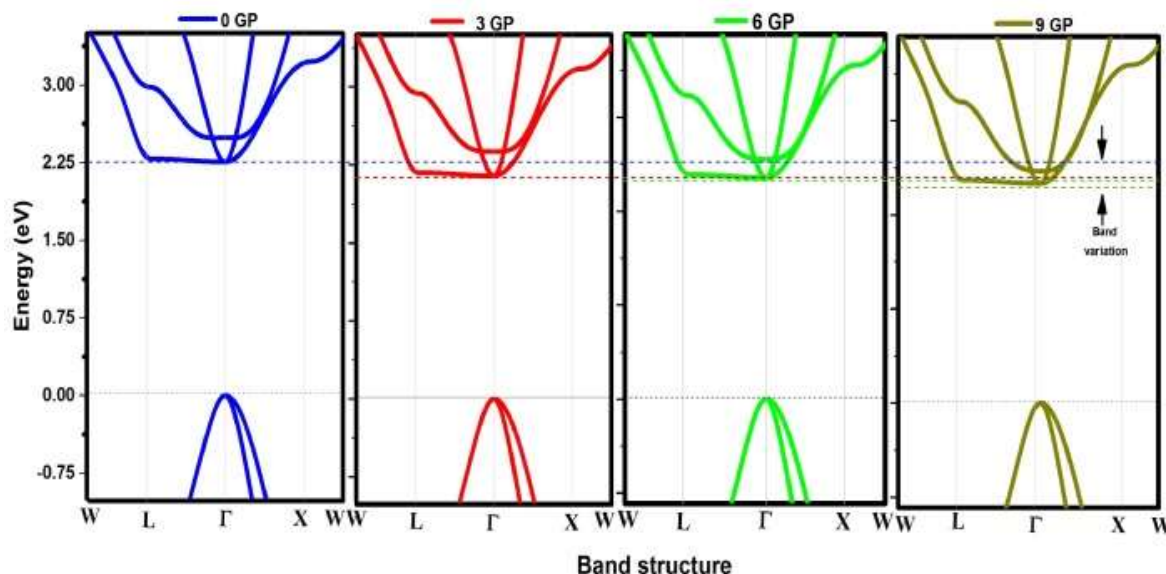


شکل ۳. ساختار نوار انرژی و چگالی حالات الکترونی (DOS و PDOS) پنتا گرافن در حالت بهینه.

۴. خواص الکترونی

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، به‌طور کلی به عنوان الکترون‌های پایه شناخته می‌شوند و برای جابه‌جایی و انتقال جریان الکتریکی نمی‌توانند به طور مستقیم 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 این شرایط را دارد. بنابراین الکترون‌هایی که در حالت‌های انتقالی لبه قرار دارند، به طور معمول با سطح نانوساختار تعامل دارند و می‌توانند برای پدیده‌های الکترونیکی مانند رسانش و انتقال

برای مطالعه خصوصیات الکترونی، ابتدا نانوساختار 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 است. بر اساس این تصویر، این نانوساختار سه‌بعدی به عنوان یک نیمه‌هادی گاف مستقیم با مقدار گاف انرژی ۲/۲۶ الکترون‌ولت، بر روی نقطه Γ شناخته می‌شود. این مقدار گاف بین ساختار نواری انرژی و چگالی حالات یکسان است. همچنین این مقدار گاف انرژی در این روش محاسبه، توافق خوبی با مقادیر به‌دست آمده در پژوهش‌های قبلی دارد [۲۲]. نکته قابل توجه در ساختار نواری انرژی این نانوساختار 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،



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

وضعیت دیده می‌شود، گاف انرژی کریستال کمی کاهش می‌یابد و به صورت گاف مستقیم در نقطه Γ باقی می‌ماند. محاسبات نشان می‌دهد در اثر اعمال فشارهای ۳، ۶ و ۹ گیگا پاسکال، گاف انرژی بلور در حלת آزاد از ۲/۲۶ الکترون ولت به ترتیب به مقادیر ۲/۱۴۳، ۲/۱۲ و ۲/۰۹۹ الکترون ولت کاهش می‌یابد.

۵. خواص اپتیکی

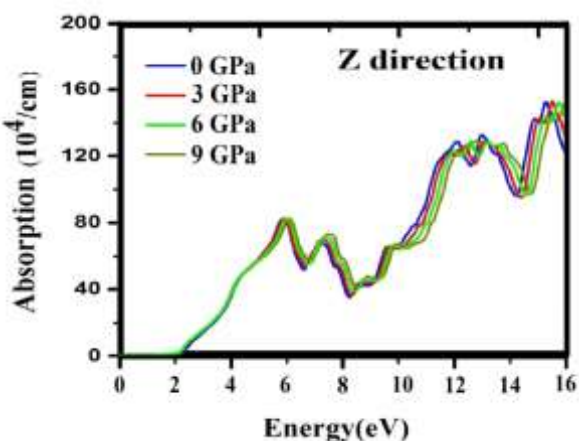
در این بخش، برای درک بهتر رفتار تی-کربن تحت شرایط تنش هیدرواستاتیکی، برخی از جنبه‌های اپتیکی مهم ساختار در محدوده انرژی ۰ الی ۱۶ الکترون‌ولت، مورد بررسی قرار می‌گیرد. می‌توان گفت تابع دی‌الکتریک مهم‌ترین مشخصه ساختاری است که بیانگر رفتارهای نوری ماده مقابل تابش نور است و بسیاری از ویژگی‌های اپتیکی نظیر جذب و بازتابش از این مشخصه به دست می‌آیند. تابع دی‌الکتریک مختلط به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\varepsilon(\omega) = R\varepsilon + iI\varepsilon, \quad (3)$$

که $R\varepsilon$ و $I\varepsilon$ به ترتیب قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط هستند. با استفاده از رابطه کرامرز-کرونینگ، قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک را می‌توان برحسب قسمت موهومی آن به صورت زیر نوشت [۲۷]:

جریان الکتریکی مورد استفاده قرار گیرند. معمولاً برای انتقالات الکترونیکی با استفاده از حالت‌های لبه اطراف گاف انرژی، تغییرات در ساختار سطح ماده نیمه‌رسانا (مانند تغییرات در فلزات گذار) با 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 جابه‌جا شوند. می‌توان جریان الکتریکی را در این ماده نیمه‌رسانا با استفاده از حالت‌های انتقالی لبه بهبود بخشید و عملکردهای الکترونیکی را ارتقاء داد. علاوه بر این، نانوساختارهای دارای این حالت‌های انرژی می‌توانند در طراحی قطعات نوآورانه‌ای مانند ترانزیستورهای فلز-اکسید، دستگاه‌های تشدید نوری و آشکارسازهای اپتیکی مورد استفاده قرار گیرند. محاسبات چگالی حالت‌های کلی و جزئی پیش‌یابی شده در اوربیتال‌های اتمی تی-کربن، بیانگر چگالی حالات جزئی یکسان در اوربیتال‌های $2p_x, 2p_y, 2p_z$ هستند و سهم اوربیتال‌های $2p$ بیشتر از اوربیتال‌های $s2$ است. به طور ویژه، تجزیه و تحلیل تراکم بار نشان می‌دهد که تراکم چگالی الکترونی در اطراف پیوندهای درونی تراکربن‌ها بسیار بالاتر از پیوندهای بیرونی آنها در ساختار تی-کربن است.

ساختار نواری انرژی بلور تی-کربن تحت فشار هیدرواستاتیکی تا ۹ گیگا پاسکال در شکل ۴، نمایش داده شده است. در این

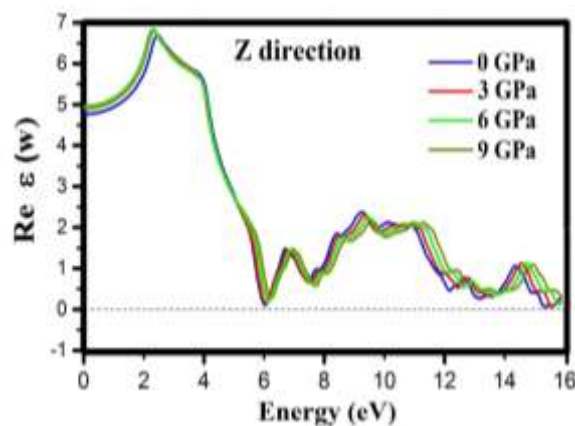


شکل ۷. طیف جذب بلور تی-کربن در حالت بهینه و تحت فشار تا ۹ گیگا پاسکال.

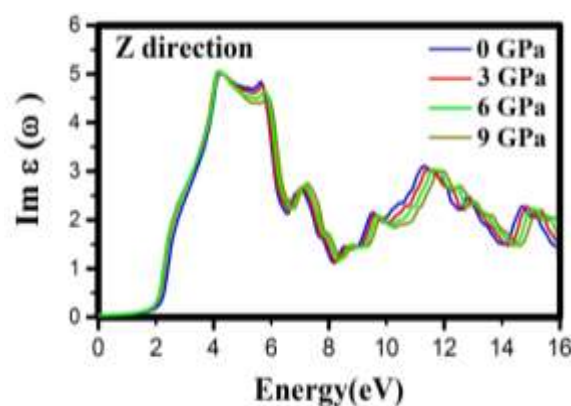
کربن در جهت Z، در حالت بهینه و تحت فشار تا ۹ گیگا پاسکال، به ترتیب در شکل ۵ و ۶، نشان داده شده است. با توجه به طیف نمودار بخش حقیقی، در طیف انرژی ۰ الی ۱۶ الکترون ولت مقادیر منفی وجود ندارد که بیانگر تداوم ترکیب انتشار در این محدوده است. طیف نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک گاف اپتیکی دارد که با نتایج 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 موهومی تابع دی الکتریک تحت شرایط اعمالی رخ می دهد. به طور کلی، با توجه به اعمال فشار، تغییرات جزئی در نمودارهای حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک این ساختار مشاهده می شود.

دو ویژگی مهم برای بررسی جنبه های اپتیکی قطعاً جذب و بازتابش است. در ادامه، این خواص اپتیکی 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 محدوده بالای طیف نور مرئی است، همچنین شدت جذب نور قابل توجهی در محدوده ۴ الی ۶ الکترون ولت است؛ به نحوی که در محدوده ۵/۷ الکترون ولت دامنه شدت جذب به حدود 10^6 cm^{-1} می رسد. این میزان جذب در این



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.

$$R_{\varepsilon}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{\gamma}{\pi} P_r \int \frac{\omega' I_{\varepsilon}(\omega')}{\omega' - \omega} \omega' d\omega', \quad (4)$$

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

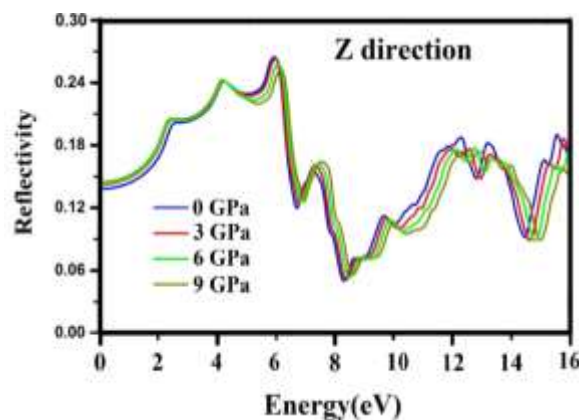
$$I_{\varepsilon} = \frac{\hbar^2 e^2}{\pi^2 m^2 \omega^2} \sum_n \int d_k \langle \psi_k^{c_n} | P^{\alpha} | \psi_k^{v_n} \rangle \quad (5)$$

$\langle \psi_k^{v_n} | P^{\beta} | \psi_k^{c_n} \rangle \delta(E_k^{c_n} - E_k^{v_n} - \omega)$ ، که P ماتریس دو قطبی و V_n و C_n حالت های اولیه و نهایی هستند. با محاسبه قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مختلط، می توان ویژگی های اپتیکی مانند ضریب 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-

۶. نتیجه گیری

به طور خلاصه، در این مقاله ضمن مطالعه شرایط پایداری دینامیکی و استاتیکی نانوساختار سه بعدی تی-کربن خواص الکترواپتیکی این نانوالترپ کربنی، تحت تأثیر 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 نانوساختار 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 است. 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 است. همچنین رفتارهایی که از خواص نوری این نانوساختار به عنوان یکی از آلترپ های کربن استخراج شده است بیانگر توافق جنبه های اپتیکی و الکترونی این نانوماده است و می توان اظهار داشت این نانوساختار با توجه به قله جذب نسبتاً 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 دارد. همچنین می تواند ماده مناسبی جهت استفاده در طراحی حسگرهای الکترونوری 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.

محدوده انرژی فوتون فرودی، قابل مقایسه و سازگاری با سلول های خورشیدی پروسیت آلی است [۳۰]. همچنین باتوجه به شروع آستانه جذب نوری از حدود ۲ الکترونولت در نمودار جذب که بیانگر تطابق این جنبه نوری با گاف انرژی الکترونی این نیمه هادی است، می توان این ساختار را به عنوان یک جاذب اپتیکی مناسب جهت استفاده در طراحی حسگرهای الکترونوری معرفی کرد.

با توجه به این نمودارها، با افزایش فشار تا ۹ گیگا پاسکال بروی بلور، طیف جذب و بازتابش به آهستگی افزایش می یابند (تغییر آرام). قله 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 است.

مراجع

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 Mater. Sci. Eng. B* **273** (2021) 115430.
10. H Alborznia, et al., *Optik* **180** (2019) 125.
11. H Alborznia, et al., *J. Res. Many. Sys.* **11** (2021) 1.
12. S Y Wakhare and M D Deshpande, *Bull. Mater. Sci.* **42** (2019) 206.

13. H R Alborzania and S T Mohammadi, *Bull. Mater. Sci.* **44** (2021) 180.
14. F A Celik *Bull. Mater. Sci.* **45** (2022) 108.
15. H R Alborzania and S T Mohammadi, *Iran. J. Phys. Res.* **20** (2020) 259.
16. H Alborzania and S T Mohammadi, *Indian J. phys.* **32** (2022) 2.
17. H Alborzania, *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 Alborzania, et al., *Superlattice Microstruct.* **133** (2019) 106217.
21. H Alborzania, *Surf. Rev. Lett.* **29** (2022) 2250078.
22. X-L Sheng, et al., *Phys. Rev. Lett.* **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., *Phys. B: Condens. Matter* **194-196** (1994) 1451.
30. N J Jeon, et al., *Nat. Mater.* **13** (2014) 897.