

خواص الکترونیکی و نوری نانو ساختار نوین دی سولفید ژرمانیوم به روش نظریه تابع چگالی

حمیدرضا البرزنی^۱ و سید تقی محمدی^۲

۱. گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی واحد کرمانشاه، کرمانشاه
۲. گروه فیزیک، مرکز علوم پایه، دانشگاه پدافند هوایی خاتم الانبیا (ص)، تهران

پست الکترونیکی: alborznia_ham@yahoo.com

(دریافت مقاله: ۱۳۹۷/۰۹/۰۹؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۹/۰۲/۲۴)

چکیده

با استفاده از نظریه تابع چگالی بر پایه محاسبات اولیه، در این مقاله نانو ساختار جدید دی سولفید ژرمانیوم (GeS_2) معرفی می‌شود. محاسبه انرژی همبستگی نشان می‌دهد که ساختار پیشنهادی از پایداری ترمودینامیکی خوبی برخوردار است. همچنین محاسبه نمودار پاشندگی فونونی به وسیله نرم افزار کوانتوم اسپرسو، پایداری دینامیکی این ترکیب را تأیید می‌کند. نتایج محاسبات نشان می‌دهد که دی سولفید ژرمانیوم، یک نیم رسانا با گاف انرژی غیر مستقیم حدود 0.9 الکترون ولت است که با اعمال تنش و کرنش دو محوره قابل تنظیم است. محاسبات نوری نشان می‌دهد که نانو ساختار پیشنهادی در ناحیه مرئی در برابر تابش فرودی، میزان جذب و بازتاب بسیار کمی را از خود نشان می‌دهد، این در حالی است که این ماده در ناحیه فرابنفش موج الکترومغناطیسی نه تنها جاذب خوبی است، بلکه بازتابش نسبتاً بالایی هم دارد. این خاصیت مبین آن است که این نانو ساختار می‌تواند در ساخت ابزارهای نوری و به طور خاص در ساخت حفاظ نور فرابنفش مورد استفاده قرار گیرد.

واژه‌های کلیدی: نظریه تابع چگالی، دی سولفید ژرمانیوم، خواص الکترونیکی، خواص نوری

۱. مقدمه

مطالعات گسترده‌ای جهت پیش‌یابی و جداسازی نانو

ساختارهای دوبعدی جدید انجام شود [۲-۴].

در سال ۲۰۱۴ نانو ساختارهای دو بعدی جدیدی از کربید برلیوم با خاصیت نیم رسانایی پیشنهاد شد [۵]. مطالعه خواص الکترونیکی این ماده نشان داده است که این ساختار یک نیم رسانای مستقیم با گاف انرژی حدود $1/52$ الکترون ولت

پیش‌یابی و فراوری مواد جدید با ویژگی‌های الکترونیکی و نوری جدید، می‌تواند نقش مهمی در توسعه ابزارهای الکترونوری نوین داشته باشد. پس از کشف گرافن در بیش از نیم قرن گذشته و جداسازی آن در سال ۲۰۰۴ [۱]، خواص منحصر به فرد این ساختار دو بعدی از کربن سبب شد که

سیستم تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA-PBE) به کار برده شده است [۱۰].

پارامتر همگرایی $R_{MT}K_{max}$ که در آن R_{MT} کوچکترین شعاع کره مافین تین و K_{max} بردار موج قطع است، برابر عدد ۷ و انرژی جداسازی ۸- لحاظ شده است. همچنین با در نظر گرفتن تقریب منخوردست [۱۱] رویکرد منخوردست- پک در محاسبات الکترونیکی و نوری به ترتیب مش بندی ساختار شبکه ای $12 \times 12 \times 2$ و $30 \times 30 \times 5$ و در منطقه اول بریلونن در نظر گرفته شده است. برای انجام دقیق محاسبات در اجرای برنامه، بازه همگرایی بار برابر با $e \times 10^{-6}$ لحاظ می شود. همچنین با استفاده از انرژی همبستگی سیستم^۴ و نرم افزار کوانتوم اسپرسو^۵ [۱۲] با در نظر گرفتن مش بندی $8 \times 8 \times 8$ پایداری دینامیکی تک لایه دی سولفید ژرمانیوم و نمودار پاشندگی فونونی این ساختار محاسبه می شود.

۳. خواص ساختاری سولفید ژرمانیوم

شکل های ۱. الف و ۱. ب، ابر یاخته 3×3 از سولفید ژرمانیوم را به ترتیب از نمای روبه رو و نمای کنار نشان می دهند.

نمودار انرژی بر حسب حجم برای سلول واحد نانو ساختار سولفید ژرمانیوم نشان می دهد که نقطه کمینه در این نمودار بیانگر حجم تعادلی یا حجم سلول واحد بهینه شده است که با یک محاسبه ساده، ثابت شبکه بهینه شده به دست می آید. نتیجه محاسبات حاضر نشان می دهد که تک لایه سولفید ژرمانیوم دارای ثابت شبکه $3/46$ آنگستروم است. نمودار انرژی بر حسب ثابت شبکه برای سلول واحد ساختار دو بعدی سولفید ژرمانیوم در شکل ۲ نشان داده شده است.

در ادامه با استفاده از ثابت شبکه بهینه شده، سلول واحد نانو ساختار تشکیل شد. برای جلوگیری از اثرات لایه های مجاور، ۱۵ آنگستروم خلأ در راستای عمود بر صفحه نانو لایه در نظر گرفته شد. در نهایت برای به دست آوردن پایدارترین حالت، سلول واحد بهینه شد که مقدار $2/44$ آنگستروم برای پیوند S-Ge حاصل شد. سپس برای بررسی میزان پایداری

است که گاف نواری این ماده با اعمال تنش^۱ و کرنش دومحوره^۲ به خوبی قابل تنظیم است [۶]. همچنین مطالعه خواص اپتیکی نانو ساختار دو بعدی کریید برلیوم نشان می دهد که این ماده دارای خواص نوری منحصر به فردی است که قابلیت کاربرد در ابزارهای جدید نوری را دارد [۷]. شبکه بلوری کریید برلیوم ساختار شش گوشه (هگزاگونال) دارد که ثابت شبکه سلول واحد آن $2/99$ آنگستروم است و از یک اتم کربن و دو اتم برلیوم تشکیل شده است. همچنین شبکه بلوری آن از سه صفحه تشکیل شده است که اتم های کربن در صفحه میانی و اتم های برلیوم در دو صفحه مجزا که هر کدام از این صفحات به اندازه $0/46$ آنگستروم از صفحه میانی فاصله دارند، قرار گرفته اند.

در این مقاله با الهام از ساختار بلوری تک لایه کریید برلیوم، برای اولین بار پیش یابی یک نانو ساختار دو بعدی جدید از سولفید ژرمانیوم ارائه می شود. در این نانو ساختار تک لایه جدید به طور مشابه تک لایه کریید برلیوم و کریید بور [۸]، اتم های کربن را با ژرمانیوم و اتم های برلیوم و بور را با گوگرد جایگزین می کنیم و ضمن اثبات پایداری ساختاری و دینامیکی تک لایه پیشنهادی، خواص الکترونیکی تحت اعمال شرایط تنش و کرنش و برخی از جنبه های اپتیکی آن با مطالعات ابتدا به ساکن با استفاده از نرم افزارهای مبتنی بر نظریه تابع چگالی، تنها به طور شبیه ساز مورد مطالعه قرار می گیرد و به عنوان یک نانو ساختار شبه گرافن جدید به صورت تئوری معرفی شده تا راهگشایی برای سنتز و فراوری این ساختار در تلاش های علمی پیش رو آینده در راستای استفاده در کاربردهای نوری و الکترونیکی باشد.

۲. روش محاسبات

در شبیه سازی حاضر از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابع چگالی^۳ (DFT)، توسط کد محاسباتی Wien2k [۹] استفاده شده است. همچنین برای بسط پتانسیل تبادل همبستگی،

۱. Tensile strain

۲. Compressive strain

۳. Density function theory

۴. Cohesive energy

۵. Quantum espresso

جدول ۱. مقایسه مقدار انرژی همدوسی نانو ساختار دو بعدی دی سولفید ژرمانیوم با ساختارهای مشابه مانند کربید برلیوم و کربید بور

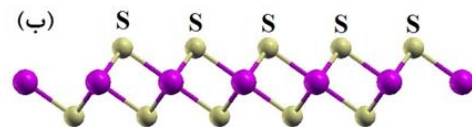
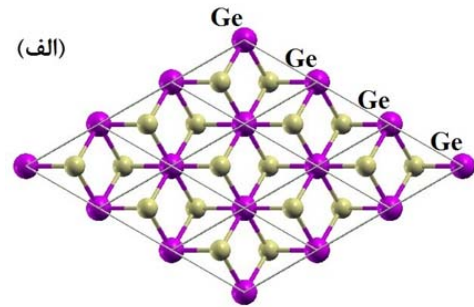
ساختار	l (Å ⁰)	E_G (eV)	E_{cho} (eV/atom)
Be ₃ C	۲/۹۹	۱/۵۲	-۴/۹۵
B ₃ C	۳/۹۳	۱/۴۴	-۶/۸۷
GeS ₂	۳/۴۶	۰/۹۲	-۴/۲۰

۴/۲- الکترون ولت بر اتم محاسبه شده است. مقایسه مقدار انرژی همدوسی این نانو ساختار دو بعدی با ساختارهای مشابه مانند کربید برلیوم و کربید بور طبق جدول ۱، تمایل به ایجاد ساختار مورد مطالعه را تأیید می‌کند. هر چند محاسبه انرژی همدوسی به تنهایی برای اثبات پایداری یک ساختار کافی نیست، اما مقدار محاسبه شده برای انرژی همدوسی، علاقه‌مندی اتم‌ها را به ایجاد ساختار دی سولفید ژرمانیوم نشان می‌دهد که این اتم‌ها به خوبی به همدیگر مقید هستند.

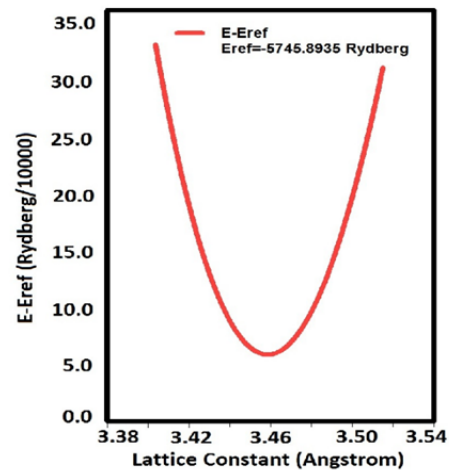
در ادامه برای بررسی پایداری دینامیکی نانو ساختار دی سولفید ژرمانیوم، نمودار پاشندگی فونونی این ساختار محاسبه شد. نمودار پاشندگی فونونی تک لایه مورد بررسی در شکل ۳ نشان داده شده است. همان گونه که از شکل پیداست، در این نمودار هیچ گونه مد منفی (موهومی) دیده نمی‌شود که این موضوع نشانگر پایداری دینامیکی این ساختار است. همچنین نمودار پاشندگی فونونی این ساختار به مقدار بسامد بیشینه حدود ۴۰۰/cm، که متعلق به بالاترین مد نوری ساختار مورد مطالعه است، در مقایسه با نانو ساختارهای دو بعدی مشابه مانند کربید برلیوم، که مقدار بسامد آخرین مد اپتیکی آن محدوده ۶۰۰/cm است، پایداری بهتری دارد [۱۳-۱۵].

۴. خواص الکترونیکی

برای بررسی خواص الکترونیکی ترکیب در چارچوب نظریه تابعی چگالی، نمودار ساختار نوار انرژی سیستم محاسبه شد. شکل ۴ نمودار ساختار نوازی و چگالی حالت‌های کلی و جزئی ترکیب GeS₂ را نشان می‌دهد. محاسبات نشان می‌دهد که این نانو ساختار نیمرسانایی با گاف انرژی غیر مستقیم ۰/۹۲ الکترون ولت است که نقطه



شکل ۱. ابر یاخته ۳×۳ دی سولفید ژرمانیوم (الف) از نمای روبه‌رو و (ب) از نمای کنار.



شکل ۲. تغییرات انرژی بر حسب ثابت شبکه سلول واحد ترکیب سولفید ژرمانیوم.

ترکیب، انرژی همبستگی سیستم محاسبه شد. انرژی همبستگی سیستم از رابطه زیر حاصل می‌شود:

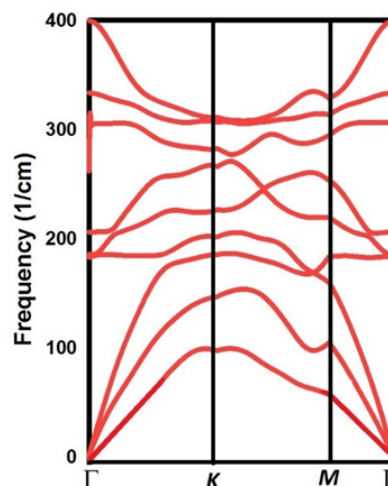
$$E_{coh} = \frac{E_{GeS_2}^{tot} - mE_S^{isolated} - nmE_{Ge}^{isolated}}{m+n}, \quad (1)$$

در معادله (۱) m و n به ترتیب تعداد اتم‌های گوگرد و ژرمانیوم موجود در سلول واحد است. $E_{GeS_2}^{tot}$ ، $E_S^{isolated}$ و $E_{Ge}^{isolated}$ به ترتیب انرژی کل سلول واحد، انرژی تک اتم گوگرد و انرژی تک اتم ژرمانیوم هستند. بر اساس این رابطه، انرژی همدوسی با مقدار منفی به معنی علاقه‌مندی و تمایل به ایجاد این ساختار است. مقدار انرژی همدوسی این ساختار

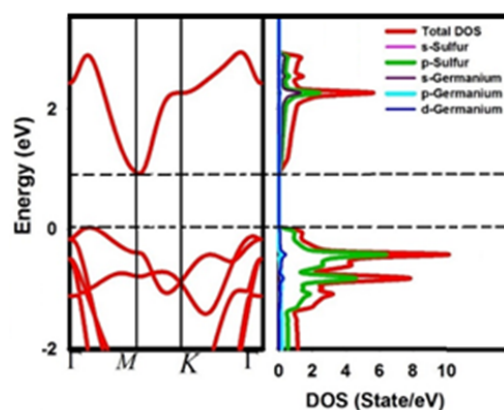
پیوندی تمرکز بسیار بیشتری در اطراف اتم گوگرد دارند که این امر می‌تواند بیانگر انتقال الکترونی از اتم ژرمانیوم به اتم گوگرد باشد که موجب ایجاد نوعی پیوند قطبی بین این دو اتم شده است. اما به قطعیت نمی‌توان درگیر بودن اتم گوگرد در سطح فرمی اوربیتال پی را نشان دهنده یونی بودن پیوند دانست و برای این منظور باید بار کل اتم‌های ژرمانیوم و گوگرد را محاسبه کرد ولی با توجه به تراکم چگالی اتم‌ها اطراف اتم گوگرد مطابق شکل ذیر، این احتمال بالا است. در ادامه برای بررسی بیشتر خواص ساختاری و الکترونیکی این نانو ساختار دو بعدی، رفتار آن در برابر اعمال تنش و کرنش دو محوره مورد مطالعه قرار گرفت. شکل ۶ چگونگی تغییر ترازهای انرژی نانو ساختار دو بعدی پیشنهادی را در شرایط اعمال تنش و کرنش دو محوره، نشان می‌دهد. نتیجه محاسبات نشان می‌دهد که با اعمال کرنش دو محوره، مقدار گاف انرژی این نیم‌رسانا کاهش پیدا می‌کند و با اعمال کرنش دو محوره بزرگ‌تر از ۱۲ درصد این ماده به حالت فلزی تغییر فاز می‌دهد. این در حالی است که با اعمال تنش دو محوره، گاف انرژی ابتدا اندکی بزرگ‌تر شده و سپس با آهنگ مشخصی کوچک می‌شود؛ در ضمن مکان گاف در فضای وارون تحت اعمال این شرایط تغییر می‌کند. نتیجه این محاسبات نشان می‌دهد که گاف انرژی این ساختار با اعمال تنش و کرنش دو محوره قابل تنظیم است که از این موضوع می‌توان در طراحی و ساخت حسگرهای مکانیکی استفاده کرد.

۵. خواص نوری

در این بخش خواص نوری نانو ساختار GeS_2 مورد بررسی قرار می‌گیرد. همان‌طور که در بررسی خواص الکترونیکی دیدیم این ساختار یک نیم‌رسانا با گاف انرژی ۰/۹۲ الکترون‌ولت است. برای مطالعه خواص نوری و بررسی امکان کاربرد این نانو ساختار در ساخت ابزارهای الکترونوری، پاسخ خطی این ماده در مقابل تابش فرودی به آن مورد بررسی قرار گرفت. مهم‌ترین مشخصه ماده که رفتار ماده را در مقابل تابش توضیح می‌دهد، تابع دی‌الکتریک مختلط است. تابع دی‌الکتریک مختلط به صورت زیر تعریف می‌شود:



شکل ۳. نمودار پاشندگی فونونی تک لایه سولفید ژرمانیوم.



شکل ۴. نمودار ساختار نواری و چگالی حالت‌های نانو ساختار دی سولفید ژرمانیوم.

بیشینه ترازهای ظرفیت این ساختار در نقطه‌ای بین نقاط M و Γ قرار دارد. این در حالی است که کمینه ترازهای رسانش این ترکیب در نقطه M قرار گرفته است.

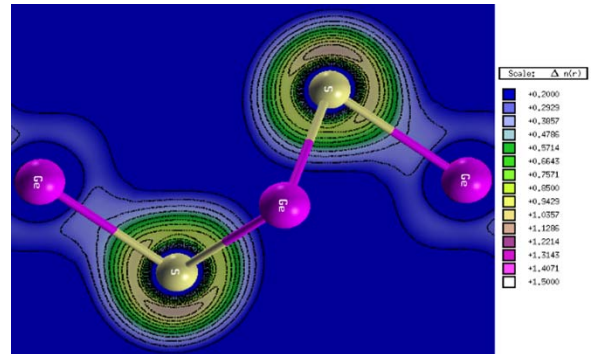
با دقت در نمودار چگالی حالات (نمودار سمت راست در شکل ۴) دیده می‌شود که در نزدیکی تراز فرمی، اوربیتال‌های p اتم گوگرد نقش بیشتری در پرشدگی ترازها دارند. لازم به ذکر است که همان‌گونه که از نمودار چگالی حالت‌ها مشخص است، اوربیتال‌های d اتم ژرمانیوم نیز نقش مؤثری در پرشدگی ترازهای ظرفیت پیرامون تراز فرمی دارند. این موضوع به خوبی در شکل ۵ که بیانگر چگالی الکترونی اتم‌های گوگرد و ژرمانیوم در صفحه پیوند ژرمانیوم-گوگرد است، دیده می‌شود. از این شکل پیداست که الکترون‌های

در اینجا P ماتریس دوقطبی و V_n و C_n حالت‌های اولیه و نهایی هستند. با استفاده از رابطه کرامرز-کرونینگ قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک را می‌توان بر حسب قسمت موهومی آن به صورت زیر نوشت:

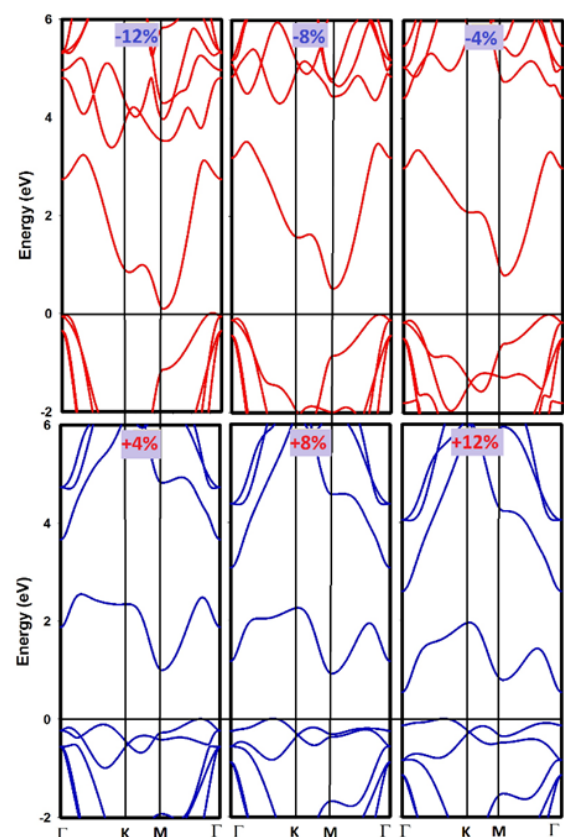
$$R_{\varepsilon}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} P_r \int_0^{\infty} \frac{\omega' I_{\varepsilon}(\omega')}{\omega'^2 - \omega'^2} \omega' d\omega', \quad (4)$$

در اینجا P_r مقدار کوشی است. با داشتن قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط، ضریب شکست $n(\omega)$ ، ضریب خاموشی $k(\omega)$ ، ضریب انعکاس $R(\omega)$ و ضریب جذب ماده به سادگی به دست می‌آید. شکل ۷ قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط را در دو راستای نانو نوار زیگزاگ و دسته صندلی نشان می‌دهد.

با توجه به شکل ۷ و نمودار مؤلفه حقیقی تابع دی‌الکتریک مختلط، رفتار ناهمسانگرد قابل ملاحظه‌ای در دو جهت نانو نوار زیگزاگ و دسته صندلی دیده می‌شود. لازم به ذکر است با توجه به تقارن ساختار و شباهت خواص نوری در جهات دسته صندلی، جنبه‌های نوری یکی از جهات دسته صندلی همراه با راستای نوار زیگزاگ بررسی می‌شود. آستانه شروع جذب نوری از حدود ۱ الکترون ولت آغاز می‌شود که این موضوع در توافق با گاف انرژی ترکیب نیم‌رسانا است. همچنین مقادیر استاتیک مؤلفه حقیقی تابع دی‌الکتریک در دو راستای نانو نوار دسته صندلی و زیگزاگ به ترتیب حدود $3/8$ و $5/3$ هستند. علاوه بر این در نمودار قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک مختلط، بیشینه‌های نسبی مختلفی دیده می‌شود. به طور ویژه سه قله مشخص در نقاط $3/5$ ، $5/5$ و $6/5$ الکترون ولت دیده می‌شود که این بیشینه‌ها که ناشی از انتقال‌های الکترونی بین ترازها هستند و به شکلی دیگر در مؤلفه موهومی تابع دی‌الکتریک خطی نیز دیده می‌شوند. همان گونه که دیده می‌شود، مؤلفه حقیقی تابع دی‌الکتریک خطی در انرژی حدود ۷ الکترون ولت به کمینه خود با مقدار منفی می‌رسد. مقدار منفی مؤلفه حقیقی تابع دی‌الکتریک مختلط بیانگر آن است که در بازه انرژی مورد نظر، تابش فرودی تا حد زیادی توسط این ماده بازتابیده می‌شود. به عبارتی در این ناحیه، ماده مورد مطالعه نوعی رفتار فلز گونه



شکل ۵. چگالی الکترونی اتم‌های گوگرد و ژرمانیوم در صفحه پیوند S-Ge

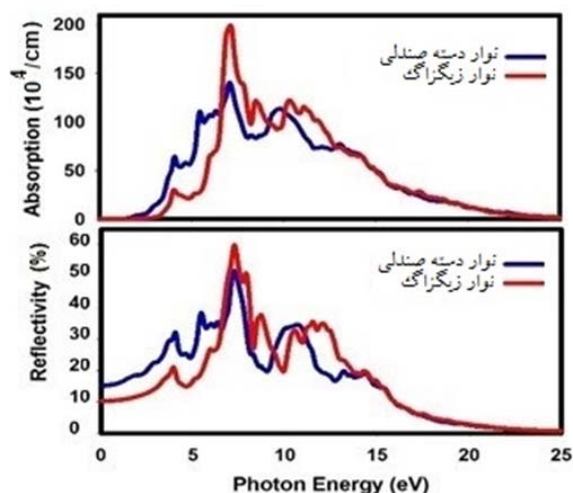


شکل ۶. تغییرات ساختار نوری نانو ساختار دی سولفید ژرمانیوم با اعمال تنش و کرنش دو محوره.

$$\varepsilon(\omega) = R_{\varepsilon} + iI_{\varepsilon}, \quad (2)$$

در اینجا R_{ε} و I_{ε} قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط را نشان می‌دهند. قسمت موهومی این تابع با رابطه زیر تعریف می‌شود [۱۶]:

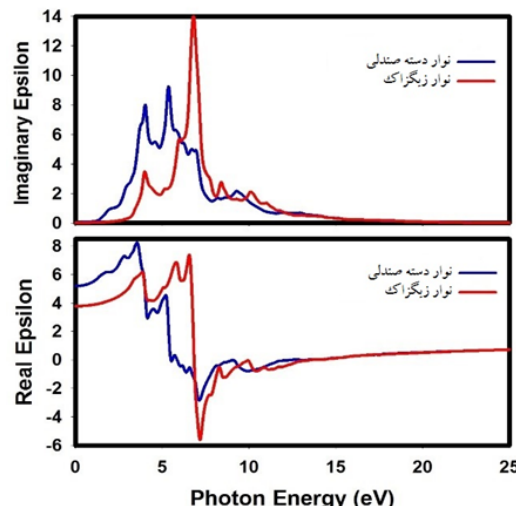
$$I_{\varepsilon} = \frac{\hbar^2 e^2}{\pi^2 m^2 \omega} \sum_n [d_k \langle \psi_k^n | P^x | \psi_k^n \rangle \langle \psi_k^n | P^y | \psi_k^n \rangle \delta(E_k^n - E_k - \omega)], \quad (3)$$



شکل ۸. نمودار نانو نوار زیگزاگ و دسته صندلی ضرایب جذب و بازتابش بر حسب انرژی فوتون فرودی.

۶. نتیجه گیری

در این مقاله بر پایه نظریه تابع چگالی با محاسبه انرژی همبستگی و بررسی نمودار پاشندگی فونونی، با به کارگیری کدهای محاسباتی کوانتوم اسپرسو، پایداری نانو ساختار دو بعدی دی سولفید ژرمانیوم (GeS_2) مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج به دست آمده بیانگر پایداری این نانو ساختار است که این موضوع امکان رشد این ساختار را به صورت تجربی پیش بینی می کند. با استفاده از نرم افزار Wien2k، خواص الکترونیکی و نوری این نانو ساختار در شرایط مختلف تنش و کرنش دو محوره مورد مطالعه قرار گرفته است که محاسبات مربوط به خواص الکترونیکی ماده، خاصیت نیم رسانایی با گاف انرژی غیرمستقیم حدود 0.92 eV الکترون ولت را پیش بینی می کند که این گاف انرژی با اعمال اثرات مکانیکی از قبیل تنش و کرنش، قابل تنظیم است. این موضوع بیانگر این مطلب است که این نانو ساختار قابلیت بالایی برای استفاده در ابزارهای الکترونیک نوری را دارد. از طرف دیگر محاسبات و شبیه سازی های نوری این نانو ساختار نشان داد که این ماده در ناحیه مرئی، ضریب جذب ناچیز و ضریب بازتابشی بسیار کمی دارد. لذا این ساختار می تواند در فناوری ساخت سلول های خورشیدی به عنوان لایه شفاف ضد بازتاب در سطح سلول های خورشیدی، مورداستفاده قرار



شکل ۷. نمودار تغییرات مؤلفه های موهومی و حقیقی تابع دی الکتریک در دو راستای نانو نوار زیگزاگ و دسته صندلی بر حسب انرژی فوتون فرودی.

از خود نشان می دهد. لازم به ذکر است که مؤلفه های موهومی و حقیقی تابع دی الکتریک در دو راستای نانو نوار زیگزاگ و دسته صندلی، بعد از 10 eV الکترون ولت همگرا می شوند.

در ادامه برای درک بیشتر رفتار نوری ترکیب GeS_2 ، ضریب بازتاب و ضریب جذب نانو ساختار شبه گرافنی مورد مطالعه قرار گرفت. تغییرات ضریب بازتابش و ضریب جذب ماده در دو راستای نانو نوار زیگزاگ و دسته صندلی بر حسب انرژی فوتون فرودی در شکل ۸ نشان داده شده است. با توجه به شکل ۸، نانو ساختار تحت بررسی در ناحیه مرئی در نانو نوار زیگزاگ نه تنها میزان جذب ناچیزی (تقریباً صفر) دارد، بلکه میزان بازتابش آن نیز بسیار کم و در حدود $10-12\%$ درصد است.

این موضوع پیشنهاد می کند که این نانو ساختار می تواند به عنوان لایه شفاف ضد بازتاب در سطح سلول های خورشیدی مورد استفاده قرار گیرد. همچنین دیده می شود که این ماده در ناحیه فرابنفش همزمان ضریب جذب و ضریب بازتابش نسبتاً بالایی دارد. به عبارتی این ماده در این ناحیه مشخص می تواند به عنوان حفاظ موج الکترومغناطیسی فرابنفش مورد استفاده قرار گیرد.

و ساخت لایه‌های محافظ امواج فرابنفش فراهم می‌کند.

گیرد. همچنین ضریب جذب و ضریب بازتابش بالای این نانو ساختار در ناحیه فرابنفش، امکان استفاده از آن را در طراحی

مراجع

- revised edition WIEN2k 13.1 release (2013/26/06)*
Wien2K users guide. ISBN 3-9501031-1-2.
10. J P Perdew, K Burke, and M Ernzerhof, *Physical Review Letters* **77**, 18 (1996) 3865.
 11. Monkhorst, H.J. and J.D. Pack, *Physical Review B* **13**, 12 (1976) 5188.
 12. G Paolo et al., *Journal of Physics: Condensed Matter* **21**, 39 (2009) 3955.
 13. Zhang, S., et al., *Angewandte Chemie* **127**, 10 (2015) 3155.
 14. H Liu et al., *Nano Letters* **16**, 6 (2016) 3831.
 15. Li, F., et al., *Physical Chemistry Chemical Physics* **17**, 37 (2015) 24151.
 16. R Abt, C Ambrosch-Draxl, and P Knoll, *Physica B: Condensed Matter* **194-196** (1994) 1451.
 1. K S Novoselov et al., *Science* **306**, 5696 (2004) 666.
 2. H H Nersisyan et al., *Chemical Engineering Journal* **281** (2015) 218.
 3. H Jeong et al., *ACS Nano* **9**, 10 (2015) 10032.
 4. J Jalilian and M Safari, *Diamond and Related Materials* **66** (2016) 163.
 5. Y Li, Y Liao and Z Chen, *Angewandte Chemie International Edition* **53**, 28 (2014) 7248.
 6. M Naseri and J Jalilian, *Materials Research Bulletin* **88** (2017) 49.
 7. J Jalilian, *Optik - International Journal for Light and Electron Optics* **127**, 24 (2016) 12063.
 8. M Naseri, J Jalilian and A Reshak, *International Journal of Modern Physics B* **31**, 8 (2017) 1750044.
 9. P Blaha et al., *An augmented Plane Wave+Local Orbitals Program for calculating crystal properties*