ISSN: 2821-1553 htpps://www.jasd.khadu.ir

فصلنامه علمی ((دفاع هوافضایی))
دوره۱، شماره ۱ ، خرداد ۱۴۰۱

مقاله پژوهشی

بررسی خواص نوری نانوساختار دوبعدی پنتا کربید بور به روش نظریهٔ تابع چگالی با رویکرد کاربرد در صنایع نظامی و دفاعی

حمید رضا البرزنیا [۱]، سید تقی محمدی [۲]

۱-دکترای فیزیک، گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد کرمانشاه، ایران

۲-استادیار فیزیک، گروه فیزیک، مرکز علوم‌پایه، دانشگاه پدافند هوایی خاتم‌الانبیاء (ص)، تهران، ایران.

اطلاعات مقاله

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۱۰ /۲۳

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۷/۱۲

کلمات کلیدی:

تئوری تابع چگالی، نانوساختار دوبعدی ، خواص الکترونیکی، خواص نوری.

نویسنده مسئول:

حمید رضا البرزنیا

ایمیل:

H.R.Alborznia@iauksh.ac.ir

چکیده

در این مقاله، خواص نوری نانوساختار دوبعدی پنتا کربید بور (B2C) با استفاده از شبیه‌سازی با کدهای محاسباتی مبتنی بر تئوری تابع چگالی بر پایهٔ محاسبات اولیه، مطالعه گردیده است. بررسی خصوصیات الکترونیکی نشان می‌دهد که این نانوساختار دوبعدی یک نیمه‌هادی غیرمستقیم با گاف انرژی ۱/۴۹ الکترون‌ولت با روش تقریب PBE می‌باشد. مطالعهٔ خواص نوری این نانوساختار با روش تقریب PBE-GGA علاوه براینکه نشان‌دهنده توافق جنبه‌های نوری با ویژگی‌های الکترونیکی این تک لایه دوبعدی می‌باشد، این نانوساختار می‌تواند در آینده، به‌عنوان مادهٔ مناسبی در طراحی دستگاه‌های الکترونوری در صنایع مختلف مورد استفاده باشد. با توجه به یافته‌های این تحقیق مبتنی بر میزان جذب نسبتاً بالا و بازتاب بسیار کم این نانو ماده در ناحیهٔ طیف مرئی، می‌توان این نانوساختار را برای کاربردهای نوری به‌ویژه در طراحی دستگاه‌های انرژی خورشیدی و حس‌گرهای نوری با کاربردهای متنوع به‌ویژه در صنایع دفاعی و نظامی مناسب دانست.

استناد به مقاله: حمید رضا البرزنیا، سید تقی محمدی، بررسی خواص نوری نانوساختار دوبعدی پنتا کربید بور به روش نظریهٔ تابع چگالی با رویکرد کاربرد در صنایع نظامی و دفاعی، مجله علمی دفاع هوافضایی دوره ۱، شماره ۱، خرداد ۱۴۰۱.

ISSN:2821-1588 htpps://www.jasd.khadu.ir

Journal of Aerospace Defense
Vol. 1, No, 1, 1401

Research Paper

Investigation of optical properties of penta-boron carbide two-dimensional nanostructure by density function theory with applied approach in defense industry

Hamidreza Alborznia [1] Seyed Taghi Mohammadi [2]

1. PhD, Department of Physics, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran.
2. Assistant Professor of Physics, Department of Physics, Basic Science Center, Khatam Ol Anbia (PBU) University, Tehran, Iran.

Article Information

Accepted: 1400/10/23

Recceived:1400/07/12

eywords:

Density Function Theory; two-dimensional nanostructure; Electrical properties; Optical properties Command and control system, Future war, Electromagnetic weapons, Air defense.

Corresponding anuthor:
Hamidreza Alborznia
Email:
H.R.Alborznia@iauksh.ac.ir

Abstract

In this paper, the optical properties of penta-boron carbide two-dimensional nanostructure (B2C) have been studied using simulations with computational codes based on density function theory based on initial calculations. The study of electronic properties shows that this two-dimensional nanostructure is an indirect semiconductor with an energy gap of 1.49 electron volts by the PBE approximation method. Study of optical properties of this nanostructure by PBE-GGA approximation method In addition to showing the agreement of optical aspects with the electronic properties of this two-dimensional monolayer, this nanostructure can in the future, as a suitable material in the design of electro-optical devices in industry Different to be used. According to the findings of this study based on the relatively high absorption rate and very low reflectivity of this nanomaterial in the visible spectrum, this nanostructure can be used for optical applications, especially in the design of solar energy devices and optical sensors with various applications in the defense industry.

HOW TO CITE: Hamidreza Alborznia, Seyed Taghi Mohammadi (1401), Investigation of optical properties of penta-boron carbide two-dimensional nanostructure by density function theory with applied approach in defense industry, Journal of Airspace Defense. , Vol. 1, No, 1, 1401.

۱. مقدمه

کشف گرافن در سال ۲۰۰۴ [۱] و خواص منحصربه‌فرد این نانوساختار دوبعدی از قبیل ویژگی‌های دینامیکی، الکترونیکی و نوری [۲-۷]، منجر به تحولی عظیم در طراحی دستگاه‌های الکترونوری گردید. این کشف باعث تحقیقات گسترده‌ای در پیش‌یابی و فرآوری نانو مواد جدید دوبعدی جهت کاربردهای بالقوه عملی در دستگاه‌های الکترونیکی و نوری گردیده است [۸-۱۶]. پس از آن، انواع نانوساختارهای جدید با کاربردهای جدید با تحقیقات نظری و تجربی پیش‌یابی و تولید گردیدند [۱۷-۳۰]. در این مطالعه، با استفاده از اصول محاسبات اولیهٔ مبتنی بر نظریه تابع چگالی (**DFT**)، جنبه های نوری نانوساختار دوبعدی پنتا کربید بور با روش تقریب **PBE-GGA**، جهت دستیابی به نتایج و پیشنهادات کاربردی آتی محاسبه و ارایه می گردد. با توجه به نتایج و یافته‌های این تحقیق نظری، می‌توان گفت این نانو ماده در تحقیقات تجربی آتی به عنوان یک مادهٔ الکترونوری در کاربردهای عملی برای دستگاه‌هایی نظیر تجهیزات انرژی خورشیدی، حسگرهای نوری و تعدیل‌کننده‌های نوری و غیره به‌ویژه در صنایع دفاعی و نظامی استفاده شود. نکته قابل توجه، میزان گاف انرژی بدست آمده در این تحقیق برای این تک لایه می‌باشد که به‌عنوان یک نیمه‌هادی، گاف غیر مستقیم در محدودهٔ مورد نیاز و مناسب برای کاربرد در محدوده طیف نوری خواهد بود.

روش های محاسباتی و کدهای شبیه‌سازی استفاده شده در این مطالعه، در بخش بعدی بیان گردیده است. خصوصیات ساختاری و پایداری تک لایه دوبعدی پیش‌یابی شده در بخش ۳ ارایه شده است. خصوصیات الکترونیکی و ویژگی‌های نوری تک لایه پنتا کربید بور در بخش ۴ گزارش می‌گردد. در نهایت نتایج تحقیق در بخش آخر بیان می‌شود.

۲. روش محاسباتی

روش های محاسباتی در این مطالعه با استفاده از اصول محاسبات اولیه، بر اساس تئوری تابعی چگالی می‌باشد. از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو [۳۱] برای شبیه‌سازی و محاسبهٔ ساختارهای فونونی و با مش‌بندی ساختار شبکه‌ای ۸ × ۸ × ۸ برای دستیابی به نتایج دقیق شبیه‌سازی به‌ویژه پایداری دینامیکی ساختار استفاده می‌شود. همچنین کدهای محاسباتی **WIEN2k [32]**، برای محاسبهٔ جنبه های الکترونیکی و نوری در نانوساختار دوبعدی پنتا کربید بور بکار رفته است. برای بسط تابع موج کوهن شم، از روش امواج تخت خطی با پتانسیل کامل به‌علاوه اوربیتال محلی (**FPLAPW + LO**) استفاده گردیده است. همچنین برای بسط پتانسیل تبادلی همبستگی، روش تقریب گرادیان تعمیم یافته (**GGA-PBE**) به کار برده شده است [۳۳]. همچنین برای بدست آوردن گاف انرژی دقیق‌تر این تک لایه، محاسبات ساختار نواری الکترونیکی توسط تئوری عملکرد ترکیبی **HSE06**)) انجام گردیده است [۳۴]. همچنین از روش تقریب مانخورست-پک [۳۵] در منطقه اول بریلوئن با

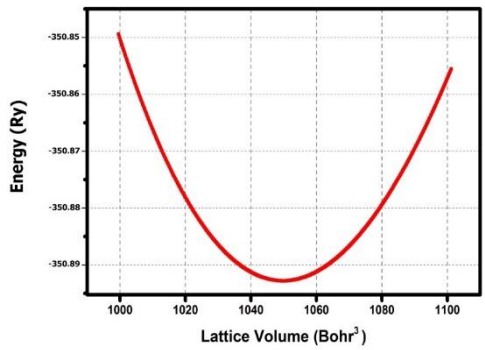
مش‌بندی ساختار شبکه‌ای ۱ × ۱۲ × ۱۲ و ۲۵ × ۲۵ × ۱ به‌ترتیب برای محاسبات الکترونیکی و نوری لحاظ گردیده است. پارامترهای ورودی محاسباتی **RMTKmax = 7**، **Gmax = 14 Ry1 / 2**، **lmax = 10** در نظر گرفته شده است در حالی‌که در محاسبهٔ ویژگی‌های الکترونیکی، انرژی جداسازی هسته از الکترون های لایه ظرفیت ۸- ریدبرگ در نظر گرفته شده است. محاسبات اسپینی بدون قطبش لحاظ گردیده است. همچنین از روابط کرامرز-کرونیگ و روش تقریب فاز تصادفی **(RPA)[36]**، برای بدست آوردن مؤلفه‌های تابع دی‌الکتریک مختلط این نانوساختار استفاده می‌شود[۴۰].

۳. مطالعات ساختاری و پایداری

در ابتدا برای رسیدن به ساختار بهینه شده سلول واحد نانوساختار دوبعدی پنتا کربید بور، با استفاده از رابطهٔ حالت ترمودینامیکی بیرچ-مورناگون بهینه می‌گردد [۳۷]:

$$E(V) = E_0 + \frac{9B_0V_0}{16}\left\{\left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{2/3} - 1\right]^3 B_0'\right\} + \frac{9B_0V_0}{16}\left\{\left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{2/3} - 1\right]^2\left[6 - 4\left(\frac{V_0}{V}\right)^{2/3}\right]\right\} \quad (۱)$$

در رابطه (۱)، حجم اولیه، حجم بهینه شده، مدول ساختار انبوهه و مشتق مدول ساختار انبوهه نسبت به فشار است. شکل ۱، نشان دهندهٔ نمودار انرژی برحسب حجم برای سلول واحد تک لایه نانوساختار پنتا کربید بورمی باشد که نقطهٔ کمینه در این نمودار بیانگر حجم تعادلی یا حجم سلول واحد بهینه‌شده می‌باشد که با یک محاسبهٔ ساده، ثابت شبکهٔ بهینه‌شده بدست می‌آید.

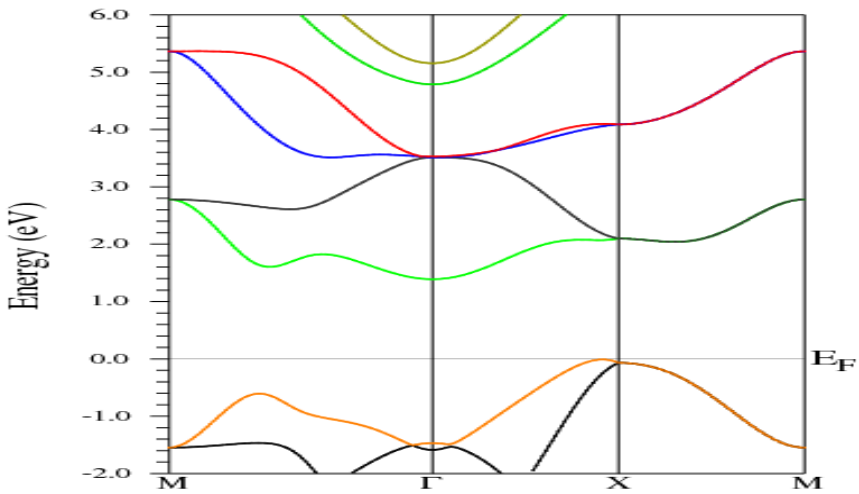


شکل۱: نمودار تغییرات انرژی برحسب حجم در سلول واحد پنتا کربید بور

مطابق با حجم تعادلی بدست آمده، ثابت‌های شبکه برای سلول واحد ساختار بهینه‌شده برابر **a = b = 3.93** برحسب آنگسترم می باشند. در ادامه با محاسبهٔ انرژی همدوسی سلول واحد پنتا کربید بور پایداری ترمودینامیکی ساختار را بررسی می‌کنیم. انرژی همدوسی سیستم از رابط× زیر حاصل می‌شود:

$$E_{coh} = (E_{B2C}^{total} - mE_B - nE_C)/m + n \qquad (۲)$$

که در معادلهٔ شماره (۲)، E_{B2C} انرژی کل این نانوساختار است. E_B، انرژی جدا شده از اتم بور است و همچنین m، تعداد اتم‌های بور را در هر سلول واحد کربید بور تعیین می‌کند. E_C، انرژی منزوی اتم کربن می‌باشد و n، تعداد اتم‌های کربن برای هر سلول واحد از این نانوساختار را بیان می‌کند. طبق محاسبات انجام‌شده، انرژی همدوسی برای این تک لایه برابر مقدار ۶/۸۷۱ الکترون‌ولت بر اتم بدست آمده است که نشان‌دهندهٔ پایداری مطلوب ترمودینامیکی این نانوساختار است. با توجه به نمودار ساختار نوار انرژی محاسبه‌شده برای این نانوساختار با استفاده از روش تقریب PBE، که در شکل ۲ نشان داده شده است این نانوساختار دوبعدی یک نیمه‌هادی غیرمستقیم با گاف انرژی ۴۹ /۱ الکترون‌ولت می‌باشد.



شکل۲: نمودار ساختار نواری پنتا کربید بور

۴. مطالعات الکترونیکی و نوری

در این بخش برای درک بهتر از ویژگی‌های فیزیکی و و بررسی امکان کاربرد نانوساختار دوبعدی پنتا کربید بور در ساخت ابزارهای الکترونوری، در تحقیقات تجربی آتی خواص نوری نانوساختار مذکور را مورد بررسی قرار می‌دهیم. باتوجه به یافته‌های جنبه‌های الکترونیکی این نانوساختار دوبعدی به‌عنوان یک نیمه‌هادی با گاف انرژی غیر مستقیم، برای مطالعه خواص نوری و بررسی امکان کاربرد این نانوساختار در ساخت ابزارهای الکترونوری، پاسخ خطی این ساختار را در مقابل تابش فرودی مورد مطالعه قرار می‌دهیم. می‌توان گفت تابع دی‌الکتریک مهم‌ترین مشخصه ساختاری است که بیانگر رفتارهای نوری ماده مقابل تابش نور می‌باشد و بسیاری از ویژگی‌های نوری نظیر جذب، بازتابش از این مشخصه بدست می‌آیند. تابع دی‌الکتریک مختلط به‌صورت زیر

تعریف می‌شود:

$$\varepsilon(\omega)=R_{\varepsilon}+iI_{\varepsilon} \qquad (۳)$$

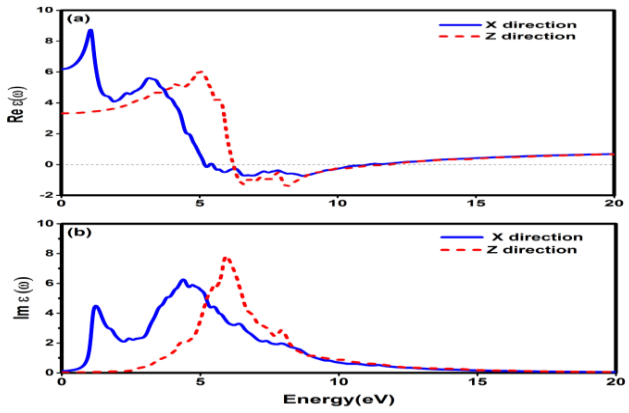
که در آن R_{ε} و I_{ε} به ترتیب قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط است. با استفاده از رابطهٔ کرامرز-کرونینگ قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک را می‌توان برحسب قسمت موهومی آن به‌صورت زیر نوشت [۴۱]:

$$R_{\varepsilon}(\omega)=\delta_{\alpha\beta}+\frac{2}{\pi}P_r\int_0^{\infty}\frac{\omega' I_{\varepsilon}(\omega')}{\omega^2-\omega'^2}\omega' d\omega' \qquad (۴)$$

که در آن P_r، تابع کوشی و $\boldsymbol{I_{\varepsilon}}$، قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط است که از رابطهٔ ۵ استنتاج می‌گردد:

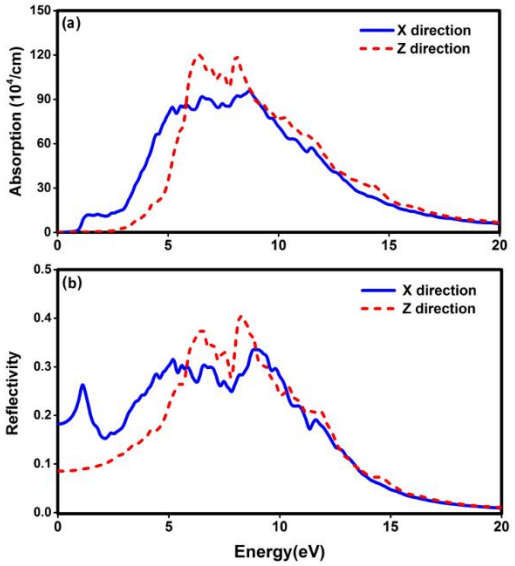
$$I_{\varepsilon}=\frac{h^2e^2}{\pi^2m^2\omega^2}\sum_n\int d_k\left\langle\psi^{c_n}{}_k\left|P^{\alpha}\right|\psi^{v_n}{}_k\right\rangle\left\langle\psi^{v_n}{}_k\left|P^{\beta}\right|\psi^{c_n}{}_k\right\rangle\delta(E^{c_n}{}_k-E^{v_n}{}_k-\omega) \qquad (۵)$$

که در رابطهٔ فوق P ماتریس دوقطبی و V_n و C_n حالت‌های اولیه و نهایی می‌باشند. با محاسبهٔ قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط، می‌توان ویژگی‌های نوری مانند ضرایب شکست $n(\omega)$، خاموشی $k(\omega)$، انعکاس $R(\omega)$ و ضریب جذب هر ساختاری را به‌سادگی بدست آورد. نتایج حاصله از محاسبهٔ قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط نانوساختار دوبعدی پنتا کربید بور بر مبنای پارامترهای ساختاری بهینه، در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی با استفاده از نرم‌افزار Wien2k در دو راستای قطبش x و z برحسب انرژی فوتون فرودی در بازه ۰ تا ۲۰ الکترون‌ولت برحسب دامنهٔ شدت در قالب نمودارهای شکل ۳، نشان داده شده است.



شکل۳: نمودار قسمت های موهومی و حقیقی تابع دی‌الکتریک کربید بور

در ادامه برای درک بیشتر ویژگی‌ها و رفتار نوری این نانوساختار دوبعدی، ضرایب جذب و بازتابش نانوساختار را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. در شکل ۴ (a) و (b)، به‌ترتیب نمودار تغییرات ضرایب جذب و بازتابش این ساختار در دو راستای قطبش X و Z، برحسب انرژی فوتون فرودی باتوجه به محاسبات این پژوهش، نمایش داده شده است:



شکل ۴: نمودار ضرایب جذب و بازتابش تک لایه پنتا کربید بور برحسب انرژی فوتون فرودی

نمودار طیف جذب در شکل ۴ (a)، بیانگر شدت جذب نسبتاً بالای این ساختار در طیف نور مرئی در دو راستای قطبش، همچنین شدت جذب نور قابل توجه در محدودهٔ ۱/۵ الی ۵ الکترون‌ولت است. همچنین باتوجه به آستانهٔ شروع جذب نوری از حدود ۱ الکترون‌ولت در نمودار جذب در راستای قطبش X، بیانگر تطابق این جنبه نوری با گاف انرژی در این نیمه‌هادی می‌باشد. نمودار طیف بازتابش در شکل ۴ (b)، نشانگر بازتابش اندک این ماده در طیف نور مرئی است. بنابراین می‌توان گفت نانوساختار دوبعدی مذکور باتوجه به میزان جذب بالا، میزان بازتابش بسیار کم و تطابق ویژگی‌های نوری این ساختار با خواص الکترونیکی می‌تواند به‌عنوان ماده‌ای مناسب جهت استفاده در کاربردها و دستگاه‌های نوری و الکترونوری بالخصوص ادوات نظامی و دفاعی، مورد استفاده قرار گیرد.

۵. نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از شبیه‌سازی با کدهای محاسباتی مبتنی بر تئوری تابع چگالی بر پایه محاسبات اولیه، خواص ساختاری و نوری نانوساختار دوبعدی پنتا کربید بور به‌عنوان یک نیمه‌هادی با گاف غیر مستقیم مورد مطالعه و شبیه‌سازی قرار گرفت. بررسی و محاسبهٔ مشخصه‌ها و فاکتورهای مؤثر بر ساختار و پایداری، مانند نمودار انرژی- حجم بهینه و همچنین انرژی همدوسی بیانگر پایداری قابل‌قبول این نانوساختار می‌باشد. که این موضوع امکان استفاده کاربردی این

ساختار را به صورت تجربی در صنایع مختلف از جمله صنایع نظامی را فراهم می‌کند. مطالعهٔ ساختار نوار انرژی این نانوساختار نشان می‌دهد، پنتا کربید بور یک نیمه‌هادی غیر مستقیم با انرژی گاف ۱/۴۹ الکترون‌ولت می باشد (با روش PBE). از طرفی محاسبات و شبیه‌سازی‌های خواص نوری نشان می‌دهد که این تک‌لایه پیشنهادی دوبعدی دارای شدت جذب خوبی در حالت بهینه ساختار و همچنین دارای بازتابش کم، به‌ویژه در ناحیهٔ طیف نور مرئی است. رفتارهایی که از خواص نوری این نانوساختار دوبعدی استخراج گردیده است بیانگر توافق جنبه‌های نوری و الکترونیکی این ماده است و می‌توان اظهار داشت این نانوساختار دوبعدی، مادهٔ مناسبی برای استفاده در دستگاه‌های الکترونیکی و نوری در شرایط پیش‌بینی شده در این مطالعه جهت طراحی دستگاه‌های انرژی خورشیدی و حسگرهای نوری با کاربردهای متنوع به‌ویژه در صنایع نظامی و دفاعی، همچنین به‌عنوان مواد جاذب راداری باشد.

تعارض منافع

هیچ گونه تعارض منافع از سوی نویسندگان گزارش نشده است.

تشکر و قدردانی

از تمامی دانشجویان تحصیلات تکمیلی دانشگاه پدافند هوایی خاتم النبیاء(ص) که در این پژوهش به عنوان نمونه پژوهش حضورداشتند، تشکر و قدردانی مینماییم.

۶. منابع

[1] Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S. V., Grigorieva I. V., Firsov A. A. 2004 Science 306 666.
[2] Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Katsnelson M. I., Grigorieva I. V., Dubonos S. V., Firsov A. A. 2005 Nature 438 197
[3] Okada Susumu 2008 Phys. Rev. B 77 041408.
[4] Gautam Mukhopadhyay Harihar Behera 2013 World J. Eng. 10 39
[5] Zhu Jixin, Yang Dan, Yin Zongyou, Yan Qingyu, Zhang Hua 2014 Small 10 3480
[6] Su Cong, Jiang Hua, Feng Ji 2013 Phys. Rev. B 87 075453
[7] Rao C. N. R., Ramakrishna Matte H. S. S., Maitra Urmimala 2013 Angew. Chem. Int. 52 13162
[8] Malko Daniel, Neiss Christian, Viñes Francesc, Görling Andreas 2012 Phys. Rev. Lett. 108 086804
[9] Liu Cheng-Cheng, Feng Wanxiang, Yao Yugui 2011 Phys. Rev. Lett. 107 076802
[10] Vogt Patrick, De Padova Paola, Quaresima Claudio, Avila Jose, Frantzeskakis Emmanouil, Asensio Maria Carmen, Resta Andrea, Ealet Bénédicte, Le Lay Guy 2012 Phys. Rev. Lett. 108 155501
[11] Giovannetti Gianluca, Khomyakov Petr A., Brocks Geert, Kelly Paul J., van den Brink Jeroen 2007 Phys. Rev. B 76 073103
[12] Watanabe K., Taniguchi T., Kanda H. 2004 Nat. Mater. 3 404
[13] Zhang Shengli, Yan Zhong, Li Yafei, Chen Zhongfang, Zeng Haibo 2015 Angew. Chem. 127 3155
[14] Balendhran Sivacarendran, Walia Sumeet, Nili Hussein, Sriram Sharath, Bhaskaran Madhu 2015 Small 11 640

[15] Zhang Shengli, Xie Meiqiu, Li Fengyu, Yan Zhong, Li Yafei, Kan Erjun, Liu Wei, Chen Zhongfang, Zeng Haibo 2016 Angew. Chem. Int. 55 1666
[16] Zhang Shengli, Zhou Wenhan, Ma Yandong, Ji Jianping, Cai Bo, Yang Shengyuan A., Zhu Zhen, Chen Zhongfang, Zeng Haibo 2017 *Nano Lett.* 17 3434
[17] Zhang Shengli, Guo Shiying, Chen Zhongfang, Wang Yeliang, Gao Hongjun, Gómez-Herrero Julio, Ares Pablo, Zamora Félix, Zhu Zhen, Zeng Haibo 2018 *Chem. Soc. Rev.* 47 982
[18] Zhang Shunhong, Zhou Jian, Wang Qian, Chen Xiaoshuang, Kawazoe Yoshiyuki, Jena Puru 2015 *Proc. Natl. Acad. Sci.* 112 2372
[19]] Zhou Wenhan, Guo Shiying, Zhang Shengli, Zhu Zhen, Song Xiufeng, Niu Tianchao, Zhang Kan, Liu Xuhai, Zou Yousheng, Zeng Haibo 2018 *Nanoscale* 10 3350
[20] Zhang Shunhong, Zhou Jian, Wang Qian, Jena Puru 2016 *J. Phys. Chem. C* 120 3993
[21] Lopez-Bezanilla Alejandro, Littlewood Peter B. 2015 *J. Phys. Chem. C* 119 19469
[22] Li Fengyu, Tu Kaixiong, Zhang Haijun, Chen Zhongfang 2015 *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17 24151
[23] Naseri Mosayeb 2017 *Appl. Surf. Sci.* 423 566
[24] Morshedi Hosein, Naseri Mosayeb, Hantehzadeh Mohammad Reza, Elahi Seyed Mohammad 2018 *J. Electron. Mater.* 47 2290
[25] Naseri Mosayeb 2017 *Chem. Phys. Lett.* 685 310
[26] Naseri Mosayeb 2018 *Phys. Lett. A* 382 710
[27] Naseri Mosayeb 2019 *Chem. Phys. Lett.* 715 100
[28] H. Alborznia, M. Naseri, N. Fatahi,Buckling strain effects on electronic and optical aspects of penta-graphene nanostructure, Superlattices and Microstructures,133(2019) 106217.
[29] H. Alborznia, M. Naseri, N. Fatahi, Pressure effects on the optical and electronic aspects of T-Carbon: A first principles calculation, Optik, 180 (2019) 125-133.
[30] DM Hoat, S Amirian, H Alborznia, A Laref, AH Reshak… - Indian Journal of Physics, 2021 Strain effect on the electronic and optical properties of 2D Tetrahexcarbon: a DFT-based study
[31] Giannozzi, et al., Computer code QUANTUM-ESPRESSO, J. Phys. Condens. Matter 21 (2009)
[32] Blaha Peter , Schwarz Karlheinz , K. H. Madsen Georg, Kvasnicka Dieter , Luitz Joachim , Laskowski Robert , Tran Fabien , D. Marks Laurence An augmented Plane Wave+Local Orbitals Program for calculating crystal properties revised edition WIEN2k 13.1 (release 06/26/2013) Wien2K users guide, ISBN 3-9501031-1-2.
[33] Perdew John P., Burke Kieron, Ernzerhof Matthias 1996 *Phys. Rev. Lett.* 77 3865
[34] Heyd Jochen, Scuseria Gustavo E., Ernzerhof Matthias 2003 *J. Chem. Phys.* 118 8207
[35] Monkhorst Hendrik J., Pack James D. 1976 *Phys. Rev. B* 13 5188
[36] Ehrenreich H., Cohen M. H. 1959 *Phys. Rev.* 115 786
[37] Birch Francis 1986 *J. Geophys. Res. Solid Earth* 91 4949
[38] Y. Li et al.,Be2C Monolayer with Quasi-Planar Hexacoordinate Carbons: A Global Minimum Structure,Angew . Chem. Int . Ed. 2014, 53, 1-6.
[39] H. Alborznia, S. Mohammadi, Investigation of electronic and optical properties of novel graphene-like GeS2 monolayer by density function theory, Iranian Journal of Physics Research. 20 259-265 (2020).
[40]Ghobadi, N., S. A. Hosseini Moradi, and M. Amirzade. "Synthesis and structural, magnetic, and electromagnetic characterization of cobalt ferrite / reduced graphene oxide composite." Advanced Materials in Engineering 40.4 (2022).
[41] Abt Robert, Ambrosch-Draxl Claudia, Knoll Peter 1994 *Physica B Condens. Matter* 194-196 1451.