



فصلنامه علمی ((دفاع هوافضایی))

دوره ۱، شماره ۴، اسفند ۱۴۰۱

عنوان مقالات

مقاله پژوهشی

بررسی اثر کرنش فشاری بر خواص الکترواپتیکی نانو ساختار دو بعدی

پنتاگرافن بر اساس نظریه تابع چگالی

حمیدرضا البرزنی^۱، سیدعلی حسینی مرادی^۲

۱. گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران

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

چکیده

اطلاعات مقاله

در این مقاله، پژوهشی نوین بر اساس تئوری تابعی چگالی (DFT)، و شبیه سازی محاسبات اصول اولیه، برای بررسی اثرات کرنش فشاری عمودی بر روی خواص نانو ساختار دو بعدی پنتاگرافن می-باشد. در ابتدا، با هدف اعتبارسنجی نتایج این تحقیق، خواص ساختاری و الکترونی پنتاگرافن در حالت بهینه بررسی گردیده که نتایج حاصل تطابق خوبی با تحقیقات پیشین را نشان می‌دهد. بررسی خواص الکترونی پنتاگرافن تحت شرایط کرنش فشاری، نشان‌دهنده تغییر گاف نوار انرژی از حالت غیر مستقیم به مستقیم می‌باشد. همچنین بررسی خواص اپتیکی این نانو ساختار دو بعدی تحت شرایط کرنش فشاری مطابقت رفتارهای نوری و الکترونی این نانوساختار را نشان می‌دهد. با توجه نتایج به‌دست‌آمده در این پژوهش نانو ساختار دو بعدی پنتاگرافن را می‌توان به عنوان یک ماده مناسب برای طراحی دستگاه‌های الکترواپتیکی معرفی نمود.

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۱۱/۱۵

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۳/۲۰

کلمات کلیدی:

تئوری تابع چگالی، نانو ساختار دو بعدی پنتاگرافن، خواص الکترونی، خواص نوری.



نویسنده مسئول:

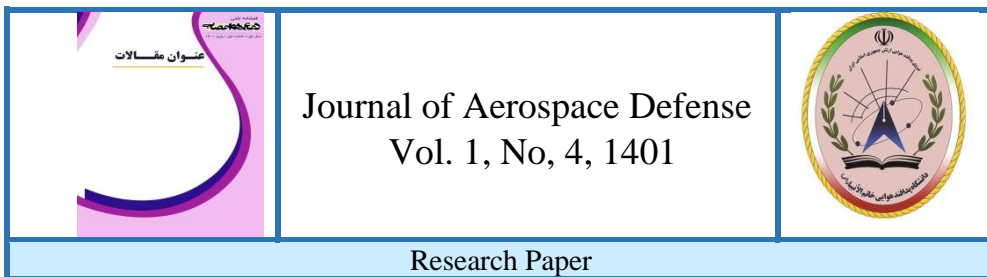
حمیدرضا البرزنی

ایمیل:

hamidrezaalborznia@gmail.com

استناد به مقاله: حمیدرضا البرزنی، سیدعلی حسینی مرادی، بررسی اثر کرنش فشاری بر خواص الکترواپتیکی نانو

ساختار دو بعدی پنتاگرافن بر اساس نظریه تابع چگالی، فصلنامه دفاع هوافضایی، دوره ۱، شماره ۴، اسفند ۱۴۰۱.



Investigating the effect of compressive strain on the electro-optical properties of the two-dimensional penta-graphene nanostructure in the base of Density Function Theory

Hamidreza Alborznia¹, Seyed Ali Hosseini Moradi²,

1. Corresponding Author, Department of Physics, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran.

2. Department of Physics, Faculty of Basic Science, Khatam ol-Anbia (PBU) University, Tehran, Iran.

Article Information

Accepted: 1401/11/15

Received: 1401/03/20

Keywords:

Density Function Theory, Two-dimensional penta-graphene nanostructure, Electrical properties, Optical properties

Abstract

In this article, new research is based on density functional theory (DFT), and simulation of first-principles calculations, to investigate the effects of vertical compressive strain on the properties of two-dimensional penta-graphene nanostructure. First, to validate this research's results, the structural and electronic properties of penta-graphene were investigated in the optimal state, and the results show a good agreement with previous research. Investigating the electronic properties of penta-graphene under the conditions of compressive strain indicates the change of the energy band gap from indirect to direct. Also, the examination of the optical properties of this two-dimensional nanostructure under compressive strain conditions shows the compatibility of this nanostructure's optical and electronic behaviors. According to the results obtained in this research, the two-dimensional nanostructure of penta-graphene can be introduced as a suitable material for the design of electro-optical devices.



Corresponding author:

Hamidreza Alborznia

Email:

hamidrezaalborznia@gmail.com

HOW TO CITE: H. Alborznia, S. A. Hosseini Moradi, Investigating the effect of compressive strain on the electro-optical properties of the two-dimensional penta-graphene nanostructure in the base of Density Function Theory. Journal of Aerospace Defense, Vol. 1, No. 4, 1401.

۱. مقدمه

پیش‌یابی و فرآوری مواد جدید با ویژگی‌های الکترونیکی و نوری جدید، می‌تواند نقش مهمی در توسعه ابزارهای الکترونوری نوین داشته باشد. پس از جداسازی گرافن در سال ۲۰۰۴ [۱]، خواص منحصر به فرد این ساختار دوبعدی از کربن سبب شد که مطالعات گسترده‌ای جهت پیش‌یابی و جداسازی نانو ساختارهای دوبعدی جدید با ویژگی‌های مشابه گرافن انجام شود. در سال‌های اخیر نانو ساختارهای شبه گرافنی متعددی پیش‌یابی شده و مورد مطالعه قرار گرفته است [۲-۲۱].

آلترپ دو بعدی جدید کربن به نام پنتا گرافن به عنوان یک نیمه هادی با باندگاف غیر مسقیم در سال ۲۰۱۵ معرفی گردید [۲۲]. و بعد از آن، با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT)، ساختار انرژی و خواص الکترونیکی نانو ساختار دو بعدی پنتا گرافن 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 پنتا گرافن بر پایه اصول محاسبات اولیه مربوط به تئوری تابعی چگالی حالت پیشرفته (DFT)، در راستای یک پژوهش نوین، خواص الکترونیکی و اپتیکی پنتا گرافن تحت اثر کرنش فشاری عمودی در جهت Z مورد بررسی قرار می‌گیرد. نتایج نهایی نشان می‌دهد که با توجه به شرایط لحاظ شده، نانو ساختار مورد نظر می‌تواند در طراحی دستگاه‌های الکترواپتیکی چند منظوره کارایی داشته باشد.

۲. روش محاسباتی

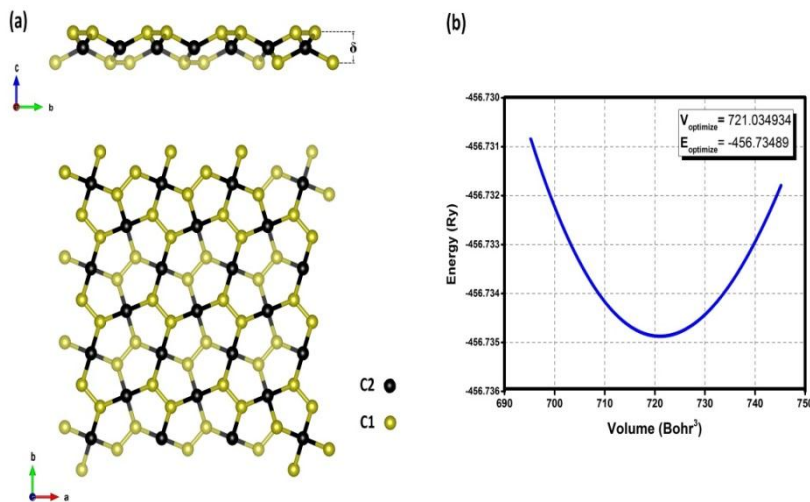
روشهای محاسباتی در این مطالعه با استفاده از اصول محاسبات اولیه بر اساس تئوری تابعی چگالی می‌باشد. از کدهای محاسباتی WIEN2k [۲۴]، برای محاسبه جنبه‌های الکترونیکی و نوری در نانو ساختار دو بعدی پنتا گرافن بکار رفته است. برای بسط تابع موج کوهن شم، از روش امواج تخت خطی با پتانسیل کامل به علاوه اوربیتال محلی (FPLAPW + LO) استفاده گردیده است. همچنین برای بسط پتانسیل تبادلی همبستگی، روش تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA-PBE) به کار برده شده است [۲۵]. همچنین از روش تقریب Monkhorst-Pack [۲۶] در منطقه اول بریلون با مش بندی ساختار شبکه‌ای $1 \times 12 \times 12$ و $1 \times 25 \times 25$ به ترتیب برای محاسبات الکترونیکی و نوری لحاظ گردیده است. پارامترهای ورودی محاسباتی G_{max} , $R_{MTKmax} = 7$. $l_{max} = 10$, $= 14 Ry^{1/2}$ در نظر گرفته شده است در حالی که در محاسبه ویژگی‌های الکترونیکی، انرژی جداسازی هسته از الکترونهای لایه ظرفیت ۸- ریدبرگ در نظر گرفته شده است. محاسبات اسپینی بدون قطبش لحاظ گردیده است. همچنین از روابط کرامرز-کرونینگ و روش تقریب فاز تصادفی (RPA) [۲۷]، برای بدست آوردن مولفه‌های تابع دی الکتریک مختلط این نانو ساختار استفاده می‌شود.

۳. خواص ساختاری و پایداری

نانوساختار کریستالی دو بعدی پنتاگرافن که در شکل ۱، نشان داده شده است، دارای یک شبکه تتراگونال است که از دو نوع طول پیوند کربن-کربن (C1 & C2) تشکیل شده است.، که در آن لایه ی اتمی C2 با هیبریداسیون sp_3 بین دو لایه ی C1 با هیبریداسیون sp_2 قرار دارد. با توجه به شکل ۱، ثابت های شبکه پنتاگرافن با استفاده از حالت ترمودینامیکی معادلات بریچ-مورنگان، بهینه سازی شده است [۲۸]:

$$E(V) = E_0 + \frac{9B_0V_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right]^3 B'_0 \right\} + \frac{9B_0V_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right]^2 \left[6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} \right] \right\} \quad (1)$$

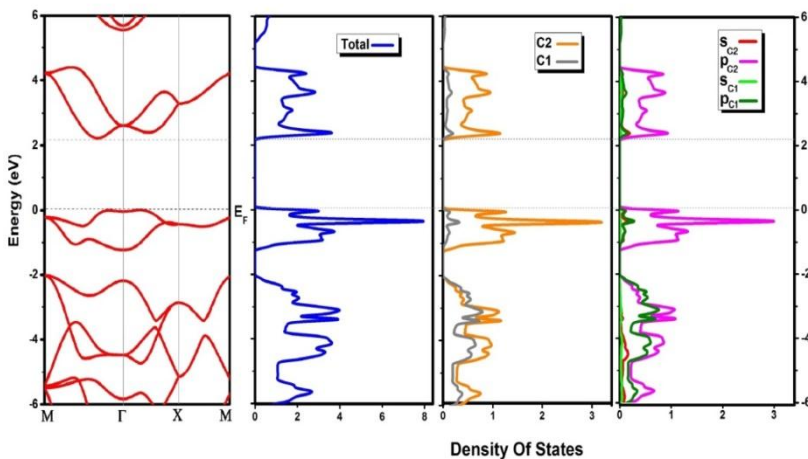
در رابطه (۱)، B_0 مدول ساختار انبوهه و B'_0 مشتق مدول ساختار انبوهه نسبت به فشار است. حجم اولیه، V حجم پایدار برای پارامترهای شبکه بهینه شده ($a = b$) پنتاگرافن می باشد. شکل ۱ (a) دیدگاه های بالای و جانبی چند یاخته کریستال دو بعدی پنتاگرافن و قسمت (b) شکل، منحنی انرژی برحسب حجم برای یاخته واحد پنتاگرافن را نشان می دهد. با توجه به شکل ۱ (b)، نقطه مینیمم این منحنی، حجم بهینه شده در حداقل انرژی یاخته واحد را نشان می دهد. با توجه به حجم تعادلی به دست آمده، پارامتر شبکه بهینه شده ($a = b$) برابر $3/649$ آنگستروم می باشد و ضخامت عمودی بین هر لایه اتم C1 و C2، (δ)، برابر با $0/589$ آنگستروم است و در نتیجه ضخامت عمودی کامل نانوساختار دو بعدی پنتاگرافن برابر $1/178$ آنگستروم می باشد



شکل (۱): (a) دیدگاه بالا و جانبی چند یاخته پنتاگرافن، (b) نمودار انرژی نسبت به حجم تک یاخته پنتاگرافن

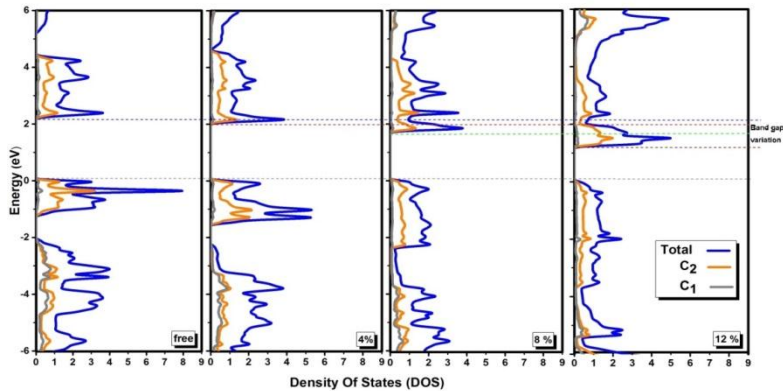
۴. خواص الکترونی

برای مطالعه خواص الکترونیکی، ابتدا نانو ساختار پنتا گرافن بهینه شده در شرایط کرنش آزاد بررسی می شود. شکل ۲، نشاندهنده ساختار باند انرژی، چگالی حالات کل و جزئی (DOS و PDOS) پنتا گرافن را در شرایط آزاد می باشد. بر اساس این تصویر، این نانو ساختار دوعبده به عنوان یک نیمه هادی گاف غیرمستقیم با مقدار گاف انرژی ۲/۲۳۱ الکترون ولت، بین حداکثر باند ظرفیت (VBM) بر روی مسیر Γ -X و حداقل باند هدایت (CBM) بر روی مسیر M - Γ شناخته می شود. طبق شکل ۲، فاصله گاف بین ساختار باند انرژی و چگالی حالات یکسان می باشد. همچنین مقدار شکاف باند به دست آمده در این تلاش تطابق خوبی با مقادیر به دست آمده در مطالعات قبلی [۲۲، ۲۳] دارد. لازم به ذکر است مطالعه بر روی چگالی حالت (DOS) پیش یابی شده از دو نوع اتم کربن با اوربیتال های مختلف هیبریدی (C1 و C2) و تجزیه و تحلیل چگالی حالت جزئی (PDOS) نشان می دهد بخش اوربیتال 2p در هر دو نوع از اتم های کربن بیشتر از اوربیتال 2s می باشد.



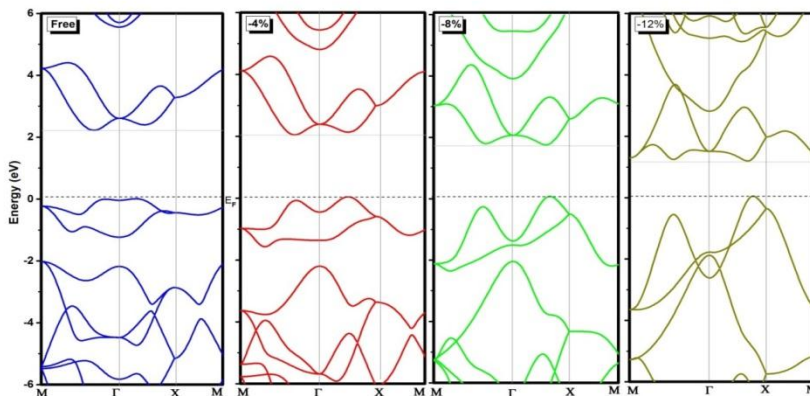
شکل (۲): ساختار باند انرژی و چگالی حالات الکترونی (DOS و PDOS) پنتا گرافن در حالت بهینه

تاثیر کرنش فشاری عمودی روی چگالی حالت های پنتا گرافن در شکل ۳، ارائه شده است. تجزیه و تحلیل نمودار های چگالی حالت ها (DOS) در تصویر نشان می دهد که با اعمال کرنش فشاری تا ۱۲ درصد، چگالی حالت های نوار ظرفیت پنتا گرافن تغییری قابل ملاحظه ای را نشان نمی دهد. در حالی که با اعمال این شرایط، چگالی حالت های لبه نوار هدایت به انرژی های پایین تر منتقل می شود. همچنین، دامنه چگالی حالت ها (DOS) در نوار ظرفیت با کاهش درصدی کرنش فشاری، نسبتاً کاهش می یابد. از سوی دیگر، با کاهش کرنش فشاری، دامنه چگالی حالت ها در لبه نوار هدایت کمی افزایش می یابد.



شکل (۳): چگالی حالات الکترونی (DOS) پنتاگرافن تحت تاثیر کرنش فشاری

نمودارهای ساختار نواری انرژی پنتاگرافن تحت تاثیر کرنش فشاری تا ۱۲ درصد در شکل ۴ نشان داده شده است. تحت شرایط اعمالی، مشاهده می شود که گاف غیرمستقیم این نیمه هادی از مقدار ۲/۲۳۱ الکترون ولت با اعمال ۴ درصدی کرنش فشاری به ۲/۰۷ الکترون ولت کاهش می یابد، این در حالی است که محدوده گاف باند غیر مستقیم بین مسیر $\Gamma-X$ و $M-\Gamma$ باقی می ماند. اما با اعمال کرنش ۸ و ۱۲ درصدی، علاوه بر کاهش گاف انرژی به ترتیب به ۱/۷۷۱ و ۱/۲۴۹ الکترون ولت، این نیمه هادی گاف غیر مستقیم تبدیل به نیمه هادی باگاف مستقیم در نقطه مسیر $\Gamma-X$ می شود.



شکل (۴): ساختار نواری انرژی پنتاگرافن تحت تاثیر کرنش فشاری

۵. خواص نوری

در این بخش، برخی از ویژگی های مهم اپتیکی مانند چگالی حالت ها مشترک ، بخش حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مرکب ، جذب، بازتاب پنتا گرافن در شرایط آزاد و تحت تاثیر کرنش فشاری تا ۱۲ درصد ، در محدوده انرژی صفر تا ۳۰ الکترون ولت مورد بررسی قرار می گیرند. با توجه به این واقعیت که برای اعمال کرنش فشاری، لازم است که فشار عمودی بر روی صفحه نانوساختار دو بعدی وارد نمود. بنابراین در ادامه جنبه های اپتیکی پنتا گرافن تحت شرایط مسئله در جهت قطبش Z بررسی و ترسیم می شوند.

می توان گفت تابع دی الکتریک مهم ترین مشخصه ساختاری است که بیانگر رفتارهای نوری ماده مقابل تابش نور 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:

$$\varepsilon(\omega) = R_\varepsilon + iI_\varepsilon \quad (۳)$$

که R_ε و I_ε به ترتیب قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مختلط . با استفاده از رابطه کرامرز-کرونینگ قسمت حقیقی تابع دی الکتریک را می توان برحسب قسمت موهومی آن به صورت زیر نوشت [۲۹]:

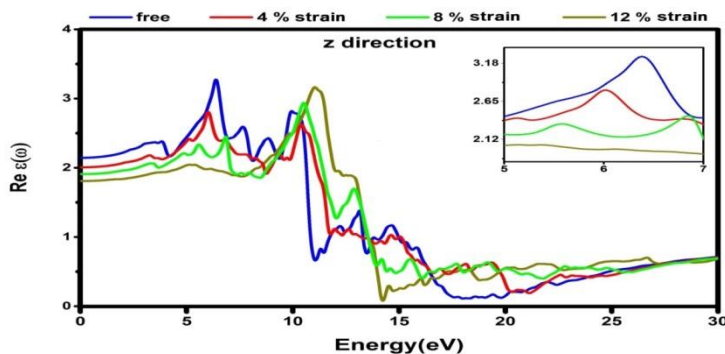
$$R_\varepsilon(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} P_r \int_0^\infty \frac{\omega' I_\varepsilon(\omega')}{\omega^2 - \omega'^2} \omega' d\omega' \quad (۴)$$

که در آن P_r ، تابع کوشی و I_ε ، قسمت موهومی تابع دی الکتریک مختلط است که از رابطه ذیل استنتاج می گردد [۳۰]:

$$I_\varepsilon = \frac{h^2 e^2}{\pi^2 m^2 \omega^2} \sum_n \int d_k \langle \psi_k^{c_n} | P^\alpha | \psi_k^{v_n} \rangle \langle \psi_k^{v_n} | P^\beta | \psi_k^{c_n} \rangle \delta(E_k^{c_n} - E_k^{v_n} - \omega) \quad (۵)$$

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 $n(\omega)$ ، خاموشی $k(\omega)$ ، انعکاس $R(\omega)$ و ضریب جذب هر ساختاری به سادگی به دست می آید.

نمودار های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مربوط به پنتا گرافن در جهت Z، بدون کرنش و تحت شرایط کرنش عمودی با ۴، ۸ و ۱۲ درصد، به ترتیب در اشکال ۵ و ۶ نمایش داده می شوند. همانطور که در شکل ۵ نشان داده شده است، پیک تیز گذار در حالت بدون فشار کرنشی در محدوده ۶ الکترون ولت رخ می دهد که با اعمال کرنش عمودی تا ۱۲ درصد این پیک نسبتا کاهش می یابد. پیک های تیز بعدی مربوط شرایط کرنش عمودی با ۸ و ۱۲ درصد کاهش پارامتر کمانش، در انرژی های بالاتر در محدوده ۱۰ تا ۱۲ الکترون ولت، شکل می گیرند. همچنین با توجه به شکل ۶، با اعمال کرنش فشاری در بخش موهومی تابع دی الکتریک، علاوه بر کاهش پیک گذار در انرژی حدود ۱۰ الکترون ولت، شاهد شیفت پیک های گذار برای حالت های کرنش

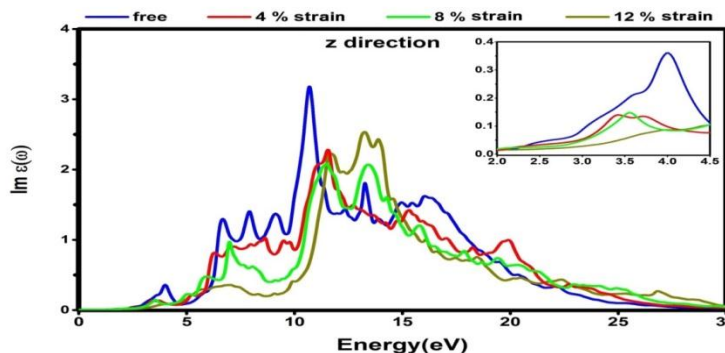


عمودی با ۸ و ۱۲ درصد در محدوده انرژی ۱۳ تا ۱۴ الکترون ولت خواهیم بود. این موارد بیانگر مطابقت رفتارهای اپتیکی و الکترونیکی این نیمه هادی تحت شرایط اعمالی مسئله تحقیق می باشد.

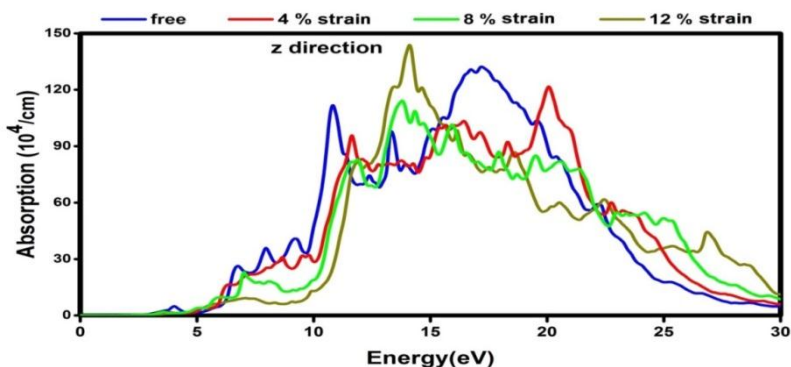
شکل (۵): نمودار بخش حقیقی تابع دی الکتریک پنتا گرافن تحت تاثیر کرنش فشاری

شکل (۶): نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک پنتا گرافن تحت تاثیر کرنش فشاری

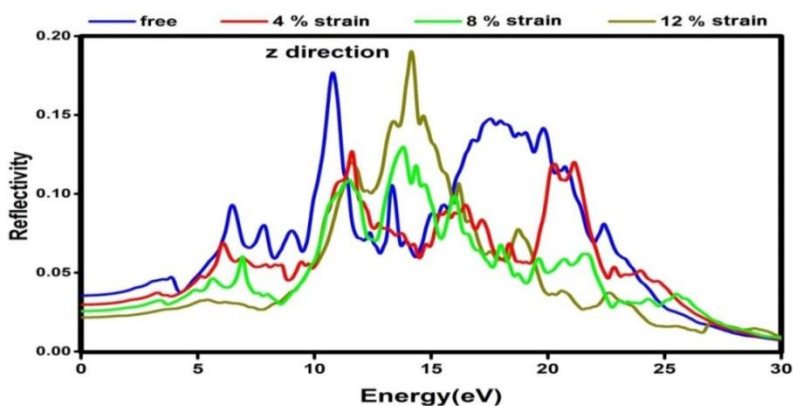
دو جنبه مهم برای کاوش، خواص اپتیکی بدون شک طیف جذب و بازتابش می باشد. شکل ۷ و ۸، به ترتیب طیف های جذب و انعکاس نانوساختار دو بعدی پنتا گرافن در جهت Z را تحت وضعیت بدون کرنش و شرایط کرنش عمودی با ۴، ۸ و ۱۲ درصد را نشان می دهد. طبق این تصاویر، دامنه



طیف های جذب و انعکاس، از انرژی نور مرئی تا حدود ۱۱ الکترون ولت ، با اعمال کرنش عمودی ۴، ۸ و ۱۲ درصدی، کاهش می یابد. این روند برای حالت ۴ درصد کرنش فشاری برای انرژی های اپتیکی بالاتر تا ۳۰ الکترون ولت ادامه می یابد. اما برای انرژی هایی بین ۱۳ تا ۱۵ الکترون ولت برای حالت های ۸ و ۱۲ درصد کرنش فشاری، افزایش سریع طیف جذب و بازتابش و شکل گیری پیک های تیز در محدوده انرژی ۱۴ الکترون ولت ملاحظه می گردد. این تغییرات رفتار اپتیکی تحت این شرایط به رفتارهای الکترونیکی این ماده، در تبدیل نیمه هادی گاف غیرمستقیم به مستقیم همراه با کاهش گاف نوار انرژی، مرتبط می باشد.



شکل (۷): طیف جذب پنتا گرافن تحت تاثیر کرنش فشاری



شکل (۸): طیف بازتابش پنتا گرافن تحت تاثیر کرنش فشاری

۶. تشکر و قدردانی:

در این مقاله از دانشگاه پدافند هوایی که در تامین نیازهای آزمایشگاهی همکاری لازم را نمودند تشکر و قدردانی می‌نماییم

۷. نتیجه‌گیری

به طور خلاصه، در این مقاله خواص الکترواپتیکی نانو ساختار دوبعدی پنتاگرافن، تحت تاثیر اعمال کرنش عمودی بر پایه محاسبات اساسی اولیه در قالب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از نرم افزار شبیه سازی و کدهای محاسباتی wien2k به عنوان یک نیمه هادی با گاف انرژی غیر مستقیم مورد پژوهش قرار گرفته است که نتایج خواص الکترونیکی مانند چگالی حالات و ساختار نواری انرژی تحت تاثیر اعمال کرنش فشاری با مقادیر ۰، ۴، ۸ و ۱۲ درصد بیانگر این موضوع می باشد که گاف انرژی از مقدار ۲/۲۳۱ الکترون ولت در حالت پایه و بهینه به مقدار ۱/۲۴۹ الکترون ولت کاهش می یابد. و همچنین بعد از کاهش ۸ درصدی کمانش این نیمه هادی گاف غیرمستقیم تبدیل به یک نانو ساختار با گاف مستقیم می گردد. همچنین نتایج بررسی خواص اپتیکی این آلترپ دو بعدی کربن از قبیل بخش حقیقی و موهومی تابع دی الکترونیک مرکب، طیف جذب و بازتابش تحت تاثیر فشار کرنشی عمودی، بیانگر یک کاهش نسبی در طیف های اپتیکی تا فشار کرنشی ۴ درصد و همچنین یک تغییر رفتار در جنبه های اپتیکی در فشار کرنشی ۸ و ۱۲ درصدی می باشد. رفتارهای که از خواص نوری نانو ساختار دو بعدی از آلترپ های کربن استخراج گردیده است بیانگر توافق جنبه های اپتیکی و الکترونی این نانوماده است. و می توان اظهار داشت این نانوساختار می تواند ماده مناسبی جهت استفاده در طراحی دستگاه های الکترو نوری در شرایط پیش بینی شده در این مطالعه به ویژه در دستگاه های انرژی خورشیدی باشد.

مراجع:

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V *et al* 2004 *Science* **306** 666
- [2] Okada S 2008 *Phys. Rev. B* **77** 041408
- [3] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Katsnelson M I, Grigorieva I V *et al* 2005 *Nature* **438** 197
- [4] Balendhran S, Walia S, Nili H, Sriram S and Bhaskaran M 2015 *Small* **11** 640
- [5] Zhang S, Zhou W, Ma Y, Ji J, Cai B, Yang S A *et al* 2017 *Nano Lett.* **17** 3434
- [6] Althib H, Flemban T H, Aljameel A I, Mera A, Ashiq MGB, Mahmood Q *et al* 2021 *Bull. Mater. Sci.* **44** 254

- [7] Lopez-Bezanilla A and Littlewood P B 2015 *J. Phys. Chem.C* **119** 19469
- [8] Benidris M, Aziz Z, Khandy SA, Terkhi S, Ahmad M A, Bouadjemi B *et al* 2021 *Bull. Mater. Sci.* **44** 221
- [9] Zhou W, Guo S, Zhang S, Zhu Z, Song X, Niu T *et al* 2018 *Nanoscale* **10** 3350
- [10] Alborznia H, Naseri M and Fatahi N 2019 *Optik* **180** 125
- [11] Alborznia H, Amirian S and Mohammadi S T 2021 *Journal of Research on Many-body Systems* **11** 1
- [12] Wakhare S Y and Deshpande M D 2019 *Bull. Mater. Sci.* **42** 206
- [13] Alborznia H R and Mohammadi S T 2021 *Bull. Mater. Sci.* **44** 180
- [14] Celik F A 2022 *Bull. Mater. Sci.* **45** 108
- [15] Alborznia H R and Mohammadi S T 2020 *Iran. J. Phys. Res.* **20** 259
- [16] Alborznia H and Mohammadi S T 2022 *Indian J. phys.* **32** 2
- [17] Tayran C, Caglayan R, Mogulkoc Y, Cakmak M and Alkan B 2021 *J. Elec. Mater.* **50** 6253
- [18] Ram B and Mizuseki H 2018 *Carbon* **137** 266
- [19] Hoat D M, Amirian S, Alborznia H, Laref A, Reshak A H and Naseri M 2021 *Indian J. Phys* **95** 2365
- [20] Alborznia H, Naseri M and Fatahi N 2019 *Superlattice Microstruct.* **133** 106217
- [21] Alborznia H 2022 *Surf. Rev. Lett.* **29** 2250078
- [22] Zhang S, Zhou J, Wang Q, Chen X, Kawazoe Y, Jena P, 2015 *Proceedings of the National Academy of Sciences* **112** 2372-2377.
- [23] Rajbanshi B, Sarkar S, Mandal B, Sarkar P, *Carbon*, 2016 **100** 118-125.
- [24] Blaha P, Schwarz K, Madsen Georg K H, Kvasnicka D, Luitz J, Laskowski R *et al* 2013 *An augmented planeWave+local orbitals program for calculating crystal properties* (revised edition) WIEN2k 13.1 (release 06/26/2013) Wien2K users guide, ISBN 3-9501031-1-2J.P.
- [25] Perdew J P, Burke K and Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [26] Monkhorst H J and Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [27] Ehrenreich H and Cohen M H 1959 *Phys. Rev.* **115** 786
- [28] Birch F 1986 *J. Geophys. Res.: Solid Earth* **91** 4949
- [29] Saleh B E A and Teich M C 1991 *Fundamentals of Photonics*, Wiley, New York, Chapter **15** 542
- [30] Abt R, Ambrosch-Draxl C and Knoll P 1994 *Physica B: Condens. Matter* 194–196 1451