

«مقاله پژوهشی»

مطالعهٔ ابتدا به ساکن گرافن تک لایه به عنوان سنسور الکترونیکی و اپتیکی برای جذب اتم‌های ردیف دوم جدول تناوبی

مریم گودرزی^{1*}، شراره تهمتن²

1. گروه فیزیک، واحد بروجرد، دانشگاه آزاد اسلامی، بروجرد، ایران

2. گروه ریاضی، واحد بروجرد، دانشگاه آزاد اسلامی، بروجرد، ایران

تاریخ دریافت: 1400/08/23 تاریخ پذیرش: 1400/09/30

AbInitio Study of Mono-Layer Graphene as an Electronic or Optical Sensor for Detecting Atoms in the Second Row of the Periodic Table

M. Goudarzi^{*1}, Sh. Tahamtan²

1. Department of Physics, Borujerd Branch, Islamic Azad University, Borujerd, Iran
2. Department of Mathematics, Borujerd Branch, Islamic Azad University, Borujerd, Iran

Received: 2021/11/14

Accepted: 2021/12/21

چکیده

Abstract

Using first principles calculation, we investigated electronic and optical properties of graphene with B, N, O and F adsorption. For the adsorption of an atom, the distortion of the graphene layer is quite significant and causes to change hybridization from sp^2 to sp^3 . We also found that B, F and O adsorptions are n-type, p-type and direct semiconductor respectively while N adsorption has a metal behavior. N adsorbed graphene showed magnetic moment, while B, O and F adsorbed graphene exhibit no magnetic moment. The absorption spectrum of monolayer graphene has been calculated for the cases of in plane ($E \perp c$), out of plane ($E \parallel c$) polarization of light and 45° to the plane of graphene layer and compared with atom adsorption on graphene and it was observed that for the case of ($E \perp c$) the graphene is an optical sensor for finding F atom and in the case of ($E \parallel c$) it is an optical sensor to find B atom in environment.

در این مقاله خواص الکترونیکی و اپتیکی گرافن تک لایه با جذب اتم‌های بور (B)، نیتروژن (N)، اکسیژن (O) و فلوئور (F) با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن بررسی شده است. در اثر جذب اتم‌های ذکر شده روی گرافن، اعوجاج لایهٔ گرافن قابل ملاحظه است و باعث تغییر هیبریداسیون آن از sp^2 به sp^3 می‌شود. همچنین مشخص شد که گرافن تک لایه با جذب اتم B به نیم رسانای نوع n و با جذب اتم‌های O و F به نیمه رسانای نوع p تبدیل می‌شود. در حالی که با جذب اتم N روی گرافن، این لایه خواص فلزی از خود نشان می‌دهد. همچنین با جذب اتم N، لایهٔ گرافن مغناطیسی می‌شود در صورتی که برای بقیهٔ اتم‌ها این چنین نیست. طیف جذب اپتیکی لایهٔ گرافن در حالت‌های قطبش نور موازی صفحه ($E \perp c$) و عمود بر صفحه ($E \parallel c$) و زاویهٔ 45° درجه نسبت به لایهٔ گرافن محاسبه شده است و نتایج برای جذب اتم‌های مختلف با یکدیگر مقایسه شده‌اند. مشاهده شد که در حالت ($E \perp c$) لایهٔ گرافن به یک سنسور اپتیکی برای تشخیص اتم F و در حالت ($E \parallel c$) به یک سنسور اپتیکی برای تشخیص اتم B در محیط تبدیل می‌شود.

واژه‌های کلیدی

Keywords

Density Functional Theory (DFT), Mono Layer Graphene, Structural and Optical Properties

خواص الکترونی و اپتیکی، گرافن تک لایه، نظریه تابعی چگالی (DFT)

*Corresponding Author: maryam_goudarzi@yahoo.com

* نویسنده مسئول: مریم گودرزی

مقدمه

گرافن یک لایه نازک از گرافیت با ساختار شبکه‌ای شش ضلعی و هیبریداسیون sp^2 است که در سال 2004 معرفی شده است [1]. بعد از کشف گرافن و مشاهده تجربی فرمیون‌های دیراک در آن، توجه جامعه علمی به ساختار منحصر به فرد این ماده جدید، خواص مکانیکی و الکترونیکی آن و مشتقات آن مانند اکسید گرافن جلب شد و این پتانسیل عظیم به عنوان یک تکنولوژی جدید به کار گرفته شد [2-4]. این کشف جدید کاندیدای مناسبی برای استفاده در ابزار اسپینترونیک، سنسورهای گازی، ابرخازن‌ها و ... به شمار می‌آید [5-8]. از آنجا که کارایی ابزار ساخته شده بر پایه گرافن به خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی آن بستگی دارد، مطالعات تجربی و تئوری زیادی جهت بررسی و تغییر خواص گرافن برای استفاده هرچه بهتر از آن انجام شده است [9 و 10]. یکی از راه‌های تغییر خواص گرافن جذب اتم‌های مختلف توسط لایه گرافن است. در این راستا، مطالعات نظری زیادی انجام شده است که اکثر آنها بر پیکربندی پایدار جذب اتم‌های فلزی روی گرافن [11]، هیبریداسیون مختلط در القای مغناطیسی [12 و 13] و انتقال بار بین اتم جذب شده و لایه گرافن [14] متمرکز شده‌اند.

خواص اپتیکی گرافیت و گرافن به طور گسترده توسط پژوهشگران زیادی مورد بررسی قرار گرفته است [15-18] ولی با وجود مطالعات زیادی که روی خواص اپتیکی گرافن صورت گرفته است، هنوز بررسی منظمی با استفاده از روش ابتدا به ساکن برای درک اثر جذب اتم اضافه روی لایه گرافن بر خواص اپتیکی آن انجام نشده است.

از آنجا که گرافن در شکل خالص خود در قسمت مرئی طیف نور شفاف است، اگر بتواند نورهایی با طول موج مشخص را جذب کند، می‌تواند برای کاربرد در ابزارهای اپتوالکترونیک بر پایه گرافن مفید باشد.

در این مقاله چگونگی تغییر پارامترهای ساختاری، الکترونیکی و خواص اپتیکی برای جذب اتم‌های O، N، B و F روی لایه گرافن با استفاده از نظریه تابعی چگالی بررسی می‌شود. به دلیل وجود طبیعی اکسیژن و نیتروژن در محیط، این اتم‌ها در طول سنتز گرافن می‌توانند جذب آن شده و باعث تغییر در ساختار نواری گرافن شوند. بنابراین بررسی خواص الکترونی و اپتیکی جذب اتم‌های O و N

روی لایه گرافن ضروری به نظر می‌رسد. همچنین تغییر در خواص الکترونی و اپتیکی گرافن به دلیل جذب اتم‌های B و F گرافن را تبدیل به یک ساختار ایده‌آل برای طراحی سنسورهای اپتیکی جهت تشخیص این اتم‌ها در محیط می‌کند.

روش محاسباتی

در این پژوهش همه محاسبات با استفاده از کد کوانتوم اسپرسو انجام شده که بر اساس نظریه تابعی چگالی نوشته شده است [19].

در این مدل‌سازی، از ابرسلول گرافن 4×4 که شامل 32 اتم است، برای انجام محاسبات استفاده شده است. برای جلوگیری از برهمکنش بین صفحات، فاصله بین صفحات گرافن $c=30 \text{ \AA}$ در نظر گرفته می‌شود و ثابت‌های شبکه عبارتند از $a=b=2/45 \text{ \AA}$ ، $\gamma=120^\circ$ و طول پیوند بین کربن‌ها برابر $C-C=1/42 \text{ \AA}$ است. پتانسیل به کارگرفته شده پتانسیل شبه‌نرم و برای جمله همبستگی-تبادلی از تقریب $GGA(PBE)$ استفاده شده است. انرژی قطع (E_{cut}) در بهینه کردن ساختار برابر 340 eV و بیشینه فاصله بین نقاط در نظر گرفته شده در شبکه معکوس (Kpoints)، برابر $0/03 \text{ \AA}^{-1}$ و پهن‌شدگی ترازا برابر $0/01 \text{ eV}$ است. بهینه کردن تا زمانی ادامه می‌یابد که نیروی وارد بر ساختار از $0/02 \text{ eV/\AA}$ تجاوز نکند. ساختار نواری، چگالی حالت‌های الکترونی و خواص اپتیکی با استفاده از اطلاعات ذکر شده برای مسیر متقارن $\Gamma-K-M-\Gamma$ محاسبه شده است.

برای پیدا کردن فاصله مناسب هر اتم از لایه گرافن، اتم‌ها در ابتدا در فاصله $3/1 \text{ \AA}$ از لایه گرافن قرار داده شده‌اند و سپس بهینه‌سازی ساختارها انجام شده است. برای پیدا کردن بهترین موقعیت قرار گرفتن اتم‌ها نسبت به لایه گرافن، همان طور که در شکل 1 نشان داده شده، اتم‌های مورد نظر در سه مکان متفاوت (بین پیوند کربن-کربن) M، (بالای یک اتم کربن) T و (وسط شش ضلعی) H قرار گرفتند. بهترین موقعیت قرار گرفتن اتم‌ها نسبت به لایه گرافن برای بررسی خواص الکترونی و اپتیکی ساختار، با توجه به مقدار انرژی جذب در حالت‌های مختلف انتخاب می‌شود که به عنوان پایدارترین حالت شناخته می‌شود. هر

همان طور که در جدول 1 دیده می‌شود، برای حالت پایدار ساختارها بعد از بهینه شدن، فاصله نهایی اتم‌های جذب شده روی لایه گرافن، d_{c-c} ، نسبت به فاصله اولیه افزایش می‌یابد و بیشترین فاصله از لایه گرافن متعلق به اتم B است که اندازه آن برابر $88/1 \text{ \AA}$ است. همچنین از ظاهر ساختارهای بهینه شده چنین مشخص است که جذب اتم‌ها روی لایه گرافن باعث حرکت اتم‌های کربن به خارج از صفحه می‌شود. این اعوجاج ثابت‌های شبکه، طول‌های پیوند و زاویه‌ها را تغییر می‌دهد. همان طور که در جدول 1 دیده می‌شود، طول پیوند کربن-کربن در نزدیک اتم اضافه شده بین طول پیوند هیبریداسیون $sp^2 (1/42 \text{ \AA})$ و هیبریداسیون $sp^3 (1/55 \text{ \AA})$ است و زاویه بین کربن‌های زیرین اتم‌های جذب شده بین 120° برای هیبریداسیون sp^2 و $109/5^\circ$ برای هیبریداسیون sp^3 است [20]. این اطلاعات نشان می‌دهد که هیبریداسیون ساختارهای جدید بین sp^2 و sp^3 است. اما در مورد نوع جذب اتم‌ها روی لایه گرافن، لازم به یادآوری است که اگر انرژی جذب ساختار کوچک‌تر از $0/4 \text{ eV}$ باشد، جذب از نوع فیزیکی است، اگر بین $0/4 \text{ eV}$ تا 1 eV باشد، جذب شیمیایی رخ می‌دهد و اگر از 1 eV بیشتر باشد، بین اتم و سطح مورد نظر پیوند شیمیایی ایجاد می‌شود [21 و 22]. با توجه به این اطلاعات و مقادیر انرژی جذب ذکر شده در جدول 1، بین اتم‌های B، O و F با لایه گرافن پیوند شیمیایی و بین اتم N و لایه گرافن جذب شیمیایی روی می‌دهد.

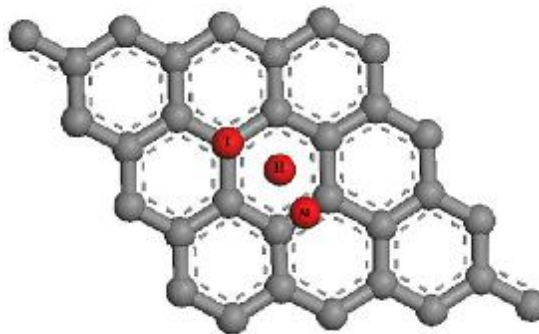
یکی از موارد مهم در بررسی هر ترکیب، شناخت نوع ترکیب بر حسب رسانا، نیمه رسانا یا نارسانا بودن آن است که یک روش برای تشخیص آن تحلیل ساختار نواری هر ترکیب است. در صورتی که باند ظرفیت و رسانش همپوشانی داشته باشند یا تراز اضافه‌ای روی تراز فرمی وجود داشته باشد، آن ترکیب رسانا است و اگر گاف انرژی بین باند ظرفیت و رسانش زیاد باشد، ترکیب نارسانا است. در مورد نیمه رساناها، از آنجا که در نیمه رسانای نوع p تعداد حفره‌ها از الکترون‌ها بیشتر می‌شود، تراز فرمی ساختار ناخالص نسبت به ساختار خاص به سمت انرژی‌های پایین‌تر جابه جا می‌شود و در ساختارهای نوع n این جابه جایی به سمت انرژی‌های بالاتر است.

همان طور که قبلاً گفته شد، هدف از این تحقیق تغییر خواص الکترونی و اپتیکی گرافن خالص است. به طوری که

چه انرژی جذب پایین‌تر باشد، ساختار پایدارتر است. این انرژی توسط رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$E_{adsorption} = E(adsorption+graphene) - E_{graphene} - E_{adatom}$$

که در آن $E(adsorption+graphene)$ انرژی نهایی ناشی از بهینه کردن پایدارترین ساختار گرافن و اتم اضافه شده است، $E_{graphene}$ انرژی کل گرافن خاص و E_{adatom} انرژی کل اتم اضافه شده در حالت پایه است.



شکل 1. مکان‌های مختلف جذب اتم روی صفحه گرافن، بالای مرکز شش ضلعی تشکیل شده توسط اتم‌های کربن (H)، بالای یک پیوند کربن-کربن (M) و بالای یک اتم کربن (T)

بحث و نتیجه‌گیری

از نتایج این بررسی مشاهده می‌شود که اگر اتم‌های B، N و F در موقعیت‌های متفاوت T، M و H قرار بگیرند، اتم‌ها در مکان اولیه خود باقی می‌مانند ولی انرژی جذب در موقعیت‌های مختلف، متفاوت است و موقعیتی که دارای پایین‌ترین انرژی جذب است، به عنوان پایدارترین حالت انتخاب می‌شود. بعد از بهینه‌سازی ساختارها، موقعیت M برای اتم‌های B و N و موقعیت T برای اتم F به عنوان پایدارترین حالت شناسایی شده است. برای جذب اتم O روی لایه گرافن، اگر این اتم را در موقعیت‌های T و H قرار دهیم بعد از بهینه‌سازی به مکان M جابه جا می‌شود و اگر در ابتدا در موقعیت M قرار داشته باشد، در همان مکان باقی می‌ماند که نشان می‌دهد برای ساختار موقعیت M پایدارترین حالت است. ساختارهای بهینه شده در شکل 2 و خلاصه‌ای از اطلاعات به دست آمده از این ساختارها در جدول 1 آورده شده است.

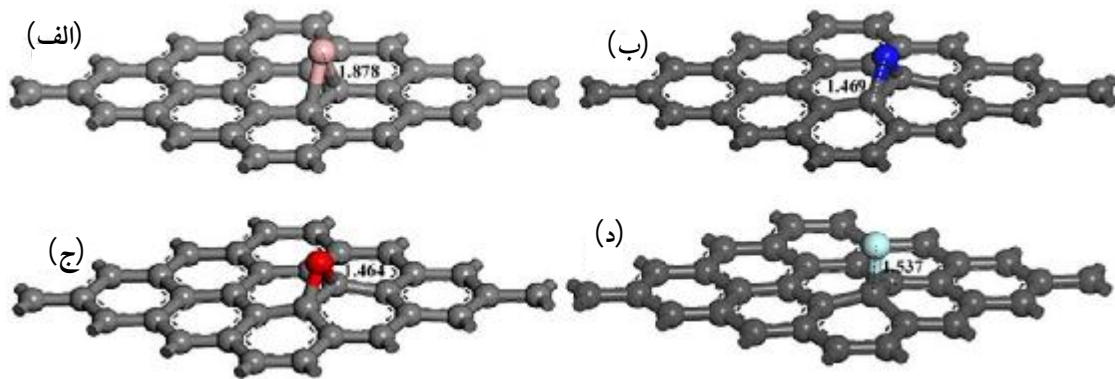
جدول 1. پارامترهای محاسبه شده برای جذب اتم‌های B، N، O و F روی سوپرسل گرافن 4x4: انرژی جذب، گاف انرژی، ممان مغناطیسی، طول پیوند کربن-کربن (d_{cc})، طول پیوند اتم جذب شده با اتم کربن (d_{xc})، زاویه بین اتم‌های کربن (θ_{ccc}) و اعوجاج (δ).

اتم جذب شده	انرژی جذب (eV)			گاف انرژی (eV)	ممان مغناطیسی (μ _B /cell)	d _{cc} (Å)	d _{xc} (Å)	θ _{ccc} (°)	δ (Å)
	T	M	H						
B	-0/857	-1/031	-1/023	0/129	----	1/431	1/880	119/6	0/06
N	0/947	-0/795	-0/052	0/118	0/82	1/461	1/466	117/2	0/405
O	----	-2/152	----	0/665	----	1/464	1/464	118/2	0/360
F	-1/165	-1/325	-1/714	0/286	----	1/479	1/533	115/0	0/401

انرژی‌های بیشتر جابه جا شده و یک گاف انرژی به اندازه 0/594eV به وجود آمده است. باند ظرفیت نیز تراز فرمی را قطع کرده است.

در جذب اتم O روی گرافن، ساختار نواری، شکل 3 (د) نشان می‌دهد که باند رسانش به سمت انرژی‌های بیشتر جابه جا شده و یک گاف انرژی مستقیم به اندازه 0/665eV به وجود آمده است. بنابراین این ساختار یک نیمه رسانای نوع p است که مطابق با نتیجه تحقیق ال فنگ است [25]. مطابق شکل 3 (ه) اگر یک اتم F توسط گرافن جذب شود، تراز فرمی به سمت انرژی‌های پایین جابه جا می‌شود و در نتیجه باند ظرفیت تراز فرمی را قطع می‌کند و در توافق با نتیجه کار ال فنگ [25] نشان می‌دهد که این ساختار یک نیمه رسانای نوع p است و گاف انرژی آن برابر

در ابزارهای الکترونیکی و اپتیکی دارای کاربرد باشد. به این منظور به بررسی ساختار توارای جذب اتم‌های B، N، O و F روی گرافن (شکل‌های 3 (ب) تا 3 (ه)) و مقایسه آن با ساختار نواری گرافن خالص، که در شکل 3 (الف) آورده شده، می‌پردازیم. از مشاهده شکل 3 (ب) دیده می‌شود که در ساختار نواری جذب اتم B روی گرافن، تراز فرمی به سمت انرژی‌های بزرگ‌تر جابه جا شده است و یک گاف انرژی در حدود 0/129eV بین باند ظرفیت و رسانش به وجود می‌آید که نشان می‌دهد این ساختار یک نیمه رسانای نوع n است. در حالی که همان طور که در بخش قبل دیده شد، گرافن آلاینده با اتم B نیمه رسانای نوع p است که این نتیجه با یافته‌های کار تئوری اگنولی و همکاران [23] و کار تجربی ام وو و همکاران [24] مطابقت دارد.



شکل 2. ساختارهای بهینه شده جذب اتم‌های (الف) B، (ب) N، (ج) O و (د) F روی لایه گرافن

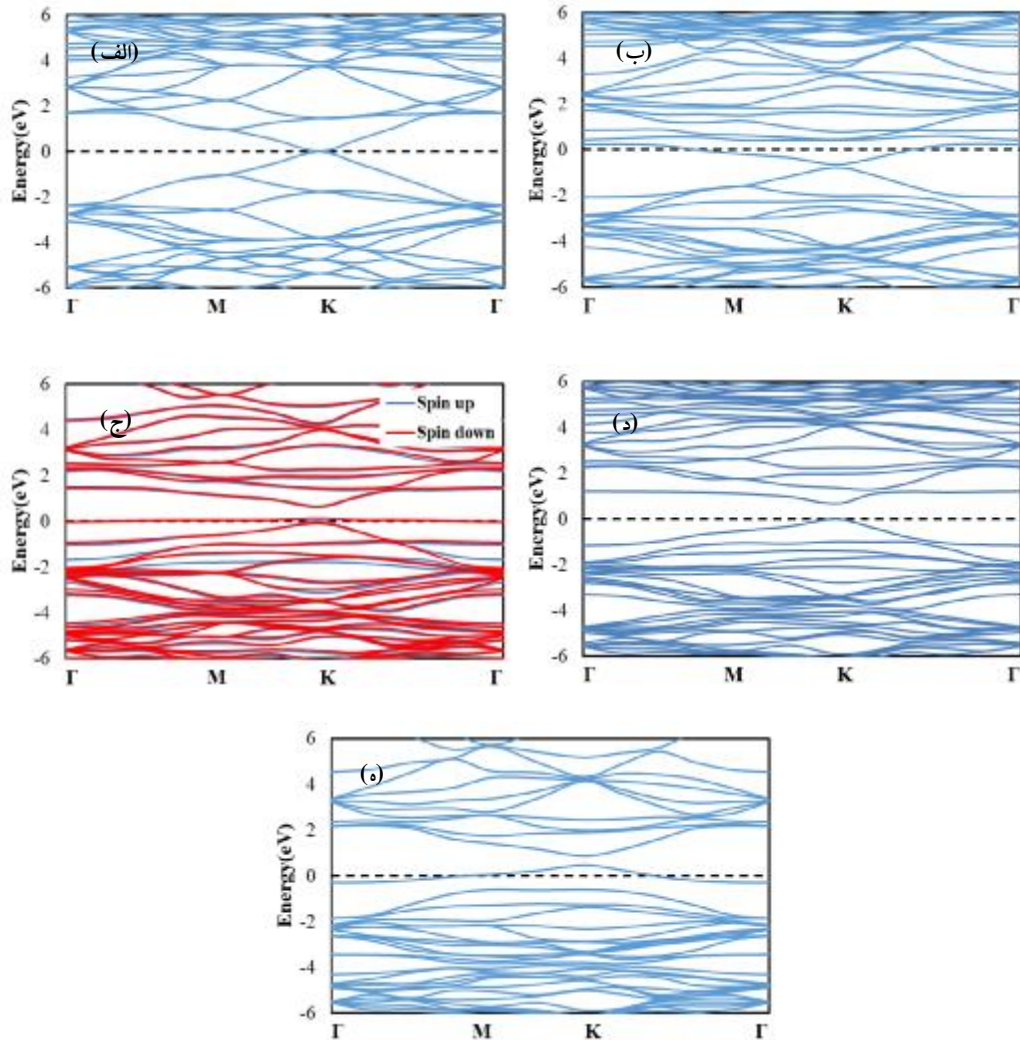
0/304eV است.

در بررسی اپتیکی، طیف جذب برای لایه گرافن با جذب اتم‌های B، N، O و F در حالت‌های قطبش موازی

برای جذب اتم N، ساختار نواری برای اسپین بالا و پایین متفاوت است. همان طور که در شکل 3 (ج) دیده می‌شود، در حالت اسپین بالا باند رسانش به سمت

5eV را در نظر گرفته ایم [26]. همان طور که در شکل 4 (الف) نشان داده شده است، برای میدان موازی با صفحه گرافن $(E \perp c)$ ، ضریب جذب برای گرافن خالص از $12662/06 \text{ cm}^{-1}$ تا $22190/36$ به صورت پیوسته تغییر می کند. ضریب جذب گرافن همراه با جذب اتم های B، N و O نیز تقریباً بدون وجود هیچ پیک مشخصی در این بازه افزایش می یابد. اما

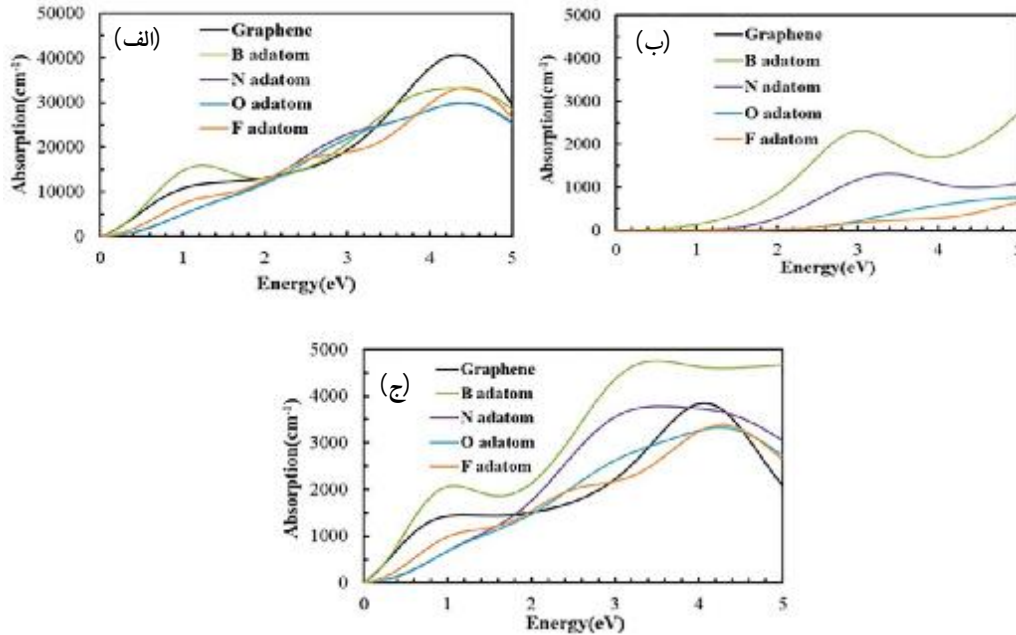
با صفحه گرافن $(E \perp c)$ ، عمود بر صفحه گرافن $(E \parallel c)$ و تابش 45° نسبت به صفحه گرافن برای ناحیه اپتیکی بررسی می شود که طیف جذب مربوط به حالت های مختلف در شکل 4 نشان داده شده است. ناحیه اپتیکی شامل طول موج های حدود 390nm تا 700nm است که بر حسب انرژی متناظر با 1/77eV تا 3/2eV است. در این تحقیق ما برای بررسی طیف جذب بازه انرژی 0 تا



شکل 3. ساختار نواری (الف) گرافن خالص، (ب) جذب اتم B، (ج) N، (د) O، (ه) F روی لایه گرافن.

جذب در ناحیه اپتیکی از $591/77\text{cm}^{-1}$ تا $2258/10\text{cm}^{-1}$ تغییر می‌کند و در طول موج حدود 414nm (3eV) یک پیک واضح وجود دارد. بنابراین در حالت میدان عمود بر صفحه، گرافن می‌تواند یک سنسور اپتیکی برای شناسایی

برای جذب اتم F روی گرافن یک پیک در حدود طول موج 477nm ($2/6\text{eV}$) دیده می‌شود. بنابراین گرافن می‌تواند به عنوان یک سنسور اپتیکی برای تشخیص گاز F در محیط استفاده شود.



شکل 4. ضریب جذب برای (الف) قطبش میدان موازی صفحه $(E \perp c)$ ، (ب) قطبش میدان عمود بر صفحه $(E \parallel c)$ و (ج) قطبش 45° نسبت به صفحه گرافن

اتم B در محیط باشد. برای تابش 45° نسبت به صفحه گرافن، شکل 4 (ج)، در ابتدای بازه اپتیکی ضریب جذب تمام ساختارها به جز برای جذب B روی گرافن نسبت به گرافن خالص کمتر است اما در انتهای بازه تنها جذب F روی گرافن مقدار ضریب جذب کمتری نسبت به گرافن خالص دارد. در این حالت در بازه اپتیکی تنها ساختار F دارای یک پیک ضعیف است و افزایش ضریب جذب بقیه ساختارها منجر به ایجاد پیک نمی‌شود.

از بین سه حالت بررسی شده، ضریب جذب در ناحیه اپتیکی در حالت میدان موازی صفحه $(E \perp c)$ برای گرافن خالص و بقیه ساختارهای ذکر شده نسبت به دو حالت دیگر بزرگتر است. جذب اپتیکی گرافن خالص و گرافن با جذب اتم، به دلیل ناهمسانگردی توزیع بار درون

به صورت کلی در ابتدای ناحیه اپتیکی، فقط ضریب جذب ساختاری که اتم B روی گرافن قرار گرفته است، از گرافن خالص بیشتر است، اما در انتهای این بازه ضریب جذب همه ساختارها به جز گرافنی که اتم F روی آن قرار گرفته است، از گرافن خالص بیشتر است.

در حالت میدان عمود بر صفحه $(E \parallel c)$ ، شکل 4 (ب)، ضریب جذب در ناحیه اپتیکی برای گرافن خالص صفر است که نشان می‌دهد گرافن خالص در این ناحیه شفاف است. برای جذب اتم‌های F و O مقدار جذب تا طول موج 565nm ($2/2\text{eV}$) صفر است و سپس به آرامی و به مقدار کمی افزایش می‌یابد. اما طیف جذب برای اتم‌های B و N روی گرافن متفاوت است. برای جذب اتم N ضریب جذب از $158/03\text{cm}^{-1}$ شروع شده و در انتهای بازه اپتیکی به $1287/18\text{cm}^{-1}$ می‌رسد و یک پیک ضعیف در این روند افزایش دیده می‌شود. برای اتم B ضریب

قطبش نور باعث ایجاد پیک در ناحیه اپتیکی می‌شود. در نهایت به دلیل اینکه جذب گرافن با جذب اتم‌های مختلف تغییر می‌کند، می‌توان از گرافن به عنوان یک سنسور اپتیکی استفاده کرد.

و بیرون لایه گرافن برای قطبش‌های متفاوت نور، ناهمسان است.

از نتایج به دست آمده چنین دریافت می‌شود که جذب اتم‌های مختلف روی لایه گرافن منجر به چگالی حالت‌های متفاوت نسبت به گرافن خالص می‌شود که در نتیجه در برخی از ساختارها و در بعضی از جهت‌های

References

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov. "Electric field effect in atomically thin carbon films", *Science* 306 (2004) 666-669.
- [2] W. Han, R.K. Kawakami, M. Gmitra, and J. Fabian, *Nat. Nanotechnol.* 9 (2014) 794.
- [3] A.A. Balandin, S. Ghosh, W.Z. Bao, I. Calizo, D.T.F. Miao, and C.N. Lau, *Nano Lett.* 8 (2008) 902.
- [4] G. Allaadini, E. Mahmoudi, P. Aminayi, S. Masrinda Tasrini, and A.W. Mohammad, *Synth. Met.* 220 (2016) 72.
- [5] S. Stankovich, D.A. Dikin, G.H.B. Dommett, K.M. Kohlhaas, E.J. Zimney, E.A. Stach, R.D. Piner, S.T. Nguyen, and R.S. Rouff, *Nature* 442 (2006) 282.
- [6] F. Schedin, A.K. Geim, S.V. Moeozov, E.W. Hill, P. Blake, M.I. Katsnelson, and K.S. Novoselov, *Nat. Mater.* 6 (2007) 652.
- [7] I.I. Barbolina, K.S. Novoselov, S.V. Morozov, S.V. Dubonos, M. Missous, A.O. Volkov, D.A.Christian, I.V. Grigorieva, and A.K.Geim, *Appl. Phys. Lett.* 88 (2006) 013901.
- [8] C.A. Di, D. Wei, G. Yu, Y. Liu, Y. Guo., and D. Zho, *Adv. Mater.* 20 (2008) 3289.
- [9] Y. Lu, B.R. Goldsmith, N.J. Kubert, and A.T.C. Johnson *Appl. Phys. Lett.* 97 (2010) 083107.
- [10] Z.M. Ao, J. Yang, S. Li, and Q. Jiang, *Chem. Phys. Lett.* 461 (2008) 276.
- [11] M. Khantha, N.A. Cordero, L.M. Molina, J.A. Alonso, and L.A. Girifalco *Phys. Rev. B* 70 (2004) 125422.
- [12] D.M. Duffy and J.A. Blackman *Phys. Rev. B* 58 (1998) 7443.
- [13] Y. Yagi, T.M. Briere, H.F. Marcel Sluiter, V. Kumar, A.A. Farajian, and Y. Kawazoe, *Phys. Rev. B* 69 (2004) 075414.
- [14] D.M. Duffy, and J.A. Blackman, *Surf. Sci.* 415 (1998) L1016.
- [15] O.V. Sedelnikova, L.G. Bulusheva, and A.V. Okotrub, *J. Chem. Phys.* 134 (2011) 244707.
- [16] A.G. Marinopoulos, L. Reining, A. Rubio, and V.Olevano, *Phy. Rev. B* 69 (2004) 245419.
- [17] A.G. Marinopoulos, L. Wirtz, A. Marini, V. Olevano, A. Rubio and L. Reining *Appl. Phys. A* 78 (2004) 1157.
- [18]. P. Rani, G.S. Dubey, and V.K. Jindal, *Physica E* 62 (2014) 28.
- [19] P. Giannizzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. L. Chiarroti, M. Cococcioni, I. Dabo, Dal, A corso. S. Gironcoli, de, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, S. M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Scalauzero, A. P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, R. Wentzcovitch, "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials", *J. Phys. Condens. Matter* 21 (2009) 395502.
- [20] R. Chang, *Physical Chemistry for the Biosciences* (Sausalito:University Science Books, cop,) (2005) 450-455.

- [21] P.A. Webb, Introduction to Chemical Adsorption Analytical Techniques and Their Applications to Catalysis (San Diego: MIC Technical Publications.), (2003) 1–12.
- [22] M. Kralik, Chem. Pap. 68 (2014) 1625.
- [23] S. Agnoli and M. Favaro, J. Mater. Chem. A 4 (2016) 5002.
- [24] M. Wu, C. Cao, and J. Z. Jiang, Nanotechnology 21 (2010) 505202.
- [25] L. Feng, Simulation of Crystal, Electronic and Magnetic Structures and gas Adsorption of Two Dimensional Materials (Wollongong: University of Wollongong), Thesis Collections, (2014).
- [26] S. Cecie, Biology: Concepts and Applications (Cole: Thomson Brooks.), (2005) 160–161.

COPYRIGHTS



© 2022 by the authors Licensee PNU, Tehran, Iran This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0) (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0>)