



## طیف های اپتوالکترونیکی و ترموالکتریکی ترکیب $\text{DyMnO}_3$ با استفاده از نظریه تابعی چگال (DFT)

حسین اصغر رهنمای علی آباد\*، ساربه رضانی ثانی

دانشگاه حکیم سبزواری، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، سبزواری، ایران

تاریخ ثبت اولیه: ۱۳۹۴/۸/۱۲، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۳۹۴/۹/۲۴، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۳۹۴/۱۰/۴

### چکیده

ویژگی های ساختاری، خواص الکترونیکی، اپتیکی و ترموالکتریکی ساختار پروسکایت  $\text{DyMnO}_3$  با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) با تقریب های  $\text{GGA+U}$  و  $\text{LDA+U}$  مورد بررسی قرار گرفته است. ساختار نواری نشان می دهد که این ترکیب در حالت اسپین پایین دارای گاف نواری مستقیم و برابر با  $3/3 \text{ eV}$  در تقریب  $\text{GGA+U}$  و مقدار  $3/1 \text{ eV}$  در تقریب  $\text{LDA+U}$  است. همچنین خواص اپتیکی شامل ضریب جذب، بازتابندگی و طیف اتلاف انرژی الکترون مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج ترموالکتریکی نشان می دهد که این ترکیب ضریب سیبک بالایی دارد و می تواند به عنوان یک ماده ترموالکتریک خوب در صنعت مورد استفاده قرار گیرد.

واژه های کلیدی: نظریه تابعی چگال، ساختار نواری، خواص اپتیکی، ضریب سیبک.

### ۱. مقدمه

چند فروبیک ها گروهی از مواد هستند که همزیستی دو نظم فرومغناطیس و فرو الکتریسته را در فاز یکسانی نشان می دهند [۱]. در نتیجه این همزیستی برهمکنشی بین نظم های فروبیک ایجاد شده که باعث پدید آمدن اثر مغناطو الکتریک (ME) می شود. در واقع میدان الکتریکی موجب مغناطش و میدان مغناطیسی باعث قطبش الکتریکی می شود [۲]. مواد چند فروبیک به دلیل جفت شدگی بین مغناطش و قطبش، هم از لحاظ فیزیکی و هم به خاطر کاربرد زیاد آنها در حافظه ها، سنسورها و مبدل ها مورد توجه زیادی قرار گرفته اند [۳]. در بین این مواد اکسیدهای فلزات واسطه به علت همین جفت شدگی از اهمیت زیادی برخوردارند. منگنات های عناصر واسطه  $\text{RMnO}_3$  (R یون خاکی کمیاب است) دارای ساختار پروسکایت هستند. این ترکیبات بسته به اندازه یون عنصر واسطه دارای دو نوع ساختار بلوری اورتورومبیک و هگزاگونال هستند. برای شعاع های یونی کوچک ساختار هگزاگونال و با افزایش شعاع یونی، ساختار اورتورومبیک می شود [۲،۴]. سلول واحد ساختارهای پروسکایت

\*عهده دار مکاتبات: حسین اصغر رهنمای علی آباد

نشانی: سبزواری، دانشگاه حکیم سبزواری، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، ایران

تلفن: ۰۹۱۵۱۲۱۷۲۶۵ پست الکترونیک: E-Mail: Rahnama@hsu.ac.ir

ایده آل، مکعبی است. اما اغلب پروسکایت‌ها به دلیل اثراتی چون اثر جان-تلا (John-Teller Effect) واپیچیده می‌شوند و ساختار مکعبی را نشان نمی‌دهند. اثر جان-تلا نقش بسار مهمی در خواص فیزیکی منگنات‌ها مانند گذار فازهای فلز-عایق و پارامغناطیس فرومغناطیس دارد [۵]. منگنات‌های چند فروبیک با ساختار پروسکایت گونه، دارای کاربردهایی در حافظه‌های کامپیوتر، خازن‌های چند لایه‌ای (Multilayered capacitors)، مبدل‌های پیزوالکتریک (Piezoelectric Transducers) و سنسورهای پیزوالکتریک (Pyroelectric Sensors) هستند [۶]. منگنات‌های عناصر واسطه به دلیل جفت شدگی بین خواص فروالکتریک و فرو مغناطیس، خواص ترموالکتریک جالبی را از خود نشان می‌دهند. امروزه فن آوری ترموالکتریک در حال پیشرفت است و کاربردهای زیادی در صنعت مخابرات، دریانوردی، فضاپیماهای دور برد و صنعت اتومبیل دارند [۷]. کارایی و بازده مواد ترموالکتریک از رابطه  $ZT = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa}$  تعیین می‌شود که در آن  $\sigma$  هدایت الکتریکی،  $S$  ضریب سیبک،  $\kappa$  هدایت گرمایی و  $T$  دمای مطلق است [۸]. موادی با ضریب سیبک و هدایت الکتریکی بالا و هدایت گرمایی پایین، بازده ترموالکتریک بالایی دارند. در این مقاله خواص اپتیکی، الکترونیکی و ترموالکتریک ترکیب  $\text{DyMnO}_3$  با استفاده از محاسبات اصول اولیه در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) بررسی می‌شود. این ترکیب جزء مواد ترموالکتریک با ساختار پروسکایت اورتورومبیک با گروه فضایی (Pnma) ۶۲ است. این ماده ضریب سیبک و هدایت الکتریکی بالایی دارد.

## ۲. روش‌های محاسباتی

محاسبات با روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی در چارچوب نظریه تابعی چگالی با استفاده از کدهای Win2k و Boltztrap انجام شده است [۹]. محاسبات برای دو تقریب  $GGA+U$  و  $LDA+U$  انجام شده که مقدار  $U=4 \text{ eV}$  در نظر گرفته شده است [۱۰]. برای انجام محاسبات تعداد ۱۲۰۰۰ نقطه در فضای  $K$  برای همگرایی ضرایب ترابرد انتخاب شده و شعاع‌های کره‌های مافین تین براساس طول پیوند  $2/24 \text{ \AA}$  محاسبات  $R_{\text{MT}}(\text{Dy})=2/24 \text{ \AA}$ ،  $R_{\text{MT}}(\text{Mn})=2/24 \text{ \AA}$ ،  $R_{\text{MT}}(\text{O}_1)=2/24 \text{ \AA}$ ،  $R_{\text{MT}}(\text{O}_2)=2/24 \text{ \AA}$  و  $R_{\text{Kmax}}=7$  کوچکترین شعاع کره مافین تین و  $K_{\text{Max}}$  انرژی برش برای موج تخت) و معیار همگرایی  $10^{-6} \text{ eV}$  در نظر گرفته شده است. تعداد نقاط  $k$  در منطقه اول بریلون  $150$  نقطه مربوط به خواص الکترونی و  $1200$  نقطه برای خواص اپتیکی در نظر گرفته شده است. انرژی جدایی بین الکترون‌های ظرفیت و مغزی برابر با  $6/5 \text{ Ry}$  است.

در روابط نیمه کلاسیک بولتزمن ضرایب ترابرد به صورت تابعی از پتانسیل شیمیایی و دما به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۱]:

$$\sigma_{\alpha\beta}(T, \mu) = \frac{1}{\Omega} \int \sigma_{\alpha\beta}(\varepsilon) \left\{ -\frac{\partial f_{\mu}(T, \varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right\} d\varepsilon \quad (1)$$

$$v_{\alpha\beta}(T, \mu) = \frac{1}{eT\Omega} \int \sigma_{\alpha\beta}(\varepsilon)(\varepsilon - \mu) \left\{ -\frac{\partial f_{\mu}(T, \varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right\} d\varepsilon \quad (2)$$

$$\kappa_{\alpha\beta}^0(T, \mu) = \frac{1}{e^2 T \Omega} \int \sigma_{\alpha\beta}(\varepsilon)(\varepsilon - \mu)^2 \left\{ -\frac{\partial f_{\mu}(T, \varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right\} d\varepsilon \quad (3)$$

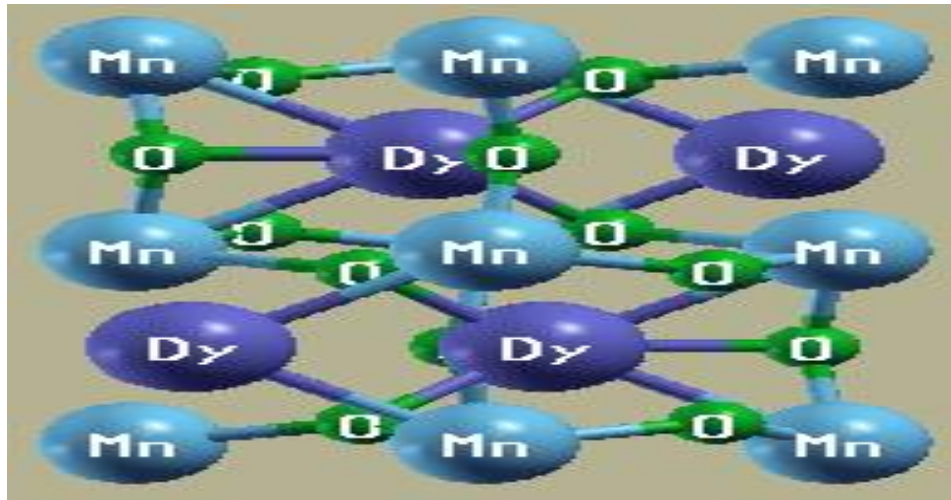
که در این روابط  $v$  مولفه سرعت گروه،  $f$  تابع توزیع فرمی دیراک و  $\kappa^0$  بخش الکترونی هدایت الکتریکی است. همچنین ضریب سیبک را از رابطه زیر می‌توان بدست آورد:

$$S_{ij} = E_i (\nabla_j T)^{-1} = (\sigma^{-1})_{ai} v_{aj} \quad (4)$$

### ۳. بحث و بررسی نتایج

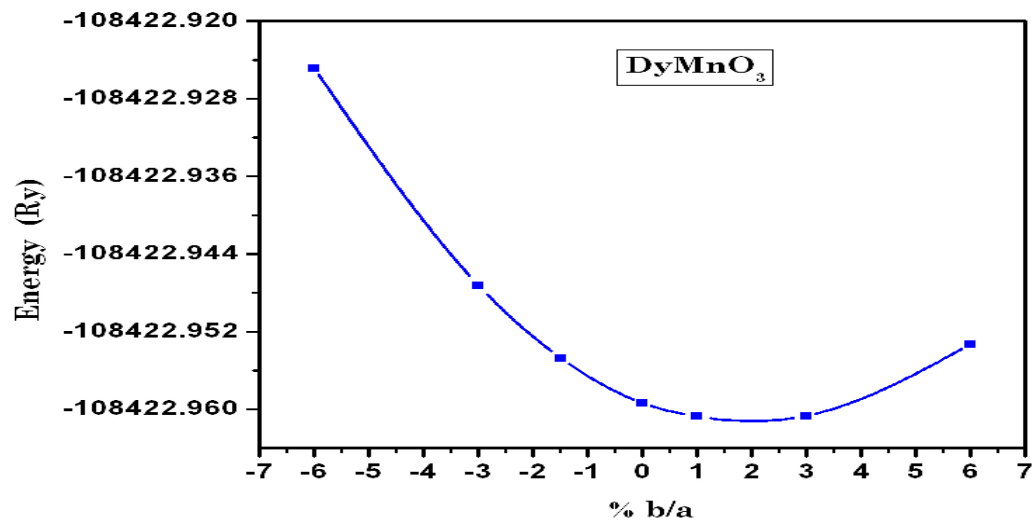
#### ۱-۳. ساختار بلوری و بهینه سازی پارامترها

سلول واحد ساختار پروسکایت ایده آل ترکیبات  $\text{RMnO}_3$  به شکل مکعب است که کاتیون های  $\text{R}^{+3}$  در گوشه های مکعب، کاتیون های  $\text{Mn}^{+2}$  در مرکز مکعب و آنیون های  $\text{O}^{-2}$  در مراکز وجوه قرار دارند. اما در بیشتر پروسکایت ها به علت دو فاکتور اثر جان-تیلر و اندازه کاتیون های  $\text{Mn}$  و  $\text{R}$  تقارن کمتری از بین می رود. در ترکیب  $\text{DyMnO}_3$  یون  $\text{Mn}^{+3}$  با شش یون  $\text{O}^{-2}$  در محیط هشت وجهی احاطه می شود که این هشت وجهی  $\text{MnO}_6$  به علت اثر جان-تیلر و پیچیده می شود و ساختار بلوری اورتورومبیک با گروه فضایی (Pnma) ۶۲ بدست می آید که ۲۰ اتم در سلول واحد خود دارد و در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱. ساختار بلوری  $\text{DyMnO}_3$

برای انجام محاسبات ابتدا ثابت های شبکه بهینه سازی شده که برای بهینه سازی ثابت های شبکه از ثابت های تجربی استفاده شده است. بهینه سازی پارامترهای شبکه در شکل ۲ آمده است. همچنین نتایج بهینه سازی ثابت های شبکه نیز در جدول ۱ آمده است. نتایج نشان می دهد که پارامترهای محاسبه شده توافق خوبی با مقادیر تجربی دارد.



شکل ۲. بهینه سازی پارامترهای شبکه

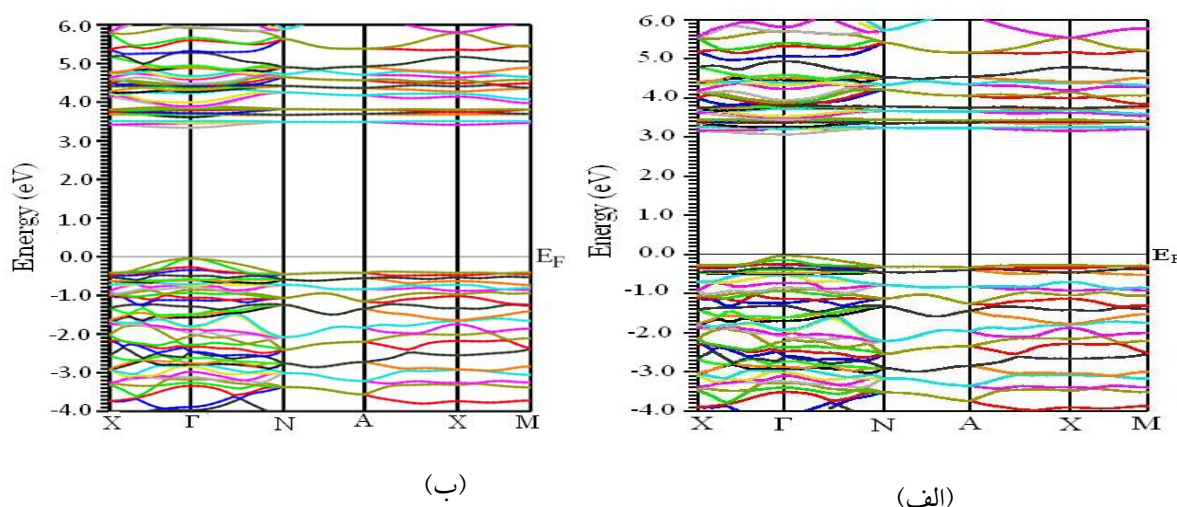
مقدار محاسبه شده	مقدار تجربی [۱۳]	مقدار تجربی [۱۲]	ثابت شبکه (Å)
5.81	5.84	5.80	a
7.44	7.37	7.39	b
5.25	5.28	5.27	c

جدول ۱. ثابت‌های شبکه بهینه شده و مقایسه آنها با مقادیر تجربی برای ترکیب  $DyMnO_3$ 

## ۲-۳. خواص الکترونیکی

## ۱-۲-۳. ساختار نوار انرژی

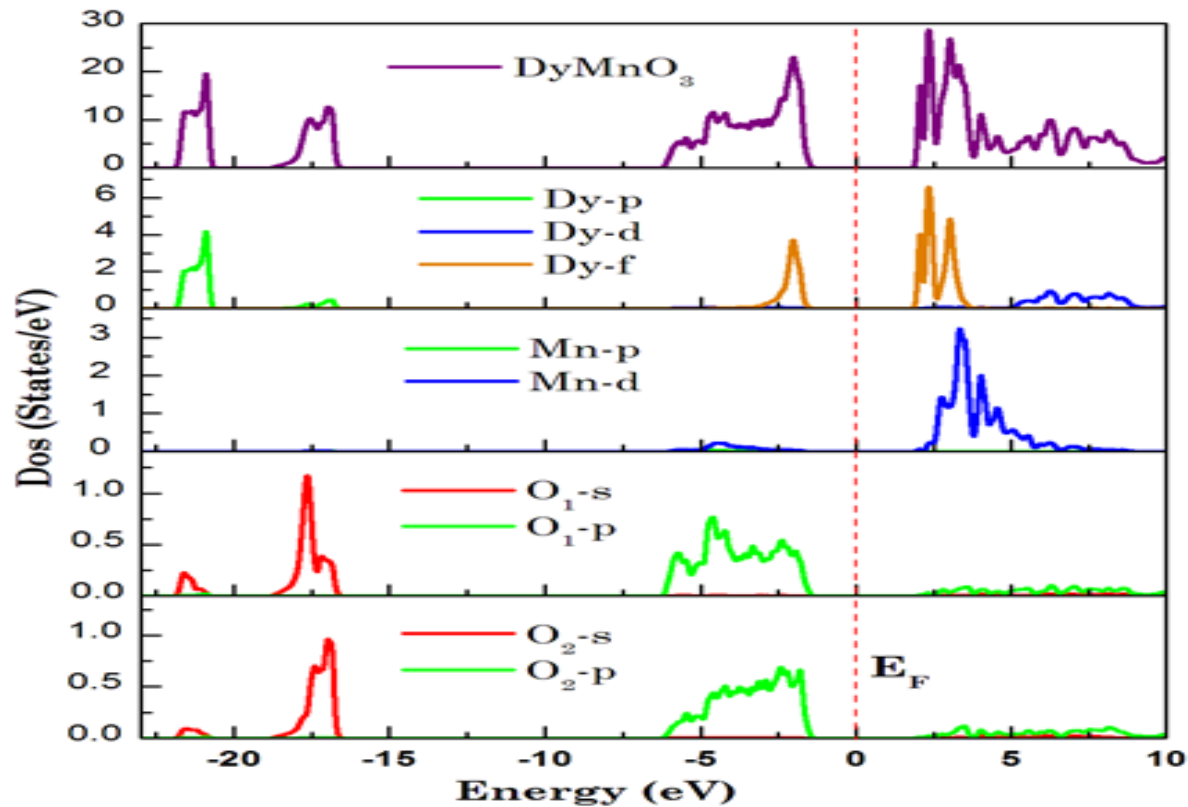
ساختار نوارهای انرژی برای ترکیب  $DyMnO_3$ ، در اسپین پایین با استفاده از تقریب GGA+U و LDA+U و مسیرهای انتخاب شده در اولین منطقه بریلوئن در شکل ۳ رسم شده است. خط کشیده شده از نقطه صفر انرژی، بیانگر سطح انرژی فرمی است. همانطور که از شکل مشخص است گاف انرژی مستقیمی در جهت  $\Gamma$  در دو تقریب GGA+U و LDA+U به ترتیب با مقدار  $E_g = 3/3 eV$  و  $E_g = 3/1 eV$  وجود دارد.

شکل ۳. ساختار نوارهای انرژی ترکیب  $DyMnO_3$  در تقریب‌های الف) LDA+U ب) GGA+U

## ۲-۲-۳. چگالی حالتها

برای تعیین خصوصیات الکترونیکی، بررسی چگالی حالتها در اطراف انرژی فرمی ضروری است. همچنین چگالی حالتها، نحوه توزیع انرژی الکترونها در طیف انرژی را توصیف می‌کنند. برای شناخت بیشتر ماهیت ساختار نوری، چگالی نهایی حالتها برای ترکیب  $DyMnO_3$  و چگالی جزئی حالتها برای Dy، Mn و O با تقریب GGA+U در شکل ۴ رسم شده است. در نمودار چگالی حالتها، انرژی صفر نشان دهنده مکان تراز فرمی است. نوار ظرفیت زیر تراز فرمی و نوار رسانش بالای تراز فرمی قرار دارد. همانطور که از شکل مشخص است در نوار رسانش توزیع چگالی حالتها مربوط به اتمهای Dy و Mn است که ناشی از اوربیتالهای f و d آنها است و در نوار ظرفیت این بیشترین توزیع چگالی مربوط به اتمهای  $O_1$  و  $O_2$  است. پایین نوار ظرفیت با حالت‌های  $Dy-p$ ،  $O_1-s$  و  $O_2-s$  اشغال شده است. نزدیک سطح فرمی در نوار ظرفیت حالت  $Dy-f$  با حالت‌های  $O_1-p$  و  $O_2-p$  و توزیع کمی از  $Mn-d$  ترکیب شده که نشان دهنده هیبریداسیون قوی بین آنها است.

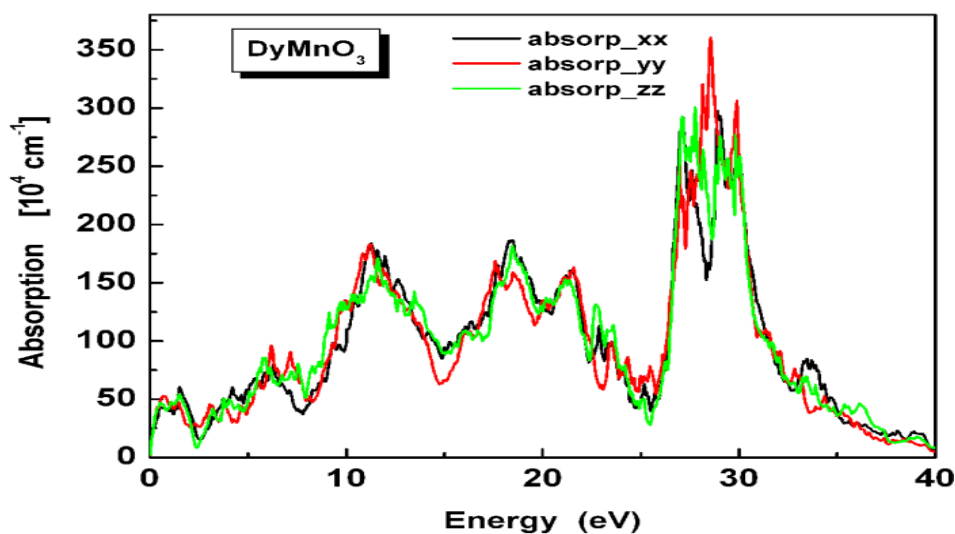
همچنین در نزدیکی سطح فرمی در نوار ظرفیت پهنای چگالی توزیع حالت‌های جزئی مربوط به اوربیتال d اتم Mn و p اتم‌های O<sub>1</sub> و O<sub>2</sub> آشکارتر از اوربیتال f اتم Dy است که این نشان دهنده هیبریداسیون قوی تر Mn - O از Dy - O است.



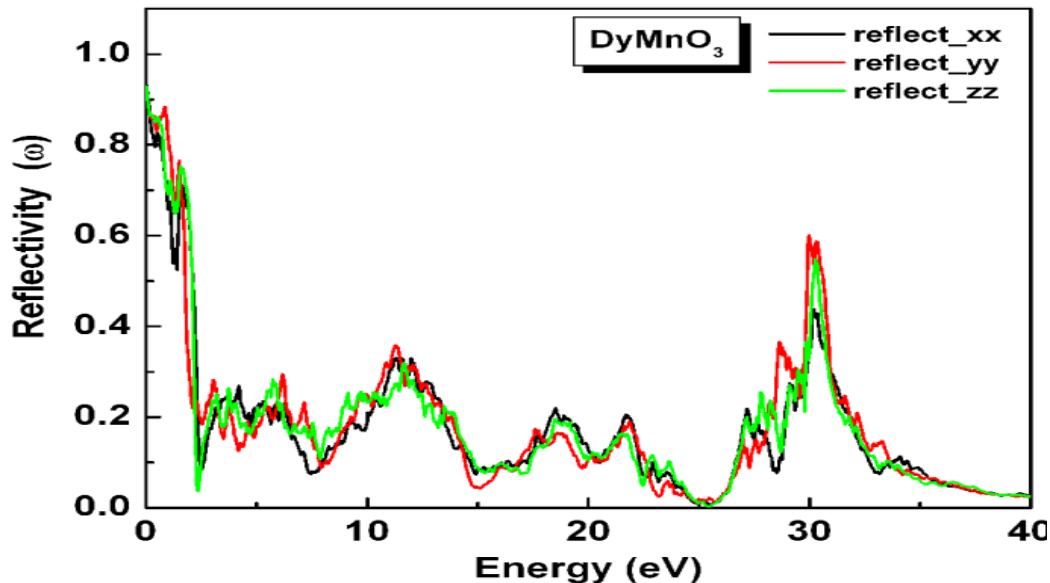
شکل ۴. توزیع چگالی حالت نهایی DyMnO<sub>3</sub> و توزیع چگالی حالت‌های جزئی اتم‌ها با تقریب GGA+U

### ۳-۳. خواص اپتیکی

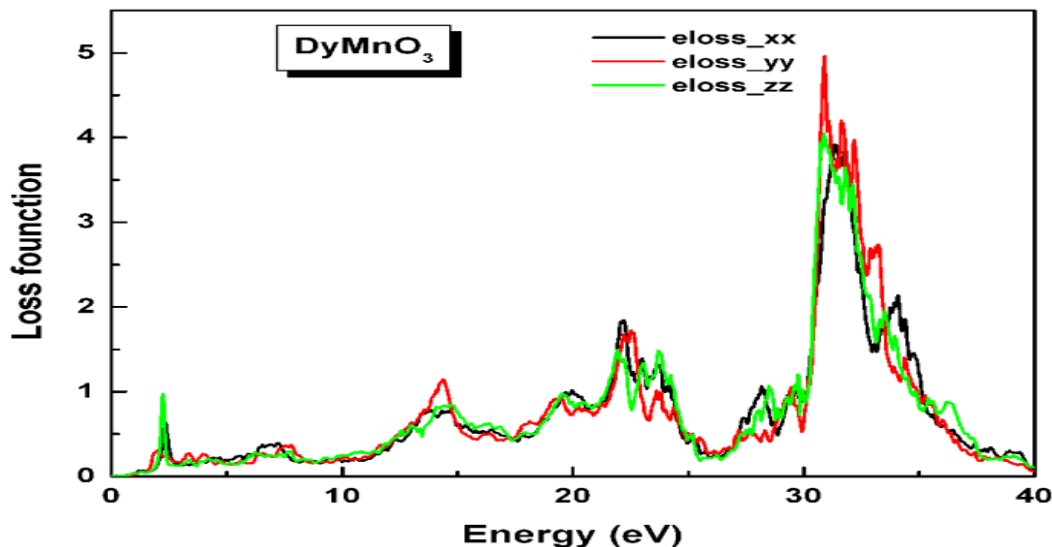
خواص اپتیکی جامدات ابزار ارزشمندی برای بررسی جنبه‌های مختلفی از مواد مانند ساختار نواری، سطوح ناخالصی، نوسانات شبکه، برانگیختگی‌ها و برانگیختگی‌های مغناطیسی می‌باشد بعضی از خواص اپتیکی از قبیل تابع اتلاف انرژی الکترون، ضریب جذب و بازتابندگی در این تحقیق مورد بررسی قرار گرفته است. الکترون‌ها با جذب فوتون، برانگیخته شده و از نوار ظرفیت به نوار رسانش می‌روند. جذب فوتون توسط الکترون‌ها را جذب بین نواری گویند. نمودار جذب بر حسب انرژی فوتون در سه راستای X، Y و Z در (شکل ۵) رسم شده است. جذب از محدوده گاف انرژی شروع می‌شود. همانطور که از شکل مشخص است جذب در راستای Y بیشتر از دو راستای دیگر است. بیشترین مقدار جذب در این ترکیب در راستای X، Y و Z به ترتیب در انرژی‌های ۲۸/۹۱، ۲۸/۴۸ و ۲۷/۷۵ الکترون ولت است.

شکل ۵. تغییرات جذب اپتیکی  $\text{DyMnO}_3$ 

بازتابندگی یا انعکاس به فرکانس بستگی دارد. نمودار بازتابندگی ترکیب  $\text{DyMnO}_3$  بر حسب انرژی در سه راستای X، Y و Z در شکل ۶ رسم شده است. با توجه به شکل شروع بازتاب از انرژی حدود  $0.38 \text{ eV}$  صورت می‌گیرد و سپس کاهش یافته و در انرژی  $1.64 \text{ eV}$  در راستای X، در انرژی  $0.84 \text{ eV}$  در راستای Y و در انرژی  $1.56 \text{ eV}$  در راستای Z به بیشینه مقدار خود می‌رسد. همچنین لازم به ذکر است که در نقاطی که بازتاب بیشینه است جذب در آن نقاط کمینه است.

شکل ۶. بازتابندگی  $\text{DyMnO}_3$ 

در شکل ۷ تابع اتلاف انرژی برای ترکیب  $\text{DyMnO}_3$  رسم شده است. این طیف در بردارنده تحریک دسته جمعی الکترون‌های ظرفیت (پلاسمون-ها) به داخل حالات اشغال نشده در نوار رسانش است. پیک اصلی در طیف اتلاف انرژی مربوط به انرژی پلاسمون حجم  $\hbar\omega_p$  است. طیف اتلاف انرژی از انرژی‌های بالاتر از گاف انرژی شروع شده است. پیک‌های ماکزیمم در راستای X، Y و Z به ترتیب در انرژی‌های  $31/40$ ،  $30/87$  و  $30/95$  الکترون‌ولت قرار دارد. در واقع پیک‌های ماکزیمم مربوط به انتقالات از نوار ظرفیت به نوار رسانش است.



شکل ۷. طیف اتلاف انرژی الکترون  $DyMnO_3$

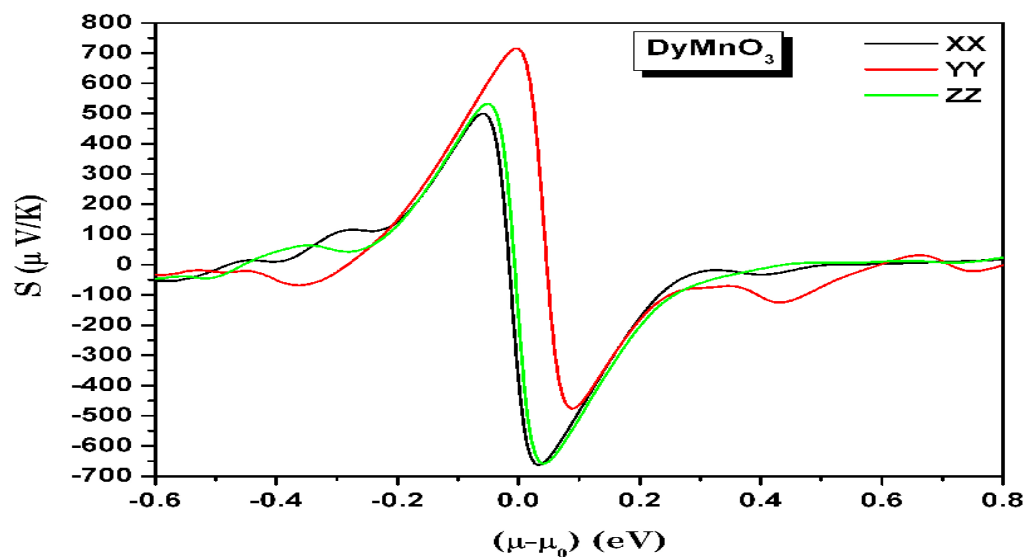
### ۳-۴. خواص ترموالکتریکی

#### ۳-۴-۱. ضریب سیبک

تولید جریان در یک رسانا به علت اختلاف دما بین دو نقطه از آن را اثر ترموالکتریکی گویند. اثرات ترموالکتریکی در تولید الکتروسیته، اندازه گیری دما و سرد کردن اجسام کاربرد دارند. این پدیده شامل اثر سیبک است که اولین بار توسط دانشمند آلمانی بنام توماس یوهان سیبک در سال ۱۸۲۱ کشف شد. سیبک آزمایش را با فلزات مختلف انجام داد و نتیجه گرفت که اختلاف دما در یک مدار باعث حرکت حامل های بار از محل گرم به سرد می شود و در نتیجه باعث ایجاد میدان الکتریکی و اختلاف پتانسیل در آن می شود [۱۴]. ضریب سیبک یک ماده بزرگی ولتاژ ترموالکتریکی القایی است که به دما و ساختار کریستال بستگی دارد. علامت ضریب سیبک بیانگر نوع حامل های بار در ترابرد الکتریکی است. در نیم رسانای نوع n که حاملان بار الکترون هستند، ضریب سیبک منفی و در نیم رسانای نوع p که حاملان بار حفره ها هستند، ضریب سیبک مثبت است. ضریب سیبک بزرگ نشان می دهد که یک اختلاف دمای کوچک، ولتاژ بزرگی را در دو طرف ماده بوجود می آورد. بنابراین برای یک ماده ترموالکتریکی ضریب سیبک بزرگ ضروری است. شکل ۸ ضریب سیبک ترکیب  $DyMnO_3$  را در دمای ۳۰۰K بر حسب پتانسیل شیمیایی در سه راستای X, Y, Z نشان می دهد. همانطور که از شکل مشخص است بیشترین ضریب سیبک در راستای Y در پتانسیل شیمیایی منفی است. نتایج پیشینه مقادیر سیبک در جدول ۲ آمده است. نتایج نشان می دهد که بیشترین ضریب سیبک  $DyMnO_3$  در حالت نیمه رسانای نوع p و در پتانسیل منفی است.

جدول ۲. نتایج ضریب سیبک  $DyMnO_3$

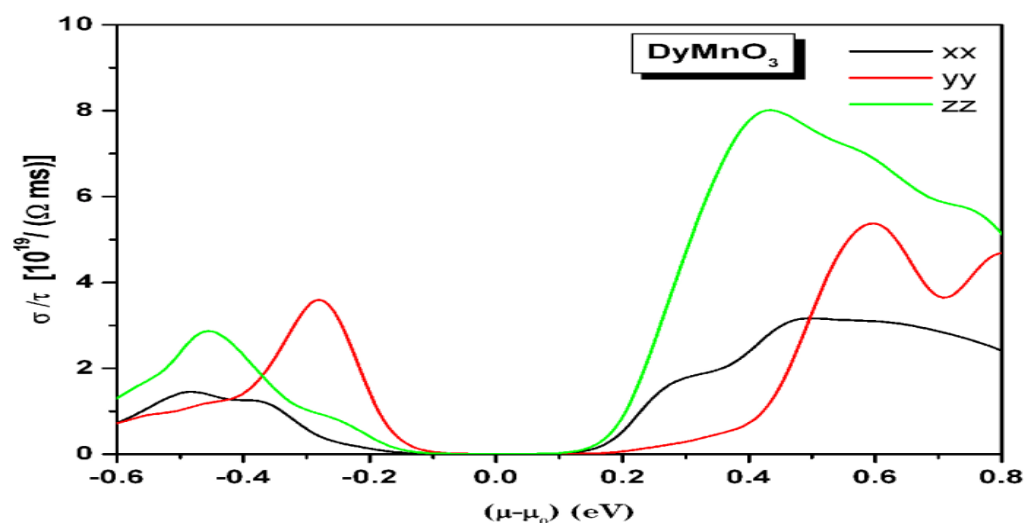
	$S_{max} (\mu < 0)$	$S_{max} (\mu > 0)$
$S_{xx}$	504.95	-663.94
$S_{yy}$	714.36	-478.33
$S_{zz}$	532.04	-660.66



شکل ۸. ضریب سبیک  $\text{DyMnO}_3$  بر حسب پتانسیل شیمیایی در دمای ۳۰۰ K.

#### ۴-۳-۲. هدایت الکتریکی

مواد با مقاومت کمتر، هدایت الکتریکی بالایی دارند و در نتیجه گرمای اتلافی کمتری دارند و گرادیان‌های دمایی را حفظ می‌کنند. برای مواد ترموالکتریک حفظ گرادیان دمایی ضروری است. بنابراین ماده ترموالکتریک خوب هدایت الکتریکی بالایی دارد. تغییرات هدایت الکتریکی  $\text{DyMnO}_3$  بر حسب پتانسیل شیمیایی در دمای ۳۰۰ K در سه راستای X، Y و Z در شکل ۹ رسم شده است. پتانسیل شیمیایی صفر در وسط گاف انرژی ساختار نواری قرار دارد. افزایش و یا کاهش پتانسیل شیمیایی نشان‌دهنده رفتار نیم رسانای نوع n و p است. همان طور که از شکل مشخص است هدایت الکتریکی با رفتار نیم رسانای نوع n بیشتر است. با توجه به شکل بیشترین هدایت الکتریکی در راستای Z و برابر با  $8/0.3 \times 10^{-19} / \Omega \text{ms}$  است.

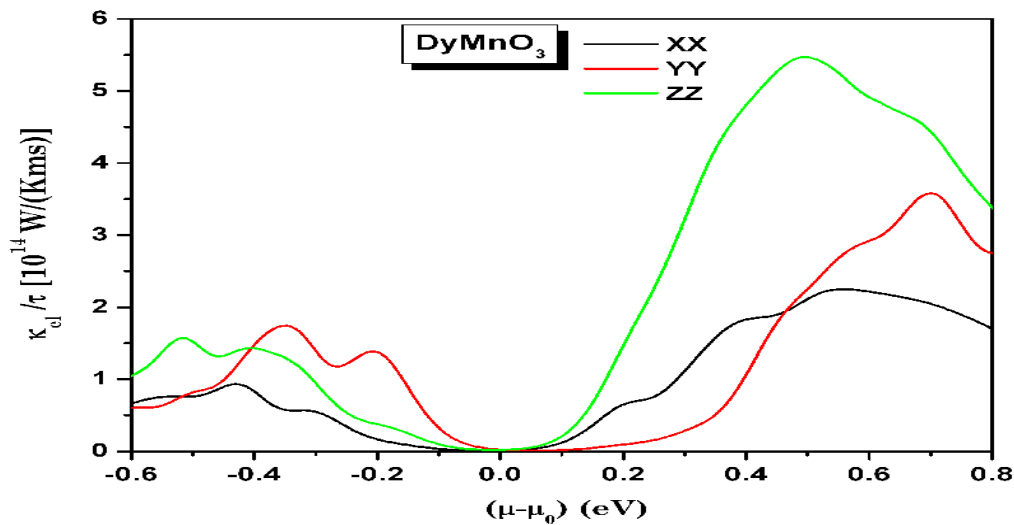


شکل ۹. تغییرات ضریب هدایت الکتریکی  $\text{DyMnO}_3$  بر حسب پتانسیل شیمیایی در دمای ۳۰۰ K.



#### ۴-۳-۳. رسانندگی گرمایی

رسانندگی گرمایی یک ماده با رابطه  $\kappa_{total} = \kappa_{el} + \kappa_{ph}$  بیان می‌شود که  $\kappa_{el}$  رسانندگی گرمایی الکترون‌ها و  $\kappa_{ph}$  رسانندگی گرمایی فونون‌ها است.  $\kappa_{el}$  با استفاده از قانون ویدمان فرانتس،  $\kappa_{el} = L\sigma T$ ، که  $L$  عدد لورنتس و برابر با  $\frac{2}{3} \frac{k^2}{e^2} W\Omega K^{-2} = 2/45 \times 10^{-8} W\Omega K^{-2}$  است، تعیین می‌شود. در نیم رساناها رسانندگی گرمایی فونون‌ها مهم است و در فلزات رسانندگی گرمایی الکترون‌ها غالب است. در شکل ۱۰ تغییرات رسانندگی گرمایی  $DyMnO_3$  بر حسب پتانسیل شیمیایی در سه راستای X, Y و Z و در دمای ۳۰۰K رسم شده است. با توجه به شکل رسانندگی گرمایی در راستای Z و در پتانسیل‌های مثبت بیشترین مقدار را دارد در حالی که در پتانسیل‌های منفی بیشترین مقدار در راستای Y است.



شکل ۱۰. تغییرات رسانندگی گرمایی  $DyMnO_3$  بر حسب پتانسیل شیمیایی در دمای ۳۰۰K.

#### ۴. نتیجه گیری

در این مقاله خواص الکترونیکی، ترموالکتریکی و اپتیکی ترکیب  $DyMnO_3$  با استفاده از محاسبات اصول اولیه با تقریب‌های GGA+U و LDA+U در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) انجام شده است. این ترکیب دارای ساختار اورتورومبیک با گروه فضایی Pnma است. نتایج گاف نواری در دو تقریب نشان می‌دهد که این ترکیب در اسپین پایین گاف نواری بزرگی دارد که نشان دهنده رفتار عایق گونه است که در این حالت آن را نیمه فلز می‌گویند. نمودار چگالی حالت‌ها نشان می‌دهد که بالای نوار ظرفیت با حالت‌های O-P و Dy-f و پایین نوار رسانش با حالت‌های Mn-d و Dy-f اشغال شده است. همچنین پیوند Mn-O پیوند کوالانس قوی تری از Dy-O دارد. مقایسه ضریب جذب در راستاهای مختلف نشان می‌دهد که بیشترین جذب در راستای Y است. همچنین نشان داده شده که نوسانات پلاسمون در انرژی‌های بالا اتفاق می‌افتد. خواص ترموالکتریکی نشان می‌دهد که این ترکیب ضریب سبیک بالایی دارد که باعث شده ماده ترموالکتریک خوبی باشد. همچنین نتایج نشان می‌دهد که ضریب سبیک، رسانندگی گرمایی و الکتریکی در پتانسیل‌های منفی در راستای Y بیشتر از راستاهای دیگر است.

## ۵. مراجع

- [1] C.J.M. Daumont, D. Mannix, S. Vevkatesan, G. Catalan, D. Rubi, B. J. Kooi, J. Hosson and B. Noheda, *J. Phys. Condens. Matter.*, 21 (2009) 1.
- [2] B.S. Tien- Ming Chuang, *The University of Texas at Austin*, ISBN 0549053719, 9780549053712, (2006).
- [3] A. Malashevich and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. Lett.*, 101 (2008) 37210.
- [4] C. Moure, J. Tartaj, A. Moure and O. Pena, *Bol. Soc. Esp. Ceram.*, 48 (2009) 199.
- [5] A.J. Millis, P.B. Littlewood and B.I. Shraiman, *Phys. Rev. Lett.*, 74 (1995) 5144.
- [6] Y. Cui, R. Wang and J. Qian, *Physica.*, B 392 (2007) 147.
- [7] N. Kenneth and C. Pierre, *Bioconjugate Chemistry.*, 16 (2005) 3.
- [8] F. Zhou, A. Moore, M.T. Petter, Y. Lee, J.H. Seol, Q. Laure Ye, L. Raabenberg and L. Shi, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 43 (2010) 25406.
- [9] M. Peterson, F. Wanger, L. Hufnagel, M. Scheffler, P. Blaha and K. Schwars, *Compute. Phys. Commun.*, 126 (2000) 294.
- [10] A. Malashevich and D. Vanderbilt, *Europ. Phys. J.*, B71 (2009) 345.
- [11] K.H. Georg, M. Madsen and D. J. Singh, *Compute. Phys. Commun.*, 175 (2006) 67.
- [12] N. Pavan Kumar, G. Lalitha and P. Venugopal Reddy, *Phys. Scr.*, 83 (2011) 45701.
- [13] T.Mori, K. Aoki, N. Kamegashira, T. shishido and T. Fukuda, *Materials Letters.*, 42 (2000) 387.
- [14] D.J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*, Prentice Hall, New Jersey, (1999).