بررسی تحلیلی اثر تنش محوری بر گاف نواری نانو لوله های کربنی زیگزاگ

پگاه احمدوند، علیرضا صفّارزاده

چکیده: در این مقاله با استفاده از روش تنگ بست تک نواری و رابطه پاشندگی انرژی، تغییرات گاف نواری را در اثر تنش محوری روی نانو لوله های کربنی تک دیواره از نوع زیگزاگ به طور تحلیلی بررسی نمودهایم. نتایج بدست آمده نشان می دهد که در تمامی نانو لوله های زیگزاگ گاف نواری با افزایش تنش محوری، σ ، به صورت خطی تغییر میکند و یک گذار از حالت نیم رسانا به حالت فلز مشاهده میشود. در نانو لولههای حورت خطی تغییر میکند و یک گذار از حالت نیم رسانا به حالت فلز مشاهده میشود. در نانو لولههای زیگزاگ نیم رسانا، شیب منحنی گاف انرژی E_g بر حسب σ یعنی $d\sigma$ یعنی $d\sigma$ ، در یک تنش بحرانی که با افزایش قطر نانو لوله کاهش میابد، تغییر علامت میدهد.

واژههای کلیدی: نانو لوله های کربنی، تنش محوری، گاف نواری.

۱– مقدمه

نانو لولههای کربنی، لولههای گرافیتی با شعاعی در حدود نانومتر هستند که ویژگیهای الکترونی جالب و غیر منتظرهای از خود نشان میدهند. نانو لوله ها میتوانند فلز و یا نیمه رسانا با گاف انرژی باریک یا نسبتاً پهن باشند که به مشخصه های هندسی آنها یعنی قطر و نوع پیچششان بستگی دارد. ویژگیهای الکترونی یک نانو لوله کربنی را میتوان از ویژگیهای مربوط به ورقه گرافیت دو بعدی به دست آورد. اصولاً تفاوت در ویژگیهای الکترونی نانو لولهها به این که آیا حالات مجاز در فضای k از نقاط K منطقه بریلوئن گرافین دو بعدی میگذرند یا نه بستگی دارد [۱۲]. تانو لوله های کربنی با تقارن بالا، نانو لولههای زیگزاگ و آرمچیر هستند. نانو لوله های آرمچیر نانو لولههای فلزی هستند در حالیکه نانو لوله های زیگزاگ

می توانند فلز یا نیم رسانا باشند. اما مطالعات اخیر ساختار نواری نانو لولهها از مدل گرافین فراتر رفته بطوری که در محاسبات، اثرات خمش نیز وارد شده است.

در این مقاله قصدداریم با استفاده از تقریب تنگ بست تک نواری، اثر تنش را که بطور محوری در راستای نانو لوله وارد می شود در حالت زیگزاگ بررسی کنیم. به همین منظور با وارد نمودن اثر تنش محوری روی انتگرال جهش بین جایگاههای شبکه و به تبع آن تغییر در رابطه پاشندگی، تغییر در گاف انرژی نانو لوله ها را بدست می آوریم. همچنین نشان می دهیم که در نانو لوله های زیگزاگ نیم رسانا، تنش محوری می تواند باعث تغییر در علامت شیب نمودار گاف نواری بر حسب تنش محوری شود.

قبلاً تغییر گاف انرژی نانو لولهها در اثر تنش از طریق محاسبه تغییرات چگالی حالات الکترونی انجام شده است [۷]. در حالیکه روش ارائه شده در این مقاله تحلیلی است و مبتنی بر محاسبه رابطه پاشندگی با لحاظ نمودن اثرات تنش است که در نهایت به نتایج مشابه میرسیم. همچنین به فرمول بندی مناسبی

پگاه احمدوند، تهران، استاد نجات الهی، دانشگاه پیام نور مرکز تهران، گروه فیزیک، pegahahmadvand@yahoo.com علیرضا صفّارزاده، (دانشیار) ۱- تهران، فرمانیه، پژوهشگاه دانش های بنیادی-پژوهشکده علوم نانو.۲- تهران، استاد نجات الهی، دانشگاه پیام نور مرکز تهران، گروه فیزیک a-saffar@tpnu.ac.ir

برای گاف نواری بر حسب قطر نانو لوله در حضور تنش محوری دست مییابیم. سپس مقدار تنش بحرانی را که به ازای آن شیب گاف انرژی تغییر علامت می دهد را محاسبه می کنیم.

۲– مدل

در اینجا از روش تنگ بست که نتایج آن برای گرافین، همخوانی خوبی با آزمایشات تجربی دارد استفاده میکنیم. با چشم پوشی از اثر خمش، هامیلتونی نانو لوله ها را در تقریب تنگ بست به صورت زیر تعریف میکنیم:

$$H = \sum_{i} \varepsilon_{i} c_{i}^{+} c_{i} + \sum_{i,j} \alpha_{i,j} c_{i}^{+} c_{j}$$
(Y)

 ε_i در اینجا c_i^+ c_i^- عملگر خلق و فنای الکترون، ε_i^- انرژی پرش انرژی الکترون در جایگاه i ام و $\alpha_{i,j}$ انرژی پرش الکترون بین جایگاه i و j است. از آنجایی که در نانو لوله ها کربنی، نوارهای انرژی (به غیر از نوار π) دور از سطح فرمی قرار دارند، به همین منظور فقط حالتهای نوار انرژی π را که در مجاورت سطح فرمی هستند بررسی می کنیم.

گرافین است. بردارهای همانی تغییر یافته a_1' و a_2' نیز بر حسب \vec{R}_i' ها به صورت زیر مشخص می شوند:

 $\vec{a}'_1 = \vec{R}'_1 - \vec{R}'_3$ $\vec{a}'_2 = \vec{R}'_1 - \vec{R}'_2$ برای حالت تغییر شکل محوری نانو لوله های غیر کایرال (آرمچیر و زیگزاگ) داریم:

$$\mathcal{E}_{armchair} = \begin{pmatrix} s_{12}\sigma & 0\\ 0 & s_{11}\sigma \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{E}_{zigzag} = \begin{pmatrix} s_{11}\sigma & 0\\ 0 & s_{12}\sigma \end{pmatrix}$$
(f)

برای ₁₁ و ₁₂ از مقادیر گرافین استفاده می کنیم [۲]:

$$s_{11} = +0.98 \times 10^{-12} [Pa]^{-1}$$

 $s_{12} = -0.16 \times 10^{-12} [Pa]^{-1}$

با استفاده از معادله (۴) بردارهای تغییر شکل یافته یاخته واحد نانو لوله، ساخته میشود. همچنین از آنجایی که تنش، طول پیوندهای کربن- کربن را تغییر میدهد، لازم است انتگرالهای جهش بین اتم های مختلف دوباره محاسبه شوند. انتگرال های جهش، مختلف دوباره محاسبه شوند. انتگرال های جهش، انرژی های پرش از یک نقطه شبکه به نقطهٔ دیگر هستند: $t_{AB} = \left\langle \varphi_A(r-R) \Big| H \Big| \varphi_B(r-R \pm \frac{a}{2}) \right\rangle$ (۵)

در این رابطه، *R* بردار شبکه کل بلور و *a* ثابت شبکه نانو لوله است. به همین منظور تغییر در انتگرال جهش را توسط فرمول هریسون که به صورت زیر معرفی میشود وارد محاسبات می کنیم [۷] :

$$t_{\alpha\beta} = t_{\alpha\beta}^{(0)} (\frac{d_0}{d})^2 \tag{(6)}$$

در این رابطه d_0 و d به ترتیب طول پیوند قبل و بعد از تغییر شکل هستند. همچنین α و β اوربیتال های متفاوت را نشان میدهند اما در اینجا به دلیل اینکه فقط با اوربیتال π کار می کنیم، نیازی به این شاخص ها نداریم. با استفاده از معادلات (۳) و (۴)، طول سه پیوند مختلف نانو لوله های غیر کایرال به صورت زیر به دست می آید:

$$Zig: d_{3} = 1 + \varepsilon_{11} \quad ; \quad d_{1} = d_{2} = 1 + \frac{1}{4}\varepsilon_{11} + \frac{3}{4}\varepsilon_{22}$$
$$Arm: d_{3} = 1 + \varepsilon_{22} \quad ; \quad d_{1} = d_{2} = 1 + \frac{1}{4}\varepsilon_{22} + \frac{3}{4}\varepsilon_{11} \quad (\forall X)$$

حال می توانیم انتگرالهای جهش را برای نانو لوله های زیگزاگ و آرمچیر بدست آوریم. اتم مرجع را با A_0 و سه اتم همسایه اول را با B_1 ، B_2 و B_3 نشان می دهیم. در نانو لوله های زیگزاگ A_0B_1 موازی محور نانو لوله و A_0B_1 و B_0A مکان های متقارن نسبت به همان محور هستند که در شکل (۱) نشان داده شده-اند. تنش در راستای محور نانو لوله وارد می شود. اثر این تنش بر یاخته واحد نانو لوله زیگزاگ در شکل (۲)



شکل ۱. اتم مرجع و سه اتم همسایه اول در نانو لوله زیگزاگ

خطوط نقطه چین، یاختههای واحد تغییر شکل نیافته را نشان میدهند. همان طور که می بینیم یاختههای واحد فقط در یک راستا تغییر میکنند. انتگرالهای جهش را با γ_3 و γ_1 نشان می دهیم. بنابراین با استفاده از روابط (۴)، (۶) و (۷)، داریم:

$$\gamma_{3} = \frac{\gamma_{0}}{(1+s_{11}\sigma)^{2}} , \quad \gamma_{1} = \frac{\gamma_{0}}{(1+\frac{3}{4}s_{11}\sigma + \frac{1}{4}s_{12}\sigma)^{2}}$$
(A)

که در این روابط 2.2 eV [۷]. به دلیل اینکه انتگرالهای جهش تغییر کردهاند رابطه پاشندگی انرژی باید دوباره نوشته شود:

$$E(k) = \sum_{B} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{A}-\vec{R}_{B})} \alpha_{AB}$$
(9)

عمل جمع روی سه همسایه اول اتم مرجع A_0 انجام می گیرد. برای نانو لوله های زیگزاگ (n,0) رابطه پاشندگی انرژی (با چشم پوشی از اثر خمش) به صورت زیر به دست می آید: $E_m^z(k) = \pm \gamma_3 \left[1 \pm (\frac{4\gamma_1}{\gamma_3}) \cos(\frac{m\pi}{n}) \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}ka) + (\frac{2\gamma_1}{\gamma_4})^2 \cos^2(\frac{m\pi}{n}) \right]^{\frac{1}{2}}$

$$\frac{-\pi}{\sqrt{3}} < ka < \frac{\pi}{\sqrt{3}}$$
 , $(m = 1, 2,, 2n)$ (1.)



شکل۲ .اثر تنش محوری بر سلول واحد نانو لوله زیگزاگ. خطوط نقطه چین حالت پیش از تنش را نشان می دهند.

که در اینجا σ بر حسب گیگا پاسکال است. همان طور که از رابطه (۱۵) مشخص است، تغییر گاف انرژی

که در آن
$$a = \sqrt{3}a_{c-c}$$
 فاصله دو اتم کربن
مجاور هم است). با توجه به اینکه کمینه انرژی در
 $k = 0$ رخ می دهد:
 $E_m^Z(0) = \pm \gamma_3 \left[1 - \frac{2\gamma_1}{\gamma_3} \cos(\frac{m\pi}{n}) \right]$ (۱۱)

همه نانو لوله های زیگزاگ به یکی از سه حالت (مه نانو لوله q عدد (در اینجا q عدد (عر اینجا q عدد صحیحی است).

با قرار دادن
$$m = q$$
 در رابطه (۱۱) گاف انرژی به دست می آید.

$$d_{t} = \frac{|C_{h}|}{\pi} = \frac{na}{\pi} \rightarrow \frac{\pi}{n} = \frac{a}{d_{t}} \Rightarrow$$
$$E_{g}(\sigma) = 2\gamma_{3}[1 - 2\frac{\gamma_{1}}{\gamma_{3}}\cos(\frac{\pi}{3} - \frac{q'a}{3d_{t}})] \qquad (17)$$

قطر لوله بر حسب آنگستروم است و
$$q^\prime$$
 به صورت d_t

$$\begin{cases} n = 3q \implies q' = 0 \\ n = 3q \pm 1 \implies q' = \pm 1 \end{cases}$$
به ازای $n = 3q$ اف انرژی برحسب σ به صورت زیر است:

$$E_g^{3q} = 2 \, [\, \gamma_3 - \gamma_1] \tag{17}$$

برای رابطه فوق با بسط γ_1 و γ_2 و σ_1 و صرف s_{11} σ رابطه فوق با بسط s_{2} د s_{22} داریم: نظر از حاصل ضرب $s_{11}\sigma$ در $s_{22}\sigma$ داریم:

$$E_g^{3q} \approx 3\gamma_0 [s_{11} - s_{12}]\sigma \tag{14}$$

معمولاً مقدار γ_0 را برابر ۳/۲ الکترون ولت در نظر می گیرند. با قرار دادن مقادیر s_{11} و s_{12} در رابطه (۱۴)، رابطه نهایی برای گاف انرژی نانو لوله های زیگزاگ فلزی به دست میآید:

$$E_g^{3q} \approx 0.011\sigma \tag{10}$$

بر حسب تنش محوری برای تمام نانو لوله های زیگزاگ فلزی یکسان و مستقل از قطر نانو لوله است. شیب نمودار، یعنی
$$d\sigma$$
 ثابت و برابر ۲۰۱۱ $dE_g/d\sigma$ میباشد.
برای $(1\pm 3q) = n$ گاف انرژی به صورت زیر نوشته می شود:

$$E_{g}^{3q\pm1} = 2[\gamma_{3} - \gamma_{1}(\cos\frac{q'a}{3d_{t}} + \sqrt{3}\sin\frac{q'a}{3d_{t}})]_{(1\%)}$$
$$E_{g}^{3q\pm1} = 2[\gamma_{3} - 2\gamma_{1}\cos(\frac{\pi}{3} - \frac{q'a}{3d})] \qquad (1\%)$$

$$E_g^{3q\pm 1} = (\pm 0.011 - 3.9 \times 10^{-3} \frac{q'a_0}{d_t})\sigma + \frac{9.22}{d} \mp \frac{2.21}{6d_t^2}$$
(1A)

همان طور که می بینیم تغییرات شیب با تغییر قطر نانو لوله خیلی کوچک است. پس برای نانو لول ه های نیم رسانی زیگزاگ، شیب تقریباً ثابت و برابر شیب حالت زیگزاگ فلزی است. برای نانو لوله های 1+3q، گاف انرژی با اعمال کشش محوری افزایش می یابد و انرژی با اعمال کشش محوری افزایش می یابد و $B_g/d\sigma$ منبیت است. برای حالت 1-3q، کاهش می یابد.

در شکل ۳ تغییرات گاف انرژی نانو لوله های زیگزاگ بـرای کشـش محـوری $(\sigma > 0)$ و فشـار محـوری $(\sigma < 0)$ نشان داده شده است.

تابعیت $\left| {dE_g} / {d\sigma} \right|$ برای هر سه حالت زیگزاگ تقریباً یکسان و برای تنش کمتر از ده گیگا پاسکال تقریبا برابر ۰/۰۱۱ است. علامت $d\sigma_g / {d\sigma}$ برای تقریبا برابر ۰/۰۱۱ است. علامت $d\sigma_g / {d\sigma}$ برای نقریبا جا برای (3q + 1,0) مثبت و برای (3q + 1,0) منفی است. در نتیجه گاف انرژی برای نانو لوله های 1 + 3 و 3q

تحت کشش ($\sigma > 0$) افزایش یافته و خطوط مجاز از نقطه K منطقه بریلوئن گرافین دور می شوند برای 3q-1 گاف انرژی کاهش یافته خطوط مجاز به نقطه منطقه بریلوئن گرافین نزدیک شده و در این حالت می توان انتظار گذار از حالت نیم رسانا به فلز را داشت.



شکل ۳- گاف انرژی به صورت تابعی از تنش محوری برای نانو لوله های متفاوت زیگزاگ نشان داده شده است.

مشاهدات آزمایشگاهی نشان می دهد، اگر تنش از یک مقدار بحرانی که آن را با σ_c نشان می دهیم بیشتر شود، حساسیت E_g به σ تغییر می کند [۴]. مقدار σ_c شود، حساسیت به قطر و کایرالیتی است و از صفر تا ۲۰ گیگا پاسکال تغییر می کند. این مطلب نشان می دهد d^{-2} که فرمول هریسون باید اصلاح شود. وابستگی d^{-2} فرمول هریسون باید اصلاح شود. وابستگی و که فرمول هریسون برای فواصل اتمی بسیار کوچک و میار بیرای است. انتگرال های جهش برای $d \to 0$ مقدار ثابت انرژی جایگاهی را دارند.

۴- تغییر علامت شیب نمودار برای نانو لوله های زیگزاگ نیم رسانا

نکته جالبی که در مورد نانو لوله های زیگزاگ $1\pm 3q \pm 3$ وجود دارد این است که در یک تنش خاص یک تغییر علامــت در شــیب نمــودار ($d\sigma_s/d\sigma$) مشــاهده می شود. علت این تغییر علامت این است کـه در ایـن

تنش خاص نوار q = m بر نوار $1 \pm q = m$ منطبق می شود و با بالاتر رفتن تنش از این مقدار خاص، پایین ترین زیر نوار رسانش (بالاترین زیر نوار ظرفیت) با قرار دادن $1 \pm q = m$ در رابطه پاشندگی انرژی به دست میآید (قبل از این تنش پایین ترین زیر نوار رسانش (بالاترین زیر نوار ظرفیت) به ازای $m = q \pm n$ به دست میآمد).

در تحقیقات پیشین به این نکته اشاره شده[۱۳]، اما جزئیات محاسبات گزارش نشده است. حال مقدار این تنش خاص را محاسبه نیم. ما این کار را برای زیگزاگ n = 3q + 1 انجام می دهیم و مقدار تنشی را که در آن مینمم نوار رسانش q بر مینیمم نوار رسانش 1+q منطبق میشود را به دست میآوریم:

$$\begin{split} E_{q}^{\min} &= [\gamma_{3}^{2} - 4\gamma_{1}\gamma_{3}\cos(\frac{q\pi}{n}) + 4\gamma_{1}^{2}\cos^{2}(\frac{q\pi}{n})]^{1/2} \\ E_{q+1}^{\min} &= [\gamma_{3}^{2} - 4\gamma_{1}\gamma_{3}\cos(\frac{(q+1)\pi}{n}) + 4\gamma_{1}^{2}\cos^{2}(\frac{(q+1)\pi}{n})]^{1/2} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} s_{11}\sigma + 4\gamma_{1}\sigma_{n} + 4\gamma_{1}^{2}\cos^{2}(\frac{(q+1)\pi}{n})^{1/2} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} s_{11}\sigma_{n} + \frac{3}{4}s_{12}\sigma_{n} - \frac{1}{2}s_{11}\sigma_{n} \\ &= \gamma_{0}(1 + \frac{3}{4}s_{12}\sigma_{n} - \frac{1}{2}s_{11}\sigma_{n}) \\ &= \gamma_{0}(1 - 2s_{11}\sigma) \end{split}$$
 (19)

با قرار دادن $E_q^{\min} = E_{q+1}^{\min}$ ، تنش بحرانی که گاف نواری در آن تغییر علامت میدهد، به صورت زیر خواهد بود:

$$\sigma_{c} = \frac{1 - [\cos(\frac{(q+1)\pi}{n} + \cos(\frac{q\pi}{n})]}{2s_{11} + (\frac{3}{4}s_{12} - \frac{1}{2}s_{11})[\cos(\frac{(q+1)\pi}{n} + \cos(\frac{q\pi}{n})]}$$
(Y ·)

برای n های کوچک، این تنش بحرانی بزرگ تر از حد شکست (که به طور میانگین ۳۰ گیگا پاسکال است[۹]) می باشد، پس σ_c را برای نانو لوله ها با قطر بزرگ تر محاسبه می کنیم. به ازای n = 3q + 1 با بسط کسینوس برای d های بزرگ به دست می آوریم: m = q - 1 منطبق میشود. تنش بحرانی با حل m = q - 1 معادله $E_q^{\min} = E_{q-1}^{\min}$ محاسبه میشود. گاف نواری با قرار دادن q = 1 در رابطه (۱۱) به دست میآید. در کششهای بالاتر از تنش بحرانی $d\sigma$ $d\sigma$ برای نانو لوله زیگزاگ 1 - 3q مثبت است و کشش سبب افزایش گاف نواری میشود.



۵- نتیجه گیری

تغییر شکل مجوری باعث تغییر در انتگرال های جهش بین نزدیکترین همسایه می شود. در این تحقیق این تغییرات را لحاظ نموده و روابط تغییر شکل یافته ای برای پاشندگی انرژی به دست آوردیم. با استفاده از این روابط جدید، تغییرات گاف انرژی را محاسبه کردیم و به نتایج زیر رسیدیم: برای نانو لوله های زیگزاگ (1,0+ 3) کشش محوری گاف انرژی را افزایش می دهد پس می توان نتیجه گرفت که در این نوع از نانو لوله ها، فشردگی باعث گذار از حالت نیم رسانا به فلز می شود. برای (1,0- 3) کشش موجب گذار از حالت نیم رسانا به فلز می شود. برای نانو لوله های 3c، گذار نیم رسانا حلز - نیم رسانا و برای نانو لوله های زیگزاگ نیم رسانا در یک تنش

نزدیک تر می شوند. در نهایت رابطه زیر برای گاف نواری در حضور کشش محوری بزرگ تر از σ_c برای نانو لوله های n = 3q + 1، به دست می آید:

$$E_{g}(\sigma) = (-0.011 - \frac{5.4 \times 10^{-3}}{d_{t}^{2}} + \frac{7.8 \times 10^{-3}}{d_{t}})\sigma + \frac{8.55}{d_{t}^{2}} + \frac{12.8}{d_{t}} , \quad \sigma > \sigma_{c} \quad (\Upsilon\Upsilon)$$

در تنش های بالاتر از σ_c کشش محوری باعث کاهش گاف نواری نانو لوله های زیگزاگ 1 + 3q می شود. در شکل ۴ تغییر در شیب نمودار برای چند نانو لوله نشان داده شده است. همان طور که در شکل می بینیم با افزایش قطر نانو لوله تغییر علامت در تنش پایین تری رخ می دهد. همچنین یک تنش بحرانی برای نانو لوله زیگزاگ 1 - 3q وجود دارد که به طور مشابه محاسبه می شود. برای این نوع نانو لوله ها در تنش بحرانی، زیر نوار q = m بر زیر نوار این تغییر علامت برای نانو لوله ها با قطر بزرگتر دارای اهمیت است، زیرا در تنش های پایین تر رخ میدهد.

مراجع

- [1] White C. T. and Mintmire J. W., Fundamental Properties of Single-Wall Carbon Nanotubes, J. Phys. Chem. B 109, 2004, pp.52.
- [2] Charlier A., McRae E., Heyd R., Charlier M. F., *Metal-semiconductor transitions* under uniaxial stress for single and double-walled carbon nanotubes, J. Phys. Chem. 62, 2001, pp. 439.
- [3] Ding J. W., Yan X. H. and Cao. J. X., Analytical relation of band gaps to both chirality and diameter of single-wall carbon nanotubes, Phys. Rev B 66, 2002, pp. 073401.
- [4] Ding J. W., Yan X. H., Cao. J., Wang D. L., Tang Y. and Yang Q. B, Curvature and strain effects on electronic properties of single-wall carbon nanotube, Condense Matter 15, 2003, pp.L439.
- [5] Ferreira M. S., Dargam T. G., Muniz R. B. and Latge A., *Local electronic properties* of carbon nanotube heterojunctions, Phys. Rev B 62, 2000, pp.16040.
- [6] Ferreira M. S., Dargam G., Muniz R. B. and Latge A., *Radial oscillations of local* density of states in carbon nanotubes, Phys. Rev B 63, 2001, pp. 245111.
- [7] Heyd R., Charlier A. and McRae E., Uniaxial-stress effects on the electronic

بحرانی، یک تغییر علامت در شیب نمودار گاف انرژی بر حسب تنش مشاهده می شود. هرچه قطر نانو لوله بیشتر باشد برای تغییر علامت، تنش کمتری نیاز است.

properties of carbon nanotubes, Phys. Rev. B 55, 1997, pp. 6820.

- [8] Michael J. O'Connell Ph.D. Theses Carbon Nanotubes Properties and Applications, Boca Raton London New York, by Taylor & Francis Group, LLC.
- [9] Min-Feng Y., Bradley S., Sivaram A. and Rodney S. R., Tensile Loading of Ropes of Single Wall, 2000.
- [10] Mintmire J. W. and White. C. T., Universal Density of States for Carbon Nanotubes, Phys. Rev. Lett. 81, 1998, pp. 2506.
- [11] Pereira V. M. and Castro N. A. H., Castro N., A tight-binding approach to uniaxial strain in grapheme, Phys. Rev. B 80, 2008, pp. 045401; Carbon Nanotubes and their Mechanical Properties. Phys. Rev Lett 84, 2006, pp. 5552.
- [12] Saito R., Dresselhaus G. and Dresselhaus M. S., *Phyical properties of Carbon Nanotube*, *London*: Imperial, College Press (1998).
- [13] Yang L., Anantram M. P., Han J. and Lu. J. P., Bandgap Change of Carbon Nanotubes: Effect of Small Uniaxial and Torsional Strain, Phys. Rev. B 60, 1999,pp. 13874.