

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

پگاه احمدوند، علیرضا صفارزاده

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 نموده ایم. نتایج بدست آمده نشان می دهد که در تمامی نانو لوله های زیگزاگ گاف نواری با افزایش تنش محوری، σ ، به صورت خطی تغییر می کند و یک گذار از حالت نیم رسانا به حالت فلز مشاهده می شود. در نانو لوله های زیگزاگ نیم رسانا، شیب منحنی گاف انرژی E_g بر حسب σ یعنی $dE_g/d\sigma$ ، در یک تنش بحرانی که با افزایش قطر نانو لوله کاهش می یابد، تغییر علامت می دهد.

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

۱- مقدمه

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

در این مقاله قصد داریم 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 جایگاه های 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 لوله ها 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 می رسیم. همچنین به فرمول بندی مناسبی

نانو لوله های کربنی، لوله های گرافیتی با شعاعی در حدود نانومتر هستند که ویژگی های الکترونی جالب و غیر منتظره ای از خود نشان می دهند. نانو لوله ها می توانند فلز و یا نیمه رسانا با گاف انرژی باریک یا نسبتاً پهن باشند که به مشخصه های هندسی آنها یعنی قطر و نوع پیچش شان بستگی دارد. ویژگی های الکترونی یک نانو لوله کربنی را می توان از ویژگی های مربوط به ورقه گرافیت دو بعدی به دست آورد. اصولاً تفاوت در ویژگی های الکترونی نانو لوله ها به این که آیا حالات مجاز در فضای k از نقاط K منطقه بریلوئن گرافین دو بعدی می گذرند یا نه بستگی دارد [۱۲]. نانو لوله های کربنی با تقارن بالا، نانو لوله های زیگزاگ و آرمچیر هستند. نانو لوله های آرمچیر نانو لوله های فلزی هستند در حالیکه نانو لوله های زیگزاگ

پگاه احمدوند، تهران، استاد نجات الهی، دانشگاه پیام نور مرکز تهران، گروه فیزیک، pegahahmadvand@yahoo.com
علیرضا صفارزاده، (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

۳- اثرات تنش در راستای محور نانو لوله

در اینجا ساختار نوار π را در حضور تنش محوری از روش تنگ بست محاسبه می‌کنیم. موقعیت جدید اتم‌های کربن تحت تأثیر تنش محوری σ در چارچوب نظریه کشسانی توسط رابطه زیر نشان داده می‌شود:

$$\bar{R}'_i = (I + \varepsilon)\bar{R}_i \quad (3)$$

که در آن \bar{R}_i و \bar{R}'_i به ترتیب موقعیت اتم‌های کربن قبل و بعد از اعمال تغییر شکل (تنش) هستند، I ماتریس واحد و ε تانسور تنش کاهش یافته در صفحه گرافین است.

بردارهای همانی تغییر یافته a'_1 و a'_2 نیز بر حسب \bar{R}'_i ها به صورت زیر مشخص می‌شوند:

$$\bar{a}'_1 = \bar{R}'_1 - \bar{R}'_3$$

$$\bar{a}'_2 = \bar{R}'_1 - \bar{R}'_2$$

برای حالت تغییر شکل محوری نانو لوله‌های غیر کایرال (آرمچیر و زیگزاگ) داریم:

$$\varepsilon_{armchair} = \begin{pmatrix} s_{12}\sigma & 0 \\ 0 & s_{11}\sigma \end{pmatrix} \quad (4)$$

$$\varepsilon_{zigzag} = \begin{pmatrix} s_{11}\sigma & 0 \\ 0 & s_{12}\sigma \end{pmatrix}$$

برای s_{11} و s_{12} از مقادیر گرافین استفاده می‌کنیم [۷]:

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

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

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 اتم‌های مختلف دوباره محاسبه شوند. انتگرال‌های جهش، انرژی‌های پرش از یک نقطه شبکه به نقطه دیگر هستند:

$$t_{AB} = \left\langle \varphi_A(r-R) \middle| H \middle| \varphi_B(r-R \pm \frac{a}{2}) \right\rangle \quad (5)$$

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 می‌دهد را محاسبه می‌کنیم.

۲- مدل

ساختار یک نانو لوله به وسیله بردار پیچش C و بردار ترابرد T عمود بر راستای بردار پیچش، مشخص می‌شود. بردار پیچش بر حسب دو بردار بسیط \bar{a}_1 و \bar{a}_2 شبکه مستقیم به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\bar{C} = n\bar{a}_1 + m\bar{a}_2 \quad (n \text{ و } m \text{ حقیقی هستند}) \quad (1)$$

برای نانو لوله‌های زیگزاگ $n=0$ و در نوع آرمچیر $n=m$ است. هیبریداسیون sp^2 ورقه گرافین دو بعدی با شبکه لانه زنبوری به علاوه شرط دوره ای بورن-ون کارمن بر روی محیط نانو لوله یعنی، $\vec{k} \cdot \vec{C} = 2\pi m$ نقش مهمی در ویژگی‌های الکترونیکی آنها ایفا می‌کند. شرط مرزی دوره‌ای، منطقه بریلوئن گرافین را به خطوط مجاز موازی تقسیم می‌کند و موقعیت این خطوط، ویژگی‌های الکترونی لوله‌ها را مشخص می‌کند.

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 لوله‌ها را در تقریب تنگ بست به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$H = \sum_i \varepsilon_i c_i^+ c_i + \sum_{i,j} \alpha_{i,j} c_i^+ c_j \quad (2)$$

در اینجا c_i^+ و c_i عملگر خلق و فنای الکترون، ε_i انرژی الکترون در جایگاه i ام و $\alpha_{i,j}$ انرژی پرش الکترون بین جایگاه i و j است. از آنجایی که در نانو لوله‌ها 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 می‌کنیم.

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

$$\gamma_3 = \frac{\gamma_0}{(1+s_{11}\sigma)^2}, \quad \gamma_1 = \frac{\gamma_0}{(1+\frac{3}{4}s_{11}\sigma+\frac{1}{4}s_{12}\sigma)^2} \quad (8)$$

که در این روابط $\gamma_0 = 3.2 \text{ eV}$ [۷].

به دلیل اینکه انتگرال‌های جهش تغییر کرده‌اند رابطه پاشندگی انرژی باید دوباره نوشته شود:

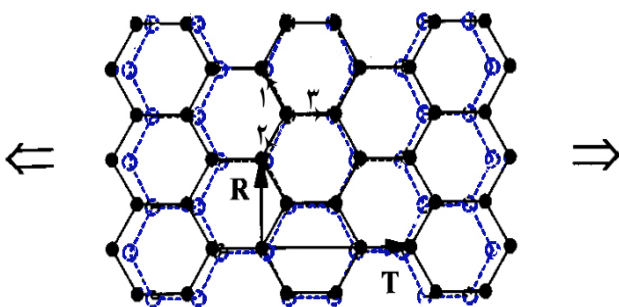
$$E(k) = \sum_B e^{ik \cdot (\vec{R}_A - \vec{R}_B)} \alpha_{AB} \quad (9)$$

عمل جمع روی سه همسایه اول اتم مرجع A_0 انجام می‌گیرد.

برای نانو لوله های زیگزاگ $(n,0)$ رابطه پاشندگی انرژی (با چشم پوشی از اثر خمش) به صورت زیر به دست می‌آید:

$$E_m^z(k) = \pm \gamma_3 \left[1 \pm \left(\frac{4\gamma_1}{\gamma_3} \right) \cos\left(\frac{m\pi}{n}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ka\right) + \left(\frac{2\gamma_1}{\gamma_3} \right)^2 \cos^2\left(\frac{m\pi}{n}\right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (10)$$

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



شکل ۲. اثر تنش محوری بر سلول واحد نانو لوله زیگزاگ. خطوط نقطه چین حالت پیش از تنش را نشان می‌دهند.

در این رابطه، R بردار شبکه کل بلور و a ثابت شبکه نانو لوله است.

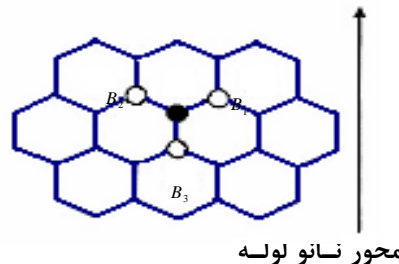
به همین منظور تغییر در انتگرال جهش را توسط فرمول هریسون که به صورت زیر معرفی می‌شود وارد محاسبات می‌کنیم [۷]:

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

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 می‌کنیم، 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 می‌آید:

$$\begin{aligned} \text{Zig}.: d_3 &= 1 + \varepsilon_{11} & ; & \quad d_1 = d_2 = 1 + \frac{1}{4}\varepsilon_{11} + \frac{3}{4}\varepsilon_{22} \\ \text{Arm}.: d_3 &= 1 + \varepsilon_{22} & ; & \quad d_1 = d_2 = 1 + \frac{1}{4}\varepsilon_{22} + \frac{3}{4}\varepsilon_{11} \end{aligned} \quad (7)$$

حال می‌توانیم 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 می‌دهیم. در نانو لوله های زیگزاگ A_0B_3 موازی محور نانو لوله و A_0B_1 و A_0B_2 مکان های متقارن نسبت به همان محور هستند که در شکل (۱) نشان داده شده- اند. تنش در راستای محور نانو لوله وارد می‌شود. اثر این تنش بر یاخته واحد نانو لوله زیگزاگ در شکل (۲) نشان داده شده است.



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

که در اینجا σ بر حسب گیگا پاسکال است. همان طور که از رابطه (۱۵) مشخص است، تغییر گاف انرژی بر حسب تنش محوری برای تمام نانو لوله های زیگزاگ فلزی یکسان و مستقل از قطر نانو لوله است. شیب نمودار، یعنی $dE_g/d\sigma$ ثابت و برابر 0.11 می باشد.

برای $n = (3q \pm 1)$ گاف انرژی به صورت زیر نوشته می شود:

$$E_g^{3q \pm 1} = 2[\gamma_3 - \gamma_1 (\cos \frac{q'a}{3d_t} + \sqrt{3} \sin \frac{q'a}{3d_t})] \quad (16)$$

$$E_g^{3q \pm 1} = 2[\gamma_3 - 2\gamma_1 \cos(\frac{\pi}{3} - \frac{q'a}{3d_t})] \quad (17)$$

با بسط کسینوس برای قطرهای بزرگ داریم:

$$E_g^{3q \pm 1} = (\pm 0.011 - 3.9 \times 10^{-3} \frac{q'a_0}{d_t}) \sigma + \frac{9.22}{d} \mp \frac{2.21}{6d_t^2} \quad (18)$$

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

در شکل ۳ تغییرات گاف انرژی نانو لوله های زیگزاگ برای کشش محوری ($\sigma > 0$) و فشار محوری ($\sigma < 0$) نشان داده شده است.

تابعیت $|dE_g/d\sigma|$ برای هر سه حالت زیگزاگ تقریباً یکسان و برای تنش کمتر از ده گیگا پاسکال تقریباً برابر 0.11 است. علامت $dE_g/d\sigma$ برای $(3q+1, 0)$ مثبت و برای $(3q-1, 0)$ منفی است. در نتیجه گاف انرژی برای نانو لوله های $3q$ و $3q+1$

که در آن $a = \sqrt{3}a_{c-c}$ (فاصله دو اتم کربن مجاور هم است). با توجه به اینکه کمینه انرژی در

$$k=0 \text{ رخ می دهد:} \quad E_m^Z(0) = \pm \gamma_3 \left[1 - \frac{2\gamma_1}{\gamma_3} \cos\left(\frac{m\pi}{n}\right) \right] \quad (11)$$

همه نانو لوله های زیگزاگ به یکی از سه حالت $(3q, 0)$ و $(3q \pm 1, 0)$ هستند (در اینجا q عدد صحیحی است).

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

$$d_t = \frac{|\bar{C}_h|}{\pi} = \frac{na}{\pi} \rightarrow \frac{\pi}{n} = \frac{a}{d_t} \Rightarrow E_g(\sigma) = 2\gamma_3 \left[1 - 2\frac{\gamma_1}{\gamma_3} \cos\left(\frac{\pi}{3} - \frac{q'a}{3d_t}\right) \right] \quad (12)$$

d_t قطر لوله بر حسب آنگستروم است و q' به صورت زیر تعریف می شود:

$$\begin{cases} n=3q & \Rightarrow q'=0 \\ n=3q \pm 1 & \Rightarrow q'=\pm 1 \end{cases}$$

به ازای $n=3q$ گاف انرژی بر حسب σ به صورت زیر است:

$$E_g^{3q} = 2[\gamma_3 - \gamma_1] \quad (13)$$

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

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

معمولاً مقدار γ_0 را برابر $3/2$ 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 می آید:

$$E_g^{3q} \approx 0.011\sigma \quad (15)$$

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

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

$$E_q^{\min} = [\gamma_3^2 - 4\gamma_1\gamma_3 \cos(\frac{q\pi}{n}) + 4\gamma_1^2 \cos^2(\frac{q\pi}{n})]^{1/2}$$

$$E_{q+1}^{\min} = [\gamma_3^2 - 4\gamma_1\gamma_3 \cos(\frac{(q+1)\pi}{n}) + 4\gamma_1^2 \cos^2(\frac{(q+1)\pi}{n})]^{1/2}$$

انتگرال‌های جهش γ_1 و γ_3 را حول $s_{11}\sigma$ بسط می‌دهیم:

$$\gamma_1 \approx \gamma_0(1 + \frac{3}{4}s_{12}\sigma - \frac{1}{2}s_{11}\sigma)$$

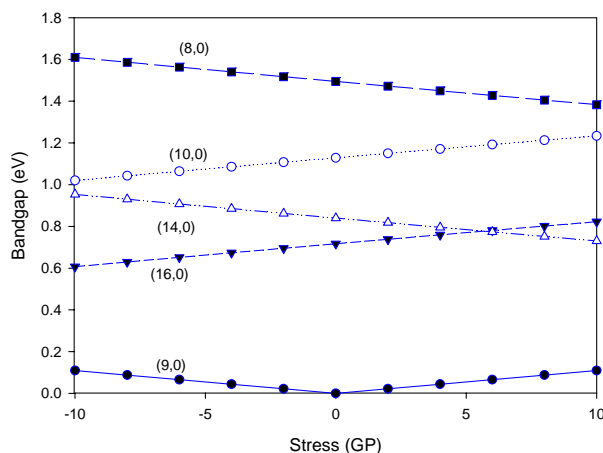
$$\gamma_3 \approx \gamma_0(1 - 2s_{11}\sigma) \quad (19)$$

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:

$$\sigma_c = \frac{1 - [\cos(\frac{(q+1)\pi}{n}) + \cos(\frac{q\pi}{n})]}{2s_{11} + (\frac{3}{4}s_{12} - \frac{1}{2}s_{11})[\cos(\frac{(q+1)\pi}{n}) + \cos(\frac{q\pi}{n})]} \quad (20)$$

برای n های کوچک، این تنش بحرانی بزرگ تر از حد شکست (که به طور میانگین ۳۰ گیگا پاسکال است [۹]) می‌باشد، پس σ_c را برای نانو لوله‌ها با قطر بزرگ تر محاسبه می‌کنیم. به ازای $n = 3q + 1$ با بسط کسینوس برای d های بزرگ به دست می‌آوریم:

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



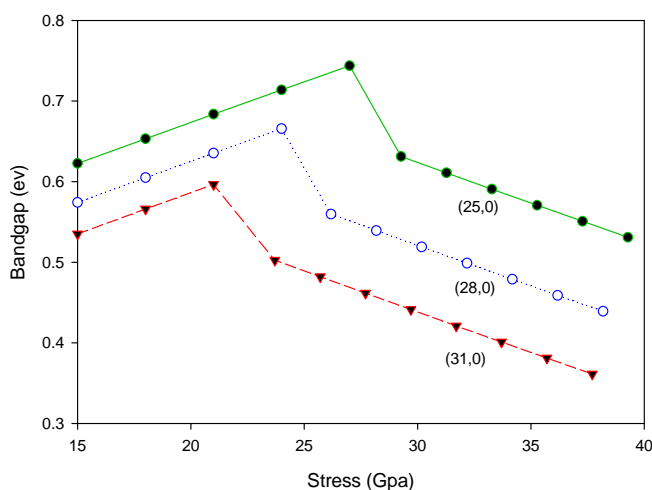
شکل ۳- گاف انرژی به صورت تابعی از تنش محوری برای نانو لوله های متفاوت زیگزاگ نشان داده شده است.

مشاهدات آزمایشگاهی نشان می‌دهد، اگر تنش از یک مقدار بحرانی که آن را با σ_c نشان می‌دهیم بیشتر شود، حساسیت E_g به σ تغییر می‌کند [۴]. مقدار σ_c وابسته به قطر و کایرالیته است و از صفر تا ۲۰ گیگا پاسکال تغییر می‌کند. این مطلب نشان می‌دهد که فرمول هریسون باید اصلاح شود. وابستگی d^{-2} فرمول هریسون برای فواصل اتمی بسیار کوچک و بسیار بزرگ نا معتبر است. انتگرال‌های جهش برای d های بزرگ به صورت نمایی افت می‌کنند و برای $d \rightarrow 0$ 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 $3q \pm 1$ وجود دارد این است که در یک تنش خاص یک تغییر علامت در شیب نمودار ($dE_g/d\sigma$) مشاهده می‌شود. علت این تغییر علامت این است که در این

$m = q - 1$ منطبق می‌شود. تنش بحرانی با حل معادله $E_q^{\min} = E_{q-1}^{\min}$ محاسبه می‌شود. گاف نواری با قرار دادن $m = q - 1$ در رابطه (۱۱) به دست می‌آید. در کشش‌های بالاتر از تنش بحرانی $dE_g/d\sigma$ برای نانو لوله زیگزاگ $3q - 1$ مثبت است و کشش سبب افزایش گاف نواری می‌شود.



شکل ۴- تغییر علامت در شیب نمودار گاف نواری بر حسب کشش محوری.

۵- نتیجه گیری

تغییر شکل محوری باعث تغییر در انتگرال‌های جهش بین نزدیکترین همسایه می‌شود. 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 $(3q + 1, 0)$ کشش محوری گاف انرژی را افزایش می‌دهد پس می‌توان نتیجه گرفت که در این نوع از نانو لوله ها، فشردگی باعث گذار از حالت نیم رسانا به فلز می‌شود. برای $(3q - 1, 0)$ کشش موجب گذار از حالت نیم رسانا به فلز می‌شود. برای نانو لوله های $3q$ ، گذار نیم رسانا- فلز- نیم رسانا و برای نانو لوله های زیگزاگ نیم رسانا در یک تنش

$$\sigma_c = \frac{0.864 + 0.72d_t}{0.00196d_t^2 - 6.1 \times 10^{-4}(d_t^2 - 0.72d_t - 0.864)} \quad (21)$$

چون پایین ترین نوار رسانش تغییر کرده است، گاف انرژی باید دوباره محاسبه شود. برای کشش بالاتر از σ_c گاف نواری با قرار دادن $m = q + 1$ در رابطه (۱۱) به دست می‌آید:

$$E_g(\sigma) = \gamma_3 \left[1 - 2 \frac{\gamma_1}{\gamma_3} \cos\left(\frac{(q+1)\pi}{n}\right) \right], \quad \sigma > \sigma_c \quad (22)$$

مقدار σ_c به طور معکوس با قطر نانو لوله ارتباط دارد. هرچه قطر نانو لوله بزرگتر باشد تغییر علامت شیب نمودار در کشش پایینتری رخ می‌دهد. این همان چیزی است که ما انتظارش را داشتیم، زیرا هرچه قطر نانو لوله بزرگ تر می‌شود فاصله بین تراز های انرژی کمتر شده و تراز های انرژی E_{q+1} و E_q به یکدیگر نزدیک تر می‌شوند.

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 می‌آید:

$$E_g(\sigma) = \left(-0.011 - \frac{5.4 \times 10^{-3}}{d_t^2} + \frac{7.8 \times 10^{-3}}{d_t} \right) \sigma + \frac{8.55}{d_t^2} + \frac{12.8}{d_t}, \quad \sigma > \sigma_c \quad (23)$$

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

این تغییر علامت برای نانو لوله ها با قطر بزرگتر دارای اهمیت است، زیرا در تنش های پایین تر رخ می دهد.

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.

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 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., *Physical 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.