

بررسی اثر کرنش محوری بر روی ترابرد جریان در نانولوله کربنی دسته صندلی محدود (۶، ۶)

سید ادريس فيض آبادی و زينب کارگر

دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران
پست الکترونیکی: edris@iust.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۸۹/۱۲/۲۱؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۰/۶/۷)

چکیده

در این مقاله با استفاده از تکنیک تابع گرین و رابطه لاندنور-بوتیکر به بررسی اثر کرنش بر جریان الکتریکی در نانولوله کربنی دسته صندلی محدود (۶، ۶) پرداخته ایم. نانولوله‌های کربنی دسته صندلی محدود با توجه به طولشان می‌توانند رسانا یا نیمه رسانا باشند. نانولوله کربنی محدود (۶، ۶) با طول $3q$ و $3q+1$ (یک عدد صحیح می‌باشد) در حالت بدون کرنش دارای گاف نواری می‌باشد. نتایج این مقاله نشان می‌دهد نانولوله محدود (۶، ۶) با طول $3q+1$ و $3q$ هنگامی که به ترتیب تحت کشش محوری و فشار محوری هستند در ولتاژهای پایین جریان مشاهده می‌گردد. نانولوله کربنی محدود (۶، ۶) با طول $3q-1$ در حالت عادی در ولتاژهای پایین جریان از خود نشان می‌دهد، با اعمال کرنش محوری این جریان کاهش پیدا می‌کند. با توجه به نتایج به دست آمده در این تحقیق، با اعمال کرنش محوری در نانولوله دسته صندلی محدود با طول‌های متفاوت، گذار فلز به نیمه رسانا و یا بالعکس را می‌توان مشاهده کرد.

واژه‌های کلیدی: نانولوله کربنی محدود، تابع گرین، ترابرد جریان، کرنش

۱. مقدمه

می‌باشند. میزان کشیدگی که نانولوله‌های کربنی می‌توانند تحمل کنند ۲۰ برابر بیشتر از استیل می‌باشد [۲] و دارای مدول یانگی از مرتبه تراپاسکال می‌باشند [۳]. خصوصیات مکانیکی ویژه نانولوله‌های کربنی را به آسانی می‌توان به وسیله پیوندهای sp^2 کربن - کربن توضیح داد که این نوع پیوندها قوی‌ترین پیوند در طبیعت می‌باشند [۴]. هر دو خصوصیت الکتریکی و مکانیکی نانولوله‌های کربنی به کایرالیته آنها بستگی دارد. تحمل نانولوله‌های زیگزاگ بیشتر از نانولوله‌های دسته صندلی می‌باشد [۵]. نانولوله‌های دسته صندلی نامحدود در مقایسه با نانولوله‌های زیگزاگ نسبت به کرنش^۱ بی اثر هستند، بدین معنی که گاف نواری برای نانولوله زیگزاگ که تحت کرنش قرار

نانولوله‌های کربنی بعد از کشف توسط آقای ایچیمادا در سال ۱۹۹۱ تاکنون توجه دانشمندان زیادی در زمینه‌های گوناگون علم و تکنولوژی به خود جلب کرده‌اند [۱]. نانولوله‌های کربنی ساختاری جدید با خصوصیات الکترونیکی ویژه‌ای هستند. یک نانولوله کربنی تک دیواره، ساختاری شبه یک بعدی دارد که از لوله کردن یک صفحه دو بعدی گرافین به دست می‌آید. هر نانولوله با یک بردار کایرال $\vec{C} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2$ مشخص می‌شود که a_1 و a_2 بردارهای پایه شبکه گرافین هستند. خصوصیات الکتریکی نانولوله‌های کربنی بستگی به نحوه پیشش صفحه گرافین دارد. علاوه بر خصوصیات الکتریکی منحصربه فرد نانولوله‌های کربنی، آنها دارای خصوصیات مکانیکی ویژه‌ای نیز

یکسان می‌باشند و جفت شدگی الکترودها و نانولوله کربنی فقط به اتم‌های انتهایی الکترودها و اتم‌های ابتدایی الکترودها راست محدود می‌شود.

هامیلتونی بستگی قوی برای نانولوله کربنی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H_C = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} t_{i,j} |i\rangle\langle j|, \quad (1)$$

$t_{i,j}$ انتگرال همپوشانی بین جایگاه اتمی i و j است که در اینجا فقط همسایه‌های اول در نظر گرفته شده است و ε_i معرف انرژی جایگاه i ام اتم کربن می‌باشد. جریان الکتریکی I از رابطه لاندنور - بوتیکر به دست می‌آید:

$$I = \frac{ye}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E)(f_L(E) - f_R(E))dE, \quad (2)$$

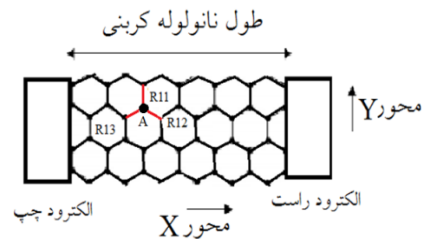
که در آن $T(E)$ احتمال عبور الکترون، و e و h به ترتیب بار الکترون و ثابت پلانک می‌باشند. $f_L(E)$ و $f_R(E)$ تابع توزیع فرمی - دیراک برای الکترودهای چپ و راست هستند که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$f_{L(R)}(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu_{L(R)}}{kT}\right)}, \quad (3)$$

در عبارت بالا k ثابت بولتزمن و T دمای کلون می‌باشد. $\mu_{L(R)}$ پتانسیل الکتریکی، الکترودها چپ (راست) می‌باشد و به صورت $\mu_{L(R)} = \varepsilon_f \pm \frac{eV}{4}$ در نظر گرفته می‌شود. در این رابطه ε_f انرژی فرمی و V ولتاژ بایاس اعمال شده به الکترودهاست. برای به دست آوردن احتمال عبور الکترون از تکنیک تابع گرین استفاده می‌کنیم. تابع گرین تأخیری برای سیستم ارائه شده در شکل ۱ به صورت زیر می‌باشد:

$$G_C^r(E) = \left[(E + i\eta)I - H_C - \Sigma_L - \Sigma_R \right]^{-1} \quad (4)$$

که در این عبارت H_C هامیلتونی نانولوله کربنی است که در بالا معرفی شد و اثرات الکترودهای نیمه بی نهایت چپ (راست) به صورت عبارت‌های $\Sigma_{L(R)}$ ظاهر می‌شود که به آنها خود انرژی گفته می‌شود. ماتریس خود انرژی با توجه به نکته گفته شده در ابتدای این بخش یک ماتریس تنک است بدین معنی که تمام داریه‌های آن صفر است به جز داریه‌هایی که



شکل ۱. نانولوله کربنی محدود که بین دو الکتروده نیمه بینهایت فلزی قرار گرفته شده است. R_{11} ، R_{12} ، R_{13} پیوندهایی هستند که اتم کربن A را به سه همسایه اول آن پیوند می‌باشند.

می‌گیرد، می‌تواند تغییر کند [۶]، اما نانولوله دسته صندلی نامحدود تحت این نوع کرنش همچنان فلز باقی می‌ماند [۷]. نانولوله‌های دسته صندلی نامحدود هنگامی که پیچیده می‌شوند دیگر دارای گاف نواری صفر نیستند [۸]. آقای آگاتا و همکارانش گاف نواری محدودی برای نانولوله دسته صندلی (۸۸) در کشیدگی محوری برابر با ۲۰٪، که بیشترین مقدار کشیدگی است که نانولوله کربنی می‌تواند تحمل کند، مشاهده کردند [۹]. اخیراً با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MDS) بالاتر بودن مدول یانگ و سختی کششی نانولوله‌های کربنی تک دیواره نسبت به مدول الاستیک و سختی فشارنده قابل توجه است. همچنین نیروی محوری بحرانی برای نانولوله زیگزاگ مستقل از شعاع آن می‌باشد، در صورتی که برای نانولوله‌های دسته صندلی با افزایش شعاع افزایش می‌یابد [۱۰].

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین و رابطه لاندنور - بوتیکر به بررسی اثرات ناشی از اعمال فشار و کشش محوری بر روی تراورد جریان در نانولوله کربنی دسته صندلی محدود (۶)، با طول متفاوت پرداخته شده است.

۲. مدل

برای بررسی اثر کشش و فشار محوری بر روی نانولوله‌های کربنی بر مبنای هامیلتونی در مدل بستگی قوی از روش تابع گرین استفاده می‌کنیم. برای این منظور یک نانولوله دسته صندلی محدود را به دو الکتروده فلزی نیمه بینهایت مطابق شکل ۱ متصل می‌کنیم و برای سادگی فرض می‌کنیم که الکترودها

تعریف می‌شود. X و Y محورهای مختصات می‌باشند. کرنش موجب تغییر طول پیوند کربن - کربن می‌شود در نتیجه هم پوشانی بین اوربیتال‌های π همسایه‌های نزدیک اتم‌های کربن تغییر می‌کند، بنابراین باید انتگرال هم پوشانی دوباره محاسبه شود. انتگرال هم پوشانی پیوندهایی که تحت تأثیر کرنش قرار گرفته‌اند، $t_i = t(\sigma_i)$ ، به انتگرال هم پوشانی در حالت عادی ، t ، بنا به قانون هریسون [۱۳]، به صورت $t_i = t \cdot (R_i / R)^2$ نسبت داده می‌شود، که در آن R_i و R به ترتیب طول پیوندهای تغییر شکل یافته و پیوندها در حالت عادی می‌باشد.

۳. نتایج

در این تحقیق سعی به بررسی اثر کشش و فشار محوری بر روی جریان عبوری از نانولوله کربنی دسته صندلی محدود شده است. برای این منظور نانولوله کربنی دسته صندلی را بین دو الکتروود قرار داده شده است که برای سادگی فرض می‌کنیم الکتروودها یکسان هستند. انرژی جایگاهی اتم‌های کربن را برابر با صفر و انتگرال هم پوشانی برای نانولوله‌ای که تحت هیچ کشش و فشاری نیست را برابر با $t = 2.7 \text{ eV}$ و تابع پهن شدگی بین الکتروود و نانولوله کربنی را برابر با $\Gamma_{L(R)} = 0.5 \text{ eV}$ قرار می‌دهیم. نسبت پواسون را برابر با 0.165 قرار داده ایم [۱۲]. محاسبات در دمای اتاق انجام گرفته است. نانولوله کربنی که مورد بررسی قرار گرفته است نانولوله کربنی دسته صندلی محدود (۶، ۶) است.

اعمال کرنش محوری بر روی انتگرال هم پوشانی بین یک اتم کربن با اتم‌های کربن مجاورش اثر می‌گذارد. در شکل ۲ نمودار انتگرال هم پوشانی برای پیوند عمود بر محور R_{11} و پیوندهای غیر محوری R_{12} و R_{13} در نانولوله کربنی دسته صندلی محدود برحسب کرنش محوری نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود دو رفتار متفاوت برای این دو نوع پیوند دیده می‌شود. پیوندهای غیر محوری R_{12} و R_{13} دارای دو مولفه در راستای محور X و Y هستند. اگر محور نانولوله کربنی دسته صندلی را در راستای محور X در نظر

در ارتباط با اتم‌های متصل به نانولوله هستند و به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\Sigma_{L(R)}(E) = \tau_{L(R),C} g_{s,L(R)}^+ \tau_{L(R),C}^+ \quad (5)$$

انتگرال همپوشانی بین الکتروودها و نانولوله کربنی است و $g_{s,L(R)}^+$ تابع گرین تأخیری برای الکتروود نیمه بینهایت چپ (راست) است. ضریب عبور الکترون از یک اتصال به اتصال دیگر از رابطه زیر به دست می‌آید

$$T = Tr(\Gamma_L G_C^r \Gamma_R G_C^a), \quad (6)$$

که Γ تابع پهن شدگی است که به صورت زیر بیان می‌شود [۱۱]

$$\Gamma_{L(R)} = i[\Sigma_{L(R)}^r - \Sigma_{L(R)}^a] \quad (7)$$

اتم‌ها در جامدات با اعمال فشار و یا کشش از وضعیت تعادل خود خارج می‌شوند اما نیروهای بازگرداننده سعی به برگرداندن اتم‌ها به حالت اولیه خود، یعنی قبل از اعمال فشار یا کشش را دارند. در مکانیک کلاسیک، رابطه کشسانی از قانون هوک به دست می‌آید که به صورت زیر بیان می‌شود:

$$s = E \sigma, \quad (8)$$

که در آن E مدول یانگ و σ و s به ترتیب برابر با کرنش و تنش^۱ ایجاد شده هستند. σ از رابطه زیر به دست می‌آید:

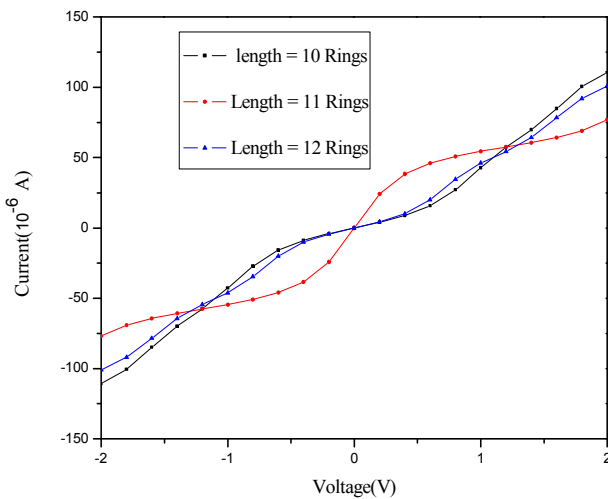
$$\sigma = \frac{L - L_0}{L_0}, \quad (9)$$

در اینجا L و L_0 طول نانولوله قبل و بعد از اعمال تنش هستند. قبل از اعمال تنش طول پیوندهای کربن - کربن با هم برابر بوده است اما بعد از اعمال کرنش پیوندهای کربن - کربن در نانولوله دسته صندلی با توجه به شکل ۱ به صورت زیر تغییر می‌کند [۱۲]:

$$R_{11} = \frac{1}{\sqrt{3}} a(1 - \sigma v) \bar{Y},$$

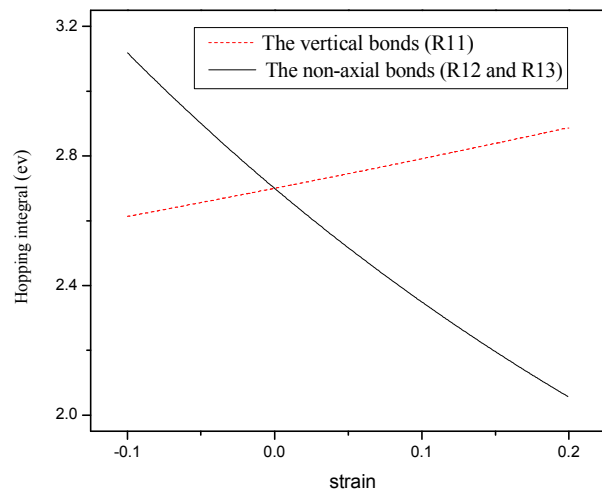
$$R_{12,13} = \pm \frac{1}{2} a(1 + \sigma) \bar{X} - \frac{1}{2\sqrt{3}} a(1 - \sigma v) \bar{Y}, \quad (10)$$

که در عبارات بالا a ثابت شبکه و مقدار آن برابر با $a = \sqrt{3} a_{C-C}$ می‌باشد. σ بیانگر کرنش محوری و v نسبت پواسون می‌باشند. نسبت پواسون، نسبت کشش قراردی عرضی به کشش طولی



شکل ۳. جریان بر حسب ولتاژ بایاس با انتگرال هم پوشانی هنگامی که $t = 2/7 \text{ eV}$ تحت کرنش نیست.

محدود (۶، ۶) را تحقیق کنیم، تراپرد جریان را در حالتی که نانولوله دسته صندلی محدود در حالت عادی است، برای طول‌های متفاوت بررسی می‌کنیم. در شکل ۳ جریان برای نانولوله کربنی محدود دسته صندلی (۶، ۶) بر حسب ولتاژ بایاس هنگامی که طول نانولوله متفاوت می‌باشد، رسم شده است. در اینجا نانولوله کربنی تحت هیچ گونه کرنشی نیست. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود نمودار جریان نسبت به ولتاژ ظاهری پله مانند دارد. در نانولوله‌های کوتاه‌تر اثرات کوانتومی باعث گسسته شدن سطوح انرژی شده و هر پله از ولتاژ معادل با انرژی لازم برای جهش الکترون از یک سطح به سطح دیگر انرژی می‌باشد. نانولوله کربنی محدود دسته صندلی بر خلاف نوع نامحدودش که خاصیت فلزی دارد، دارای گاف انرژی بوده و این گاف انرژی به طول نانولوله محدود دسته صندلی بستگی دارد. اگر طول نانولوله برابر با $3q+1$ ، $3q$ و $3q-1$ باشد (q یک عدد صحیح می‌باشد). در این صورت به ترتیب دارای بیشترین، معمولی و کمترین گاف انرژی است [۱۴]. همان‌طور که در شکل ۳ مشاهده می‌گردد، جریان برای نانولوله کربنی دسته صندلی با طول‌هایی معادل با $3q+1$ ، $3q$ در ولتاژهایی پایین دارای مقادری نزدیک به صفر می‌باشد. که این ولتاژهای پایین معادل با گاف انرژی برای نانولوله دسته صندلی محدود (۶، ۶) هستند [۱۵]. هنگامی که طول نانولوله برابر با $3q-1$ است

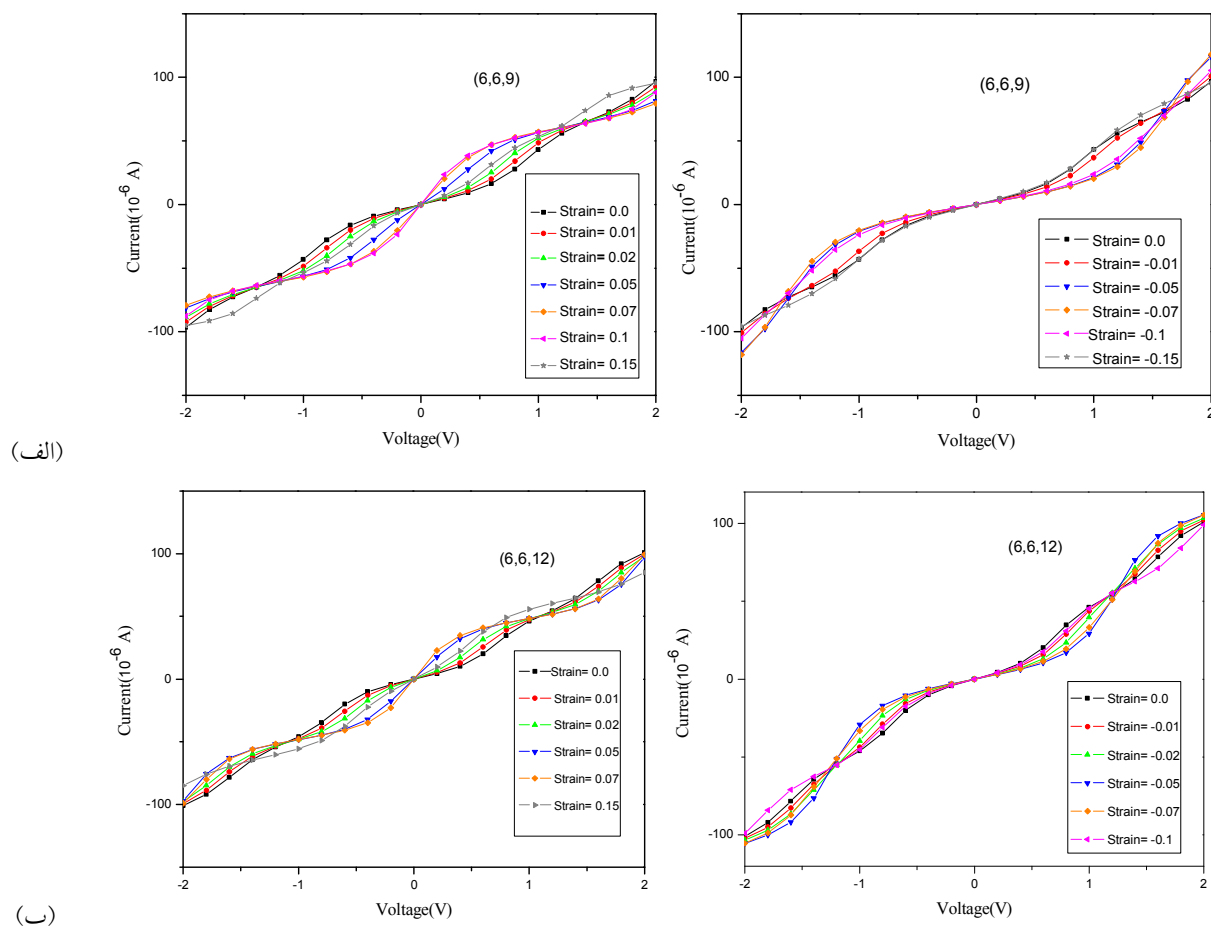


شکل ۴. انتگرال هم پوشانی نانولوله کربنی دسته صندلی بر حسب کرنش برای پیوند غیر محوری (خط ممتد سیاه) و پیوند عمود بر محور نانولوله (خط چین قرمز).

بگیریم مطابق شکل ۱ اعمال کرنش از جمله کشش (فشار) در راستای محور X ، بر روی هر دو مولفه X و Y پیوندها تأثیر می‌گذارد و منجر به افزایش (کاهش) مولفه X و کاهش (افزایش) در مولفه Y پیوند غیر محوری می‌شود اما در مجموع این تغییرات منجر به دور (نزدیک) شدن اتم‌های کربن مجاور می‌شود. هنگامی که اتم‌ها از هم دورتر (به هم نزدیکتر) می‌شوند، هم پوشانی بین اوربیتال‌های $2p_z$ اتم‌های مجاور کمتر (بیشتر) شده در نتیجه جهش الکترون از یک اتم به اتم مجاور سخت‌تر (آسان‌تر) می‌شود. بنا بر قانون هریسون، که انتگرال هم پوشانی با مجذور فاصله بین اتم‌ها نسبت عکس دارد، انتگرال هم پوشانی پیوندهای غیر محوری هنگامی که نانولوله کربنی دسته صندلی تحت کشش (فشار) قرار می‌گیرد، کاهش (افزایش) می‌یابد.

اما در پیوند R_{11} که عمود بر محور نانولوله کربنی دسته صندلی بوده و فقط دارای مولفه Y می‌باشد، با افزایش کشش (فشار) محوری اتمی کربنی که در انتهای این پیوند قرار دارد به اتم‌های مجاورش نزدیک (دور) شده، در نتیجه هنگامی که تحت کشش (فشار) قرار می‌گیرد الکترون راحت‌تر (سخت‌تر) به اتم دیگر جهش می‌کند و در نتیجه انتگرال هم پوشانی افزایش (کاهش) می‌یابد.

قبل از اینکه اثر کرنش بر روی تراپرد جریان در نانولوله



شکل ۴. نمودار جریان بر حسب ولتاژ برای نانولوله کربنی محدود (۶، ۶)، (الف) طول ۹ حلقه، (ب) طول ۱۲ حلقه، تحت کشش محوری (شکل سمت چپ) و فشار محوری (شکل سمت راست) قرار گرفته‌اند.

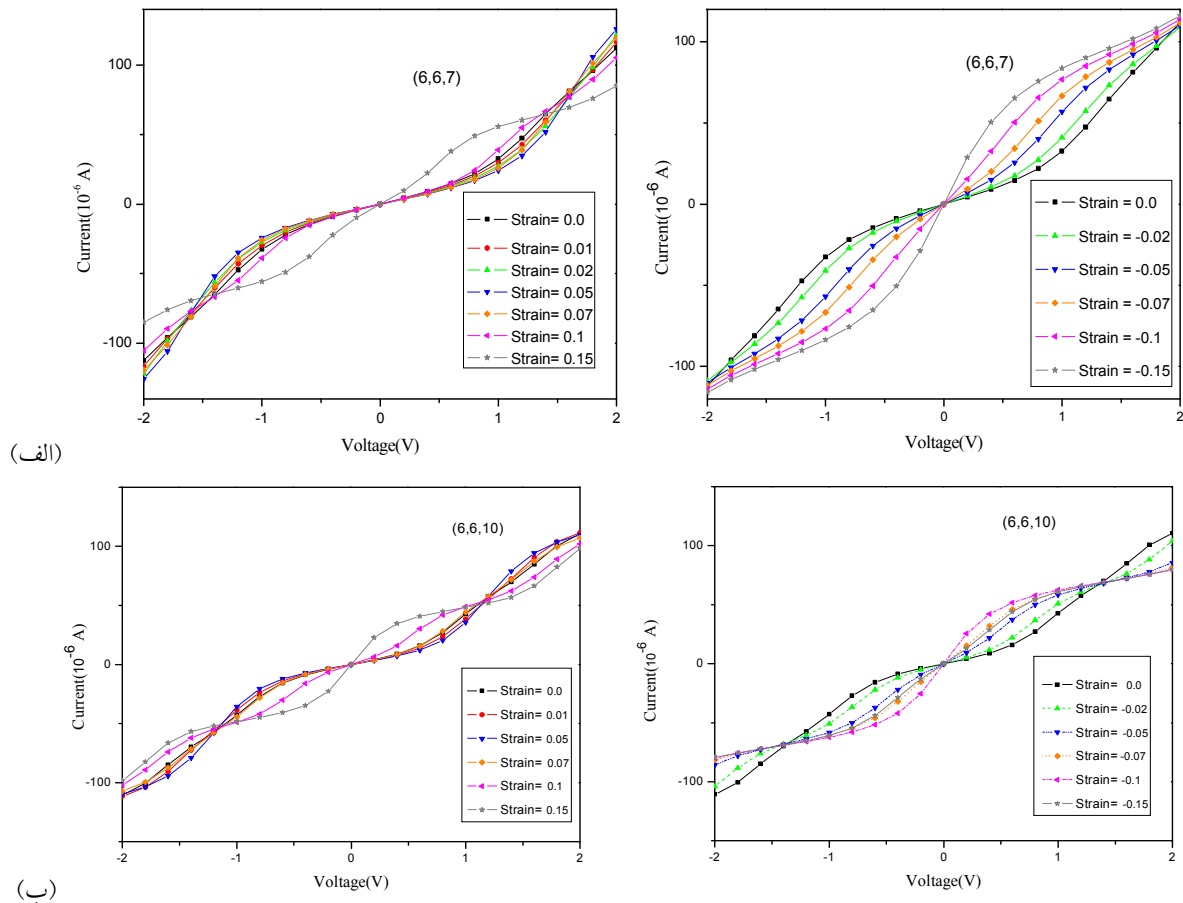
همان‌طور که در شکل ۴ دیده می‌شود با افزایش فشار محوری جریان کاهش و گاف نواری افزایش می‌یابد. با افزایش کشش محوری جریان افزایش می‌یابد درحالی‌که نانولوله (۶، ۶) با همین طول در حالت عادی خود تقریباً هیچ جریانی را در ولتاژهای پایین از خود نشان نمی‌دهد. اعمال کرنش محوری منجر به تغییر پیوندهای بین اتم‌های کربن مجاور می‌شود و بنا به قانون هریسون انتگرال هم پوشانی نیز تغییر می‌کند. بنابراین برای مشاهده گذار از نیمه رسانا به رسانا در نانولوله کربنی محدود (۶، ۶) با طول ۳q، نانولوله را تحت کشش محوری قرار می‌دهیم.

در شکل ۵ تغییرات جریان بر حسب ولتاژ برای نانولوله محدود با طول ۷ و ۱۰ حلقه، تحت تأثیر کرنش محوری رسم

بیشترین مقدار جریان را مشاهده می‌کنیم، که در این طول کمترین مقدار گاف انرژی وجود دارد.

برای بررسی اثر کرنش محوری بر روی تراپرد جریان در نانولوله دسته صندلی محدود، نانولوله کربنی محدود (۶، ۶) را تحت کشش و فشار محوری قرار می‌دهیم، تراپرد جریان بر حسب ولتاژ در نانولوله کربنی محدود (۶، ۶) در شکل ۴ با طول ۳q در شکل ۵ با طول ۳q+۱ و در شکل ۶ با طول ۳q-۱ تحت کرنش محوری نشان داده شده است.

همان‌طور که قبلاً گفته شد نانولوله دسته صندلی محدود با طول ۳q در ولتاژهایی پایین دارای گاف نواری غیر صفر است. در شکل ۴ طول نانولوله کربنی (۶، ۶) را برابر با ۹ و ۱۲ حلقه انتخاب کرده‌ایم و آن را تحت کرنش محوری قرار داده‌ایم.



شکل ۵. نمودار جریان بر حسب ولتاژ برای نانولوله کربنی محدود (۶، ۶)، (الف) طول ۷ حلقه، (ب) طول ۱۰ حلقه، تحت کشش محوری (شکل سمت چپ) و فشار محوری (شکل سمت راست) قرار گرفته‌اند.

(۶، ۶) با طول ۸ و ۱۱ (۳q-۱) حلقه تحت کرنش باشد، جریان کاهش می‌یابد. در نتیجه برای دیدن گذار از فلز به نیمه رسانا در نانولوله کربنی (۶، ۶) با طول ۳q-۱ کفایت نانولوله را تحت کشش یا فشار محوری قرار دهیم.

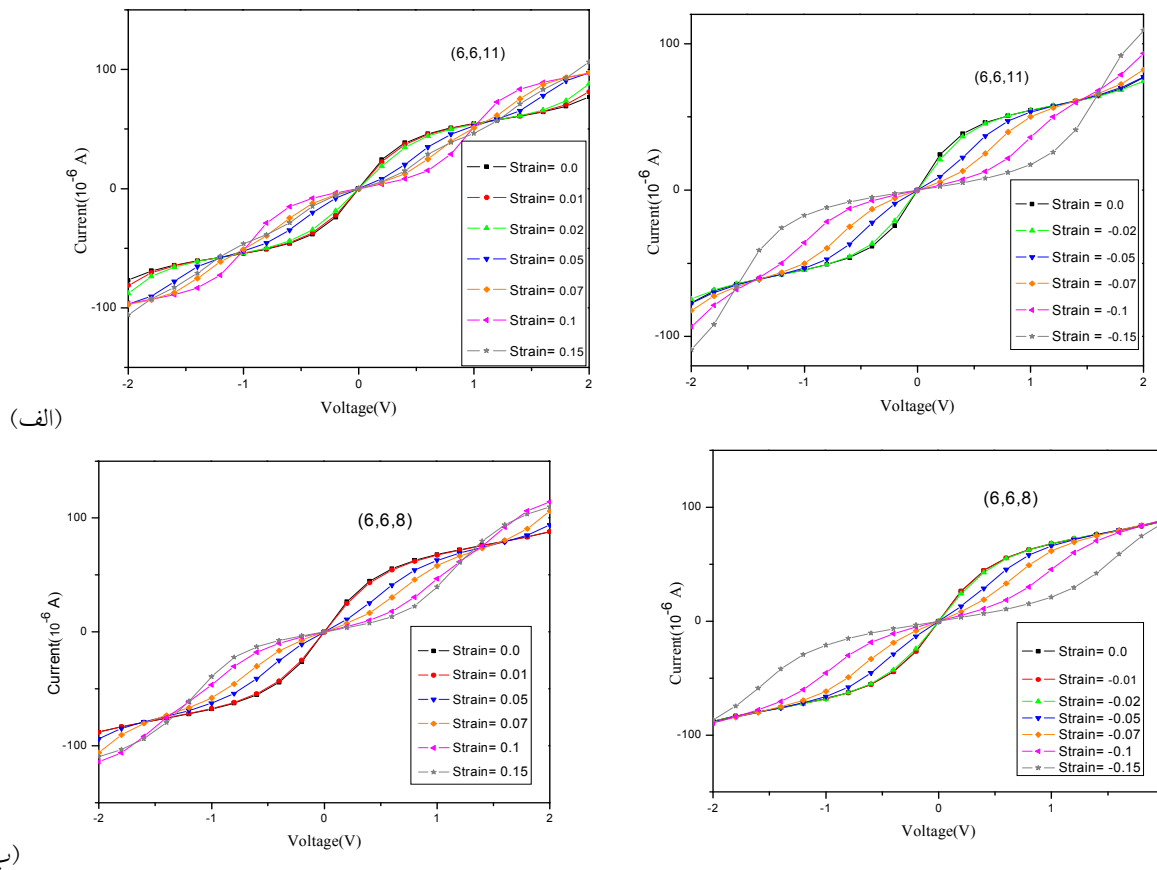
برای توجیه رفتارهای مشاهده شده در تراورد جریان تحت کرنش محوری از مفهوم گاف نواری استفاده می‌کنیم. گاف نواری برای یک نانولوله دسته صندلی محدود به صورت زیر می‌باشد [۱۶]:

$$\Delta E = 2 \left| t_{11} + 2 t_{12} \cos \left(\frac{r\pi}{N+1} \right) \right|, \quad (11)$$

که در این رابطه r یک عدد صحیح است به طوری که عبارت بالا کمترین مقدار خود را داشته باشد و t_{11} انتگرال هم پوشانی برای پیوند عمود بر محور نانولوله و t_{12} انتگرال هم پوشانی

شده است. همان‌طور که قبلاً در شکل ۳ نشان داده شده بود در این طول نیز مانند هنگامی که طول ۳q است جریانی نزدیک به صفر در ولتاژهای پایین مشاهده می‌شود. حال اگر نانولوله محدود (۶، ۶) با طول ۳q+۱ را تحت فشار محوری قرار دهیم، افزایش جریان مشاهده می‌شود و هنگامی که تحت تأثیر کشش محوری باشد، در ابتدا جریان کاهش و با افزایش کشش، جریان بیشتر می‌شود. بنابراین برای دیدن گذار در نانولوله محدود (۶، ۶) با طول ۳q+۱ باید نانولوله را تحت تأثیر فشار محوری قرار داد.

برخلاف دو حالت قبل، هنگامی که طول نانولوله محدود (۶، ۶) مطابق شکل ۳ برابر با ۳q-۱ حلقه است در حالت عادی نانولوله با این طول رسانا بوده و در ولتاژهای پایین جریان مشاهده می‌شود، اما با توجه به شکل ۶ هنگامی که نانولوله



شکل ۶. نمودار جریان بر حسب ولتاژ برای نانولوله کربنی محدود (۶، ۶)، (الف) طول ۱۱ حلقه، (ب) طول ۸ حلقه، تحت کشش محوری (شکل سمت چپ) و فشار محوری (شکل سمت راست) قرار گرفته‌اند.

محدود می‌باشد. حال اگر طول نانولوله برابر با ۹ یا ۱۲ حلقه (۳q) باشد، گاف نواری هنگامی که نانولوله تحت کشش محوری است کاهش می‌یابد و در نتیجه جریان افزایش پیدا می‌کند، و اگر نانولوله فشرده شود گاف نواری نسبت به حالت عادی افزایش می‌یابد که نتیجه آن کاهش در جریان عبوری از نانولوله است.

با توجه به نتایج به دست آمده جریان در نانولوله دسته صندلی محدود نسبت به تغییرات کرنش در ولتاژهای پایین حساس بوده است. به طور کلی این نوع نانولوله می‌تواند مبنای مناسبی برای سنسورهای کرنش محوری باشد.

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین و رابطه لاندنور-بوتیکر، به بررسی اثر کرنش محوری بر روی تراپرد جریان در

پیوند غیر محوری می‌باشد. هنگامی که طول نانولوله ۱-۳q باشد i برابر با $2q$ و اگر طول نانولوله برابر با $3q+1$ یا $3q$ باشد، در این صورت $i=2q+1$ ، قرار می‌دهیم.

نانولوله دسته صندلی محدود با طول ۸ و ۱۱ حلقه (۱-۳q) هنگامی که در حالت عادی است دارای گاف نواری صفر است اما وقتی که تحت کشش یا فشار محوری قرار می‌گیرد با توجه به رابطه (۱۰) و قانون هریسون، انتگرال هم پوشانی پیوندهای مجاور، t_{11} و t_{12} دیگر یکسان نیستند و در نتیجه گاف نواری به وجود می‌آید که منجر به کاهش جریان در ولتاژهای پایین می‌گردد. اگر نانولوله دسته صندلی محدود دارای طول ۷ یا ۱۰ حلقه باشد، یعنی حالتی که طول نانولوله برابر با $3q+1$ است، با در نظر گرفتن رابطه (۱۱) گاف نواری نانولوله تحت کشش (فشار) محوری، افزایش (کاهش) پیدا می‌کند و پیامد آن کاهش (افزایش) در جریان عبوری از نانولوله کربنی دسته صندلی

کربنی محدود (۶، ۶) را تحت کشش محوری قرار می‌دهیم. نانولوله محدود (۶، ۶) با طول برابر با ۷ یا ۱۰ حلقه ($3q+1$) هنگامی که تحت فشار محوری قرار می‌دهیم در ولتاژهای پایین که معادل با گاف نواری است، جریان مشاهده می‌گردد. اگر نانولوله با طول ۸ و ۱۱ حلقه ($3q-1$) که در حالت عادی دارای گاف نواری صفر است و در نتیجه بیشترین جریان را از خود عبور می‌دهد، تحت کرنش محوری قرار دهیم جریان کمتر می‌شود و حتی می‌توانیم گذار فلز به نیمه رسانا را نیز مشاهده کنیم.

نانولوله کربنی دسته صندلی محدود (۶، ۶) پرداخته شده است. نتایج نشان می‌دهد، نمودار جریان برحسب ولتاژ رفتاری پله مانند دارد. هر پله از ولتاژ معادل با انرژی لازم برای جهش الکترون از یک سطح به سطح دیگر انرژی می‌باشد. اعمال کرنش محوری به نانولوله دسته صندلی محدود تغییر در انتگرال هم پوشانی بین نزدیکترین اتم‌های همسایه کربن را به دنبال دارد. نانولوله کربنی دسته صندلی محدود با طول $3q$ و $3q+1$ (q عدد صحیح) دارای گاف نواری غیر صفر در حالت عادی می‌باشد. برای دیدن گذار از حالت نیمه رسانا به رسانا هنگامی که طول نانولوله برابر با ۹ یا ۱۲ حلقه ($3q$) است، نانولوله

مراجع

1. S Iijima, *Nature* **354** (1991) 56.
2. K Mylvaganam, and L C Zhang, *Carbon* **42** (2004) 2032.
3. M M J Treacy, T W Ebbesen, and J M Gibson, *Nature* **381** (1996) 678.
4. R Saito, G Dresselhaus, M S Dresselhaus, "Physical properties of carbonnanotubes", Imperial College press, London (1998).
5. C L Zhang, H S Shen, *Carbon* **44** (2006) 2608.
6. J M Zhang, R L Liang, and K W Xu, *Physica B* **405** (2010) 1329.
7. R Heyd, A Charlier, and E McRae, *Phys. Rev. B* **55** (1997) 11.
8. B Liu, H Jiang, H T Johnson, and Y Huang, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **52** (2004) 1.
9. S Ogata, Y Shibutani, *Phys. Rev. B* **68** (2003) 165409.
10. A R Ranjbartoreh, and G Wang, *Nanopart. Res.* **12** (2010) 537.
11. S Datta, "Electronic Transport in Mesoscopic Systems", Cambridge University Press (1995).
12. V M Pereira, A H Castro Neto, and N M R Peres, *Phys. Rev. B* **80** (2009) 045401.
13. W A Harrison, "Elementary Electronic Structure" World Scientific (1999).
14. A Rubio, D Sánchez-Portal, E Artacho, P Ordejón, and J. M. Soler, *Phy. Rev. Lett.* **82** (1999) 3520.
15. L Liu, C S Jayanthi, H Guo, S Y Wu, *Phys. Rev. B* **64** (2001) 033414.
16. S Compernelle, L Chibotaru, and A Ceulemans, *Journal of Chemical Physics* **119** (2003) 51.