Research Paper

Investigation of the Effect of Uniaxial Strain on the Electrical Transport Properties of Zigzag Carbon Nanotube Joints[1]

Ahmad Ahmadi Fouladi[2]

Received: 2022.01.28
Revised: 2022.05.06
Accepted: 2022.07.05

Abstract

In this paper, the electron transport through a zigzag single-walled carbon nanotube (SWCNT) junction consisting of zigzag SWCNT (central region) sandwiched between two semi-infinite metallic zigzag SWCNT leads to the presence of an applied uniaxial strain is numerically investigated. This study is based on a nearest-neighbor tight-binding approximation within the framework of a generalized Green's function technique and relies on the Landauer-B¨utikker formalism. The results show that the electron transport properties of the system can be well controlled by modifying the uniaxial strain strength and length of the SWCNT junction. Besides, applying compressive strain is more effective than tensile strain in opening a band gap in the system. Furthermore, the current amplitude for the tensile strain is bigger than the compressive strain with the same absolute values of uniaxial strain strength. As the length of the intermediate region increases, the density of states in Fermi energy decreases, and the magnitude of the electron emission function in Fermi energy decreases to zero, leading to the transition of the metal to the semiconductor.

Keywords: *Carbon Nanotube Junction, Electron Transport, Uniaxial Strain, Green's Function Method.*

---

[1] DOI: 10.22051/ijap.2022.39336.1260
[2] Assistant Professor, Department of Physics, Sari Branch, Islamic Azad University, Sari, Iran. Email: a.ahmadifouladi@iausari.ac.ir

مقالهٔ پژوهشی

بررسی اثر کرنش تک محوری روی ویژگی‌های ترابرد الکتریکی پیوندگاه نانولوله‌کربنی زیگزاگ[1]

احمد احمدی فولادی[2]

فصلنامهٔ علمی فیزیک کاربردی ایران
دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه الزهرا
سال دوازدهم، پیاپی ۳۰، پاییز ۱۴۰۱
صص۷ - ۱۸

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۱۱/۰۸
تاریخ بازنگری: ۱۴۰۱/۰۲/۱۶
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۰۴/۱۴

چکیده:

در این مقاله ترابرد الکترونی از راه پیوندگاه نانولوله‌کربنی تک‌جداره زیگزاگ که در آن یک نانولوله‌کربنی تک‌جداره زیگزاگ (منطقه میانی) به الکترودهای نیمه‌بینهایت نانولوله‌کربنی تک‌جداره زیگزاگ در حضور کرنش تک‌محوری متصل می‌شود، به صورت عددی بررسی شده است. این مطالعه بر پایه تقریب بستگی قوی در چارچوب روش تابع گرین تعمیم یافته و فرمول‌بندی لانداور- بوتیکر انجام شده است. نتایج نشان می‌دهند که ویژگی‌های ترابرد الکترونی سامانه را به خوبی با تغییر قدرت کمیت کرنش تک‌محوری و طول پیوندگاه نانولوله‌کربنی تک‌جداره زیگزاگ می‌توان پایش نمود. افزون بر این، اعمال کرنش فشاری مؤثرتر از کرنش کششی در باز کردن شکاف نواری در سامانه می‌باشد. همچنین، بزرگی جریان الکتریکی در اعمال کرنش کششی بزرگ‌تر از اعمال کرنش فشاری در اندازه‌های مساوی مقادیر قدرت کرنش است. با افزایش طول منطقه میانی، چگالی حالت‌ها در انرژی فرمی کاهش می‌یابد و اندازه تابع گسیل الکترونی در انرژی فرمی به صفر می‌رسد که منجر به گذار فلز به نیمرسانا می‌گردد.

واژگان کلیدی: *پیوندگاه نانولوله کربنی، ترابرد الکترونی، کرنش تک‌محوری، روش تابع گرین.*

---

[1] DOI: 10.22051/ijap.2022.39336.1260

[2] استادیار، گروه فیزیک، واحد ساری، دانشگاه آزاد اسلامی، ساری، ایران. Email: a.ahmadifouladi@iausari.ac.ir

۱. مقدمه

نانولوله‌کربنی توجهات زیادی را در سال‌های اخیر به دلیل ویژگی‌های منحصربه فرد و توانایی‌های کاربردی در طراحی ادوات نانوالکترونیک به خود جلب نموده است [۴-۱]. یک نانولوله کربنی تک‌جداره[1] می‌تواند نیمرسانا و یا فلز باشد که به کایرالیتی [2] و قطر آن بستگی دارد [۵]. برای ساخت یک قطعه بر پایه نانولوله کربنی تک‌جداره در نانوالکترونیک، توانایی تنظیم مشخصه‌های الکترونی آن یک نیاز ضروری است. یکی از توانایی‌های مورد توجه نانولوله کربنی، ویژگی‌های الکترونی و ترابردی قابل تنظیم آن تحت تغییر شکل مکانیکی چون پیچ‌خوردگی، کرنش و خمش است. در سال‌های اخیر، مطالعات نظری و تجربی فراوانی در بررسی تأثیر این عوامل بر ویژگی‌های الکترونی نانولوله‌های کربنی انجام شده است [۱۶-۶]. همچنین بسیاری از نتایج تجربی نشان دادند که از الکترودهای بر پایه کربن نیز می‌توان در پیوندگاه‌ها به جای الکترودهای فلزی مرسوم استفاده نمود [۱۷و۱۸]. به صورت ویژه یافته‌ها نشان می‌دهند که نانولوله کربنی می‌تواند گزینه بسیار خوبی به عنوان الکترود در پیوندگاه‌ها با فواید فراوان در زمینه الکترونیک مولکولی باشد [۱۹]. در این مقاله با استفاده از مدل بستگی قوی و روش تابع گرین تعمیم یافته، اثر کرنش تک محوری و طول سامانه بر ویژگی‌های ترابرد الکترونی پیوندگاه نانولوله کربنی تک‌جداره زیگزاگ به عنوان یک نانوپیوندگاه تمام کربنی، که در آن یک نانولوله کربنی تک‌جداره زیگزاگ (منطقه میانی) به الکترودهای نیمه‌بینهایت نانولوله کربنی تک‌جداره زیگزاگ متصل می‌شود (شکل ۱)، بصورت عددی بررسی می‌شود.

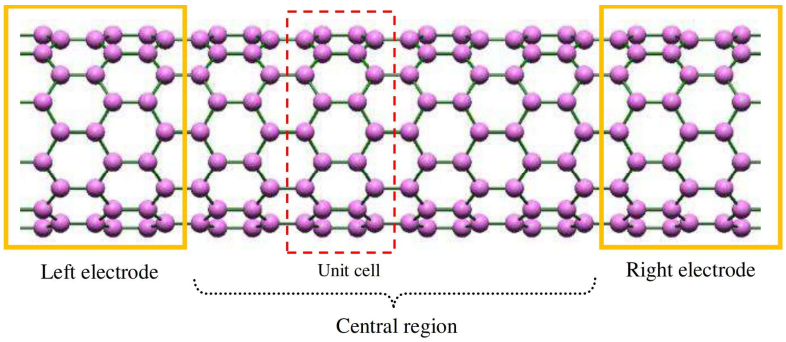
۲. مدل

در این بخش مدل و روش محاسبه کمیت‌های ترابردی پیوندگاه نانولوله کربنی تک‌جداره زیگزاگ که در آن یک نانولوله کربنی تک‌جداره زیگزاگ (۰و۹) (منطقه میانی) به الکترودهای نیمه‌بینهایت نانولوله کربنی تک‌جداره زیگزاگ (۰و۹) متصل شده است، را معرفی می‌کنیم. با استفاده از مدل بستگی قوی با تقریب پرش بین نزدیکترین همسایه‌ها، هامیلتونی نانولوله کربنی تک‌جداره به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H_C = \sum_i \{\alpha_\circ c_i^\dagger c_i - t_\circ (c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i)\} \qquad (۱)$$

[1] Single-Walled Carbon Nanotube (SWCNT)
[2] Chirality

که عملگر $c_i^{\dagger}$ (c_i) یک الکترون p در جایگاه i از شبکه نانولوله کربنی تک‌جداره خلق (نابود) می‌کند. $a_{\circ}$ و $t_{\circ}$ به ترتیب انرژی جایگاهی اتم‌های کربن و انتگرال پرش بین اتم‌های کربن همسایه می‌باشند.



شکل ۱ طرح‌واره‌ای از پیوندگاه SWCNT زیگزاگ که یک SWCNT زیگزاگ (منطقه میانی) به الکترودهای نیمه‌بینهایت SWCNT زیگزاگ متصل شده است.

با اعمال کرنش تک‌محوری بر منطقه میانی، انتگرال پرش بین اتم‌های کربن مطابق با فرمول هریسون تغییر می‌کند که به صورت زیر نوشته می‌شود [۲۰]:

$$t_i = t_{\circ}\left(\frac{r_{\circ}}{r_i}\right)^2, i = t, c \qquad r_t = (1+\varepsilon_t)r_{\circ t}, r_c = (1+\varepsilon_c)r_{\circ c} \qquad (۲)$$

که $r_{\circ}$ ($r_{i=t,c}$) طول پیوند کربن-کربن در غیاب کرنش (در حضور کرنش) و r_t ($r_{\circ t}$) و r_c ($r_{\circ c}$) به ترتیب مؤلفه‌های محوری و محیطی طول پیوند کربن-کربن در حضور (در غیاب) کرنش تک‌محوری می‌باشند. ε_t و ε_c کرنش تک‌محوری را به ترتیب در راستای محور و محیط نانولوله نشان می‌دهند که با رابطه پواسون $\nu = -\frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_t}$ به یکدیگر مربوط می‌شوند [۲۱و۲۲]. تابع گرین منطقه میانی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$G(E) = [(E + i0^{+})I - H_C - \Sigma_L(\mathrm{E}) - \Sigma_R(\mathrm{E})]^{-1} \qquad (۳)$$

که E انرژی الکترون فرودی و 0^+ یک مقدار بسیار کوچک است. همچنین I ماتریس همانی و $\sum L(R)$ خودانرژی الکترودهای SWCNT چپ (راست) از روی پیوند منطقه میانی با الکترودهاست که آن را با استفاده از فرمول‌بندی بیان شده در منبع [۲۳] محاسبه می‌کنیم. تابع گسیل را می‌توان بر حسب تابع گرین منطقه میانی و اتصال آن با الکترودهای SWCNT چپ و راست با استفاده از رابطه زیر بیان نمود:

$$T(E) = Tr[\mathrm{G}_L(\mathrm{E})G^r(\mathrm{E})\ \mathrm{G}_R(\mathrm{E})\ G^a(\mathrm{E})] \qquad (۴)$$

که G^r و G^a به ترتیب تابع گرین تأخیری و پیشرونده هستند. $\Gamma_{L,R} = i(\sum_{L,R} - \sum_{L,R}^{\dagger})$ تابع پیوند منطقه میانی با الکترودهای SWCNT زیگزاگ چپ و راست می‌باشد. چگالی حالت‌های الکترونی میانگین[1] پیوندگاه با رابطه زیر داده می‌شود:

$$DOS(E) = -\left\{\frac{1}{N\pi}\right\} Tr[\mathrm{Im}(G)]$$

که در آن N تعداد اتم‌های کربن در منطقه میانی می‌باشد. بر اساس فرمول‌بندی لانداور- بوتیکر، جریان الکتریکی برحسب ولتاژ اعمالی (V) از رابطه زیر بدست می‌آید [۲۴]:

$$I(V) = \frac{2e}{h}\int_{-\infty}^{+\infty} T(\mathrm{E})\,[f_L - f_R]dE \qquad (۵)$$

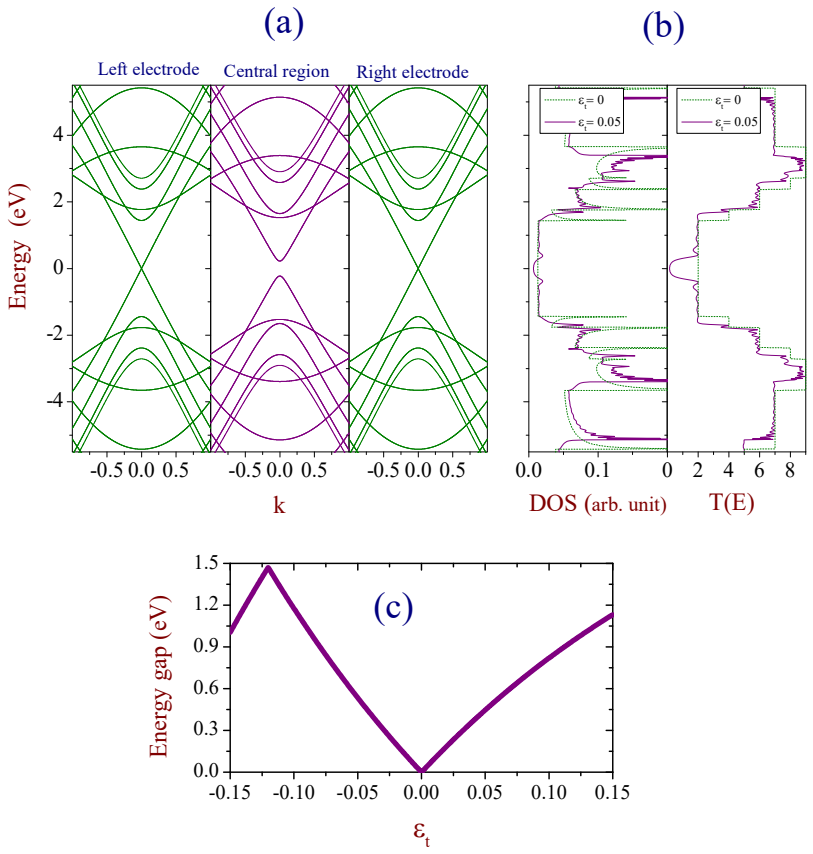
که در آن $f_{L(R)} = f(E - m_{L(R)})$ تابع توزیع فرمی برای الکترود SWCNT زیگزاگ چپ (راست) با پتانسیل الکتروشیمیایی $\mu_{L,R} = E_F \pm \frac{1}{2}eV$ و E_F انرژی فرمی است. همچنین e و h به ترتیب بار الکترون و ثابت پلانک است.

۳. نتایج عددی و شرح آن‌ها

در این بخش نتایج بدست آمده از محاسبات بر پایه فرمول‌بندی در نظر گرفته شده در بخش قبل را بیان می‌کنیم. محاسبات با در نظر گرفتن مقادیر عددی کمیت‌ها به صورت $\alpha_\circ = 0$ و $t_\circ = 2.71eV$ و $\nu = 0.2$ انجام شده است [۲۵ و ۲۶]. انرژی پرش در الکترودهای راست و

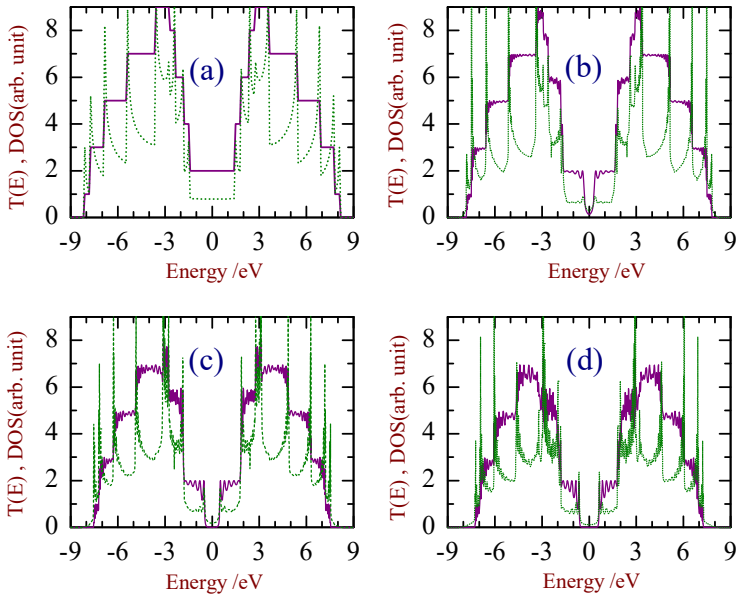
[1] Density of States (DOS)

چپ SWCNT و همچنین در پیوند ناحیه میانی با الکترودهای راست و چپ، $t_o = 2.71eV$ است. انرژی فرمی و دما به ترتیب $E_F = 0$ و $T = 11K$ در نظر گرفته می‌شوند. شکل ۲-a ساختار نواری SWCNT زیگزاگ (۰و۹) را در حضور کرنش تک‌محوری با $\varepsilon_t = 0.05$ نشان می‌دهد.



شکل ۲ (a) ساختار نواری SWCNT زیگزاگ (۰و۹) در حضور کرنش تک‌محوری با $\varepsilon_t = 0.05$ **(b)** چگالی حالت‌های الکترونی میانگین (نمودار چپ) و تابع گسیل الکترونی (نمودار راست) بر حسب انرژی برای پیوندگاه SWCNT زیگزاگ (۰و۹) در حضور کرنش تک‌محوری ($\varepsilon_t = 0.05$) و بدون کرنش تک‌محوری ($\varepsilon_t = 0$) با ۱۲ سلول واحد ($n_L = 12$) و **(c)** شکاف نواری SWCNT زیگزاگ (۰و۹) بر حسب کمیت کرنش تک‌محوری (ε_t)

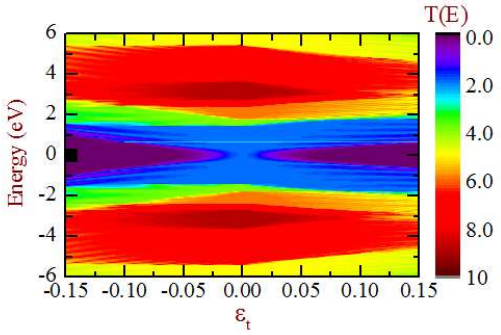
در محاسبه نوار انرژی SWCNT با طول بی‌نهایت، از روش تفاضل متناهی مؤثر همانند یک زنجیره یک بعدی بی‌نهایت استفاده کردیم [۲۷]. ملاحظه می‌گردد که کرنش تک‌محوری سبب تغییر در ساختار نوار انرژی می‌شود. در نبود کرنش تک‌محوری، SWCNT زیگزاگ (۰و۹) شکاف انرژی ندارد و دلیل باز شدن شکاف نواری، حضور کرنش تک‌محوری است. تغییرات تابع احتمال گسیل و چگالی حالت‌های الکترونی میانگین بر حسب انرژی در حضور کرنش تک‌محوری و با مقدار $\varepsilon_t = 0.05$ و ۱۲ سلول واحد ($n_L = 12$) در شکل ۲-b نشان داده شده است. نمودار تابع گسیل برای پیوندگاه SWCNT زیگزاگ (۰و۹) در غیاب کرنش، ساختاری پله‌ای دارد. هنگامی که کرنش تک‌محوری اعمال می‌گردد، این ساختار پله‌ای از بین می‌رود و تابع احتمال گسیل رفتاری نوسانی را اطراف پله‌ها نشان می‌دهد و اندازه احتمال گسیل کاهش می‌یابد. چگالی حالت‌های الکترونی میانگین و احتمال گسیل در نزدیکی انرژی فرمی در حضور کرنش تک‌محوری کاهش می‌یابند.



شکل ۳ نمودار تابع گسیل و چگالی حالت‌های الکترونی بر حسب انرژی برای پیوندگاه SWCNT زیگزاگ (۰و۹) با $n_L = 12$ به ترتیب برای کمیت‌های کرنش کششی (a) $\varepsilon_t = 0$ (b) 0.05، (c) 0.1 و (d) 0.15.

شکل ۲-c نمودار شکاف نواری SWCNT زیگزاگ (۰و۹) بر حسب کمیت کرنش تک‌محوری را نشان می‌دهد. همانطور که ملاحظه می‌گردد، رفتار شکاف انرژی برای کرنش کششی ($\varepsilon_t > 0$) و فشاری ($\varepsilon_t < 0$) متفاوت می‌باشد. برای کرنش کششی، با افزایش ε_t شکاف نواری به صورت کمابیش خطی افزایش می‌یابد. در حالی که برای کرنش فشاری با افزایش بزرگی ε_tشکاف نواری ابتدا افزایش یافته و به مقدار بیشینه 1.5eV می‌رسد و سپس کاهش می‌یابد. همچنین شیب افزایشی شکاف نواری برای کرنش فشاری بیشتر از کرنش کششی است.

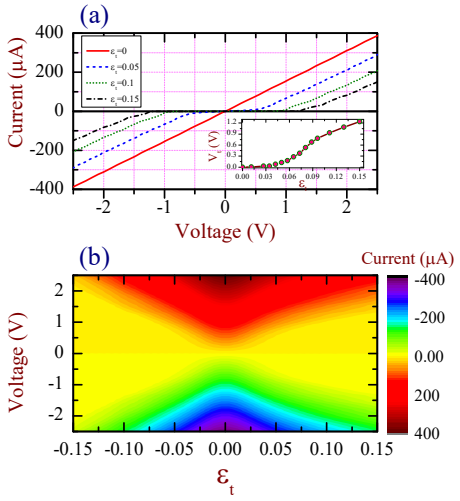
شکل ۳-a، ۳-b، ۳-c و ۳-d نمودارهای تابع گسیل و چگالی حالت‌های الکترونی بر حسب انرژی را با $n_L = 12$ به ترتیب برای کمیت‌های کرنش کششی $\varepsilon_t = 0$، 0.05، 0.1 و 0.15 نشان می‌دهند. با افزایش مقدار ε_t، احتمال گسیل به تدریج کاهش و دامنه نوسان احتمال گسیل افزایش می‌یابد. با افزایش ε_t، چگالی حالت‌های الکترونی و تابع گسیل در انرژی فرمی به دلیل باز شدن شکاف نواری به شدت کاهش می‌یابند. برای درک بهتر از ویژگی‌های ترابرد الکترونی پیوندگاه در حضور کرنش تک‌محوری، نمودار تابع گسیل الکترونی را بر حسب انرژی و ε_t در شکل ۴ رسم نموده‌ایم. ملاحظه می‌شود که تابع گسیل برای کرنش فشاری (مقادیر منفی ε_t) و کششی یکسان نمی‌باشد. کاهش احتمال گسیل حول انرژی فرمی با افزایش $|\varepsilon_t|$ برای کرنش فشاری بزرگتر از کرنش کششی است. نکته جالب این است که احتمال گسیل در انرژی فرمی به ازای $\varepsilon_t = -0.15$ صفر است درحالی‌که برای $\varepsilon_t = 0.15$ غیرصفر است. بنابراین گذار فلز به نیمرسانا برای کرنش فشاری دیده می‌شود.



شکل ۴ نمودار تابع گسیل الکترونی پیوندگاه SWCNT زیگزاگ (۰و۹) بر حسب انرژی و ε_t با $n_L = 12$.

شکل ۵-a، وابستگی نمودار جریان-ولتاژ به کرنش را در پیوندگاه SWCNT زیگزاگ (۹و۰) به ازای $n_L = 12$ نشان می‌دهد. ملاحظه می‌شود که در غیاب کرنش، نمودار جریان- ولتاژ رفتاری خطی دارد. با اعمال ولتاژ، پتانسیل الکتروشیمیایی دو الکترود نسبت به هم جابجا می‌شوند. هنگامی که یک تراز مولکولی بین این پنجره ولتاژ قرار بگیرد، جریان الکتریکی شارش می‌یابد. در نبود کرنش برای SWCNT زیگزاگ (۹و۰) شکاف نواری وجود ندارد، بنابراین ولتاژ آستانه برای روشن کردن جریان نداریم. در حضور کرنش کششی تک‌محوری، رفتار خطی برای جریان به دلیل وجود شکاف نواری در منطقه میانی به صورت کامل از بین می‌رود و در نتیجه ولتاژ آستانه برای روشن شدن جریان وجود دارد.

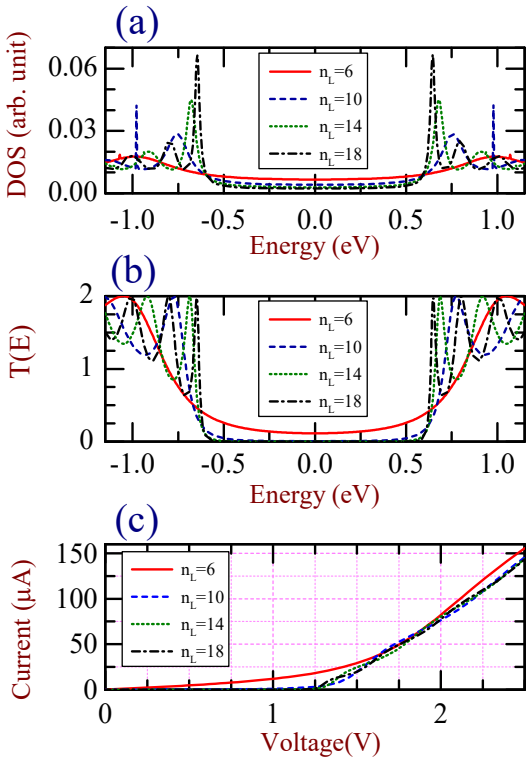
با افزایش ε_t به دلیل افزایش شکاف نواری، ولتاژ آستانه (V_t) نیز افزایش می‌یابد که در نمودار داخل شکل ۵-a نشان داده شده است. در شکل ۵-b نمودار جریان الکتریکی بر حسب ولتاژ و ε_t رسم شده است. روشن است که رفتار کلی جریان برای کرنش فشاری و کششی مشابه است بجز اینکه ولتاژ آستانه برای کرنش فشاری افزایش بیشتری دارد. افزون بر این، اندازه جریان برای کرنش کششی بزرگتر از کرنش فشاری برای مقادیر مساوی $|\varepsilon_t|$ است. از این رو می‌توان نتیجه گرفت که با تغییر قدرت و نوع کرنش می‌توان ولتاژ آستانه و جریان الکتریکی را تنظیم نمود و از این ویژگی‌ها می‌توان در طراحی ادوات نانوالکترونیک بهره برد.



شکل ۵ (a) نمودار جریان- ولتاژ به ازای کرنش‌های کششی مختلف به ازای $n_L = 12$. شکل کوچک: نمودار ولتاژ آستانه بر حسب کرنش کششی است. **(b)** نمودار جریان الکتریکی بر حسب ولتاژ و ε_t به ازای $n_L = 12$.

حال اثر طول نانولوله کربنی تک‌جداره (n_L) را بر ویژگی‌های ترابرد الکترونی پیوندگاه در حضور کرنش تک‌محوری بررسی می‌شود. شکل ۶-a و ۶-b به ترتیب نمودارهای چگالی حالت‌های الکترونی و تابع گسیل پیوندگاه SWCNT زیگزاگ (۹و۰) بر حسب انرژی الکترون فرودی با $\varepsilon_t = -0.1$ برای مقادیر مختلف تعداد سلول‌های واحد (n_L) را نشان می‌دهد.

با افزایش n_L، حالت‌های ترابردی از سمت چپ و راست پنجره انرژی به سمت انرژی فرمی نزدیک می‌شوند. از شکل ۶-a، مشاهده می‌شود که قلّه‌های چگالی حالت‌های الکترونی در نزدیکی انرژی فرمی با افزایش n_L، باریک‌تر و بزرگ‌تر شده‌اند.



شکل۶ (**a**) چگالی حالت‌های الکترونی، (**b**) تابع گسیل بر حسب انرژی و (**c**) مشخصه جریان- ولتاژ پیوندگاه SWCNT زیگزاگ (۹و۰) برای مقادیر مختلف طول منطقه میانی با $\varepsilon_t = -0.1$.

افزون بر این، با افزایش n_L از $n_L = 6$ تا $n_L = 18$، چگالی حالت‌های الکترونی در انرژی فرمی کاهش می‌یابد. تابع گسیل برای $n_L = 6$ در انرژی فرمی غیرصفر است و این نشان می‌دهد که ویژه‌حالت‌ها در انرژی فرمی گسترده هستند. با افزایش n_L تا مقدار $n_L = 18$، تابع گسیل در انرژی فرمی به صفر می‌رسد و بنابراین حالت‌ها در انرژی فرمی جایگزیده می‌شوند و گذار فلز به نیمرسانا را داریم. بنابراین می‌توان طول بحرانی برای گذار از حالت فلز به نیمرسانا را برابر $n_L = 18$ در نظر گرفت. شکل ۶-c، نمودار اثر n_L بر جریان الکتریکی را بر حسب ولتاژ با $\varepsilon_t = -0.1$ نشان می‌دهد. برای $n_L = 6$ ولتاژ آستانه وجود ندارد و افزایش n_L باعث بوجود آمدن ولتاژ آستانه (به دلیل کاهش شدید اندازه تابع گسیل در نزدیکی انرژی فرمی) می‌گردد.

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله، ترابرد الکترونی از راه پیوندگاه SWCNT زیگزاگ که یک SWCNT زیگزاگ (منطقه میانی) به الکترودهای نیمه‌بینهایت SWCNT زیگزاگ متصل شده، با استفاده از روش تابع گرین تعمیم‌یافته در چارچوب تقریب بستگی قوی، به صورت عددی بررسی شده است. نشان دادیم که ویژگی‌های ترابرد الکترونی پیوندگاه را به خوبی با اعمال کرنش تک‌محوری و تغییر طول نانولوله در منطقه میانی می‌توان تنظیم نمود. نتایج نشان می‌دهند که اعمال کرنش تک‌محوری می‌تواند شکاف نواری در SWCNT زیگزاگ را بوجود آورد و در نتیجه شاهد تغییرات زیادی در چگالی حالت‌های الکترونی، تابع گسیل و مشخصه جریان- ولتاژ سامانه هستیم. همچنین نشان دادیم که اعمال کرنش فشاری تأثیر بیشتری به نسبت کرنش کششی در باز کردن شکاف نواری در سامانه دارد. افزون بر این، حساسیت ترابرد الکترونی به طول منطقه میانی در حضور کرنش تک‌محوری بررسی شده است. با افزایش طول منطقه میانی، چگالی حالت‌های الکترونی در انرژی فرمی کاهش می‌یابد و تابع گسیل در انرژی فرمی به صفر می‌رسد و گذار فلز به نیمرسانا را شاهد هستیم. این نتایج می‌تواند درک بنیادی ما را از ترابرد الکترونی پیوندگاه‌های بر پایه نانولوله کربنی افزایش دهد که در طراحی ادوات نانوالکترونیک آینده سودمند است.

منابع

[1] Iijima, S. Nature 354 56 Iijima S and Ichihashi T 1993. *Nature*, ***363***, 603 (1991).

[2] Charlier, J. C., Blase, X., & Roche, S., Electronic and transport properties of nanotubes. *Reviews of modern physics*, ***79***(2), 677 (2007).

[3] Derycke V., Martel R., Appenzeller J., Avouris P., *Nano Letters **1**(9), 453-465* (2001).

[4] Bachtold, A., Hadley, P., Nakanishi, T., & Dekker, C., Logic circuits with carbon nanotube transistors. *Science*, ***294***(5545), 1317-1320 (2001).

[5] Saito, R., Fujita, M., Dresselhaus, G., & Dresselhaus, U. M., Electronic structure of chiral graphene tubules. *Applied physics letters*, ***60***(18), 2204-2206 (1992).

[6] Paulson, S., M. R. Falvo, N. Snider, A. Helser, T. Hudson, A. Seeger, R. M. Taylor, R. Superfine, and S. Washburn., In situ resistance measurements of strained carbon nanotubes. *Applied Physics Letters*, ***75***(19), 2936-2938 (1999).

[7] Tombler, Thomas W., Chongwu Zhou, Leo Alexseyev, Jing Kong, Hongjie Dai, Lei Liu, C. S. Jayanthi, Meijie Tang, and Shi-Yu Wu., Reversible electromechanical characteristics of carbon nanotubes underlocal-probe manipulation. *Nature*, ***405***(6788), 769-772 (2000).

[8] Maiti, A., Svizhenko, A., & Anantram, M. P., Electronic transport through carbon nanotubes: Effects of structural deformation and tube chirality. *Physical Review Letters*, ***88***(12), 126805 (2002).

[9] Cao, J., Wang, Q., & Dai, H., Electromechanical properties of metallic, quasimetallic, and semiconducting carbon nanotubes under stretching. *Physical review letters*, ***90***(15), 157601 (2003).

[10] Umeno, Y., Kitamura, T., & Kushima, A., Metallic–semiconducting transition of single-walled carbon nanotubes under high axial strain. *Computational materials science*, ***31***(1-2), 33-41 (2004).

[11] Zhang, Y., & Han, M., Band gap of carbon nanotubes under combined uniaxial–torsional strain. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, ***43***(10), 1774-1778 (2011).

[12] Chen, Y. R., Weng, C. I., & Sun, S. J., Electronic properties of zigzag and armchair carbon nanotubes under uniaxial strain. *Journal of Applied Physics*, ***104***(11), 114310 (2008).

[13] Sun, J., Yuan, K., Zhou, W., Zhang, X., Onoe, J., Kawazoe, Y., & Wang, Q., Low thermal conductivity of peanut-shaped carbon nanotube and its insensitive response to uniaxial strain. *Nanotechnology*, ***31***(11), 115701 (2019).

[14] Park, J., Pena, P., & Tekes, A., Thermal Transport Behavior of Carbon Nanotube–Graphene Junction under Deformation. *International Journal of Nanoscience*, ***19***(02), 1950013 (2020).

[15] Güemes, A., Pozo Morales, A. R., Fernandez-Lopez, A., Sanchez-Romate, X. X. F., Sanchez, M., & Ureña, A., Directional Response of Randomly Dispersed Carbon Nanotube Strain Sensors. *Sensors*, ***20***(10), 2980 (2020).

[16] Faizabadi S.E., Kargar Z., *Iranian Journal of Physics Research **12** (1)*, 1-8 (2012) (in Persian)

[17] Prins, F., Barreiro, A., Ruitenberg, J. W., Seldenthuis, J. S., Aliaga-Alcalde, N., Vandersypen, L. M., & van der Zant, H. S., Room-temperature gating of molecular junctions using few-layer graphene nanogap electrodes. *Nano letters*, ***11***(11), 4607-4611 (2011).

[18] Marquardt, C.W., Grunder, S., Błaszczyk, A., Dehm, S., Hennrich, F., Löhneysen, H.V., Mayor, M. and Krupke, R., Electroluminescence from a single nanotube–molecule–nanotube junction. *Nature nanotechnology*, ***5***(12), 863-867 (2010).

[19] Kim, W. Y., Kwon, S. K., & Kim, K. S., Negative differential resistance of carbon nanotube electrodes with asymmetric coupling phenomena. *Physical Review B*, ***76***(3), 033415 (2007).

[20] Harrison W., *Electronic structure and properties of solids* (Freeman Press, San Francisco) (1980).
[21] Yoon, Y., & Guo, J., Analysis of strain effects in ballistic carbon nanotube FETs. *IEEE Transactions on Electron Devices*, ***54***(6), 1280-1287 (2007).
[22] Natsuki, T., Tantrakarn, K., & Endo, M. J. A. P. A., Effects of carbon nanotube structures on mechanical properties. *Applied Physics A*, ***79***(1), 117-124 (2004).
[23] Sancho, M. L., Sancho, J. L., Sancho, J. L., & Rubio, J., Highly convergent schemes for the calculation of bulk and surface Green functions. *Journal of Physics F: Metal Physics*, ***15***(4), 851 (1985).
[24] Datta, S., *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge university press (1997).
[25] Wilder, J. W., Venema, L. C., Rinzler, A. G., Smalley, R. E., & Dekker, C., Electronic structure of atomically resolved carbon nanotubes. *Nature*, ***391***(6662), 59-62 (1998).
[26] Sánchez-Portal, D., Artacho, E., Soler, J. M., Rubio, A., & Ordejón, P., Ab initio structural, elastic, and vibrational properties of carbon nanotubes. *Physical Review B*, ***59***(19), 12678 (1999).
[27] Dutta, P., Maiti, S. K., & Karmakar, S. N., Positional dependence of energy gap on line defect in armchair graphene nanoribbons: Two-terminal transport and related issues. *Journal of Applied Physics*, ***114***(3), 034306 (2013).

© 2020 Alzahra University, Tehran, Iran. This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/).