

Table 1: Nanotubos Zigzag

(n, m)	$d_t^{teo}(\text{\AA})$	$d_t^{sim}(\text{\AA})$	$P_c(GPa)$	$B_o(GPa)*$	$\frac{\Delta V}{V_o}$
(10,0)	7,82	7,91	15,38	262,84	0,21991
(11,0)	8,61	8,68	10,16	237,49	0,24168
(12,0)	9,39	9,46	7,57	229,94	0,30513
(13,0)	10,17	10,23	5,63	211,99	0,33622
(14,0)	10,96	11,00	4,18	217,03	0,37513
(15,0)	11,74	11,78	3,36	141,94	0,38173
(16,0)	12,52	12,56	2,21	131,92	0,41352
(17,0)	13,30	13,34	2,02	168,72	0,45149
(18,0)	14,09	14,11	1,40	142,68	0,45392
(19,0)	14,87	14,89	1,01	145,65	0,46992
(20,0)	15,65	15,67	1,18	141,87	0,51345

*O valor do módulo de Bulk foi calculado no intervalo de 0,0GPa a 2,5GPa.