

# COVALENT-BINDING CARBON NANOTUBE: SIMULATION OF FORMATION MECHANISMS AND ENERGY CHARACTERISTICS

**E.E. Mikheeva<sup>\*</sup>, L.A. Chernozatonskii, T.Yu. Astahova**  
Institute of Biochemical Physics, Russian Academy of Sciences,  
Kosygin str. 4, Moscow, 119991 Russia

## Introduction

In recent time the building of “nanonet” from nanoobjects have been very important in nanoelectronics. Process of nanotube’s polymerization is one of resources of the building of “nanonet”. Carbon nanotube “nanonets” are also interested as molecular gas storages [1].

## Results and considerations

In this work we consider covalent-junction combinations from nanotubes with various electronic properties (metallic properties and semiconducting properties). We consider step-by-step mechanism of formation X- and T-structures by covalent junction of nanotubes, define potential barriers and P-T phase diagrams. The energy simulation has shown that the investigated structures are stable.

It was shown that T-junction of (8,0) nanotubes is formed by 2+2 cyclo-addition with small potential barrier ( $\sim 2$  eV). This allow to predict their formation in certain condition experiments.

- The simulation use molecular dynamics method with empirical bond-order potential that was parameterized by Brenner [2] including long-range interaction [3].

## Conclusions

Investigation of these structures is very important for formation of materials with “nanonet” from covalent-binding nanotubes possessing various characteristics including specific transport and elastic properties.

## References

1. Synthesis, Structure, Properties and Applications ed. by M.S. Dresselhaus et al., Springer, 2001.
2. D.W. Brenner, et al. J. Phys.: Condens. Matter 14, 783 (2002).
3. Z. Mao, A. Garg, S.B. Sinnott Nanotechnology 10, 273 (1999).

---

\* Fax: +7-(095)-137-4101 E-mail: elenamih@mail.ru

# КОВАЛЕНТНО-СВЯЗАННЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБЫ: МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК

Михеева Е.Э.\*, Чернозатонский Л.А., Астахова Т.Ю.

Институт Биохимической физики РАН,  
Ул. Косыгина 4, Москва, 119991 Россия

## Введение

В настоящее время для наноэлектроники важно конструирование «наносетей» из нанобъектов. Одна из возможностей создания подобных сетей – это процесс полимеризации элементов из различных по электронным свойствам нанотруб. «Наносети» из углеродных нанотруб также интересны для применения в качестве хранителей молекулярных газов [1].

## Результаты и обсуждение

В данной работе рассматриваются комбинации ковалентных соединений из нанотруб с различающимися электронными свойствами (металлическими и полупроводниковыми). Подробно рассмотрен процесс образования структуры X- и T-типов путем ковалентного соединения нанотруб, определены барьеры реакции и P-T фазовые диаграммы. Расчет энергетических характеристик показал, что исследуемые структуры представляют собой устойчивые соединения.

В частности, показано, что T- соединение из (8,0) нанотруб получается при 2+2 циклоприсоединении шапки одной трубы к поверхности трубы-перекладины при реакции с небольшим энергетическим барьером (~2 эВ). Это позволяет предсказать их получение при

определенных условиях в экспериментах с применением сравнительно небольших давлений и температур, а также при сваривании электронным пучком небольшой мощности.

Для расчета энергий применялся метод молекулярной динамики с потенциалом Бреннера [2] и с учетом взаимодействия Ван-дер-Ваальса [3].

## Заключение

Исследование рассматриваемых структур важно для формирования материалов с «сеткой» из ковалентно-связанных нанотруб, которые будут обладать многофункциональными характеристиками, включая специфические транспортные и упругие свойства.

## Литература

4. Synthesis, Structure, Properties and Applications ed. by M.S. Dresselhaus et al., Springer, 2001.
5. D.W. Brenner, et al. J. Phys.: Condens. Matter 14, 783 (2002).
6. Z. Mao, A. Garg, S.B. Sinnott Nanotechnology 10, 273 (1999).

---

\* Факс: +7-(095)-137-4101 E-mail: elenamih@mail.ru