

Базисная конфигурация Y -соединений однослойных углеродных нанотрубок симметрии D_{3h} : структура и классификация

© С.В. Лисенков, И.В. Пономарева, Л.А. Чернозатонский

Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук,
119991 Москва, Россия

E-mail: lisenkov@sky.chph.ras.ru

(Поступила в Редакцию 5 августа 2003 г.

В окончательной редакции 29 декабря 2003 г.)

Исследована структура и предложена классификация Y -соединений однослойных углеродных нанотрубок симметрии D_{3h} , содержащих топологические дефекты в виде шести гептагонов или трех октагонов, расположенных непосредственно в областях сшивки каждой пары нанотрубок, образующих Y -соединения. Показано, что пары гептагонов в Y -соединении, образованном нанотрубками типа „зигзаг“, могут располагаться двумя способами и трансформироваться друг в друга с помощью преобразования Стоун-Валеса $(6, 7, 7, 6) \leftrightarrow (7, 6, 7, 6)$, а октагон и пары гептагонов в Y -соединении, образованном нанотрубками „кресельного“ типа, трансформируются друг в друга включением или исключением C_2 -кластера. Предложен способ построения таких Y -соединений.

Работа выполнена при поддержке Российской научно-технической программы „Актуальные направления в физике конденсированных сред“ (направление „Фуллерены и атомные кластеры“), Российской программы „Низкотемпературные квантовые структуры“ (проект № 9.21) и INTAS (грант N 00-237).

1. Введение

После открытия углеродных нанотрубок (УНТ) Ииджимой [1] появилось большое число экспериментальных [2–6] и теоретических [6–10] работ, посвященных изучению мультитерминальных структур из УНТ, а именно соединений L -, X -, Y - и T -типов. Было показано, что такие структуры могут использоваться в качестве нанотранзисторов и нанодиодов [11–18].

Известно, что в зависимости от диаметра и хиральности, которые определяются хиральным вектором (n, m) , где n и m — целые числа [19], однослойные УНТ могут быть либо проводящими (тип (n, n) или (n, m) , $n = m + 3q$), либо полупроводящими (тип (n, m) , $n \neq m + 3q$, q — целое). Таким образом, мультитерминальные соединения могут быть образованы из различных по проводимости нанотрубок. В 1992 г. была предсказана возможность образования непрерывного соединения из двух различных нанотрубок при введении пентагон-гептагонной пары [7,8]. Если одна из двух нанотрубок является металлической, а другая полупроводящей, то их гетеросоединение будет представлять собой выпрямляющий диод [20,21]. Такие двухтерминальные соединения недавно наблюдались экспериментально [22,23].

Для использования Y -соединений в электронных устройствах требуется большой выход однородных по форме и размерам соединений, поэтому первые экспериментальные наблюдения Y -соединений УНТ [2] не привлекли особого внимания ученых из-за сложности получения однородных структур. Лишь совсем недавно были разработаны контролируемые способы получения Y -соединений при использовании алюминиевых шаблонов [3], а также при пиролизе органометаллических

продуктов [5]. Первым из указанных методов [3] были получены Y -соединения со „стволом“, превышающим в диаметре „ветви“, и острым углом между ними, а в результате синтеза методом химического парового осаждения были получены Y -соединения УНТ с одинаковыми углами (120°) между всеми нанотрубками [5].

2. Структура и классификация Y -соединений

С топологической точки зрения образование Y -соединений из нанотрубок возможно только при наличии топологических дефектов между нанотрубками, образующими соединение. Как правило, эти дефекты являются пентагонами, гептагонами и октагонами. Количество топологических дефектов в таких Y -соединениях может быть определено из формулы Эйлера для многогранников произвольного рода G [24]

$$N(7) + 2N(8) - N(5) = 12G - 12, \quad (1)$$

где $N(5)$, $N(7)$ и $N(8)$ — суммарное число пентагонов, гептагонов и октагонов соответственно. Количество гексагонов в таком многограннике произвольно. При бездефектном слиянии двух Y -соединений образуется замкнутая поверхность второго рода. Для такой поверхности суммарное число дефектов в 2 раза больше, чем в каждом из двух Y -соединений, при слиянии которых она образована:

$$N(5) = 2n(5), \quad N(7) = 2n(7), \quad N(8) = 2n(8), \quad (2)$$

где $n(5)$, $n(7)$, $n(8)$ — число пентагонов, гептагонов и октагонов в таком Y -соединении. Тогда формула (1) с

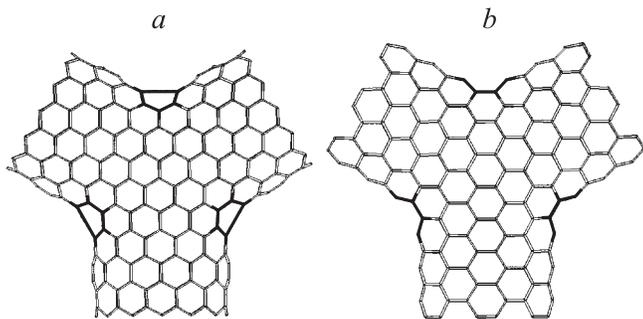


Рис. 1. Y_b -соединения УНТ. *a* — „зигзаг“ типа (12,0), дефекты шести гептагонов; *b* — „кресельного“ типа (6,6), дефекты трех октагонов. Дефекты обозначены жирными линиями.

учетом (2) может быть переписана следующим образом:

$$n(7) + 2n(8) - n(5) = 6. \quad (3)$$

Заметим, что в Y -соединении могут присутствовать пентагоны в паре с дополнительными гептагонами, однако наличие таких пар не является обязательным. Поэтому в данной работе мы полагаем, что $n(5) = 0$.

Мы рассматриваем только Y -соединения УНТ симметрии D_{3h} (ось третьего порядка C_3 ; три плоскости симметрии σ_v , содержащие эту ось, и плоскость симметрии, перпендикулярная ей), состоящие из нехиральных нанотрубок: „кресельного“ типа (n, n) и типа „зигзаг“ $(n, 0)$. Они содержат дефекты, расположенные в областях сшивки нанотрубок (рис. 1). Такие соединения УНТ будем называть базисными Y_b -соединениями

(индекс b означает базисный), так как все остальные Y -соединения симметрии D_{3h} могут быть получены из них путем различных преобразований (преобразования по типу Стоун–Валеса, включение/исключение атомов, атомных кластеров или гексагоновых колец).

Y_b -соединения образуются из нанотрубок одного типа с одинаковыми парами индексов. Более того, только нанотрубки с четными индексами n могут участвовать в образовании такого соединения, что является следствием наличия плоскостей симметрии группы симметрии D_{3h} , причем $n \geq 2$ для нанотрубок „кресельного“ типа, $n \geq 4$ для нанотрубок типа „зигзаг“. Вследствие наличия оси симметрии третьего порядка для Y_b -соединения существует только два возможных набора топологических дефектов: шесть гептагонов или три октагона (по два гептагона или одному октагону между каждой парой нанотрубок). Все возможные варианты расположения дефектов в области сшивки любой пары нанотрубок в Y_b -соединении приведены на рис. 2.

Из рис. 2 видно, что два гептагона в областях сшивки нанотрубок типа „зигзаг“ могут располагаться двумя различными способами (рис. 2, *a* и *b*) и переходят друг в друга путем преобразования Стоун–Валеса [25] $(6, 7, 7, 6) \leftrightarrow (7, 6, 7, 6)$. Из двух вариантов расположения гептагонов в качестве основного выбираем вариант, соответствующий рис. 2, *a*. Заметим, что ни преобразованием Стоун–Валеса, ни исключением или включением C_2 -кластера невозможно трансформировать октагон (рис. 2, *c*) в два гептагона и наоборот. Исходя из этого, для Y_b -соединений нанотрубок типа „зигзаг“ основными наборами дефектов будут шесть гептагонов (расположе-

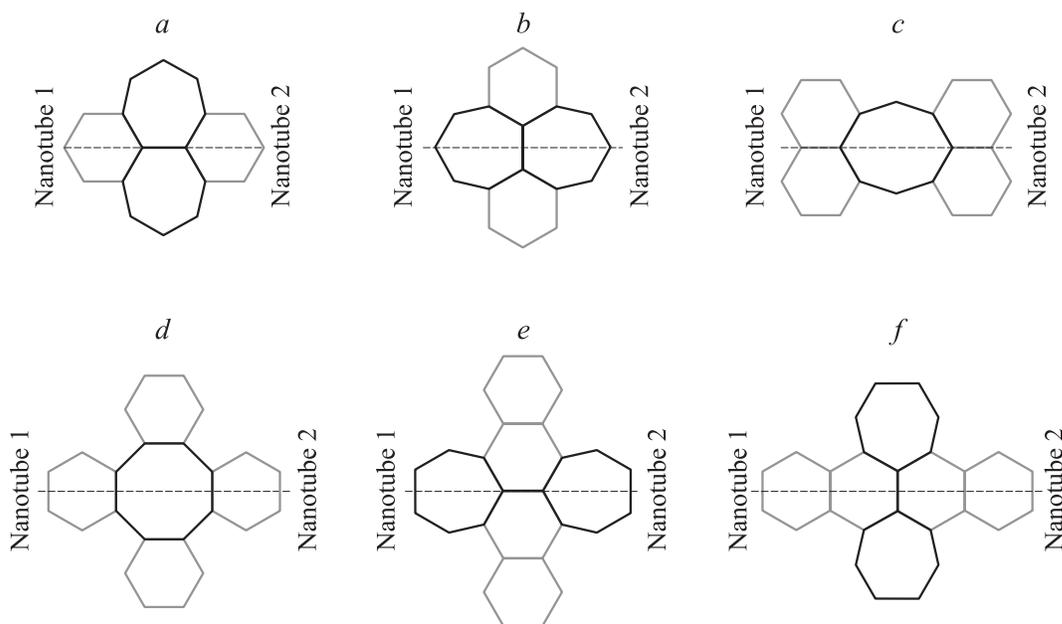


Рис. 2. Расположение дефектов между нанотрубками, образующими Y_b -соединения. Для нанотрубок типа „зигзаг“: *a, b* — два гептагона, *c* — октагон. Для нанотрубок „кресельного“ типа: *d* — октагон, *e, f* — два гептагона. Трансформация дефектов ($a \leftrightarrow b$) происходит с помощью преобразования Стоун–Валеса $(6-7-7-6) \leftrightarrow (7-6-7-6)$, а трансформация дефектов ($d \leftrightarrow e$ и $d \leftrightarrow f$) — включением или исключением C_2 -кластера. Штриховая линия — пересечение Y -соединения с плоскостью симметрии σ_v . Дефекты обозначены жирными линиями.

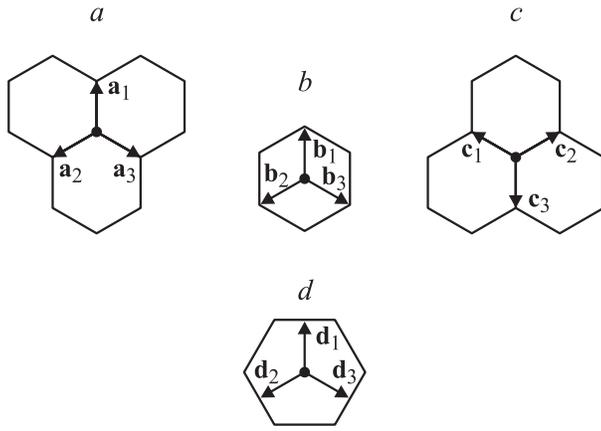


Рис. 3. Типы интерфейсов и связанные с ними системы опорных векторов Y_b -соединений УНТ. Для нанотрубок типа „зигзаг“: a — тип A ; b — тип B ; c — тип C . Для нанотрубок „кресельного“ типа: d — тип D . $\mathbf{a}_i, \mathbf{b}_i, \mathbf{c}_i, \mathbf{d}_i$ — векторы СОВ.

ние каждой пары гептагонов показано на рис. 2, a) и три октагона (расположение каждого октагона представлено на рис. 2, c).

В Y_b -соединениях, составленных из нанотрубок „кресельного“ типа, возможна трансформация дефектов один октагон (рис. 2, d) → два гептагона (рис. 2, e или 2, f) при включении C_2 -кластера, соединяющего два гептагона. Обратная трансформация возможна при исключении C_2 -кластера. Поэтому в качестве основного дефекта для соединений такого типа нанотрубок выбираем октагон. Следовательно, для Y_b -соединений нанотрубок „кресельного“ типа основным набором дефектов следует считать три октагона (расположение каждого октагона показано на рис. 2, d). Из него можно получить Y_b -соединения с шестью гептагонами в двух вариантах, где каждая пара располагается либо в соответствии с рис. 2, e , либо в соответствии с рис. 2, f .

Рассмотрим подробно структуру Y_b -соединений. В случае Y_b -соединений, состоящих из нанотрубок типа „зигзаг“, ось симметрии третьего порядка может проходить либо через один из атомов двухточечного базиса гексагональной сети, либо через центр гексагонового кольца. Две точки Y_b -соединений, через которые проходит ось C_3 , назовем интерфейсом. Тогда рассматриваемое соединение может иметь три различных типа интерфейса (A, B, C), каждому из которых соответствует система опорных векторов (СОВ). Сопоставим интерфейсу типа A СОВ $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$, интерфейсу типа B — $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3)$, интерфейсу типа C — $(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3)$. Центр каждой СОВ совпадает с одной из точек интерфейса (рис. 3, $a-c$). Длины векторов в СОВ удовлетворяют соотношению

$$|\mathbf{a}_i| = |\mathbf{b}_i| = |\mathbf{c}_i| = a_{C-C}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (4)$$

где a_{C-C} — расстояние между соседними атомами в графитовой плоскости.

Y_b -соединения нанотрубок „кресельного“ типа имеют только один тип интерфейса (D) и соответственно одну

СОВ — (d_1, d_2, d_3) (рис. 3, d). Для векторов $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \mathbf{d}_3$ справедливо соотношение

$$|\mathbf{d}_i| = \left(\sqrt{3}/2\right) a_{C-C}. \quad (5)$$

В основу классификации положены следующие параметры Y_b -соединений: тип нанотрубок („зигзаг“ или „кресельный“), тип дефектов (шесть гептагонов или три октагона), тип интерфейса (A, B, C или D). Заметим, что эти три параметра не являются независимыми. Поэтому для однозначного определения структуры Y_b -соединений необходимо и достаточно знать любые два из трех параметров.

Для нахождения взаимосвязи между параметрами, определяющими Y_b -соединение нанотрубок типа „зигзаг“, воспользуемся тем обстоятельством, что тип интерфейса (A, B, C) повторяется при изменении индекса n нанотрубки на 6. Таким образом, индексы n нанотрубок, имеющих один и тот же тип интерфейса, образуют арифметическую прогрессию, общий член которой равен 6. Тогда формула для k -го члена такой прогрессии имеет вид

$$n_k = n_0 + 6(k - 1), \quad (6)$$

где $n_k = n$ — индекс нанотрубок в Y_b -соединении; n_0 — минимальное значение индекса нанотрубок в Y_b -соединении, имеющем интерфейс данного типа, k — порядковый номер члена в арифметической прогрессии. Так, для Y_b -соединения с набором топологических дефектов в форме шести гептагонов: для интерфейса типа A $n_0 = 6$; для интерфейса типа B $n_0 = 8$; для интерфейса типа C $n_0 = 10$. Образует три арифметические прогрессии: $n = 6 + 6(k - 1)$ для интерфейса типа A ; $n = 8 + 6(k - 1)$ для интерфейса типа B ; $n = 10 + 6(k - 1)$ для интерфейса типа C . Если теперь выразить в формулах (4)–(6) k через n , то получим эффективный способ определения типа интерфейса по заданному индексу нанотрубки n : порядковый номер члена в арифметической прогрессии является целым числом; следовательно, выбирая из трех формул, соответствующих трем различным типам интерфейса, ту, в которой число k является целым, мы определим тип интерфейса для заданного индекса n нанотрубки. По аналогии могут быть получены формулы для определения типа интерфейса топологических дефектов в форме трех октагонов. Эти формулы приведены в первом столбце табл. 1. Верхняя часть этой таблицы соответствует Y_b -соединениям, образованным нанотрубками типа „зигзаг“, а нижняя часть — Y_b -соединениям, образованным нанотрубками „кресельного“ типа. Второй и третий столбцы таблицы содержат информацию о типе интерфейса, связанного с каждой арифметической прогрессией, для различных типов дефектов.

Для удобства построения Y_b -соединений мы ввели вектор-указатель на дефект \mathbf{R}_L (где индекс $L = H$ в случае гептагона и $L = O$ в случае октагона), начало которого совпадает с центром СОВ. Этот вектор упирается

Таблица 1. Взаимосвязь между тремя основными параметрами Y_b -соединения: тип нанотрубок („зигзаг“ или „кресельный“), тип дефектов (шесть гептагонов или три октагона), тип интерфейса (A, B, C, D)

k	Тип интерфейса	
	Шесть гептагонов	Три октагона
1	2	3
Тип „зигзаг“ ($n, 0$)		
$(n+2)/6$	C	A
$n/6$	A	B
$(n-2)/6$	B	C
„Кресельный“ тип (n, n)		
$n/2$	–	D

Примечание. $k > 0$ — целое число, n — первый индекс нанотрубок.

Таблица 2. Число атомов в коннекторе Y_b -соединений

Тип дефектов	Число атомов в коннекторе	
	Нанотрубка ($n, 0$)	Нанотрубка (n, n)
Шесть гептагонов	$(n+4)^2/2 - 6$ (рис. 2, a)	$3(n^2 + 2n + 4)/2, n \geq 4$ (рис. 2, e)
–,–	$(n+10)^2/2 - 48$ (рис. 2, b)	$3(n^2 + 14n + 4)/2$ (рис. 2, f)
Три октагона	$(n+6)^2/2 - 18$	$3(n^2 + 6n)/2$

Примечание. В скобках приводятся ссылки на рисунки, на которых показано расположение гептагонов в коннекторе.

своим концом в дефект (в вершину гептагона и середину стороны октагона). Длина вектора-указателя является функцией индекса нанотрубки n : для нанотрубки типа „зигзаг“:

$$|\mathbf{R}_H| = \frac{n}{2} - 2, \quad (7)$$

$$|\mathbf{R}_O| = \frac{n}{2} - 1; \quad (8)$$

для нанотрубки „кресельного“ типа:

$$|\mathbf{R}_O| = n - 1. \quad (9)$$

Далее приводится алгоритм, позволяющий построить Y_b -соединение при помощи вектора-указателя.

Таким образом, зная любые два из трех основных параметров Y_b -соединения, можно однозначно определить его структуру, восстановив третий параметр с помощью табл. 1. Расположение дефектов показано на рис. 2, a, c, d .

Приведем один из возможных алгоритмов построения Y_b -соединений. Пусть заданы тип нанотрубок и их индекс n .

1) В табл.1 выбираем ту часть, которая соответствует заданному типу нанотрубок, входящих в Y_b -соединение („зигзаг“ или „кресельный“).

2) Подставляя индекс нанотрубки n в формулы первого столбца, определяем строку таблицы, для которой число k целое.

3) На пересечении выбранной в пункте 2 строки и столбца, соответствующего заданному набору дефектов, находим тип интерфейса Y_b -соединения.

4) Определяем длину вектора-указателя, соответствующего заданному набору дефектов (см. (7)–(9)).

5) Далее в гексагоновой сети строим СОВ для данного типа интерфейса (рис. 3) и откладываем вдоль каждого ее вектора вектор-указатель \mathbf{R}_L .

6) Вырезаем из гексагоновой сети треугольный фрагмент, в вершинах которого расположены гексагоны, в которые упирается вектор-указатель. Производим замену этих гексагонов на дефекты (гептагоны для \mathbf{R}_H , „половинки“ октагонов для \mathbf{R}_O). Затем полученный треугольник зеркально отображаем в плоскости, перпендикулярной оси C_3 . Далее совмещаем вершины этих двух треугольников.

Полученная фигура является шаблоном для образования Y_b -соединения, так как она содержит все топологические дефекты, определяющие его геометрическую форму. Назовем такой шаблон коннектором трех нанотрубок [8].

В табл. 2 приведено число атомов в коннекторе Y_b -соединений.

В следующем разделе на двух примерах поясним схему построения Y_b -соединений.

3. Примеры построения Y_b -соединений

3.1. Пример построения Y_b -соединения из нанотрубок типа „зигзаг“. Построим Y_b -соединение $(12,0)$ – $(12,0)$ – $(12,0)$ с топологическими дефектами в форме шести гептагонов. Применим наш алгоритм.

1) Нанотрубке типа „зигзаг“ соответствует верхняя часть табл. 1. Индекс нанотрубки $n = 12$.

2) Поочередно подставляем число 12 в три формулы для k (строки 1–3 табл. 1) и выбираем строку, для которой k целое. При $n = 12$ $k = 2$ во второй строке.

3) Поскольку топологическими дефектами являются шесть гептагонов, Y_b -соединение имеет интерфейс типа A (пересечение второй строки и второго столбца).

4) По формуле (7) определяем длину вектора-указателя: $|\mathbf{R}_H| = 4$.

5) Типу интерфейса A соответствует СОВ ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$). Строим в гексагоновой сети эту СОВ (рис. 3, a) и откладываем вдоль каждого вектора $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ вектор-указатель $\mathbf{R}_H = 4\mathbf{a}_i$ (рис. 4, a).

6) Вырезаем из гексагоновой сети треугольник, в вершинах которого расположены гексагоны, в которые упирается вектор-указатель. Затем заменяем эти гексагоны на гептагоны (рис. 4, b). Далее отображаем этот треугольник в плоскости, перпендикулярной оси C_3 , и совмещаем полученные треугольники по

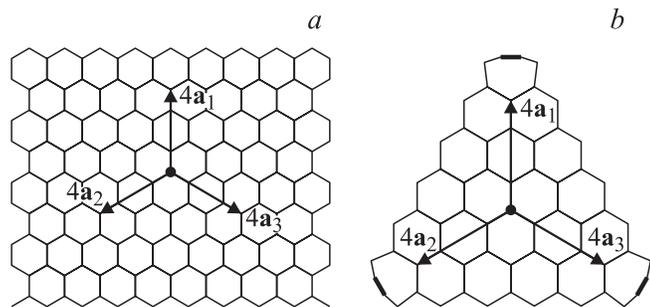


Рис. 4. Схема построения Y_b -соединения из нанотрубок (12,0). *a* — система опорных векторов типа A с вектором-указателем $\mathbf{R}_H = 4\mathbf{a}_i$; *b* — треугольный фрагмент гексагоновой сети после замены гексагонов, в которые упирается вектор-указатель, на гептагоны. Жирные линии — связи гептагона, по которым производится совмещение.

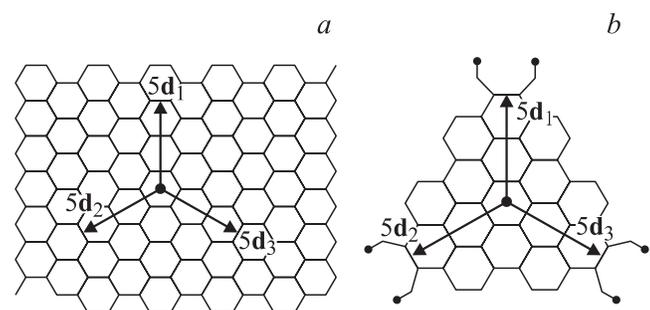


Рис. 5. Схема построения Y_b -соединения из нанотрубок (6,6). *a* — COB типа D с вектором-указателем $\mathbf{R}_O = 5\mathbf{d}_i$. *b* — треугольный фрагмент гексагоновой сети после замены гексагонов, в которые упирается вектор-указатель, на „половинки“ октагонов. Темные кружки — атомы октагона, по которым производится совмещение.

связям (рис. 4, *b*). В результате получаем коннектор Y_b -соединения (12,0)–(12,0)–(12,0). Присоединяя нанотрубки (12,0) к каждому из трех терминалов этого коннектора, получаем Y_b -соединение, показанное на рис. 1, *a*.

Отметим, что для получения Y_b -соединения с топологическими дефектами в форме шести гептагонов, расположенных в соответствии с рис. 2, *b*, необходимо применить к каждой паре гептагонов преобразование Стоун–Валеса (6, 7, 7, 6) \leftrightarrow (7, 6, 7, 6).

3.2. Пример построения Y_b -соединения из нанотрубок „кресельного“ типа. Рассмотрим схему построения Y_b -соединения (6,6)–(6,6)–(6,6) с топологическими дефектами в форме трех октагонов. С помощью приведенного выше алгоритма осуществим процедуру построения.

1) „Кресельному“ типу нанотрубки соответствует нижняя часть табл. 1, первый индекс нанотрубки равен 6.

2) Y_b -соединения нанотрубок „кресельного“ типа имеют только один тип интерфейса — тип D .

3) По формуле (9) определяем длину вектора-указателя: $|\mathbf{R}_O| = 5$.

4) Для построения Y_b -соединения с интерфейсом типа D строим COB с векторами \mathbf{d}_1 , \mathbf{d}_2 , \mathbf{d}_3 и откладываем вдоль каждого ее вектора вектор-указатель $\mathbf{R}_O = 5\mathbf{d}_i$ (рис. 5, *a*).

5) Вырезаем из гексагоновой сети треугольник, в вершинах которого расположены гексагоны, в которые упирается вектор-указатель. Затем заменяем эти гексагоны на „половинки“ октагонов (рис. 5, *b*). Далее отображаем этот треугольник в плоскости, перпендикулярной оси C_3 , и, совмещая два полученных треугольника по атомам октагона (темные кружки на рис. 5, *b*), получаем коннектор Y_b -соединения (6,6)–(6,6)–(6,6). Присоединяя нанотрубки (6,6) к каждому из трех терминалов этого коннектора, получаем Y_b -соединение, показанное на рис. 1, *b*.

Отметим, что, если мы хотим построить Y_b -соединение с топологическими дефектами в форме шести гептагонов (в любом варианте), мы должны построить Y_b -соединение с дефектами в форме трех октагонов, а далее добавить три C_2 -кластера (рис. 2, *d, e*).

4. Заключение

Таким образом, в данной работе предложена классификация Y -соединений УНТ симметрии D_{3h} базисной конфигурации, содержащих в области сочленения каждой пары нанотрубок топологические дефекты в форме шести гептагонов или трех октагонов. В основу классификации положена взаимоднозначная связь трех основных параметров Y_b -соединения: типа нанотрубок, типа дефектов и типа интерфейса. Именно этими основными параметрами определяются электронные и транспортные свойства данных соединений [17], поэтому знание взаимоднозначной связи между ними является эффективным при построении элементов наночастиц и исследования свойств таких соединений. Показано, что в таких базисных Y_b -соединениях возможна трансформация дефектов друг в друга либо с помощью преобразования Стоун–Валеса, либо включением или исключением C_2 -кластера. На основе предложенной классификации разработан эффективный способ построения базисных Y_b -соединений.

Авторы благодарят И.В. Станкевича (ИНЭОС РАН) за обсуждение и ценные замечания.

Список литературы

- [1] S. Iijima. Nature **345**, 6348, 56 (1991).
- [2] D. Zhou, S. Seraphin. Chem. Phys. Lett. **238**, 4–6, 286 (1995).
- [3] J. Li, C. Papadopoulos, J. Xu. Nature **402**, 6759, 253 (1999).
- [4] P. Nagy, R. Ehlich, L.B. Biro, J. Gjulai. Appl. Phys. A **70**, 4, 481 (2000).
- [5] B.C. Satishkumar, P.J. Thomas, A. Govindraj, C.N.R. Rao. Appl. Phys. Lett. **77**, 16, 2530 (2000).

- [6] M. Terrones, F. Banhart, N. Grobert, J.C. Charlier, H. Terrones, P.M. Ajayan. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 7, 075 505 (2002).
- [7] B.I. Dunlap. *Phys. Rev. B* **46**, 3, 1933 (1992).
- [8] L.A. Chernozatonskii. *Phys. Lett. A* **170**, 1, 37 (1992).
- [9] G.E. Scuseria. *Chem. Phys. Lett.* **195**, 5–6, 534 (1992).
- [10] L.A. Chernozatonskii. *Phys. Lett. A* **172**, 3, 173 (1992).
- [11] M. Menon, D. Srivastava. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 22, 4453 (1997).
- [12] C. Papadopoulos, A. Rakitin, J. Li, A.S. Vedeneev, J.M. Xu. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 16, 3476 (2000).
- [13] A.N. Andriotis, M. Menon, D. Srivastava, L. Chernozatonskii. *Phys. Rev. B* **65**, 16, 165 416 (2002).
- [14] G. Treboux, P. Lapstun, K. Silverbrook. *Chem. Phys. Lett.* **306**, 5–6, 402 (1999).
- [15] A.N. Andriotis, M. Menon, D. Srivastava, I. Ponomareva, L. Chernozatonskii. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 14 (2003).
- [16] G. Treboux, P. Lapstun, Z. Wu, K. Silverbrook. *J. Phys. Chem. B* **103**, 41, 8671 (1999).
- [17] G. Treboux. *J. Phys. Chem. B* **103**, 47, 10 378 (1999).
- [18] A.N. Andriotis, M. Menon, D. Srivastava, L. Chernozatonskii. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 6, 066 802 (2001).
- [19] R. Saito, M. Fujita, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. *Phys. Rev. B* **46**, 3, 1804 (1992).
- [20] P. Lambin, A. Fonseca, J. Vigneron, J.B. Nagy, A.A. Lucas. *Chem. Phys. Lett.* **245**, 1, 85 (1995).
- [21] L. Chico, V.H. Crespi, L.X. Benedict, S.G. Louie, M.L. Cohen. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 6, 971 (1996).
- [22] J. Han, M.P. Anantram, R. Jaffe, J. Kong, H. Dai. *Phys. Rev. B* **57**, 23, 14 983 (1998).
- [23] Z. Yao, H.W.C. Postma, L. Balants, C. Dekker. *Nature* **402**, 6759, 273 (1999).
- [24] V.H. Crespi. *Phys. Rev. B* **58**, 19, 12 671 (1998).
- [25] A.J. Stone, D.J. Wales. *Chem. Phys. Lett.* **128**, 5–6, 501 (1986).