

СВЯЗЬ ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК
С ИХ АТОМНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРАМИ

Ф.Н. Томилин, П.В. Аврамов, А.А. Кузубов,
С.Г. Овчинников, Г.Л. Пашков*

В работе изучалась связь атомной и электронной структуры углеродных нанокластеров. Было рассмотрено влияние пяти-, семиугольных дефектов, а также эффект деформации шестиугольников в различных нанотрубках. Показана взаимосвязь между дефектами в атомном строении объекта и π компонентой его электронной структуры.

Выбор объектов исследования

Особенностью элементарного углерода является его способность образовывать практически любые сложные объемные структуры, состоящие из многоугольников. Впервые теоретически нанотрубки были предсказаны М.Ю. Корниловым в 1977г. [1-2] и Л. Чернозатонским в 1991 [3-4], а экспериментально зафиксированы С. Иджимой в 1991г. [5]. В настоящее время нанотрубки это материал, из которого возможно конструировать различные макромолекулярные структуры, размеры которых достигают сотен нанометров. Открытие нанотрубок

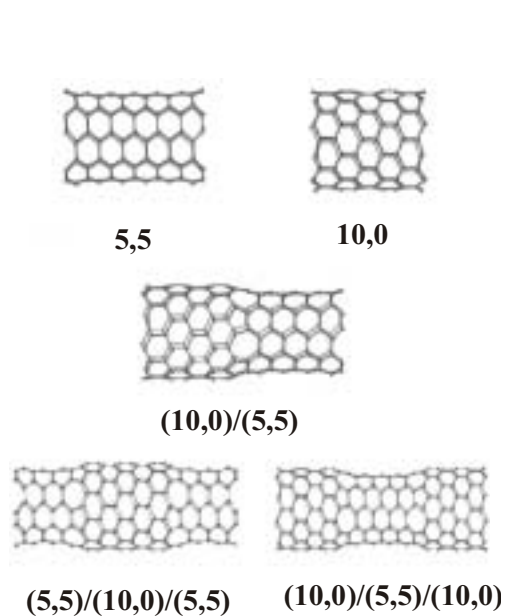


Рис. 1. Зубчатая нанотрубка (5,5) и зигзаг трубка (10,0), углеродные нанотрубки с 5-7 дефектами

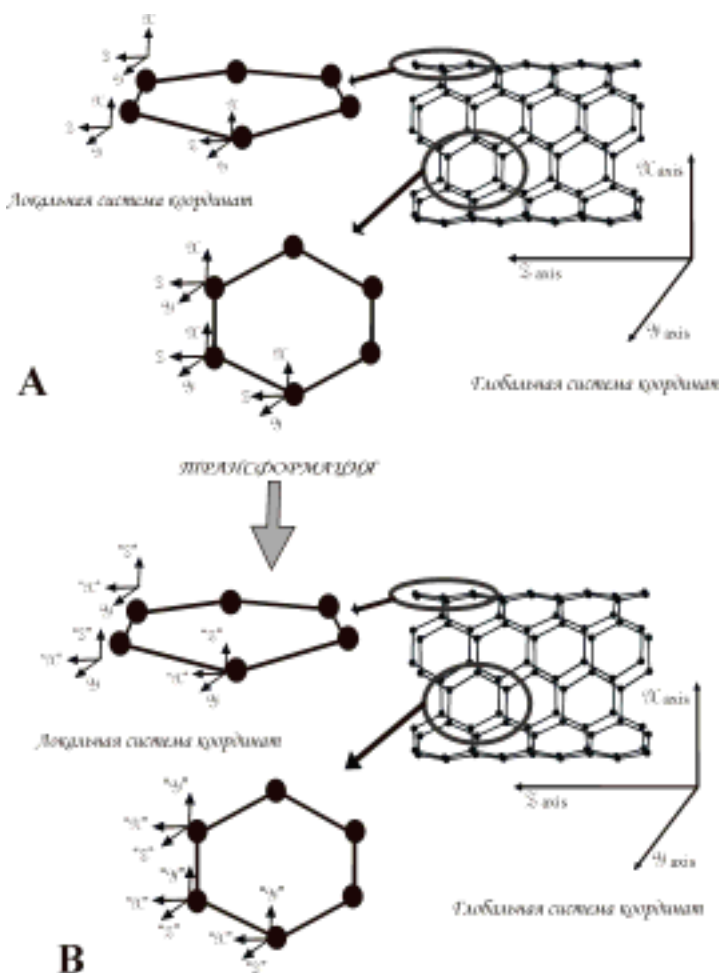


Рис. 2. Преобразование из глобальных координат в локальные для нанотрубок

* © Ф.Н. Томилин, Институт химии и химической технологии СО РАН, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН; П.В. Аврамов, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярский государственный университет; А.А. Кузубов, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярский государственный технологический университет; С.Г. Овчинников, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярский государственный университет; Г.Л. Пашков, Институт химии и химической технологии СО РАН, 2003. felix@iph.krasn.ru

вызвало большой интерес у исследователей, занимающихся созданием материалов с необычными физико-химическими свойствами.

В работе изучали природу химической связи углеродных нанокластеров и рассматривали влияние атомной структуры на электронные характеристики. Для модельных расчетов были выбраны две структуры с одним набором атомов по окружности углеродного цилиндра. Это зигзаг трубка (10,0) и зубчатая нанотрубка (5,5), которые различаются взаиморасположением шестиугольников по отношению к продольной оси нанотрубки и радиусом (рис. 1). Выбор размерности трубок ограничивался вычислительными возможностями: количество атомов в трубках варьировалось от 150 до 200, длина трубок варьировалась от 15 до 25 нм.

Далее было проведено молекулярное конструирование переходов от одной нанотрубки к другой, построением вдоль одной оси структур типа: (10,0)/(5,5), (10,0)/(5,5)/(10,0), (5,5)/(10,0)/(5,5). В качестве границы перехода от одной трубки к другой служил пояс, составленный из пар пяти- и семиугольников (5-7 дефекты). Количество атомов в трубках варьировалось от 200 до 500, длина трубок варьировалась от 25 до 35 нм.

Все нанотрубки рассчитывались с использованием полуэмпирических расчетов PM3 (Parametric Method 3) программы GAMESS [6]. Полуэмпирические методы достаточно хорошо описывают как атомную (длины связей, углы), так и электронную структуры (фотоэлектронные спектры), что было показано неоднократно [7, 8 и др.]. Вместе с этим, метод позволяет производить расчет электронной и атомной структуры достаточно больших кластеров.

ПОСТРОЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ПЛОТНОСТЕЙ

Для изучения электронной структуры строились электронные плотности состояний (ЭПС). Строился энергетический спектр молекулы, в котором каждая молекулярная орбиталь представлялась в виде линии, интенсивности всех линий принимались равными 1. Далее каждая линия заменялась гауссовым распределением с полушириной на заданной полувысоте (например, 0,1 эВ), интенсивности всех распределений при каждом значении энергии складывались.

При построении парциальной электронной плотности состояний (ПЭПС) атомных орбиталей x интенсивность каждой линии соответствующей молекулярной орбитали y принималась равной сумме квадратов коэффи-

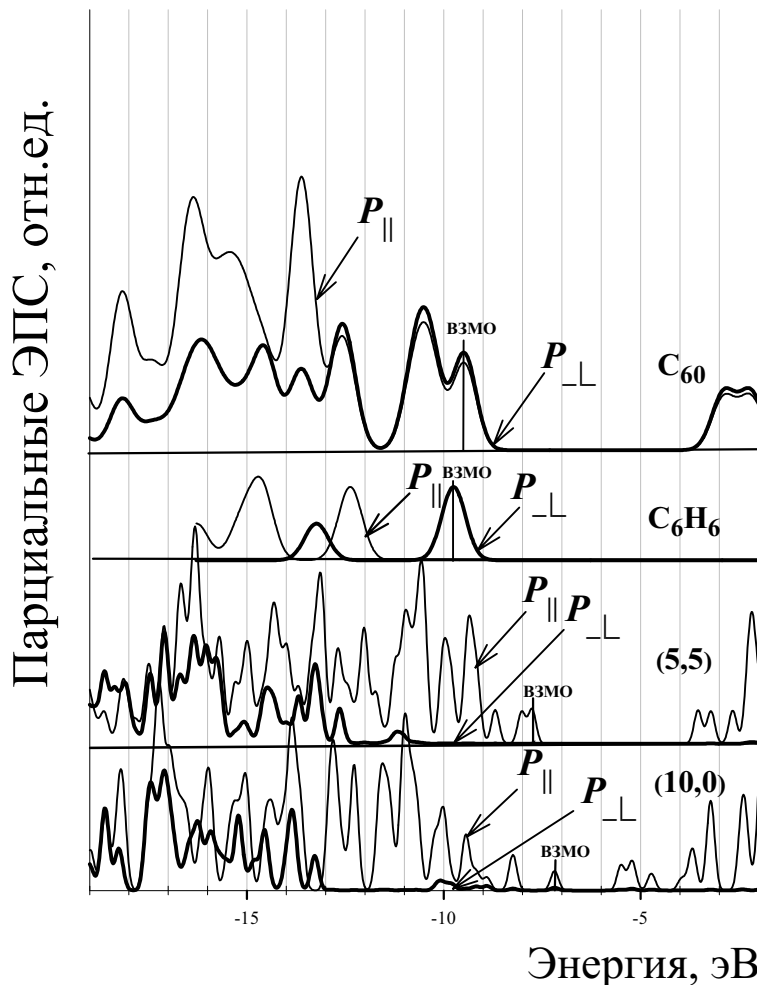


Рис. 3. Парциальные электронные плотности углеродных нанотрубок

циентов при атомных орбиталях x в разложении МО ЛКАО орбитали y . Далее алгоритм построения парциальной плотности состояний аналогичен алгоритму построения полной плотности состояний.

При расчете все волновые функции системы лежат в соответствии с принятыми в программе глобальными координатами, относительно которых задаются структуры. Например, волновая функция P_z у любого атома вне зависимости от его расположения в молекуле всегда направлена в соответствии с осью Z программы. Для интерпретации результатов расчета иногда необходимо поменять направление определенных волновых функций для каждого атома (для полных электронных плотностей это не обязательно) в соответствии с симметрией системы относительно глобальных координат программы.

Так как нанотрубки представляют собой замкнутую поверхность в виде цилиндра, то для того, чтобы парциальные плотности состояний адекватно описывали электронную структуру, необходимо проводить трансформацию базиса волновых функций из глобальной системы координат в локальную для каждого атома углерода. Соответственно, для нанотрубки это будет цилиндрическое преобразование относительно продольной оси трубы. Примеры данных преобразований для нанотрубок представлены на рис. 2.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ НАНОКЛАСТЕРОВ

Изучение природы химической связи проводилось путем сравнения электронных плотностей состояний. Сравнились плотности состояний как для P орбиталей, тангенциально направленных к плоскости молекулы ($P_{||}$), так и для P орбиталей, располагающихся по нормали к поверхности трубки (P_{\perp}) (рис. 2).

На рис. 3 представлены парциальные плотности для $P_{||}$ и P_{\perp} состояний, рассчитанных углеродных нанотрубок. По рисунку видно, что электронные функции, тангенциально и нормально лежащие к поверхности структуры и, соответственно, определяющие $\sigma(P_{||})$ и $p(P_{\perp})$ связывание углеродной нанотрубки, оказываются энергетически замешанными между собой.

Интересно для сравнения вместе с нанотрубками рассмотреть электронную структуру фуллеренов и бензола (рис. 3). Из рис. 3 видно что энергетическое замешивание между $P_{||}$ и P_{\perp} также характерно для фуллеренов [9], в отличие, от плоских ароматических молекул (бензол) (рис. 3). В то же время верхние уровни в валентной области нанотрубок представлены преимущественно $P_{||}$ составляющей и малой долей P_{\perp} состояний. В бензоле верхние уровни в валентной области представлены исключительно $\pi(P_{\perp})$ связыванием, а в фуллерене C_{60} наблюдается присутствие в замешанном виде $P_{||}$ и P_{\perp} состояний, примерно в равной пропорции.

Таким образом, мы имеем следующую картину. Молекула бензола имеет плоскую форму правильного шестиугольника, $\sigma(P_{||})$ и $\pi(P_z$ или $P_{\perp})$ связи разделены и верхние орбитали представлены исключительно P_z (P_{\perp}) орбиталями. Молекула фуллерена C_{60} имеет форму икосаэдра, шестиугольники лежат на гранях фигуры и не деформированы. Вследствие кривизны поверхности происходит замешивание между P_z (P_{\perp}) и P_x, P_y ($P_{||}$) орбиталями, верхние валентные энергетические уровни представляют собой смесь P_{\perp} и $P_{||}$ состояний. В нанотрубках структура имеет вид цилиндра и, исходя из общих предположений, пропорция замешивания P_{\perp} и $P_{||}$ должна лежать между бензолом и фуллеренами.

Рассмотрим, почему этого не происходит.

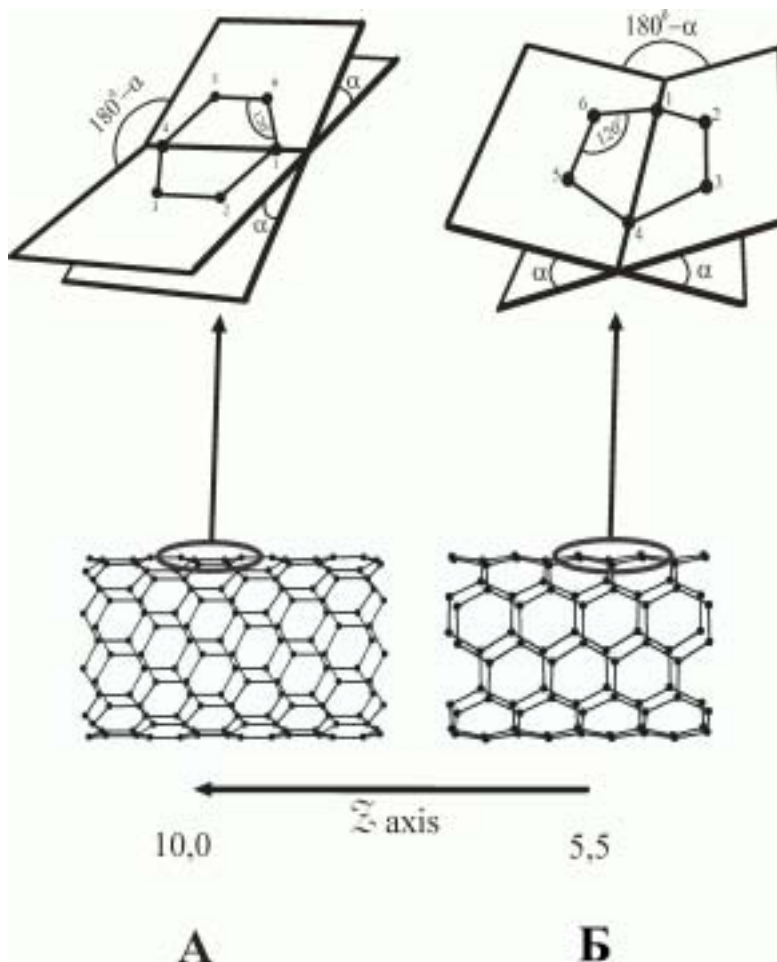


Рис. 4. Торсионные углы в углеродных нанотрубках А — (10,0), Б — (5,5)

Вследствие кривизны поверхности происходит замешивание между P_z (P_{\perp}) и P_x, P_y ($P_{||}$) орбиталями, верхние валентные энергетические уровни представляют собой смесь P_{\perp} и $P_{||}$ состояний. В нанотрубках структура имеет вид цилиндра и, исходя из общих предположений, пропорция замешивания P_{\perp} и $P_{||}$ должна лежать между бензолом и фуллеренами.

Для начала проанализируем природу химической связи для (5,5) и (10,0) трубок. При сравнении парциальных электронных плотностей между структурами (5,5) и (10,0) наблюдается небольшой рост P_{\perp} составляющей связи в структуре (10,0) трубки. Это можно объяснить большим диаметром и, как следствие, уменьшением кривизны поверхности, вследствие чего происходит большее перекрывание между P_{\perp} орбиталями с возрастанием P_{\perp} системы орбиталей на ВЗМО (потолок валентной зоны).

Однако это не объясняет малую долю P_{\perp} связывания на потолке валентной зоны, хотя диаметр данных нанотрубок сопоставим с диаметром фуллерена C_{60} ($d(n,n) < d(2n,0)$, $d(5,5)=6,78E$, $d(10,0)=7,83E$, $d(C_{60})=7,09E$).

Обсуждения результатов

Как указывалось, нанотрубки должны обладать достаточно большой, в сравнении с теми же фуллеренами, P_{\perp} плотностью на потолке валентной зоны. Углеродные нанотрубки по своей структуре занимают промежуточное положение между плоским бензолом и графитом и идеально сферическим (симметрия I_h) фуллереном C_{60} . При этом, обладая большим разбросом по диаметру, в нанотрубках, так же как и в фуллеренах, происходит замешивание между P_z (P_{\perp}) и P_x, P_y (P_{\parallel}) орбиталями в валентной области, но в меньших пропорциях.

Для того чтобы ответить на вопрос, почему нанотрубки обладают такими интересными свойствами электронной структуры, необходимо перейти от рассмотрения геометрической структуры нанотрубки в целом (радиус, длина трубки) к детальному анализу атомной структуры шестиугольников, образующих углеродный каркас трубки.

Рассмотрим валентные углы. Предположительно их влияние на природу химической связи должно быть преобладающим. При ближайшем рассмотрении оказывается, что валентные углы в шестиугольниках на протяжении всей трубки для всех структур остаются неизменными и составляют $\sim 120^\circ$ (классический угол для sp^2 гибридизации), точно такой же как и в бензоле, графите и шестиугольниках фуллерена. Разброс межъядерных расстояний для нанотрубок также мало отличается от молекул фуллеренов и, следовательно, как и валентный угол, не влияет на параметры перераспределения P_{\parallel} и P_{\perp} связей.

Далее необходимо рассмотреть торсионные (дигранные, двухгранные) углы (рис. 4), описывающие величину деформации многоугольника (отклонения от плоскости). Здесь можно проследить интересную закономерность. Во всех нанотрубках наблюдаются большие деформации в структуре *всех* шестиугольников. При этом обнаружилось деформации двух типов, отдельно для трубок (10,0) и отдельно для трубок (5,5).

В структуре трубки (10,0) торсионный угол в шестиугольнике принимает значение $\sim 18^\circ$ (угол между плоскостями образованными 1-2-3-4 и 4-5-6-1 атомами углерода рис. 4А). Плоскость шестиугольника разламывается на две, при этом линия сгиба лежит параллельно оси трубы. В структуре трубки (5,5) торсионный угол в шестиугольнике принимает значение $\sim 24^\circ$, плоскость шестиугольника разламывается на две плоскости, и линия сгиба шестиугольника лежит под прямым углом к оси трубы (рис. 4).

Для структуры (5,5) значение торсионного угла в среднем на 6° больше, чем для структуры (10,0). При этом плоскость шестиугольника в данной структуре четко разбивается на две плоскости. Для шестиугольников структуры (10,0) деформация также приводит к двум плоскостям, но эти плоскости не четко выделены. Из рис. 3 мы видим, что плотность P_{\perp} системы на потолке валентной зоны больше для (10,0) структуры, точно так же как деформация шестиугольников данной структуры меньше, и наоборот, плотность P_{\perp} системы для (5,5) структуры меньше по сравнению с (10,0), потому что деформация плоскости шестиугольников больше.

Таким образом, чем меньше деформированы шестиугольники в структуре углеродной нанотрубки, тем больше происходит перекрывание между P_{\perp} , что в свою очередь приводит к возрастанию P_{\perp} системы на потолке валентной зоны. Как следствие, большие деформации углеродных шестиугольников меняют характер и энергию перекрывания между P_{\perp} , что ведет к увеличению доли s связей.

Изучение влияния пяти- и семиугольных дефектов на электронную структуру

Далее в работе было проведено молекулярное конструирование переходов от одной нанотрубки к другой, с помощью построения вдоль одной оси структур типа: (10,0)/(5,5), (10,0)/(5,5)/(10,0), (5,5)/(10,0)/(5,5). В качестве границы перехода от одной трубки к другой служил пояс, составленный из пар пяти- и семиугольников (5-7 дефекты) (рис. 1).

При рассмотрении углеродных нанотрубок с 5-7 дефектами (10,0)/(5,5)/(10,0) и (5,5)/(10,0)/(5,5) наблюдается увеличение вкладов от P_{\perp} орбиталей в пакете верхних занятых уровней по сравнению с (5,5) и (10,0) трубками и трубкой (10,0)/(5,5) (рис. 6).

То есть введение 5-7^{го} дефекта для некоторых трубок приводит к перекрыванию данных орбиталей между собой на потолке валентной зоны с появлением там π системы. Причем для ВЗМО орбиталей π система больше для случая (10,0)/(5,5)/(10,0) трубки, точно так же больше общий диаметр структуры и меньше кривизна. Но тогда становится непонятно, почему трубка (10,0)/(5,5) не заняла промежуточного положения по замешиванию σ и π составляющей связи между (10,0)/(5,5)/(10,0) и (5,5)/(10,0)/(5,5) трубками?

Рассмотрим электронную структуру пар 5-7-угольных дефектов (рис. 6). При рассмотрении локальных плотностей в ВЗМО наблюдается большое присутствие электронных плотностей атомов, принадлежащих к 5-7-угольным дефектам, по сравнению с атомами углерода, принадлежащими только шестиугольникам. Это связано с тем, что у образующих дефект 5-7-угольников валентный угол отличается от идеального 120° для sp^2 гибридизации и, следовательно, энергия образования связи меньше, чем для шестиугольника, при этом данные состояния образуются преимущественно $P_{||}$ состояниями.

Обсуждения результатов

В структуре смешанных трубок с 5-7-дефектами необходимо рассматривать торсионные углы для шестиугольников, принадлежащих отдельным частям — $(10,0)$ и $(5,5)$, торсионные углы для 5- и 7-угольников, а также шестиугольников у 5-7 дефектов.

В структуре трубки $(10,0)/(5,5)/(10,0)$ максимальный торсионный угол в шестиугольнике для $(5,5)$ части принимает значение около 23° вблизи дефекта, 20° к центру части, минимальный — 0° , оставаясь неизменным по типу. Максимальный торсионный угол в шестиугольнике для $(10,0)$ части становится около 16° вблизи дефекта и 19° по центру части, минимальный 1° , также оставаясь неизменным по типу.

В структуре трубки $(5,5)/(10,0)/(5,5)$ максимальный торсионный угол в шестиугольнике для $(5,5)$ части принимает значение около 25° где 7-угольник, 24° вблизи дефекта и 21° по середине, минимальный — 0° , оставаясь неизменным по типу.

Максимальный торсионный угол в шестиугольнике для $(10,0)$ части становится около 16° вблизи дефекта и 18° по центру части, минимальный — 2° у дефекта и 0° по центру части, также оставаясь неизменным по типу.

В структуре трубки $(10,0)/(5,5)$ максимальный торсионный угол в шестиугольнике для $(5,5)$ части принимает значение около 22° (5-угольник), 24° вблизи дефекта и 22° по середине, минимальный — 0° , оставаясь неизменным по типу. Максимальный торсионный угол в шестиугольнике для $(10,0)$ куска становится около 16° вблизи дефекта и 18° по центру части, минимальный — $2,5^\circ$ у дефекта, по центру части — 1° , так же оставаясь неизменным по типу.

Как видно по данным табл. 1 для структуры $(5,5)$ значение торсионного угла в среднем на 5° больше, чем для структуры $(10,0)$. При этом плоскость шестиугольника в данной структуре четко разбивается на две плоскости. Для

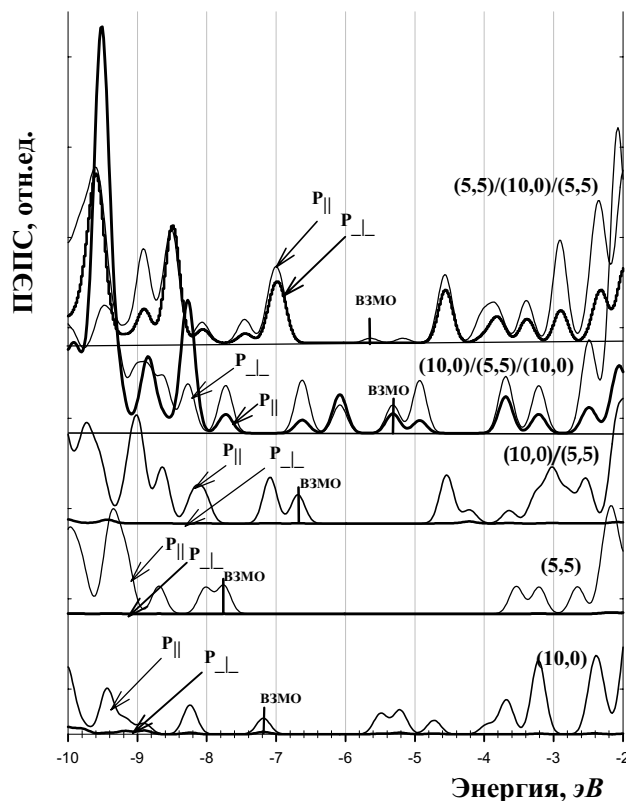


Рис. 5. Парциальные электронные плотности нанотрубок вблизи ВЗМО

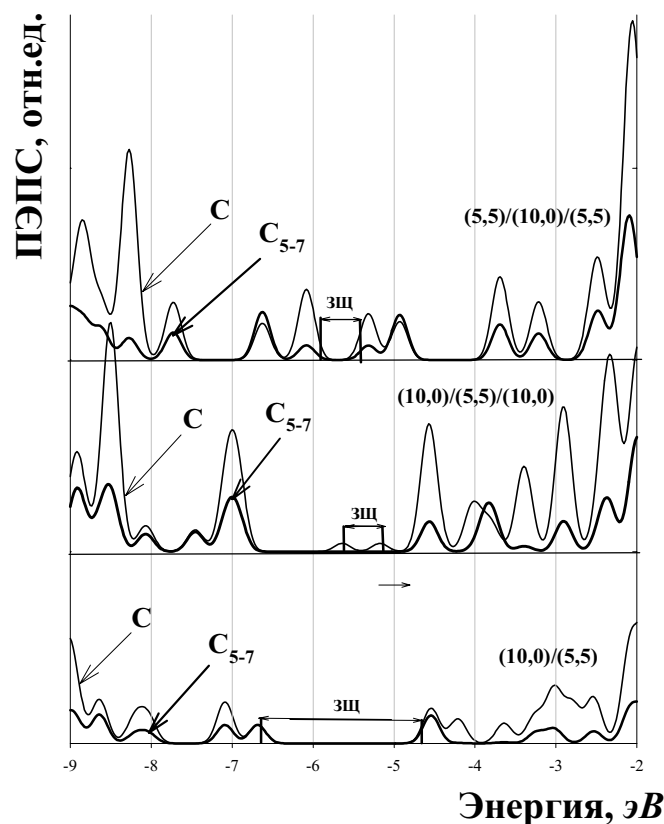


Рис. 6. Локальные плотности для атомов углерода, принадлежащих 5-7-дефектам, и атомов углерода, принадлежащих шестиугольникам вблизи потолка валентной зоны

Торсионные углы для шестиугольников

Вид структуры	Значение торсионного угла для шестиугольника	
	минимальный	максимальный
(10,0)	$\sim 0^\circ$	$18 \div 17^\circ$
(5,5)	0°	$23 \div 24^\circ$
(5,5) от (10,0)/(5,5)/(10,0)	0°	$20^\circ \div 23^\circ$
(10,0) от (10,0)/(5,5)/(10,0)	1°	$19^\circ \div 16^\circ$
(5,5) от (5,5)/(10,0)/(5,5)	0°	$21^\circ \div 24^\circ$
(10,0) от (5,5)/(10,0)/(5,5)	$0^\circ \div 2^\circ$	$18^\circ \div 16^\circ$
(5,5) от (10,0)/(5,5)	0°	$22^\circ \div 24^\circ$
(10,0) от (10,0)/(5,5)	$1^\circ \div 2,5^\circ$	$18^\circ \div 16^\circ$

шестиугольников структуры (10,0) деформация так же приводит к двум плоскостям, но эти плоскости не четко и не всегда выделены. По рис. 6 видно, что плотность р-системы на потолке валентной зоны больше для (10,0) структуры, точно так же как деформация шестиугольников данной структуры меньше, и наоборот, плотность р-системы для (5,5) структуры меньше по сравнению с (10,0), потому что деформация плоскости шестиугольников больше.

Для смешанных трубок в целом наблюдается такая же картина, но с некоторыми особенностями. Для структур (10,0)/(5,5)/(10,0) и (5,5)/(10,0)/(5,5) наблюдается заметное повышение р плотности за счет уменьшения торсионных углов у шестиугольников. Также можно сделать вывод о том, что подобное уменьшение торсионных углов происходит сильнее в том случае, если структура симметрична, в случае присутствия в структуре двух переходов, располагающихся недалеко друг от друга. Это происходит оттого, что находящаяся по середине структура получает выправление своих шестиугольников с двух сторон, но данный эффект уменьшается с расстоянием, как, например, в случае с (10,0)/(5,5).

Видно, что чем меньше деформированы шестиугольники в структуре углеродной нанотрубки, тем больше происходит перекрытие между P_{\perp} , что в свою очередь приводит к возрастанию π системы. Как следствие, большие деформации углеродных шестиугольников ведут к увеличению доли s связей.

Подтверждения

Косвенным подтверждением нашей модели могут служить эксперименты по химической обработке наноструктур [10-26]. Как правило, химическому модифицированию подвергается около 5-8% (в зависимости от условий, вида углеродных структур и модифицирующего реагента) всех атомов углерода в наноструктурах, причем, как правило, эти атомы принадлежат дефектам наноструктуры. При этом концевые атомы оказываются более реакционно-способными, чем атомы, принадлежащие поверхности нанотрубки. Также известно, что при достаточно жестких условиях (сильные кислоты, высокие температуры обработки, плазменная активация и т.д.) после *полного* модифицирования нанотрубки меняют некоторые свои свойства, в частности становятся менее устойчивыми.

Химическую инертность нанотрубок можно объяснить малым количеством P_{\perp} связей на потолке валентной зоны. При очень сильном воздействии на наноструктуры (полная модификация) химическая реакция идет с использованием P_{\perp} системы нанотрубки, как более доступной пространственно. При этом происходит уменьшение взаимодействия между P_{\perp} и P_{\parallel} , так как часть P_{\perp} орбиталей взаимодействует с модифицирующим реагентом и, как следствие, происходит уменьшение энергетической стабильности наноструктуры. Поэтому *полностью* модифицированные наноструктуры разлагаются при более низких температурах.

ВЫВОДЫ

Наш взгляд на электронную структуру основывается на связи соотношения P_{\parallel} и P_{\perp} вкладов в высоко занятые молекулярные орбитали от деформации углеродных многоугольников.

Вследствие кривизны поверхности в углеродных наноструктурах происходит замешивание атомных орбиталей, направленных тангенциально (P_{\parallel} — связывание) и по нормали к поверхности (P_{\perp} — связывание). Соотношение вкладов этих волновых функций определяет природу химической связи в данных структурах. Из-за особенностей геометрии в подавляющем большинстве углеродных наноструктур все шестиугольники, формирующие поверхность, деформированы. Данные пространственные деформации приводят к заметным отличиям в электронной структуре. В целом углеродные нанотрубки — это объекты с малой долей перекрытия между

собой P_{\perp} функций на потолке валентной зоны. Из этого, в частности, следует, что нанотрубки должны быть достаточно инертными в химических реакциях, что и наблюдается в эксперименте.

Работа выполнена в Центре коллективного пользования «Квантово-химические расчеты нанокластеров» Красноярского научно-образовательного центра высоких технологий, созданного на средства ФЦП «Государственная поддержка интеграции высшего образования и фундаментальной науки» (грант №69, №31) и «Фуллерены и атомные кластеры» (в рамках проекта № 97018), а также NATO Scientific Airs Division в рамках проекта PST. CLG 974818 и 6-го конкурса научных проектов молодых ученых РАН (№155).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Корнилов М.Ю. // Доклады АН УССР, серия «Б», 12, 1097-1100, 1977
2. Корнилов М.Ю. // «Химия и жизнь», 8, 22, 1985
3. LA Chernozatonskii. // Phys.Lett.A., 1991, v. 160, 4, 392-396.
4. LA Chernozatonskii // Phys.Lett. A, 166, 55.
5. S. Iijima // Nature, 354, 56-58, 1991.
6. M.W. Schmidt, K.K. Baldrige, J.A. Boatz, S.T. Elbert, M.S. Gordon, J.H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K.A. Nguyen, S.J. Su, T.L. Windus, M. Dupuis, J.A. Montgomery. J.Comp.Chem., 14, 1347 (1993).
7. С.А. Варганов, П.В. Аврамов, С.Г. Овчинников. ФТТ, 42, (2000).
8. L. G. Bulusheva, A. V. Okotrub, D. A. Romanov, D. Tomanek. // Phys.Low-Dim.Struct., 3/4, 107-134, 1998
9. А.А. Кузубов П.В. Аврамов, С.Г. Овчинников, С.А. Варганов, Ф.Н. Томилин. // ФТТ, 43, 9, 2001 С. 1721-1728
10. A. Hirsch. // Angew.Chem.Int.Ed., 41, 11, 1853-1859, 2002
11. A. Kuznetsova, I. Popova, J.T. Yates, Jr., M.J. Bronikowski, C.B. Huffman, Jie Liu, R.E. Smalley, H.H. Hwu, J.G. Chen. // J.Am.Chem.Soc. 43, 123, 10699, 2001.
12. T. W. Odom, J.-L. Huang, P. Kim, C. M. Lieber. // J.Phys.Chem. B, 104, 2794-2809, 2000
13. J. Liu, A.G. Rinzler, H. Dai, J.H. Hafner, R.K. Bradley, P.J. Boul, A. Lu, T. Iverson, K. Shelimov, C.B. Huffman, F. Rodriguez-Macias, Y.-S. Shon, T.R. Lee, D.T. Colbert, R.E. Smalley. // Science, 280, 1253-1256, 1998
14. J. Chen, M.A. Hamon, H. Hu, Y. Chen, A.M. Rao, P.C. Eklund, R.C. Haddon. // Science, 282, 95-97, 1998
15. M.A. Hamon, H. Hu, P. Bhowmik, S. Niyogi, B. Zhao, M.E. Itkis, R.C. Haddon. // Chem.Phys.Lett., 347, 8-12, 2001
16. M.A. Hamon, J. Chen, H. Hu, Y. Chen, M.E. Itkis, A.M. Rao, P.C. Eklund, R.C. Haddon. // Adv.Mater., 11, 834-840, 1999
17. D.B. Mawhinney, V. Naumenko, A. Kuznetsova, J.T. Yates, J. Liu, R.E. Smalley. // Chem.Phys.Lett., 324, 213-216, 2000
18. M. Monthieux, B.W. Smith, B. Bouteaux, A. Claye, J.E. Fischer, D.E. Luzzi. // Carbon, 39, 1251-1272, 2001
19. J.L. Bahr, J.M. Tour. // Chem.Mater., 13, 3823-3824, 2001
20. E. Jouguelet, C. Mathis, P. Petit. // Chem.Phys.Lett. 318, 561-564, 2000
21. Q. Chen, L. Dai, M. Gao, S. Huang, A. Mau. // J.Phys.Chem. B 105, 618, 2001
22. T. Nakajima, S. Kasamatsu, Y. Matsuo. // Eur.J.Sol.St.Inorg.Chem., 33, 831-840, 1996
23. E.T. Mickelson, C.B. Huffman, A.G. Rinzler, R.E. Smalley, R.H. Hauge. // Chem.Phys.Lett., 296, 188-194, 1998
24. E.T. Mickelson, I.W. Chiang, J.L. Zimmerman, P.J. Boul, J. Lozano, J. Liu, R.E. Smalley, R.H. Hauge, J.L. Margrave. // J.Phys.Chem. B 103, 4318-4322, 1999
25. Y. Chen, R.C. Haddon, S. Fang, A.M. Rao, P.C. Eklund, W.H. Lee, E.C. Dichey, E.A. Grulke, J.C. Pendergrass, A. Chavan, B.E. Haley, R.E. Smalley // J.Mater.Res., 13, 2423-2431, 1998
26. K. Fu, W. Huang, Y. Lin, L.A. Riddle, D.L. Carroll, and Y.-P. Sun, // NanoLett., 1(8), 439-441, 2001

RELATIONSHIP OF CHEMICAL CHARACTERISTICS CARBON NANOTUBES WITH THEIR ATOMIC AND ELECTRONIC STRUCTURE

**F.N. Tomilin, P.V. Avramov, A.A. Kuzubov,
C.G. Ovchinnikov, G.L. Pashkov**

In work was studied relationship of atomic and electronic structure carbon nanoclusters. It was considered influence of pentagonal-, heptagonal defects, as well as effect of deforming the hexagons in the different nanotubes. Shown intercoupling between defects in the atomic construction of object and p component of its electronic structure.