

ESTUDO TEÓRICO DE PROPRIEDADES ÓPTICAS NÃO-LINEARES DE NANOTUBOS DE CARBONO DE PAREDE ÚNICA QUIMICAMENTE MODIFICADOS

Antônio M. Da Silva Jr., Geórgia M. A. Junqueira e Hélio F. Dos Santos*

Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Juiz de Fora, 36036-330 Juiz de Fora – MG, Brasil

Ana Cláudia M. Carvalho

Departamento de Física e Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Itajubá, 37500-000 Itajubá – MG, Brasil

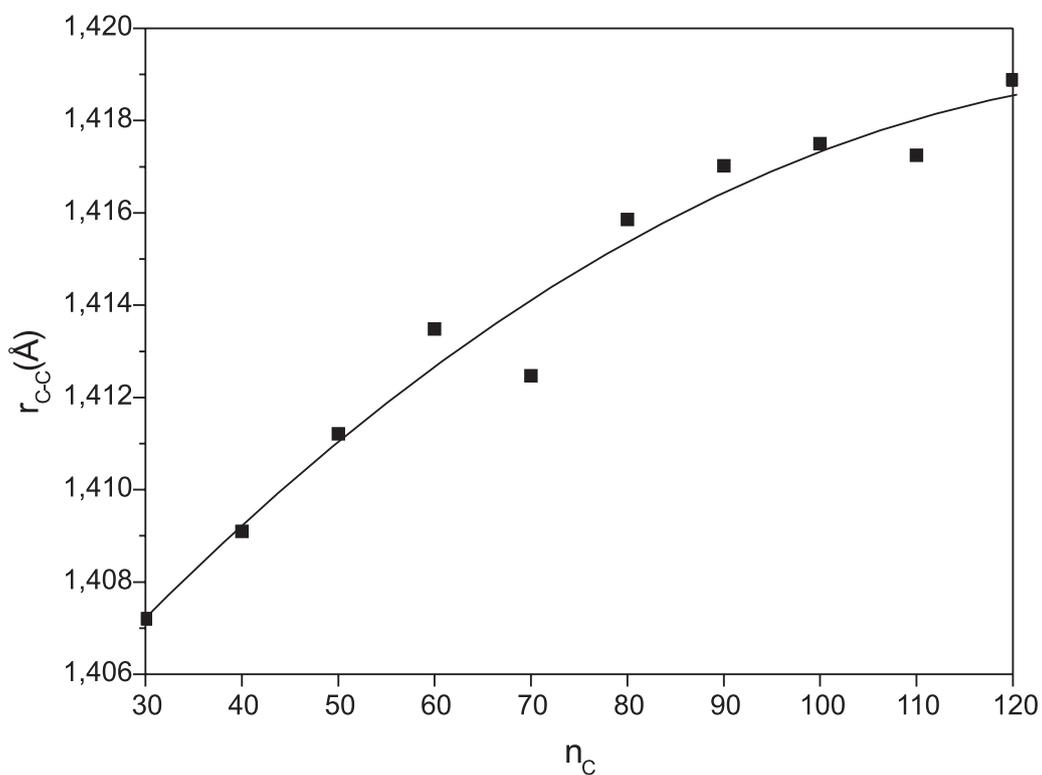
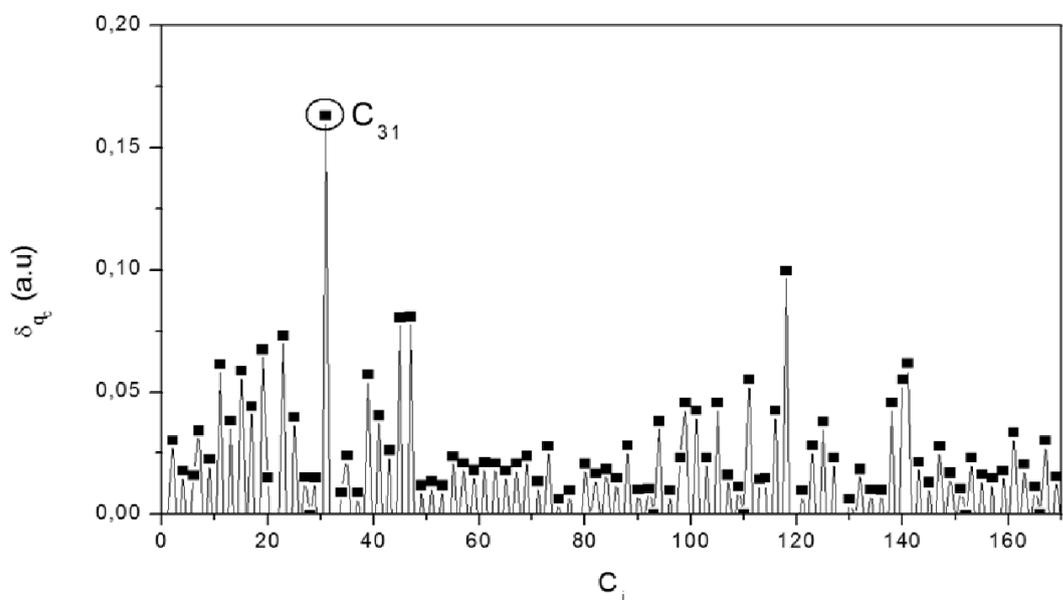
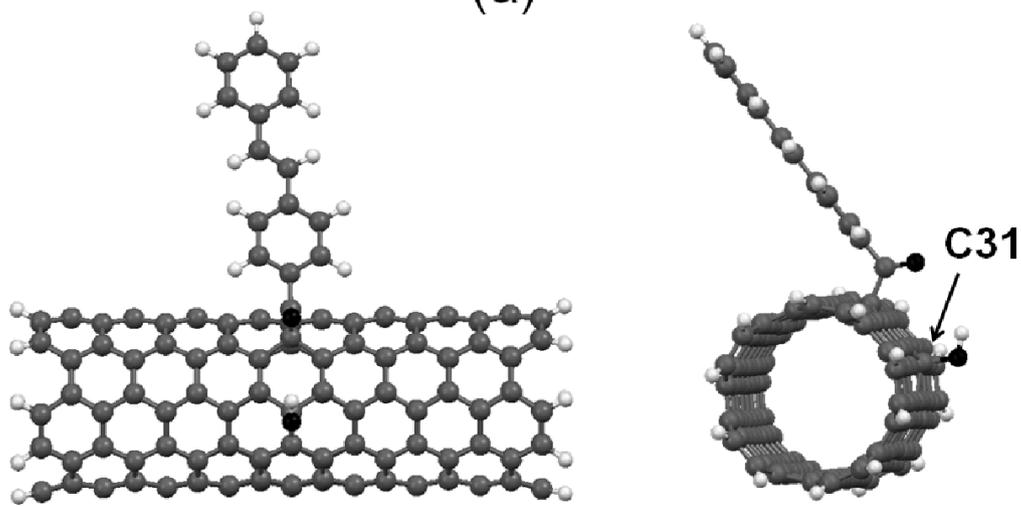


Figura 1S. Distâncias médias C-C para estrutura a(5,5) em função do número de carbonos obtidas no nível PM3. A escala das ordenadas foi ampliada para mostrar a convergência do parâmetro r_{C-C} com o número de carbonos

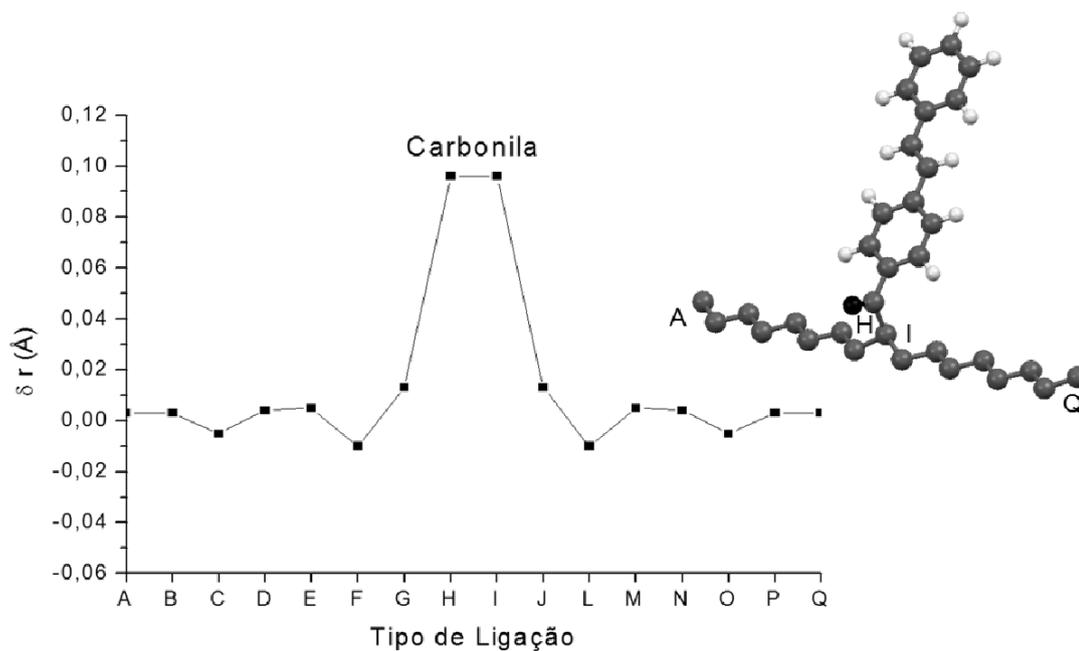


(a)

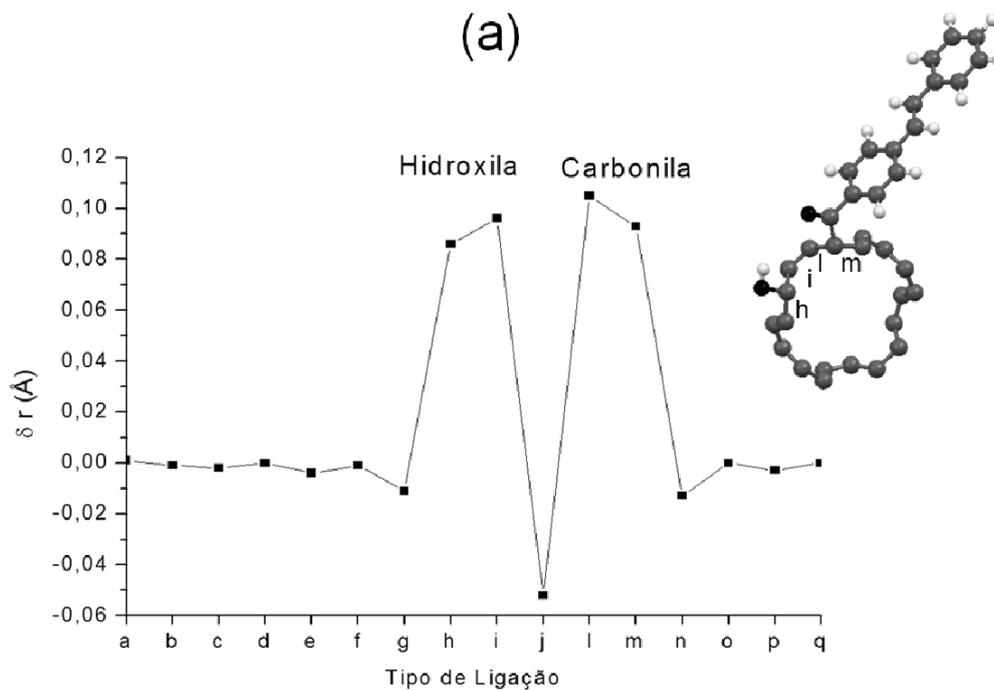


(b)

Figura 2S. (a) Variação de carga para os átomos de carbono do tubo antes e depois da inserção do ligante. (b) Estruturas otimizadas no nível PM3 para o derivado *a(5,5)*-STB-H, mostrando a posição relativa do ligante e da hidroxila na superfície do tubo



(a)



(b)

Figura 3S. Variação dos comprimentos de ligação C-C para o tubo $\alpha(5,5)$ -STB-H em relação ao tubo não modificado. (a) Análise na direção longitudinal e (b) análise na direção transversal. As letras A-Q e a-u representam as ligações C-C e são discutidas no texto