

Functionalization of carbon nanotubes by covalently bonded graphite nanoplatelets: a theoretical study

Andrey N. Enyashin and Alexander L. Ivanovskii*

Table 1. Energies of formation (E_f , eV) of graphite platelete/carbon nanotube adducts.

Nanotube		Types of graphite platelets ^a								
		<i>b</i>	<i>n1</i>	<i>n2</i>	<i>n3</i>	<i>f1</i>	<i>f2</i>	<i>f3</i>	<i>f4</i>	<i>f5</i>
(14,0)	I	-3,00	-3,72	-2,22	-4,05	-5,19	-6,44	-3,68	-4,25	-5,50
	II	-4,99	-3,61	-3,61	-3,97	-2,55	-6,37	-1,89	-2,34	-5,41
	III	<u>-5,34</u> ^b	-3,57	-4,19	<u>-4,50</u>	-3,76	<u>-7,01</u>	-4,20	-2,86	-4,64
	IV	-3,50	-2,84	-3,71	-3,10	-2,35	-5,23	-3,73	-1,48	-2,34
	V	-4,75	-3,30	-3,71	-4,06	-1,83	-6,46	-3,75	-4,24	-5,21
	VI	-4,08	-2,93	-3,09	-3,37	-1,83	-5,84	-3,07	-3,56	-4,85
(8,8)	I	-5,30	-3,99	-3,78	-4,14	-3,54	-6,52	-2,06	-2,51	-5,59
	II	<u>-5,33</u>	-3,89	-3,80	-4,15	-3,82	-6,55	-2,07	-2,52	-5,53
	III	-5,04	-3,70	-3,83	-4,16	-3,50	-6,61	-3,84	-2,54	-5,32
	IV	-2,23	-2,76	-4,34	-4,19	-1,99	-4,80	-5,53	-4,32	-1,83
	V	-5,14	-3,57	-4,25	<u>-4,61</u>	-2,37	<u>-6,98</u>	-4,29	-4,78	-5,59
	VI	-4,42	-3,19	-3,59	-3,89	-1,31	-6,34	-3,61	-4,07	-5,23
(12,4)	I	-4,99	-3,66	-3,56	-3,95	-4,56	-6,34	-3,58	-2,31	-5,40
	II	-4,98	-3,55	-3,57	-3,91	-3,52	-6,31	-1,81	-2,28	-5,29
	III	-4,95	-3,62	-3,53	-3,89	-2,56	-6,29	-1,79	-2,27	-5,33
	IV	-5,18	-3,54	-4,00	<u>-4,30</u>	-3,11	<u>-6,83</u>	-4,01	-2,68	-4,55
	V	<u>-5,55</u>	-2,60	-3,40	-2,87	-1,86	-4,83	-5,00	-2,11	-2,09
	VI	-4,09	-3,11	-3,83	-3,38	-1,07	-5,73	-2,96	-1,76	-4,79
	VII	-4,90	-3,37	-3,82	-4,17	-2,59	-6,58	-3,85	-4,37	-5,23
	VIII	-4,52	-3,17	-3,45	-3,80	-1,81	-6,22	-3,47	-3,98	-5,04
	IX	-4,14	-2,60	-3,10	-3,41	-1,82	-5,82	-3,16	-3,58	-2,09

^a See Figure 1 of the manuscript for the types of platelets (*b-f*) and the variants of their connections on carbon nanotubes (I-IX). ^b The most favourable types of adducts are underlined.