

Oxidized single-walled carbon nanotubes and nanocones: A DFT study

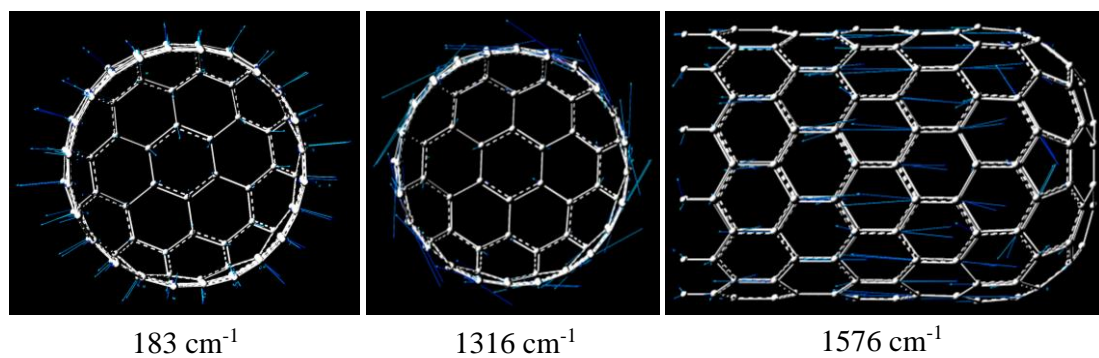
Leonardo A. De Souza^a, Antônio M. Da Silva, Jr.^b, Hélio F. Dos Santos^c, Wagner B. De Almeida^{*a}

^a Laboratório de Química Computacional (LQC), Departamento de Química Inorgânica, Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Campus do Valonguinho, Centro, Niterói, RJ 24020-141, Brazil.

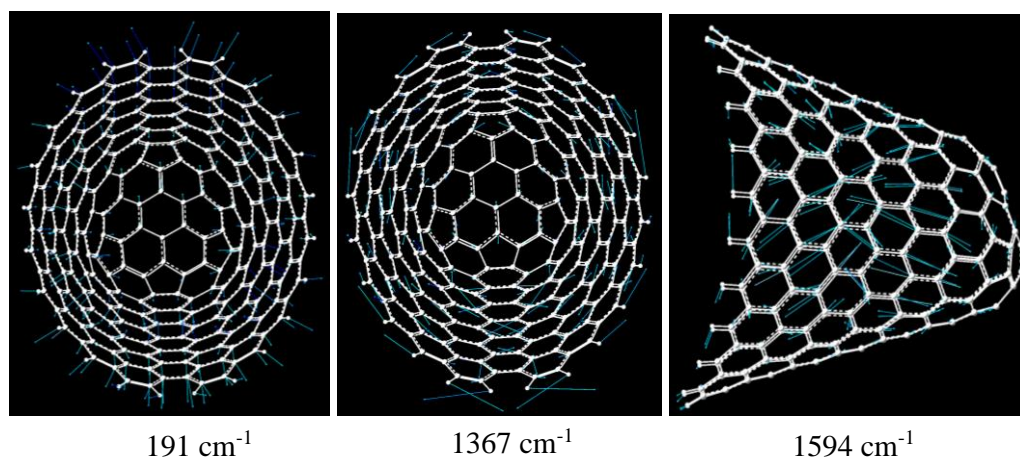
^b Laboratório de Compostos Funcionais Semicondutores (LCFS), Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro – UFRRJ, BR-465, Km 7 Seropédica, Rio de Janeiro, 23.897-000, Brazil.

^c Núcleo de Estudos em Química Computacional (NEQC), Departamento de Química, ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora – UFJF, Campus Universitário Martelos, Juiz de Fora, MG, 36.036-330, Brazil.

Supplementary Information



S1. Main Raman normal modes calculated at B3LYP/3-21G level for pristine CNT model.



S2. Main Raman normal modes calculated at B3LY/3-21G level for pristine CNC model.