

Szén nanocsövek grafén litográfiai előállításának topológiai és energetikai feltételei

Fülep D.¹, Zsoldos I.¹, László I.²

¹Széchenyi István Egyetem, Műszaki Tudományi Kar, Győr, fulep@sze.hu, zsoldos@sze.hu

²Budapesti Műszaki Egyetem, Elméleti Fizika Tanszék, Budapest, laszlo@eik.bme.hu

Absztrakt

Szén nanocsöveknek grafén nanoszalagokból történő kialakításához molekuláris dinamikai szimulációt végeztünk. A szimuláció a tight-binding módszeren és a Nosé-Hoover termosztát alkalmazásán alapszik. Vizsgáltuk, hogy milyen körülmények között alakulhat ki két párhuzamosan egymás fölé helyezett grafén nanoszalagból szén nanocső szerkezet. Kritikus görbületi energiákat, valamint topológiai feltételeket határoztunk meg előre definiált nanocsövek korrekt összenövéséhez.

1. Bevezetés

Annak ellenére, hogy a szén nanocsövek kivételes elektromos tulajdonságait már bizonyították [1], csak néhány nanoelektronikai eszköz került bemutatásra vagy megvalósításra [2-4]. Ez főképpen annak köszönhető, hogy még nem sikerült találni jól irányítható, megbízható technológiát sem az előállításukra, sem nanocső hálózatok építésére. A grafén nanoszalagok grafén lapból való kivágásai kiváló lehetőséget ígérnek. Nanolitográfiai [5] és különböző kémiai [6-8] módszerekkel oldották meg különböző alakú grafén nanoszalagok kivágásait, sőt, szén nanocsőnek plazmával való szétvágásával is készítettek grafén nanoszalagot [9]. A grafén nanoszalagok elektromos viselkedésének vizsgálatára intenzív kutatások folynak mind elméleti [10-13], mind pedig kísérleti [13-14] területeken. Különböző nanoelektronikai építőelemek megvalósításához különböző alakú grafén nanoszalagokat javasolnak, mint pl. L-alakú [15], T-alakú [16-18] és Z-alakú [19-20] szalagokat. Grafén nanoszalagokból álló nanoelektronikai hálózatok [21], funkcionális egységek [22-24] működését vizsgálják kísérleti és szimulációs módszerekkel. A szalagok kivágását jelenleg néhány nm-es pontossággal tudják megvalósítani, az atomi pontosságú kivágáshoz már csak kb. egy nagyságrend hiányzik. A szalagok széleinél jelentkező instabilitások elkerülése céljából ismét felmerültek a nanocső szerkezetek vizsgálatai. Atomi pontosságú grafén nanoszalag kivágás feltételezésével molekuláris dinamikai szimulációkkal keresték, össze tud-e nőni két párhuzamosan egymás fölé helyezett grafén nanoszalagból a nanocső szerkezet [25-26]. Ugyancsak molekuláris dinamikai szimulációkkal mutatták meg, hogy egyetlen, atomi pontossággal kivágott grafén alakzatból is fel tud tekeredni tervezett kiralitású, zárt végű nanocső, sőt, egyetlen jól definiált grafén alakzatból előre tervezett fullerén molekulák is felépülhetnek önszervező módon [27-29].

Szén nanocsövek két darab grafén nanoszalagból való előállításának vizsgálata azért fontos, mert nanocső hálózatok szerkezetei csak nyitott végű nanocsövekből tervezhetőek, amíg egyetlen grafén nanoszalagból zárt végű nanocső tekerhető fel [27]. A párhuzamos grafén szalagokból való szén nanocső növesztés nem triviális feladat, bár a lehetőséget korábban már publikálták [25-26], ebben a munkában azt is megmutatjuk, hogy csak adott topológiai és energetikai feltételek esetén alakul ki hibátlan nanocső szerkezet. Jellemezzük továbbá a görbületi energiák és a görbületek közötti kapcsolatot.

2. Molekuláris dinamikai algoritmus

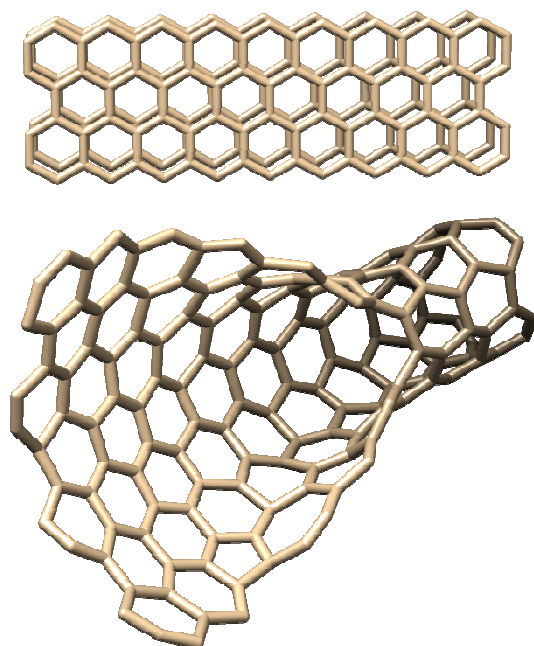
Számolásainkhoz sűrűség funkcionális elmélethez illesztett szoros kötésű módszert (DFT-TB) használtunk [30]. A nanoszalagokat $r=1.42 \text{ \AA}$ szomszédos atomtávolságokat tartalmazó grafénből vágtuk ki. Miután a szalagokat a grafit síkoknak megfelelő távolságra párhuzamosan egymás fölé helyeztük, a nanocső kialakulását állandó hőmérsékletű molekula dinamikai [31-32] számolással vizsgáltuk. Az idő léptetésére $\Delta t=0.7\text{fs}$ időt használtunk és Verlet-algoritmus [33] adta a sebességet. A kezdő sebességek $\Delta t=0.7\text{fs}$ idejű elmozdulásait véletlenül választott elmozdulásokból határoztuk meg, mely elmozdulásokat úgy skáláztuk, hogy a hozzájuk tartozó kinetikus energiából számolt T_{init} kezdeti hőmérséklet előre megadott értéket vegyen fel. Ezt a hőmérsékletet a $T_{\text{init}} = 1000$ és 1100 K közötti tartományból választottunk. Azt tapasztaltuk, hogy ugyanazon kezdeti sebességekből indított szerkezet végső állapota nem változott lényegesen, ha kezdősebességek átskálázásával növeltük vagy csökkentettük a kezdeti hőmérsékletet. A kialakult szerkezet jobban függött a kezdeti sebességek irányától, mint a T_{init} nagyságától. Mivel az újabb kötések létrejötte hőtermeléssel jár, ami tönkretelheti a már kialakult szerkezetet, a szimulációt állandó hőmérsékletű környezetben hajtottuk végre. Az állandó hőmérsékletű szimulációt Nosé-Hoover termosztát szolgáltatta [31-32,34-35]. Amikor a továbbiakban számolási hőmérsékletéről írunk, mindig a Nosé-Hoover-termostát által biztosított környezeti hőmérsékletet értjük rajta. Igen gyakran az állandó hőmérsékletű számolásokat a kinetikus energia előre megadott ütemben történő átskálázásával érik el. Ilyen számolásban azonban a rendszer hőmérséklete és a környezet hőmérséklete nem különíthető el, és nincs értelme a környezeti hőmérséklettől eltérő kezdeti hőmérsékletnek sem. A mi számolásunkban a Nosé-Hoover-termostát lehetővé teszi e két hőmérséklet elkülönítését.

3. Futtatási eredmények

Karosszék és cikkcakk típusú egyenes nanocsövek modelljeivel dolgoztunk. A szimuláció kiindulása két egybevágó grafén nanoszalag egymás fölé helyezésével definiált modell volt, 1. ábra. A párhuzamosan egymás fölé helyezett nanoszalagok közötti távolság megegyezett a grafit kristályrétegei közötti 0.34 nm egyensúlyi távolsággal. Vizsgáltuk, hogy a két nanoszalagból álló, magára hagyott rendszer milyen feltételek mellett tud összenőni önszervező módon egyetlen előredefiniált nanocső szerkezetté. Azt vártuk, hogy az egyik szalag szélein található, szabad kötéssel rendelkező szénatomok kötést létesítenek a másik szalag szélein álló szénatomokkal, és az összenőtt szerkezet nanocsővé alakul. Különböző viselkedést tapasztaltunk a karosszék és a cikkcakk nanocsövek esetében, melyet az alábbiakban ismertetünk.

3.1 Karosszék nanocsövek

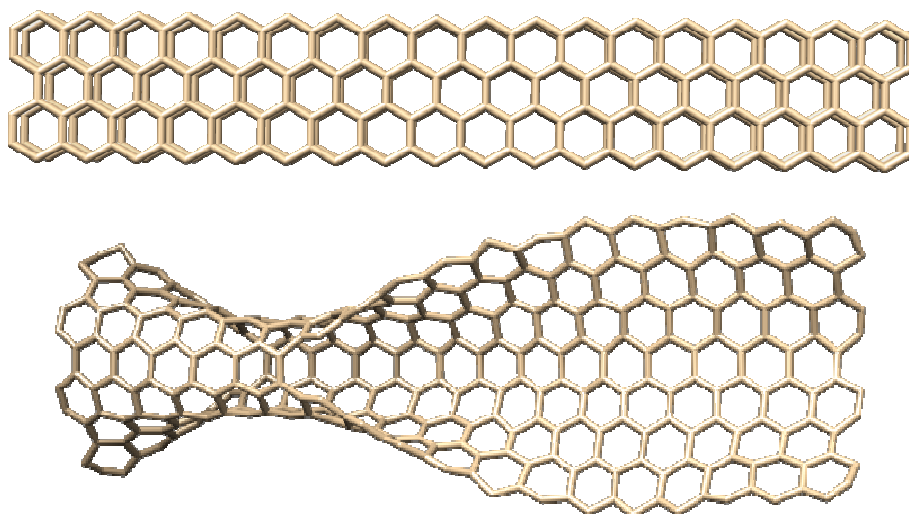
Karosszék típusú nanocsövek esetén az alapproblémát az 1. ábra segítségével mutatjuk be. A modell két párhuzamosan egymás fölé helyezett, egybevágó, karosszék típusú grafén nanoszalagból áll, amelyen a szimulációt 1000 K hőmérsékleten futtattuk. A szimuláció során a nanoszalagok összenövése a szalagok mindkét oldalán megkezdődött, de a folyamat nem tudott befejeződni, az ábrán látható szerkezet állandósult, az egyik oldalon grafén lappá való kisimulás figyelhető meg.



1. ábra: Párhuzamos, egybevágó grafén szalagokból álló bemeneti modell és az állandósult szerkezet.

A kísérletet megismételtük 1000 K-nél alacsonyabb és magasabb hőmérsékleteken is. A két nanoszalag más hőmérsékleteken sem tudott teljesen összenőni. (700-1300 K közötti hőmérsékleten az 1. ábrán látható eredményeket kaptuk. Alacsonyabb hőmérsékleten a szalagok összenövése nem kezdődött meg, magasabb hőmérsékleten pedig összenövés helyett a rendszer szétesett.)

A grafén nanoszalagok hibátlan összenövésének érdekében a méretek növelése látszik célszerűnek. Először a szalagok hosszának növelését vizsgáljuk meg. A hossz növelésével nagyobb a valószínűség arra, hogy a szalagok összenövése egyszerre több helyen is megkezdődik, és ezek a kialakult kötések összehúzzák a szerkezet szomszédos részeit is. A 2. és 3. ábrák felső részein ismét párhuzamosan egymás fölé helyezett, egybevágó, karosszék típusú nanoszalagok modelljeit mutatjuk. A nanoszalagok szélessége azonos az 1. ábrán látható szalagokéval, csak a szalagok hosszát növeltük. 1250 K és 1100 K hőmérsékleten futtatott szimuláció eredményeit mutatjuk.



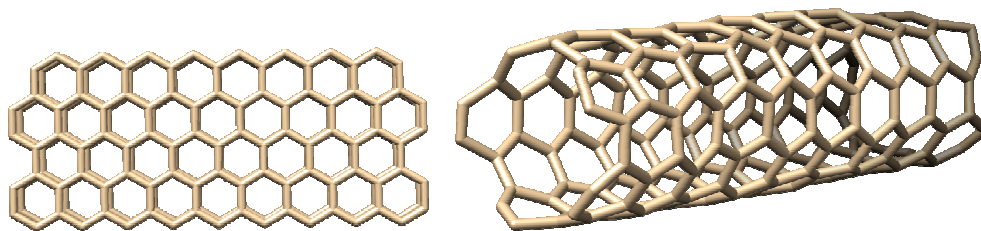
2. ábra: 4.302 nm hosszú bemeneti modell és az állandósult szerkezet..



3. ábra: 14.101 nm hosszú bemeneti modell és az állandósult szerkezet.

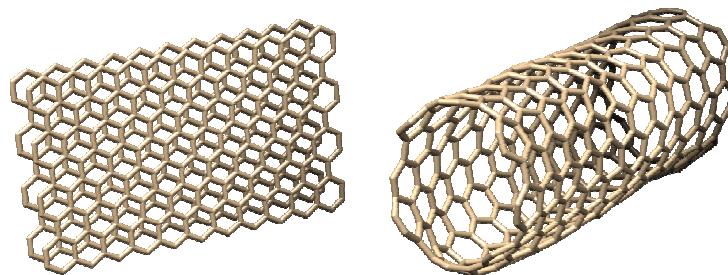
A szimuláció során a két nanoszalag összenövése a hosszabb modell esetében már valóban több ponton megkezdődött, de ezek a kötések mégsem tudták a szerkezetet szabályos nanocsővé összehúzni. A 2. és 3. ábrák alsó részein látható szerkezetek állandósulnak, egyes szakaszokon a grafén lappá való kisimulás most is megfigyelhető. Az eredményt tekintve más hőmérsékleten sem tapasztaltunk lényegi különbségeket. Az előző futtatásnál ismertetett hőmérsékleti viszonyok itt is hasonlóan alakultak. Ez a tendencia a későbbi futtatásoknál is hasonlóan adódott, ezért a későbbiek során csak a legjellemzőbb hőmérsékleten való futtatást fogjuk ismertetni.

A hossznövelés után a szélességnövelés hatását vizsgáljuk meg. A 4. ábrán egy kristályréteggel szélesebb (0.897 nm széles) nanoszalagokból álló bemeneti modell látható. 1000 K hőmérsékleten futtatott szimuláció eredményét mutatjuk. A szélesebb grafén nanoszalagok hibátlan nanocső szerkezetté nőttek össze, már kis hosszúságok esetén is.



4. ábra: 0.897 nm széles grafén nanoszalagokból álló bementi modell és az állandósult szerkezet.

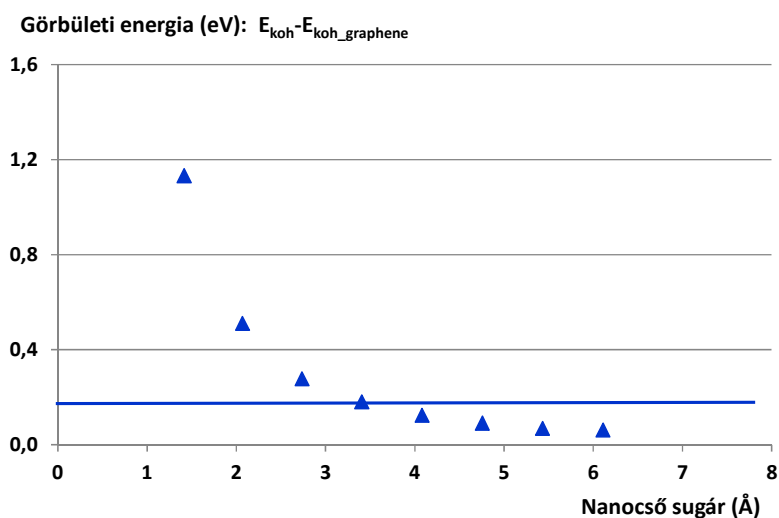
A grafén nanoszalagok szélességének további növelésével a hibátlan összenövés tendenciája megmarad, 5. ábra.



5. ábra: 1.518 nm széles grafén nanoszalagokból álló bementi modell és az állandósult szerkezet.

Felmerül a kérdés, mi lehet az oka annak, hogy egy kritikus grafén nanoszalag szélesség felett hibátlan nanocső szerkezetet kapunk, amíg ennél keskenyebb szalagok esetében nem alakul ki hibátlan nanocső szerkezet. A magyarázatot szükségszerűen a különböző sugarú szén nanocsövek energiaállapotainak különbségében kell keresnünk. A 6. ábrán a karosszék típusú szén nanocsövek görbületi energiáit mutatjuk a sugár függvényében. A görbületi energiát az $E_c - E_{c_graphene}$ kifejezéssel definiáljuk, azaz az adott szén nanocsőre kalkulált, egy atomra vonatkoztatott átlagos kötési energiából (E_c) kivonjuk a grafén hasonlóan számolt átlagos kötési energiáját ($E_{c_graphene}$), atomonként ennyi többletenergiára van ugyanis szükség ahhoz, hogy adott grafén nanoszalagból szén nanocső szerkezet alakulhasson ki. Az átlagos kötési energiára, így a görbületi energiára is igaz, hogy változik a nanocső sugár függvényében, de nem függ a csövek hosszától.

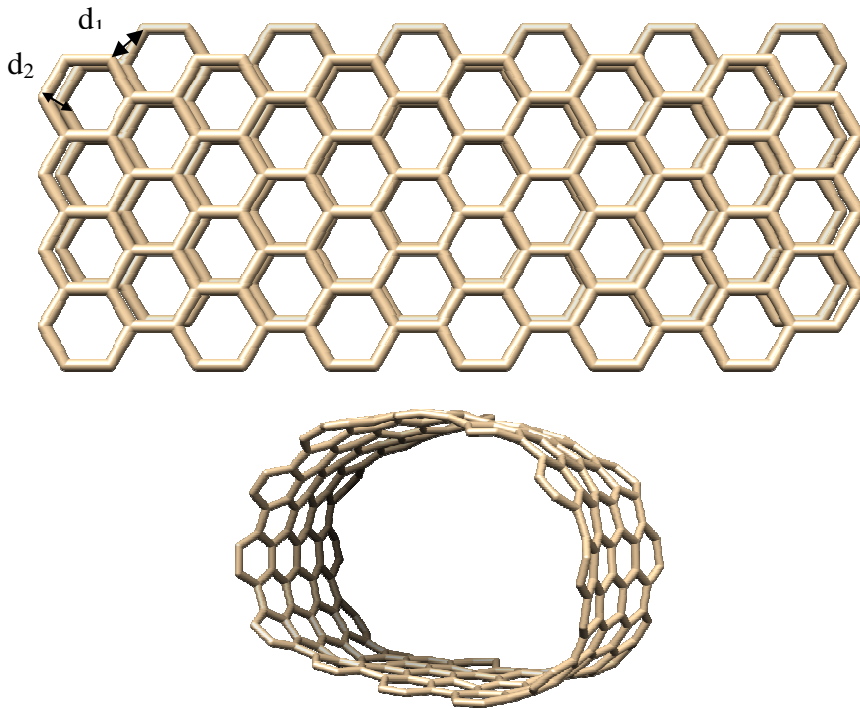
A 6. ábrán látható, hogy a nagyobb sugarú, kisebb görbülettel rendelkező szén nanocsövek görbületi energiája kisebb, hiszen az átlagos kötési energiájuk közelebb áll a grafén átlagos kötési energiájához. A kisebb sugarú, nagyobb görbülettel bíró nanocsövek görbületi energiája magasabb, mint a nagyobb sugarúaké. A kis sugarú, nagyobb energiájú nanocső szerkezeteknek grafén szalagokból való kialakításához (a szalagok begörbítéséhez) tehát több energiára van szükség. A többlet energia fedezetére a szalagok szélein egymás után kialakuló kötések nem minden esetben elegendőek. Többlet energiát a hőmérséklet emelésével tudunk a rendszerbe vinni, de az erre vonatkozó kísérletek sikertelenek voltak. A 6. ábra szerint a karosszék típusú szén nanocsövek grafén nanoszalagokból való hibátlan kialakításához egy kritikus szalagszélesség adódik. Ez a kritikus szalagszélesség 4 kristályréteg (0.897 nm, 4. ábra), amely a kialakuló nanocsőnél 0.33 nm sugárnak (5,5) kiralitásvektornak felel meg (4. ábra). A diagramon vízszintes vonallal jelöltük a kritikus szalagszélességnek megfelelő kritikus görbületi energiát (0.18 eV).



6. ábra: Karosszék típusú szén nanocsövek görbületi energiája

3.2 Cikkcakk nanocsövek

A cikkcakk nanocsövek esetében az alapprobléma összetettebb, mint a karosszék nanocsöveknél. Az első példán látni fogjuk, hogy a grafén szalagok végei alapvetően befolyásolják a kialakuló szerkezetet. A 7. ábrán két párhuzamosan egymás fölé helyezett, cikkcakk típusú grafén nanoszalag modellje látható. Az egybevágó szalagok pontos egymás fölé helyezését kizártuk, mert a karosszék elrendezés miatt a hosszanti széleknél 4 és 8 szögek jönnének létre. Az 1000 K-en futtatott szimuláció eredményét mutatjuk az ábra alsó részén. A szalagok rövidebb oldalán, a cikkcakk elrendeződésű atomok között alakulnak ki kötések, lényegében a várthoz képest 90°-kal elfordított, nagy átmérőjű karosszék típusú cső jön létre. A szalagok hosszanti szélein a karosszék elrendezés mellett topológiailag szintén kialakulhatnak a hatszöges összenövés, itt azonban a szabad kötéssel rendelkező szénatomok távolsága nagyobb, mint a rövidebb végeknél, az ábra jelöléseivel: $d_1 > d_2$. Emiatt kezdődik meg az összenövés a rövidebb szalagvégeken. A cikkcakk nanocsövek esetében tehát a szalagvégek kialakítására is figyelni kell. A szalagvégeket úgy kell kialakítani, hogy a széleken lévő szénatomok távolsága a szalagok hosszabb oldalainál kisebb legyen, mint a szalagvégeknél, a 8. ábra jelöléseivel: $d_1 < d_2$.

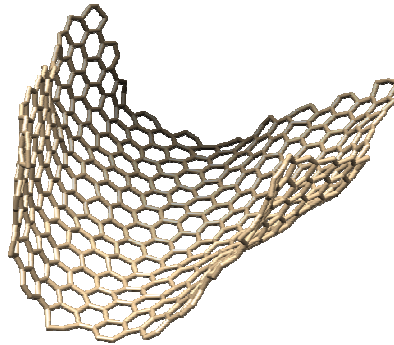
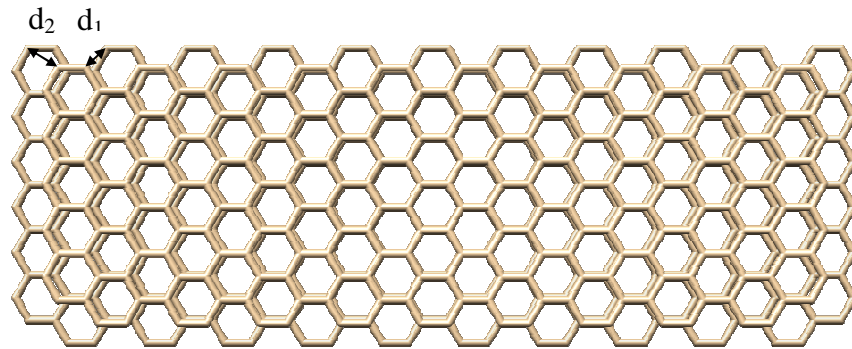


7. ábra: Két egybevágó grafén nanoszalagból álló bemeneti modell és az állandósult szerkezet: a szalagok végeinél összenőtt karosszék típusú nanocső

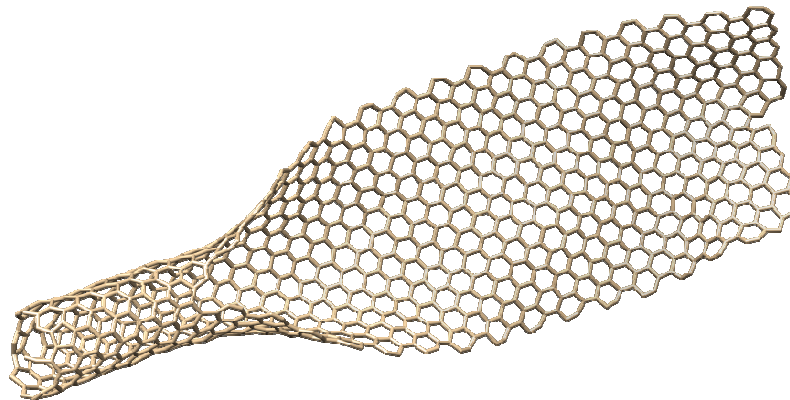
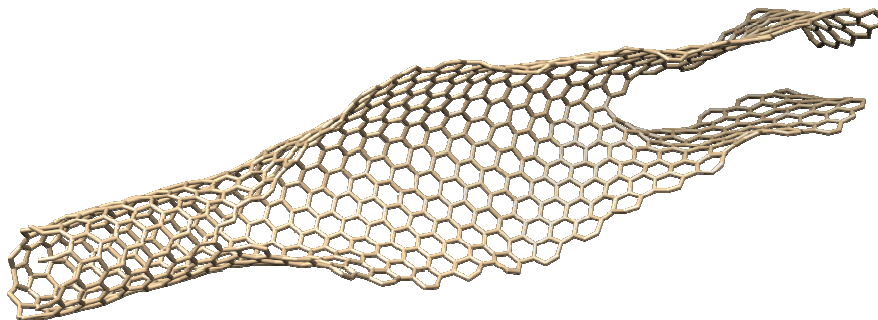
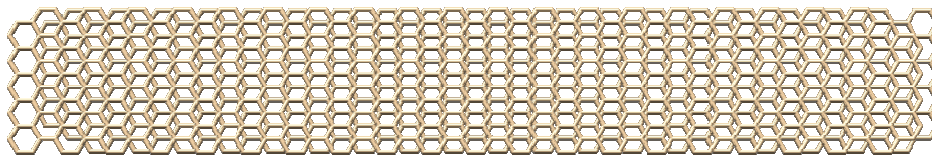
A cikkcakk nanocsövek esetében a kritikus grafén szalagszélesség nagyobbra adódik, mint a karosszék nanocsöveknél. A kritikus érték környezetét elemezzük a következő példával.

A 8. ábrán 1.264 nm és 1.503 nm széles grafén nanoszalagokból álló bemeneti modell látható. A két szalag széléin található, szabad kötéssel rendelkező szénatomok távolsága a hosszanti oldalak mentén kisebb, mint a végeknél ($d_1 < d_2$), ezért várhatóan most a hosszanti oldalon kell megtörténnie az összenövésnek. A szimuláció során valóban a hosszanti oldalon nő össze a szerkezet, de csak az egyik oldalon alakulnak ki kötések, a szerkezet szétnyílik, a grafén lappá való alakulás jellemző.

A 9. ábrán látható bemeneti modellen a grafén szalagokat az előző példához viszonyítva keresztirányban eltoltuk, hogy a hosszanti széleken lévő atomok egymás fölé kerüljenek, ahogyan a grafit kristályszerkezetében rendeződnek az egymás feletti kristálysíkok. Így a d_1 távolság némileg kisebbre adódik. Hosszabb szalagok választásával több esélyt adunk arra, hogy a szalagok összenövése mindkét oldalon megkezdődhessen. A szimuláció pillanatfelvételeit is mutatjuk, 1.7 ps és 2.8 ps elteltével. Annak ellenére, hogy valóban mindkét hosszanti oldalon megkezdődött az összenövés, a hibátlan nanocső szerkezet mégsem alakult ki a grafén lappá való simulási kényszer miatt.

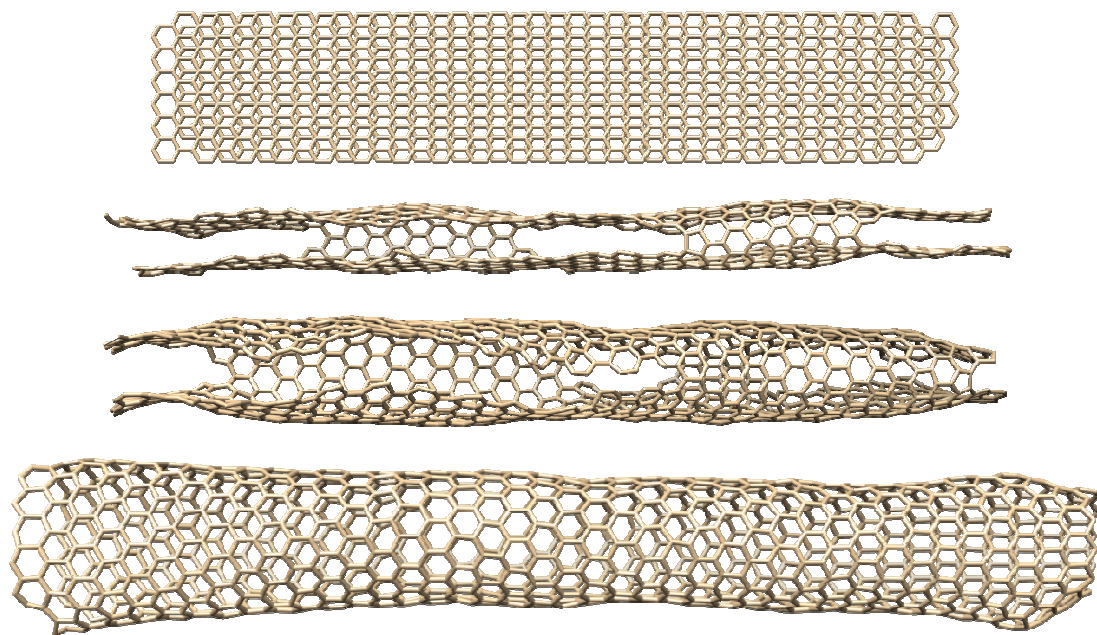


8. ábra: A bemeneti modell, optimálisan kialakított szalagvégekkel és a szétnyílt szerkezet.



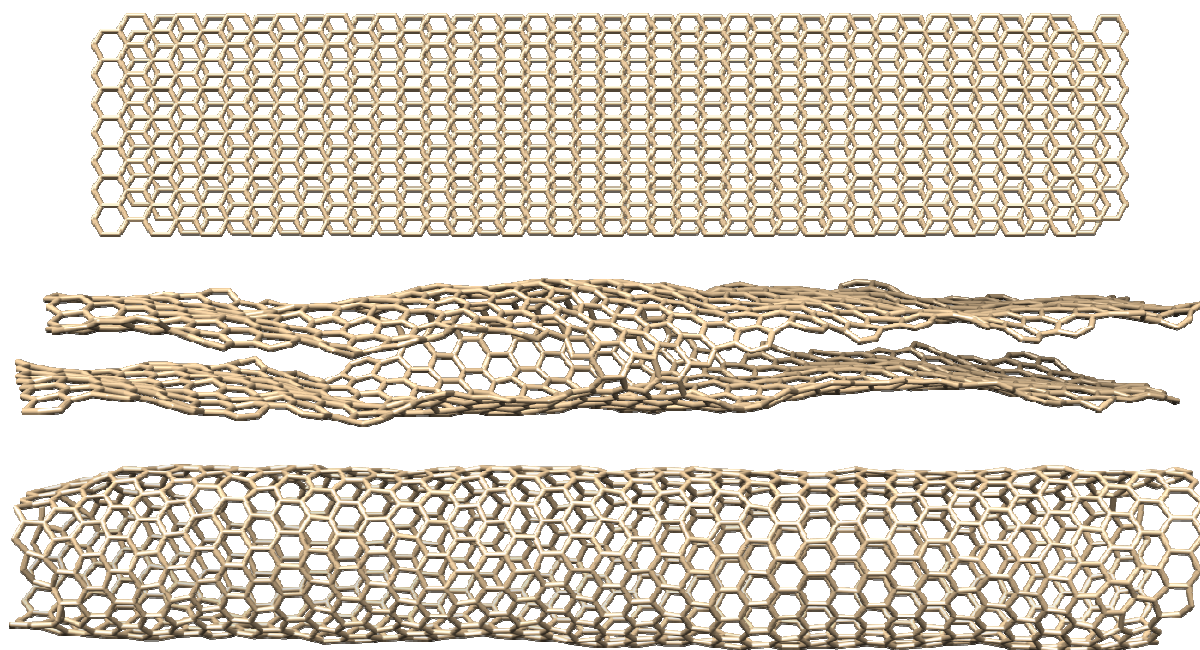
9. ábra: 1.264 nm széles bemeneti modell, alatta a szimuláció pillanatfelvételei 1.7 ps és 2.8 ps után (állandósult szerkezet).

A következő példákban a nanoszalagok szélességét növeljük. A 10. ábrán 1.503 nm szélességű szalagokból álló bemeneti modell látható. A szimuláció során 0.4 ps idő elteltével mindkét oldalon megkezdődött az összenövés és 2.8 ps alatt kialakul a nanocső szerkezet.



10. ábra: 1.503 nm széles bemeneti modell, a szimuláció állása 0.45 ps és 0.77 ps elteltével és az állandósult szerkezet 2.8 ps után

A karosszék nanocsövek esetéhez hasonlóan a grafén nanoszalagok szélességének további növelésével a hibátlan összenövés tendenciája megmarad a cikkcakk nanocsövek esetében is. A 11. ábrán látható, a korábbi példánál szélesebb szalagokból álló bemeneti modellnél a szimuláció során 0.8 ps idő elteltével mindkét oldalon megkezdődik az összenövés és 2.6 ps alatt kialakul a nanocső szerkezet.



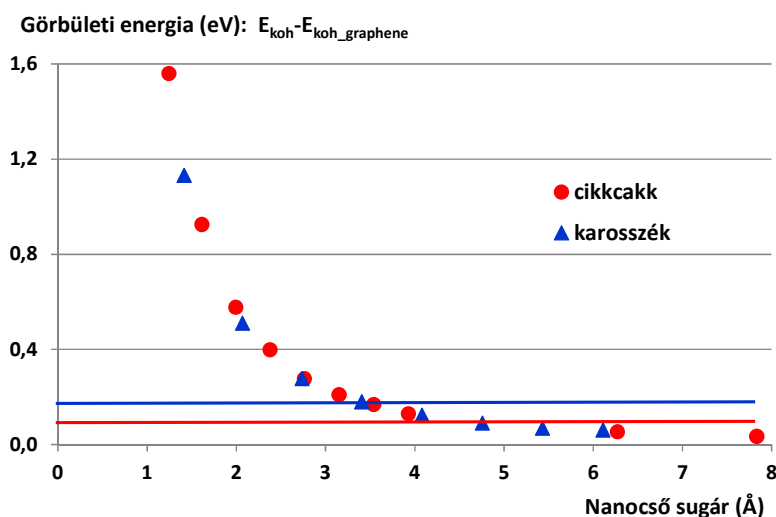
11. ábra: 1.742 nm széles bemeneti modell, a szimuláció állása 0.8 ps elteltével és az állandósult szerkezet

A cikkcakk típusú szén nanocsövek előállításánál több probléma merült fel, mint a karosszék típusúaknál. A szalagok végeinek optimális kialakítását és a szalagok helyes pozícióját kellett legelőször

megkeresni. A grafén lappá alakulási kényszer leküzdéséhez nagyobb kritikus szalagszélesség adódott, mint a karosszék nanocsöveknél.

A kritikus érték magyarázatához most is a különböző görbületű szén nanocsövek energiaállapotainak különbségét vizsgáltuk.

A 12. ábrán ugyanabban a diagramban mutatjuk a cikkcakk és karosszék típusú szén nanocsövek görbületi energiáit a sugár függvényében. A kétféle nanocső esetében a számított pontok láthatóan ugyanazon görbére esnek. A kritikus szalagszélesség cikkcakk típusú csöveknél nagyobbra adódott, 1.503 nm szélességű szalagoknál alakult ki először hibátlan csőszerkezet, amely a cikkcakk típusú nanocsöveknél (14, 0) kiralitás vektornak felel meg, a kritikus görbületi energiát (0.1 eV) piros vízszintes vonallal jelöltük a diagramon.



12. ábra: Cikkcakk és karosszék típusú szén nanocsövek görbületi energiája

Összefoglalás

Molekuláris dinamikai szimulációk azt mutatják, hogy két párhuzamosan egymás fölé helyezett nanoszalagból a következő feltételek teljesülése esetén alakul ki szén nanocső szerkezet:

- Karosszék típusú nanocsövek kialakításához elegendő a kritikus szalagszélesség (0.897 nm) megléte, ezzel együtt a görbületi energiának a kritikus értéknél (0.18 eV) kisebbnek kell lennie.
- Cikkcakk típusú nanocsövek kialakításához a kritikus szalagszélesség nagyobbra (1.503 nm), a kritikus görbületi energia (0.1 eV) kisebbre adódik. Emellett a szalagvégek kialakítására is figyelni kell: a szabad kötéssel rendelkező szénatomok távolsága a szalagvégeken nagyobb kell, hogy legyen, mint a szalagok hosszanti oldalán.

Köszönetnyilvánítás

A kutatás a "Járműipari anyagfejlesztések" című TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0029 azonosító számú projekt támogatásával valósult meg.

Hivatkozások

[1] Avouris P. Molecular electronics with carbon nanotubes. Accounts Chem. Res. 35, 1026-1034, 2002

- [2] Tans S.J., Verschueren A.R.M., Dekker C. Room-temperature transistor based on a single carbon nanotube. *Nature* 393, 49-52, 1998
- [3] Yao Z., Postma H.W.C., Balents L., Dekker C. Carbon nanotube intramolecular junctions. *Nature* 402, 273-276, 1999
- [4] Keren K., Berman R.S., Buchstab E., Sivan U., Braun E. DNA-templated carbon nanotube field-effect transistor. *Science* 302, 1380-1382, 2003
- [5] Tapaszto L., Dobrik G., Lambin P., Biro L.P. Tailoring the atomic structure of graphene nanoribbons by scanning tunnelling microscope lithography, *Nature Nanotechnology* 3, 397-401, 2008
- [6] Nemes-Incze P., Magda G., Kamarás K., Biró L. P. Crystallographically selective nanopatterning of graphene on SiO₂, *Nano Research* 3, 110, 2010
- [7] Datta, S. S., Strachan, D. R., Khamis, S. M., Johnson, A. T. C. Crystallographic etching of few-layer graphene. *Nano Lett.* 8, 1912–1915, 2008
- [8] Wu Z.S., Ren W.C., Gao L.B., Liu B.L., Zhao J.P., Cheng H.M. Efficient Synthesis of Graphene Nanoribbons Sonochemically Cut from Graphene Sheets, *Nano Research*, 3, 16-22, 2010
- [9] Jiao L., Zhang L., Wang X., Diankov G., Dai H. Narrow graphene nanoribbons from carbon nanotubes, *Nature* 458, 877-880, 2009
- [10] Son Y.W., Cohen M.L., Louie S.G. Half-metallic graphene nanoribbons, *Nature* 444, 2006
- [11] Son Q.F., Xie X.C. Quantum transport through a graphene nanoribbon-superconductor junction, *Journal of Physics, Condensed Matter* 21, 344204, 2009
- [12] Akhemov A.R., Bardarson J.H., Rycerz A., Beenakker C.W.J. Theory of the valley-valve effect in graphene nanoribbons, *Physical Review B* 77, 205416, 2008
- [13] Han M.Y., Özyilmaz B., Zhang Y., Kim P. Energy Band-Gap Engineering of Graphene Nanoribbons, *Phys. Rev. Lett.* 98, 206805, 2007
- [14] Alam K. Transport and performance of a zero-Schottky barrier and doped contacts graphene nanoribbon transistors, *Semiconductor Science and Technology* 24, 015007, 2009
- [15] Xie Y.E., Chen Y.P., Sun L.Z., Zhang K.W. Zhong J. The effect of corner form on electron transport of L-shaped graphene nanoribbons, *Physica B-Condensed Matter* 404, 1771-1775, 2009
- [16] Kong X.L., Xiong Y.J. Resonance Transport of Graphene Nanoribbon T-Shaped Junctions, *Chinese Phys. Letters* 27, 047202, 2010
- [17] Li Y.F., Li B.R., Zhang H.L. The computational design of junctions between carbon nanotubes and graphene nanoribbons, *Nanotechnology* 20, 225202, 2009
- [18] Chen Y.P., Xie Y.E., Sun L.Z., Zhong J.X. Asymmetric transport in asymmetric T-shaped graphene nanoribbons, *Applied Physics Letters* 93, 092104, 2008
- [19] Wang Z.F., Li Q.X., Shi Q.W., Wang X.P., Hou J.G., Zheng H.X., Yao Y., Chen J. Ballistic rectification in a Z-shaped graphene nanoribbon junction, *Applied Physics Letter* 92, 133119, 2008
- [20] Chen Y.P., Xie Y.E., Zhong J.X. Resonant transport and quantum bound states in Z-shaped graphene nanoribbons, *Physics Letter A* 372, 2928-5931, 2008
- [21] Areshkin D.A., White C.T. Building Blocks for Integrated Graphene Circuits, *Nanoletters* 7, 3253-3259, 2007
- [22] Areshkin D.A., Nikolic B.K. I-V curve signatures of nonequilibrium-driven band gap collapse in magnetically ordered zigzag graphene nanoribbon two-terminal devices, *Phys. Review B* 79, 205430, 2009
- [23] Guo J. Modeling of graphene nanoribbon devices, *Nanoscale* 4, 5538-5548, 2012
- [24] Lee G.Y., Kang J.W. Controlling resonance frequencies of double-walled carbon nanotube oscillators with divided outertubes, *J. of Nanoscience and Nanotechnology*, 14, 6033-6037, 2014.

- [25] Han S.S., Lee K.S., Lee H.M. Nucleation mechanism of carbon nanotube, *Chemical Physics Letters* 383, 321-325, 2004
- [26] He L., Lu JQ., Jiang H. Controlled Carbon-Nanotube Junctions Self-Assembled from Graphene Nanoribbons, *Small* 5(24), 2802-2806, 2009
- [27] László I., Zsoldos I. Graphene-based molecular dynamics nanolithography of fullerenes, nanotubes and other carbon structures, *Europhysics Letters* 99, 63001, 2012
- [28] László I., Zsoldos I. Molecular dynamics simulation of carbon nanostructures: The C₆₀ buckminsterfullerene, *Phys. Status Solidi B* 249(12), 2616-2619, 2012
- [29] László I., Zsoldos I. Molecular dynamics simulation of carbon nanostructures: The D_{5h} C₇₀ fullerene, *Physica E* 56, 427-430, 2014
- [30] Allen M.P., Tildesley D.J. *Computer Simulation of Liquids* (Clarendon Press, Oxford) 1996.
- [31] Frenkel D., Smit B. *Understanding Molecular Simulation* (Academic Press, San Diego) 1996.
- [32] Porezag D., Frauenheim T., Köhler T., Seifert G. and Kaschner R. Construction of tight-binding-like potentials on the basis of density-functional theory: application to carbon, *Phys. Rev. B*, 51, 12947-12957, 1995.
- [33] Verlet L. Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules, *Phys. Rev.*, 159, 98-103, 1967.
- [34] Nosé S. A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble, *Mol. Phys.* 52, 255-268 1984.
- [35] Hoover W.G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions, *Phys. Rev. A*, 31, 1695-1697, 1985.