bevezetés a nanoszerkezetek fizikájába
11.14.

~~[illegible]~~

virag.elte.hu/kurti

fullerén C_{60} (buckminster fullerene)

~~grafe~~ grafitban és a szénben $d_{cc} = 0{,}14$ nm

szének kőt (30 db?) $\in$ van tőle

Szerkezet:

általában a grafitban el van csúszva egymás szerint egy fél C atom van benne (ami alatt van másik és ami alatt üres)

sok más fém lehetséges elrendezés is van

(a fázisdiagram szobahőmérsékletben van)

gyémánt:

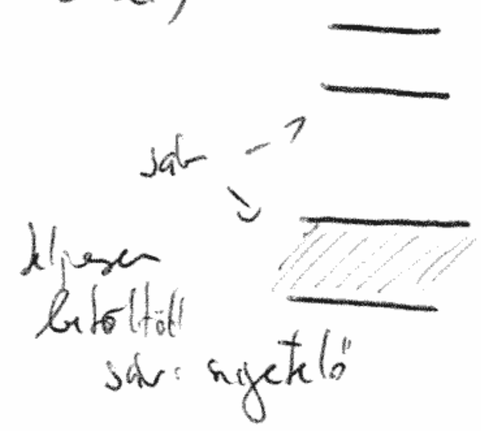
- a tetraédereket két féle lépésben is el lehet helyezni

Lonsdaleit (ilyen mintákban van nanocső) és a gyémánt

- átlátszó
- szigetelő (a grafit szerint vezet)
- teljesen más mechanikai tulajdonságok

Kvalitatív magyarázat a grafit $\leftrightarrow$ gyémánt különbségre:

- a különbség az elektronszerkezetben van (sávszerkezet)



látható fény: 1 - 3 eV

↳ gyémántnak szigetelő
↳ grafitnak vezető } sávszerkezet

gyémánt sp^3 hibridizáció

2db sp^3 — lazítópálya
↑ ez jó pár eV is lehet
↓ kötőpálya ← nyilak ide jön

minden párra tudok osztani ilyen pályákat

1) ha két atompálya átfed akkor kötő v. lazító pályákra kerülnek

⇓

4N szeres degeneráció felhasad
- 2N lazító } 2Ndb (csak σ^*)
- 2N kötő } 2Ndb (csak σ)

a 4N db elektron párosával betölti az egészet

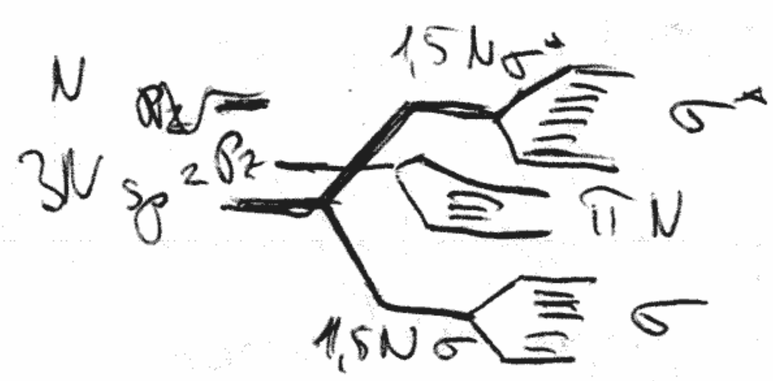
a két atomos molekulapályák is átfedtek, de csak kicsit

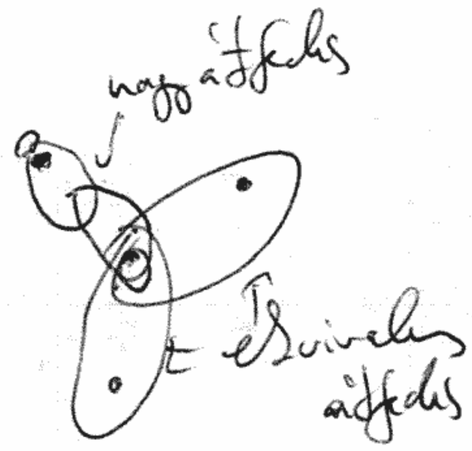
⇓

2) ha egy hullámfüggvény több monomérjével is ekvivalensen kölcsönhat, akkor egy sáv alakul ki

grafit

3N sp^2





4Ndb elektronból
3N a σ
N a π-x → itt a felénél alszik
a állapot → a Fermi szint a π pont közepe van.

a grafit a kedvezőbb energiatartalmú (mert olcsóbb)

a grafitban az sp^2-k átfedése nagyobb mint a gyémántban az sp^3 (szorosabb vannak az elektronok) ⇒ σ sáv messzebb van és ezen a π nem vont angyit de nagyon kicsi a sávszélesség (C atomokat ~16meV)

Szén nano
11.14

E − TS amit valójában nézni kéne (a grafit entropiája nagyobb)
miatt lesz jóval stabilabb

ha nyomást is nézünk

E − TS + pV a grafit térfogatát nagyobb tehát a nyomás növekszik
vont ezen

Szén nano
11. 21

~~Szabolcs~~ Kroto: szerves molekulákat mutatott ki a ~~csillagközi térben~~ vörös óriási külső körben spektroszkopikusan

$H_2C=O$, $H-C\equiv N$, CO

a kollégái ilyeneket gondoltak.

$H-(C\equiv C)_N-H$

$H-(C\equiv C-C)\equiv N$ → utána felvették a spektrumot és megfeleltek az ~~csillagok~~ írben

2_{2+1}

Smalley nósakozott azzal, hogy lézerrel lőtt szét dolgokat és szépiesi-cölö fémgyűrűtromeiteibe vezette azelet

↳ erről szólt a Curl a Kroto-nak de Smalleynak nem tetszett

Smalley szénszálakhoz volt szokva a Exxonnál

egy ér műlba szóltak Krotonak hogy van ~~gy~~ szét ~~dolg~~ ang használhatja a gépet

- impulzus üzemű lézerrel forgó szén szórongott lőttek
~~elő~~ amit egy nyomás gázzal fújtak
először ammóniával aztán Hélimmal fújtak

a spektrumban csak páros rendszámú tagok voltak

↓

ellenőrzés játszani a paraméterekkel

↓

illeszteni a C_{60}-at

---

a C_{20} nagyon instabil

a ötszögek mindig 12-en vannak, mindegy hány C_{hat}

~~Euler~~ Euler-féle poliéder tétel

~~P~~ csúcsok C

$C + L = E + 2$

~~vége~~: lapok L

~~élek~~ E

n_5 db ötszög n_6 db hatszög

$L = n_5 + n_6$

$C = \frac{5n_5 + 6n_6}{3}$ (minden csúcsot három vagy más 3 lap ~~annak~~)

$L = \frac{5n_5 + 6n_6}{2}$

$\frac{5n_5 + 6n_6}{3} + n_5 + n_6 = \frac{5n_5 + 6n_6}{2}$

$16n_5 + 18n_6 = 15n_5 + 18n_6 + 12$

$\boxed{n_5 = 12}$

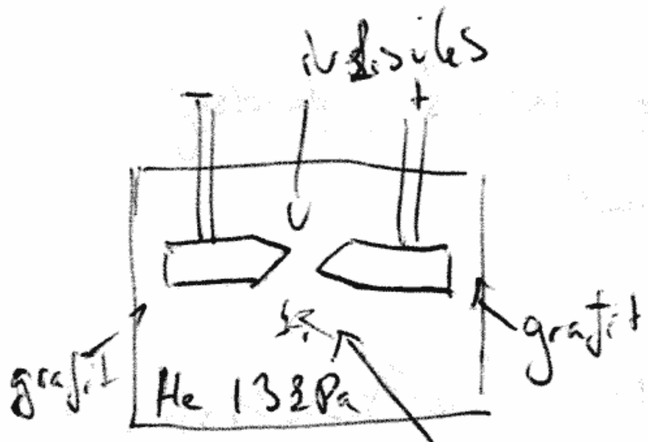
pároszsag $C = \frac{5 \cdot 12}{3} + \frac{6}{3}n_6 =$

$=$ páros szám $+ 2n_6 =$

páros szám

1990: új Nature cikk

valóban előállítják C_{60} kristályokat (Krätschmer, Lamb, Fostiropoulos, Huffman)



a C_{60}-at benzolban v. toluolban oldják

korom → kristályosítható : makroszkopikus mennyiség

infravörös spektrum: egyes módusokat gerjeszt

a C_{60} 174 normál módusban
↳ nem mindegyik aktív IR-ben és van degenerált

szögt
||
elnyel összesen vagy 4 db látszik IR-ben

NMR: ehhez kell ^{13}C mert a ^{12}C-nek nincs NMR-jele
↓
(magmomentum Larmor-frekvenciája)
↳ nem a külső mágneses tér érzi az elektronfelhő miatt)

$$\omega = \gamma (1 - \sigma) B$$

σ: diamágneses árnyékolás (ppm): erős viszonylag kis szinten nőttek kicsi és a szilícium szerves jellegű

~~$^{13}C_{60}$~~

ha $^{13}C_{60}$ van a $^{12}C_{60}$-ban, akkor a szimmetriát nincs szétlen vonal lesz az NMR-ben

a C_{70}-ben 5 féle nem ekvivalens pozíció van ⇒ 5 vonal a spektrumban

itt nem írtam le az hogy halom dolgot a NMR-el szerkezetben

Lapcentrált kristály

3 ~~X~~ van de Waals távolság
a szénnél

⇓

gyenge kötés (molekulakristály)

⇓

a C_{60} elhelyezni fogni saját
körmetszés lehetőt C_{90}

200 K-ig szinte áll a forgás és
sima kristály lesz

200 K-nél vált át sima kristály
itt nem tudjuk szabad a forgás
(szemben szerkezet szerint gyűrűk)

rendszerint szép nem
lehet szerkezetet szimmetriát belőle, mert nagy körmetszés gömbök
lesznek, alacsonyan meg a kristály és az ötfogású szimmetria itt
fontos

Léteshosszt : elektron diffrakció
NMR
röntgen
} ilyennel lehet mérni

C_{60} : elektronok állapota : => elektronos
=> optikai
tulajdonságok

egy C-nek 6 e^--ja

$1s^2$: 1 ilyen elektron energiája (13,6 eV a H alapállapot)
O-ra körülbelül $Z^2 \cdot 13{,}6$ eV
(kicsit nagyobb)

3db sp^2 hibrid
1db p_z pálya
↳ ez ilyen gömbszimmetrikus csak kis → gömbfüggvény
(első közelítésben)

h	5	11
g	4	9
f	3	7
d	2	5
p	1	3
s	0	1
	l	degeneráció

× 2 a spin miatt => 60db kell míg l = 5 is

de ennek valójában sokszögű a szimmetriája
és ezek felhasadnak
ezt állítólag (mivel Lőrincz hogyan kell egy ilyen felhasadást meggondolni)
azt tanultak egy éve

highest occupied molecular orbital (HOMO)
lowest unoccupied —"— (LUMO)
} Frontiers - orbitals (itt lehet mérni)

ez konkrétan az, hogy elforgatom valahova a tengelyt ott tesszek és vissza

$S g S^{-1}$: konjugált osztályok : ezeknek ugyanaz a spurja (karakter)

az ikozaédernek 120 db szimmetria művelet

ez ugyanaz mintha egy S-ből az ott levő ugyanolyan szimmetriát tenném vissza

a degeneráció foka a ugyanannyiszor (ugyanaz dimenziója

szóban ennyire jutott az óra utolsó tanulói :)

I_h csoport

konjugáltosztály

tükrözve forgatás

~~C_5 tükrös forgatások~~

tükörsík

	E	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$	i	$12S_{10}$	$12S_{10}^3$	$20S_6$	15σ
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$T_{1g} \equiv F_{1g}$	3									
$T_{2g} \equiv F_{2g}$	3									
G_g	4									
H_g	5									
A_u	1									
$T_{1u} \equiv F_{1u}$	3									
$T_{2u} \equiv F_{2u}$	3									
G_u	4									
H_u	5									

10 db ábrázolás ez 10 konjugált osztály van

ez itt a ábrázoló mátrix spúrja

levezethető ábrázolásban

A, B : a 1 dimes ábrázolás (C,D: szimmetria)

g, u : az inverzió

E : 2 dim

F : 3 -"- (spektroszkopiában ez van ott T-nek hívja)

G : 4 -"-

H : 5 -"-

a 60 db p_z pálya fog 60 dimenziós ábrázolni
↳ ez a gamma ábrázolás
ez fog redukálódni ábrázolás ennek a karakterei ~~[illegible]~~ van nincsenek ezen a spúrra

	E	$12\,C_5$	$12\,C_5^2$	$20\,C_3$	$15\,C_2$	i	$12\,S_{10}$	$12\,S_{10}^3$	$20\,S_6$	$15\,\sigma$
Γ	60	0	0	0	0	0	0	0	0	4

ahol fog pont nem marad helyben stt nincsen fixtlóbeli elem
tehát a spur 0

most skalárszorzattal kell a többi ábrázolással (karakterekkel) és a eredmény, hogy hányszor van ez a fajta redukálódás

$$\Gamma = 1\,A_g + 1\,F_{1g} + 1\,F_{2g} + 2\,G_g + 3\,H_g + 0\,A_u + 2\,F_{1u} + 2\,F_{2u} + 2\,G_u + 2\,H_u$$

a megfelelő hullámfüggvényt fogja leírni megcsinálni fogja ábrázolásra, hogy vesszen a p_z-t alkalmazzon rá a szimmetria műveleteket és a karakterekkel megfelelő szűrővel osztályozzon őket

Fullerén elektronszerkezet:

kristályosítva megint változik az elektronszerkezet ⟹ kialakul a sávszerkezet

ez azért van most nagyon szépen kutatnak sokan → nagyon sűrűsödnek a sávok (több eV maradt lent és itt fél)

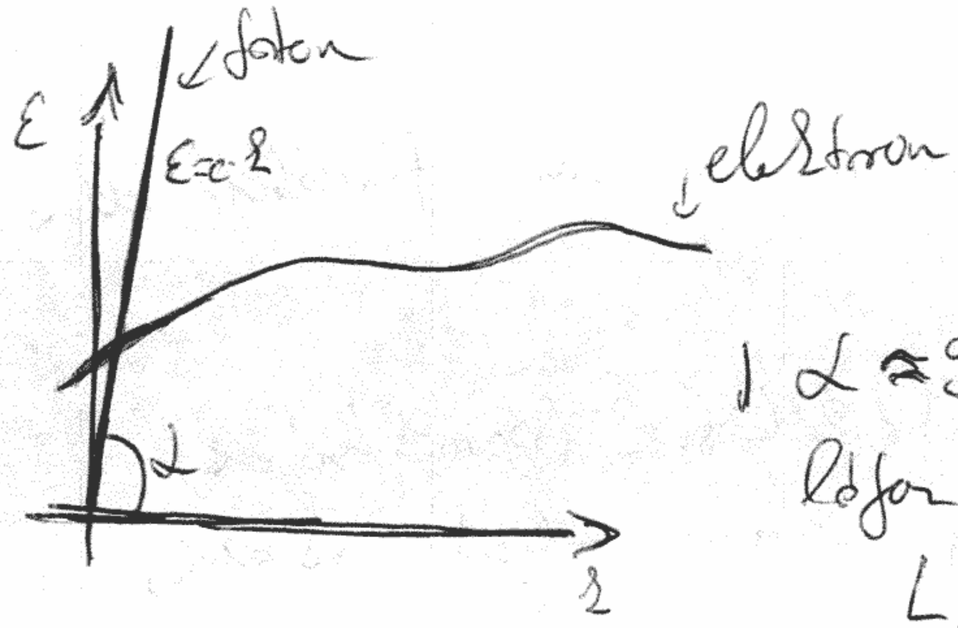
lapcentrált köbös rács

látszanak a HOMO és a LUMO degenerációjának a nyoma a sávszerkezetben

D.O.S.: density of states

⇓

van egy tiltott sáv, 1,5 eV direkt gap



ha $\alpha \approx 90°$ nőtt a elektronok sebessége a lefojtott a fényhez képest

↳ optikai gerjesztésnél a energia-impulzus megmaradás miatt

$\Delta k = 0$ fotonra

Kitérő:

a π elnevezés nem kötött, egy adekvát, mert nem sík a p_z alatt levő felület

jelen esetben a sp^2 (grafit) és a sp^3 (gyémánt) között vagyunk

Piramidalizáció

sp^2: 0 – sp^3: 19,47

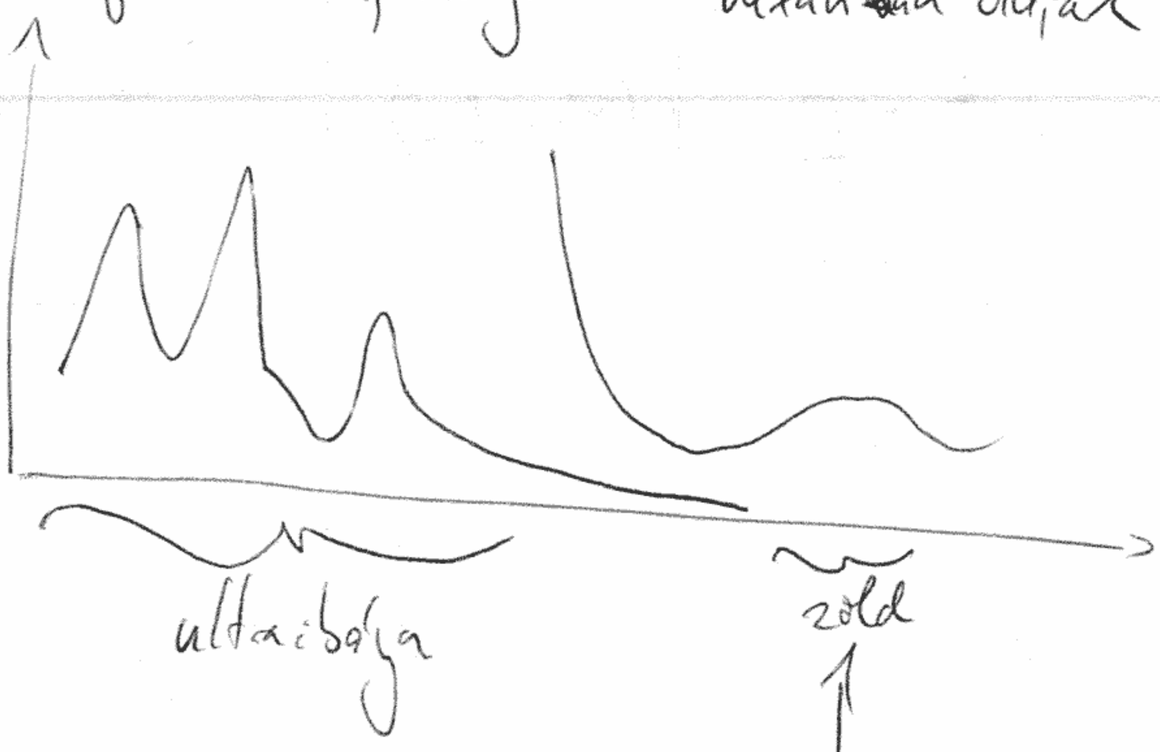
Fullerénben: C_{60}-ra 11,6

más módszerrel is van.

síkban a σ és a π nem tudnak keveredni, de most σ-π rehibridizáció van

kvalitatív dolog: az π elektront jobb kötésben a görbe felületre.

optikai tulajdonságok: hexánban oldják



a (nagyon pici) zöld a korszerű miatti szimmetria sértés miatt van

Sodonos átmenet: dipól átmenet
⇓
annak ~~[illegible]~~ elő-jelet vált inverziója
⇓
csak $u \to g$ ..
$g \to u$ átmenet lehet

azért nem látszik optikailag az 1,5 eves HOMO-LUMO átmenet mert az $u \to u$ lenne

nagyon nagy ugrással a vegyesi spektrum is látszik

exciton: a gerjesztett elektron és a lyuk kölcsönhatása

lehet singlett és triplett gerjesztődést tölni
ilyenkor ~~[illegible]~~ lehetek azonos helyen
⇓
nőjebb energia

dielektronos sorondizmus

$\varepsilon_r \qquad \mu_r \approx 1$

$$c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_r}} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \qquad N = \frac{c_0}{c} = \sqrt{\varepsilon_r} \qquad \underline{E} = \underline{E}_0 e^{-i(\omega t - \underline{k}\underline{r})}$$

polarizáció

$$\varepsilon_r = 1 + \chi$$

komplex

$$P(\omega, \underline{k}) = \chi(\omega, \underline{k}) \varepsilon_0 E(\omega, \underline{k})$$

$$\chi = \chi' + i\chi''$$

$$\varepsilon_r = \varepsilon' + i\varepsilon''$$

$$N = n + ik$$

elnyelés

$$\varepsilon' = n^2 - k^2 \qquad k = \sqrt{\frac{|\varepsilon| - \varepsilon'}{2}} \qquad n = \sqrt{\frac{|\varepsilon| + \varepsilon'}{2}}$$

$$\varepsilon'' = 2nk$$

$$\chi'(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi''(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'$$

$$\chi''(\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty}$$

} Kramers-Kronig

a nanocsövek hajlíthatóak, nagyon rugalmasak

az egyfős termelt előállítási módszerrel is a nem 30%-át hangosítják

Thess et al.: 70% hangosítás „schmutz": a nem hangosított nem

Tle

jelentős mértékű grafit, fény ha szórja is van rajta

<u>hanocső fajtái:</u>

$\underbrace{\text{cikk-cakk és karosszék}}_{\text{aszimmetrikus}}$

Wigner.elte.hu/science

az indexek a (n,m) az az
hogy a grafitsík mit hogyan fedjen
a fellépésben

~~$(n,0)$ és $(0,n)$ az szi~~

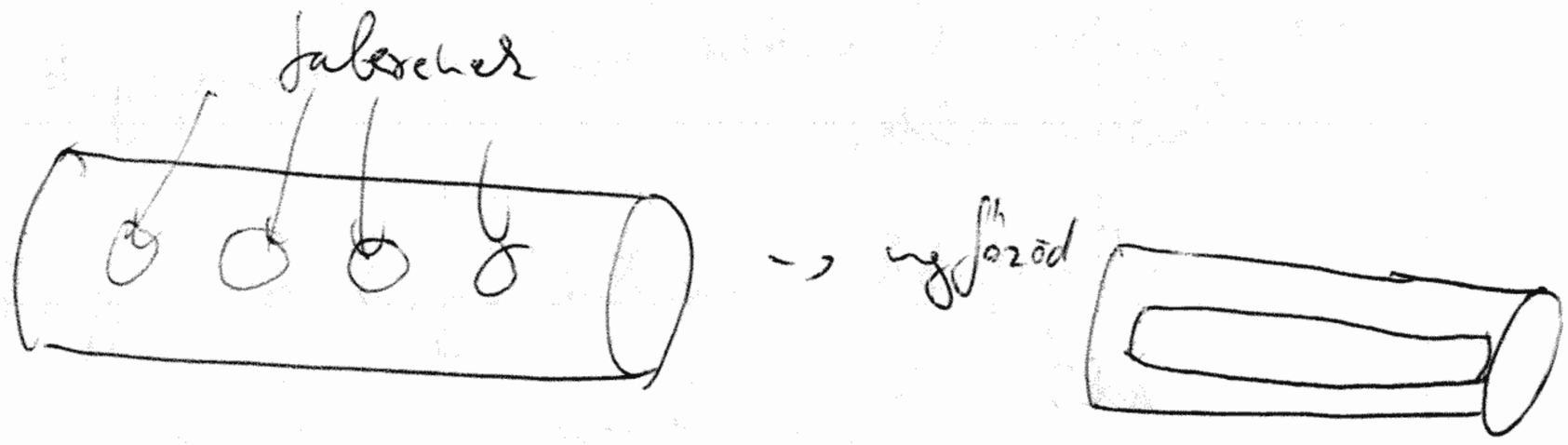
az $(n,m) = (m,n)$ ha szimmetrikus fedlet
jobb-bal - balra

a $(n,0)$ a mindig cikkcakk

$\vec{T}$ egyre merőleges vektor a
T transzlációs vektor, amivel a
hasna az elemi cellát

durva nagyság:
ha a kiralis indexek különbsége
osztható 3-mal, akkor fémes jellegű félvezető

módszer:
lassú (peapod)



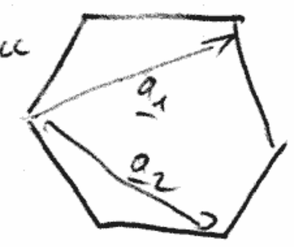
Szénia „ötös": jól funkcionalizálhatóak a nanocsövek és a ellenállásuk is jól lehet mérni

Szérnano
dIV. 4

C_h: Rivalitas (mit hosszunk fokban) -> ennek a hossza – sőkerülete

T: transzláció a cső tengelye

1,42 Å
↓
a_{cc}



$$a = |\underline{a}_1| = |\underline{a}_2| = \sqrt{3}\cdot a_{cc}$$

$$\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \pm\frac{1}{2}\right) a = \underline{a}_1, \underline{a}_2 \qquad \underline{a}\,\underline{b} = 2\pi$$

$$L = \sqrt{\underline{C}_h^2} = a\sqrt{n^2+m^2+nm}$$. Rivalis

Rivalitás nagy: a C_h-vektor a (0,0)-tól bizonyos

n,m legnagyobb közös osztója a elemi cella vektorral egyezik

d_R: $a(2n+m)$ egy $2n+m$ legnagyobb közös osztója a felhasznál
lapszelete

elektronos tulajdonságok

a módszer: zone folding method (sávszerkezet nem kösz)
↳ grafitból származtatod ezek az összehajtogatásnak megfelelő
határfeltételekre
⇓
a grafitból vonalakkal vágjuk ki a grafitban 2-szögű
sapkat fémeset, ha pont elvágjuk a k-vonalat

a M pontban vágny átmy ty kis radius törtszám $\frac{2}{d}$ kisz skal d
a szélek
egymnek kell lennie, hogy fennes a sávot
hogy

a $\frac{1}{3}(n_1 - n_2)$

1D-ben van Hove-singularitás

és a -tól nyilván szép nagyobb gerjesztésre szép naraltan

| mérés: jól fog csak a arányban

Az előző órán elős ugrott kolléga, hogy ne legyen szerveres IV. 11 Hermann

most eldönt tudunk megint

<u>ellipsometria</u>:

- a komplex dielektromos állandó nagyolható a kramers-kronige
  de a elsőrendű tag vert alles $-\infty - \infty$ Lorentz szép nemmi

ellipsometria szorosan mási a Langmuret

PSCA: Polarizator Sample Compensator Analizator
fázistolást tesz

- reflexiós mérés:

síráról: az a bázis amin diagonális

Fig 8.: a sines pontjait alt

a kékli gyorsabb a σ mint p-ben a gyorsabb fele

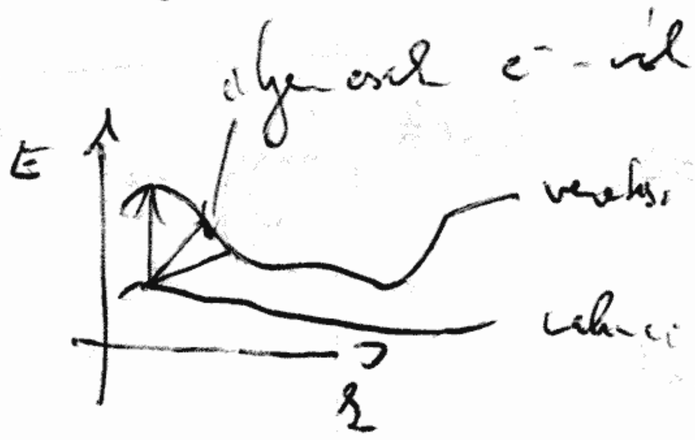
a bal fele a kreszos gyorsítás.

Spektroszkópia:

electron energy loss spectroscopy

- szabad anyagsugár
- ultra vákuum

a deflection plates: a szórás szögét változtatja és és szórási tartomány az elektronokat a detektorba



C_{60}-nál alig van impulzus ~~[illegible]~~ szórás mert alig van kinetikus

photoelectron spektroszkópia (XPS: X-ray Photo e⁻)

- nagyon szétszórt forrás elektronok gyűjthetők
  a szórás a kilökött elektron energiát ebben a gyűjtőben szépen
  szaggatott vonalak: szórás sorban gyűjti az elektronfelhőt

a piros !: itt tűnik fel homo-lumo átmenetek
mert elektron átmenetben látszanak az n→n gerjesztés
(optikában is ilyen)

Rezgési spektrum:

174 dimenziós a rezgési probléma
⇓
4 csúcs látszik [illegible]

egyszerűbb mint a 180-nak lesznek

csoportok az T_h csoport

most $\Gamma = 180$
Γ (180 dim) ábrázolást kell megoszlani

(aki tudok figyelni olyan állás vagok)

	E	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$	i	$12S_{10}$	$12S_{10}^3$	$20S_6$	15σ
Γ	180	0	0	0	0	0	0	0	0	4

$$n_{Ag} = \frac{180 + 15\cdot 4}{120} = 2$$

zárt felszín szimmetriája vizsgálata

4 átfed van a sík síkban

pontcsoport a 5 rögzítés a ikozaédere hiszünk sőt vagy ez

$p\left(1_{-1}\right)\cdot 4$

Hf.: ~~Vol~~ a 180 direkt felülete irreducibilisek szerepelnek

$$\Gamma = 2A_g + 4T_{1g}\ (3T_{1g}) + 4T_{2g} + 6G_g + 8H_g + A_u + 5T_{1u}\ (4T_{1u}) + 5T_{2u} + 6G_u + 7H_u$$

IR

R

dipolmomentum mátrixelem szerint a fotonos rezgések

dorgás és transzlációk

a teljes szimmetriák és a megfelelő rezgés irreducibilis ábrázolása szerint

IR: infravörös csak a vektorral megfelelő szimmetriájú lehetnek. T_{1u} mintha transzlációk

Raman: ilyenkor a tenzor adja a csúcsokat

ahol van átfedés ott a Raman és az infra az kiszámítása kizárja

Szemináriumi V. 2

infravörös gerjesztés: dipól átmenet

a Raman-nál a polarizálhatóság van hőre (ezért tenzor)

breathing mód: radiális

pinch mód: tangenciális (a átlagos felületnek az képzeletbeli gömb csúcsain)

a Raman-spektrumban a szimmetriát a csúcsokban keresztben polarizátorral lehet szinezni (90°-ban az itt polarizáltakat szűrjük a polarizálhatósági diagonális elemet, a spurt, ttkit az fg-t)

carbyne: lineáris szénlánc

Az egyes Raman spektrum: nincs a random csúcsok?
(szórás nincs)

↳ a csúcsszám elhagyja a szimmetriát a csúcs amiben van

↳ nem csak az egyszeri Raman szélesíti a Raman-csúcsokat (felharmonikusok) a anharmonicitás miatt

- ez a másodrendű folyamat látszik az infrában is
- az Ag módus látszik infrában pedig szimmetria elhagyják a g-nek ez fura látszani, de nem. ez az oszcillátor a C_{60} vastagságának növelésével => a hordozó felületen más a szimmetria viszonyok

infrában nem látszanak a felharmonikusokat csak szét a szerzetlen a szimmetriája g ai nem látszik infrában

Szilárdban szinkronban szerzett: rezgésállapotok
szinkronban összegére, ahol ha van T_{1u} azt látom infrában

ezeknek az eltolásoknak a hibaszórásokkal, másodlagos spektrumok
szétválasztásával az összes rezgési módus megmérhető

---

cyclic voltammogramm: ainu-jellegű karakterisztika

szoben szaphat elektront a C_{60}^{-} a fis gyűrűk az 1x-ss 2x ...
ionokat vesz

EPR = ESR

szilárd fázisban is lehet rátenni e^--t rá. jó donorokat
kell keresni. pl C_{60} filmet begőzölni alkáli atomokkal

adalékolás: „doping"

A_3C_{60} ~~szétium~~ alkáli-fullerid
alkáli

f.c.c.-ben ilyen fázis van: ijenben szét típusú
lyuk van: szétszakadt szoftis
rés (octaéderes)
kétféle lyuk szórt (tetraéderes
helyes)

msc felvételi jún 29 - 2, hétfő beadható

Szérnano V. 9

amikor nincs vizsga: június 7 - 14 (6 - 15)

lesz v. május 31. előtt de lehet másik vizsgával együtt meg a legutolsó héten

---

dopeolás:

a C_{60}-nak nagy az elektronaffinitása -> ha viszünk be donorokat akkor tölthetővé a LUMO-nát (összesen 6 e-t lehet neki adni) ha 6-ot adunk megnő a vezetőképesség, de a szétválasztó szerepe vezető

A_3C_{60} -> ~~[illegible]~~ szétválasztó ez vezető

folytatjuk ezt utána megint vissza a napravezetőre

dope-olás sorban az optikai tulajdonságok (abszorbció) „in-situ" mérés

K_3C_{60}: nincsenek ~~[illegible]~~ jellegzetes csúcsok, amit fehér

K_0C_{60} -> K_6C_{60}

↳ eltűnik egy átmenet (a 2-es) amit LUMO szintre történő átmenet

↳ kiemelkedik egy csúcs -> ez a LUMO-ról történő abszorbció

↳ a K_3C_{60}-ra kiemelkedik egy csúcs de K_6C_{60}-ra eltűnik -> ez a LUMO sávon belüli gerjesztés

Szénanó
V. 9.

low energy electron energy loss - változása

↳ L_2 kis energiás elektronokkal bombázás

↳ ez C_{60}-nál szögfüggetlen lesz.

↳ ezen kívül ugyanazt látod mint a fény abszorbciót

változások itt: eltűnik a LUMO szerint gerjesztés

megjelenik a LUMO mintájú gerjesztés

megjelenik és eltűnik a LUMO sávon belüli gerjesztés

high energy EELS

↳ ezek belső elektronokat is ki tudnak lökni

↳ bizonyos csúcsok megmaradnak de elcsúsznak (el lejjebb)

kémiai eltolódás: egy fajta áramlökést adnak a belső vagy elektronok az

1s-x is

az él az azért van mert a minimális gerjesztés hogy az 1s-t a LUMO legalsóra felravigyük

↳ az első csúcs most tele lesz a LUMO

annak tudjuk hogy 1s, hogy a C-k belső elektronjai nem túl érzékenyek az atom külső állapotaira (minden atom ilyen) ezért a 280 eV körüli csúcsnak lehet tudni, hogy 1s

ultraviolet-photoelectron - spectroszkópia (UPES)

↳ ezzel most nem a k-térjat nézzük hanem a HOMO, HOMO-1 igazából lösöget

a Fermi szintig valógerjesztés energiái

$$\epsilon_{pc} = h\nu - [e(PE) + e\phi_{sp}]$$

ez a betöltött szintet méri

kilépési munka a vákuumba (technikailag ez nem a vákuumba, hanem a spektrométerre jellemző)

ivesz - photoelectron spectroscopy

↳ $e^- \rightarrow$ ~~~>

↳ ez az ices állapotok állapotsűrűségét mérni

a PES és a IPES-sel jött ug lehet venni a betöltött és betöltetlen állapotokat
de ez ábrára is rakható tenni, de a sötét ábrát nem lehet jól megmérni illesztéssel
vagy máshol vannak a 0-pontok

Raman-spektrum

ez windhaw pinch módus
- ↳ a pinch módus a helyén marad de eltűnik | kiütés a C_{60} porban
- ↳ megjelenik de eltűnik frekvencia ez a K_3C_{60} pinche
- ↳ sötét fr. új csúcs ez a K_6C_{60} pinche

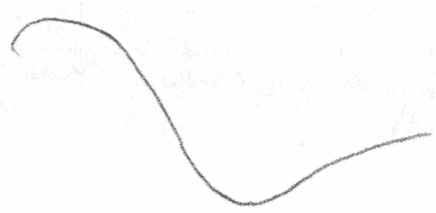
ez annak a jele, hogy a fázisok szétválnak: K_0C_{60}, K_3C_{60}, K_6C_{60}
fázis szerint van jelen, sikerült arányban
„fázis separáció"

Ramanral pár perc alatt a pinch-módus helye alapján megmondható
↳ mennyire dopedt

Infravörösben is a fázis separáció látszik

Fano-vonal: (abszorbció)

van ez diszkrét szint
és ez kontinuum szint



szét ahol ezek és van csatolás köztük

a kontinuum a vezetési elektronok és a pinch rezgés sötét
nem minden rezgésben tud csatolódni, csak ha az
egy szimmetrikus eset fy

C_{60} szupravezetése megint.

Sárunné
V. 9.

92 A_3C_{60} lehetőve szupravezet

BCS szupravezetés: e^--fonon csatolás

$$k_B T_c = 1{,}14 \cdot \hbar\omega_D \, e^{-\frac{1}{N(0)V}}$$

← 2 uni csatolás

↑ állapotsűrűség

itt nem lehet perturbációt alkalmazni, mert az $e^{-\frac{1}{x}}$ nem fejthető sorba

a C_{60} szupravezetését itt effektív csatolásokkal (olyan nagy a T_c)

- itt optikai fononok vannak (pinch módus)
- nagy a Fermi nívó állapotsűrűsége mert egy szűk sáv
  ↳ a rácsállandó növelésével egy másik is lyukat a sávot

Ramanban látszanak egy
nagyjelenek a dimerben alacsony frekvenciás rezgések
↳ 6-tal több módusa van mint két monomernek

ionos polimerizáció:

A_1C_{60} (ehhez több mint 100°C kell)

ugyanúgy olyan a rács mint a NaCl

lassan hűtöd
polymer lesz

gyorsan hűtöd
dimer lesz

[fullerénből lehet gömbtrális szerezhet polimert csinálni
de ez nem biztos vagy hát
lépfar.) rmi order arcas
mintát

bulk modulus: $\frac{\Delta V}{V} = \frac{1}{B} \cdot p$ ← nyomás

Young modulus: $\frac{\Delta l}{l} = \frac{1}{Y}\frac{F}{A}$ és lehet hogy hibás

mérni valamit mérjük]

~~H H~~ szubán: C_8H_8

C_{60}-szubán a C_{60}-ra szerű szubán molekulákat tenni
↑ rotor ↑ sztátor

Sós nano
V. 16.

~~Fullerenek kovalens~~

megjegyzés a szupravezetéssel kapcs.:

- magas az optikai módus foktije
- nagy az állapotsűrűség (a keskeny sávok miatt) } ezért nagy a kritikus mérséklet

Szatori:

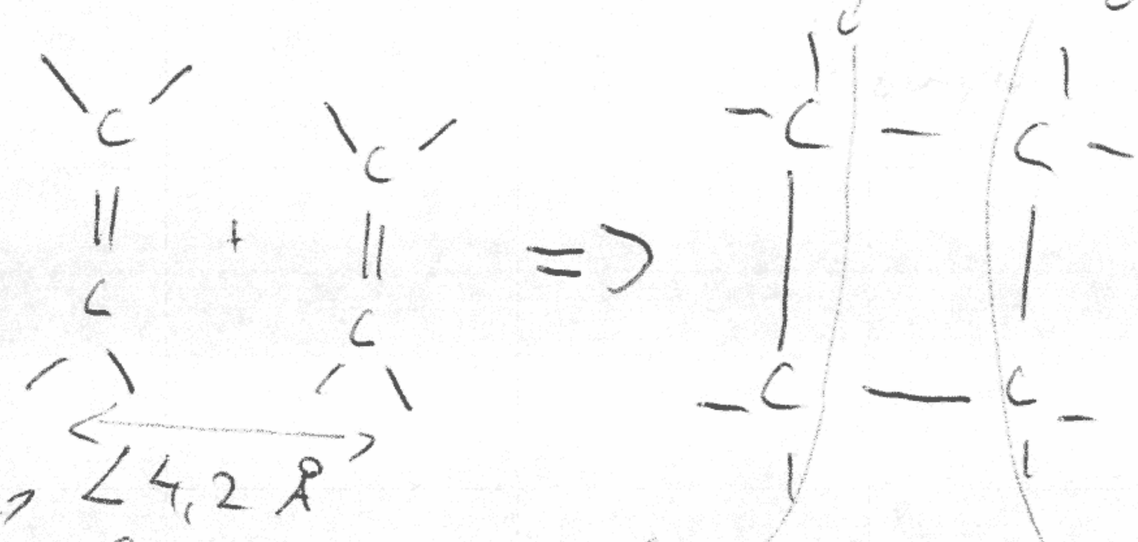
volt ötlet, hogy p-dope-olással nagyobb állapotsűrűséget lehet csinálni és csináltak 50 K-es krit hőt
↳ kiderült hagy csaltak nahát :)

C_{60} polimerek.

a 6 ring - 6 ring kötés elen kapcsolódnak össze

hozhatnak létre kovalens kötéseket legegyszerűbb
2+2 cikloaddíció

egyik C_{60} másik C_{60}



Woodward-Hoffmann szabályok
:)

4n, 4n+2
↑
az összes a molekulára levő, kötésben résztvevő e^--ek száma.
ha ez tudja, akkor nincs reakció
⇑
szt nem érdekes :)

a stimmel (annyit a távolság) de a mol. pálya erősen torzult kell alkalmazni ezt a LUMO-n tud csak kötni (ott nincs csomósík)

- foto: fej gerjesztés
- ionos: e^--t dobok rá

C_{60}-C_{60} táv kb 10 Å az fcc rácsban

a polimerizáció reverzibilis