

Szin nanoszerkezetek

előadó: Kurti Jenő

kontakt: virág.elte.hu / kurti
kipedia.elte.hu → Nanofizika Tudomány

II. 14.

1. óra

Beveretés

1) Fullerenek

Nobel-díj: 1996 -ban (Nature-cikk: 1985)

C₆₀ buckminsterfulleren (buckyball)

2) Szin nanocsövek:

S. Iijima (Nature, 1991) → Kavli-díj: 2008

hossz: 1-100 μm (több mm hosszúságú is állítható elő)

diameter: 1-1,5 nm

3) grafén:

Koroselov: 2004 → Nobel-díj: 2010 (előállítás: celluláral)

4) grafit, gyémánt

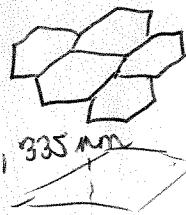
a)

<u>grafit</u>	<u>gyémánt</u>
pula	kemény
szilárd	flexibilis
vezető	szigetelő

gap: ≈ 0
 $(-0,04 \text{ eV})$ $5,47 \text{ eV}$

óka: merkészeli bülönlisége

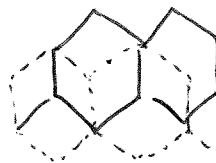
grafit:



$$\downarrow d = 0,335 \text{ nm}$$

$$d_{cc} = 0,142 \text{ nm}$$

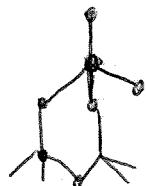
Bélap - merkészés (A-B-A-B stacking)



felől nézve réteg

alsó réteg

gyémánt: $d_{cc} = 0,154 \text{ nm}$



lokális \Rightarrow tetraéders szerkezetű is 2 rét \rightarrow lonsdaleit $\xrightarrow[\text{Bad}]{\text{reklám}}$
(borító réteg)

pl. ZnS \rightarrow wüstit
 \rightarrow sulfidit

\rightarrow "igni gyémánt" \rightarrow reklám
(kölös)

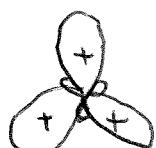
(más eredménye is
nemrég benne)

b) kitörés: hibridizáció

mágnys szeretet $2s + 2p$

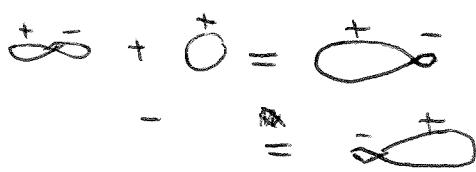
\hookrightarrow több C atom (kristály) \rightarrow keverék \rightarrow energiaszint a keverékekkel,
de a kötésök kialakulásával
több energiát nyer!

sp^2 hibrid
(3D által)



\rightarrow minősítményeket
polylek

sp^1 hibrid

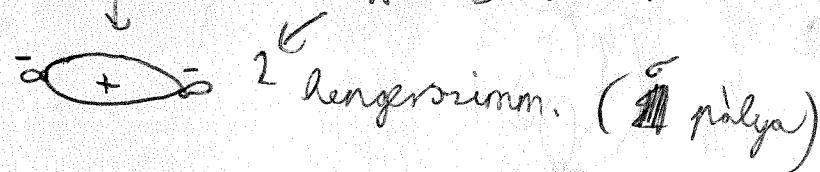


pl. acetilen

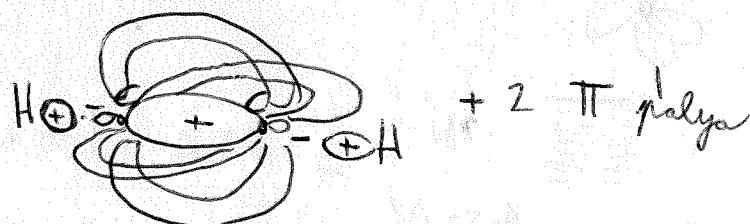


2 sromsked

kötőszörz



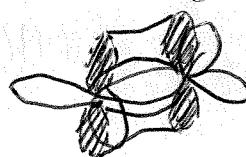
120 pm



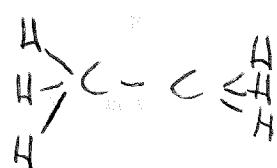
sp^2 hibrid

egyad 1 p_z , ami 1 a síkra

133 pm



sp^3 hibrid



154 pm

① molekul: ha ökötökkel minden hatások kölcsön

pl. ~~metán~~
metán



2 egyszerű \Rightarrow kétból es szintj
atomi állapot molekulapályák

} ~ degeneráció felhalad

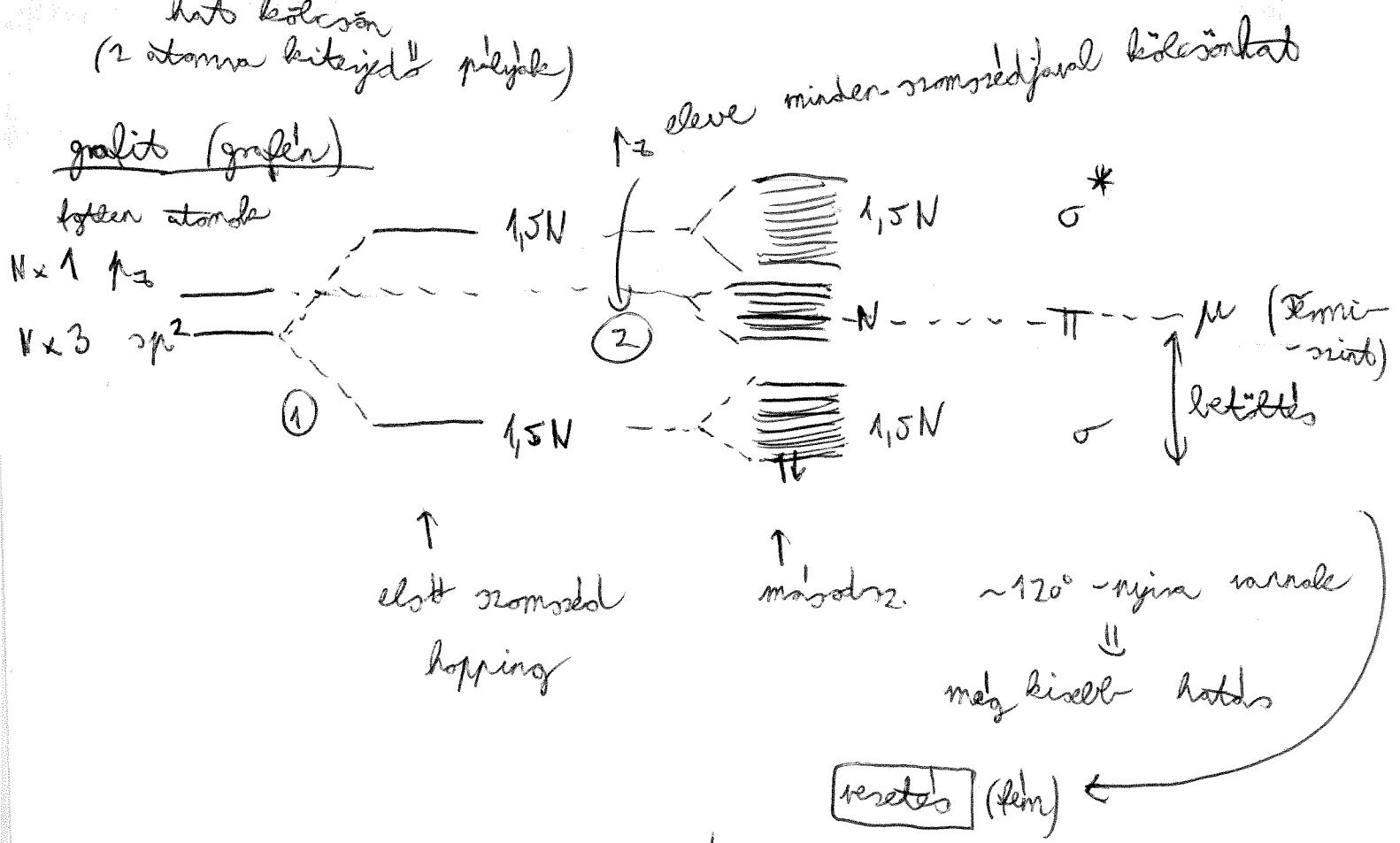
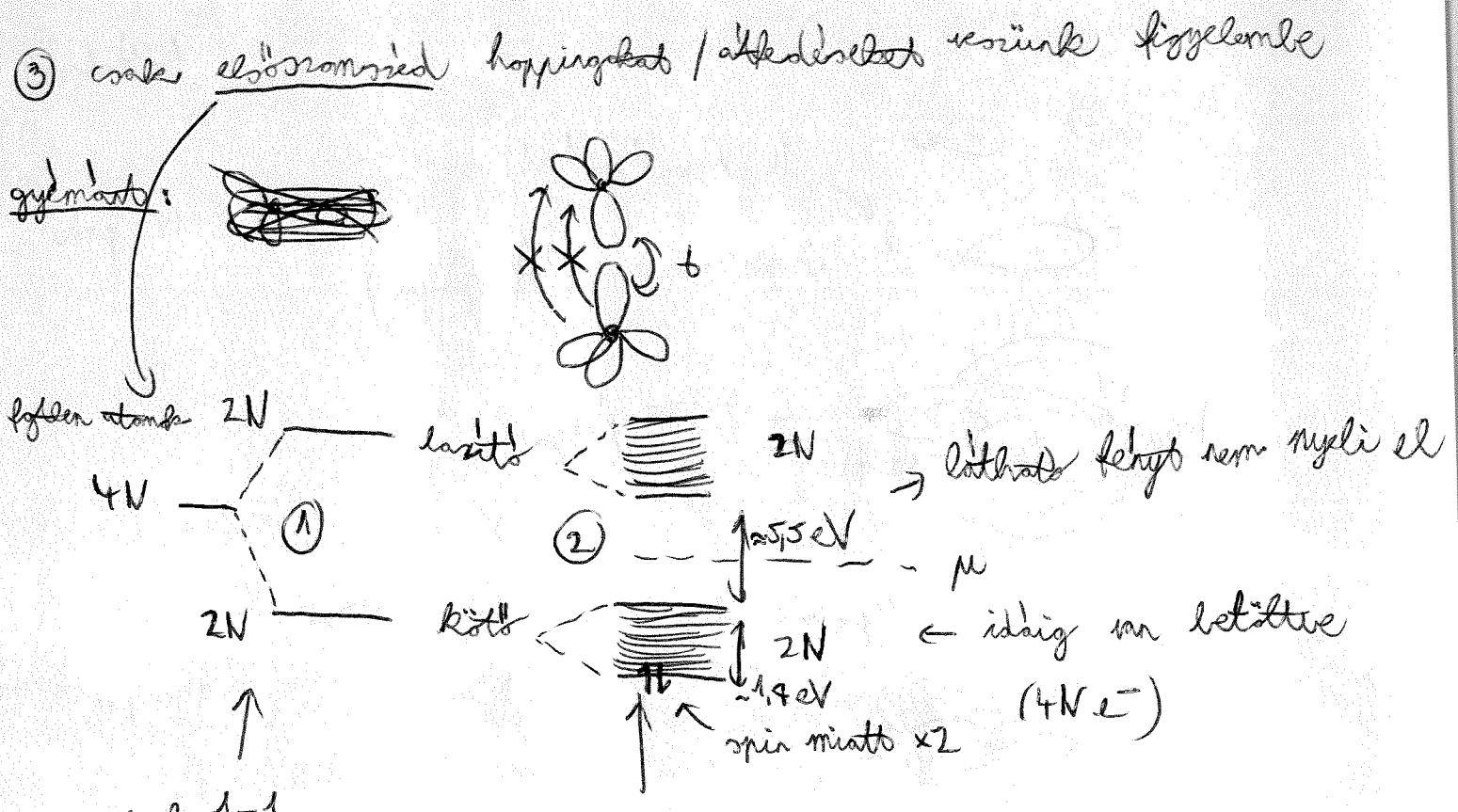
② több atomra, pl. N_2 : van legkötöbb és legláthatóbb pálya, melyek

kettő N-2 pálya lesz

pl. azonos elágazási módon elágazik

(~~H-ato~~)

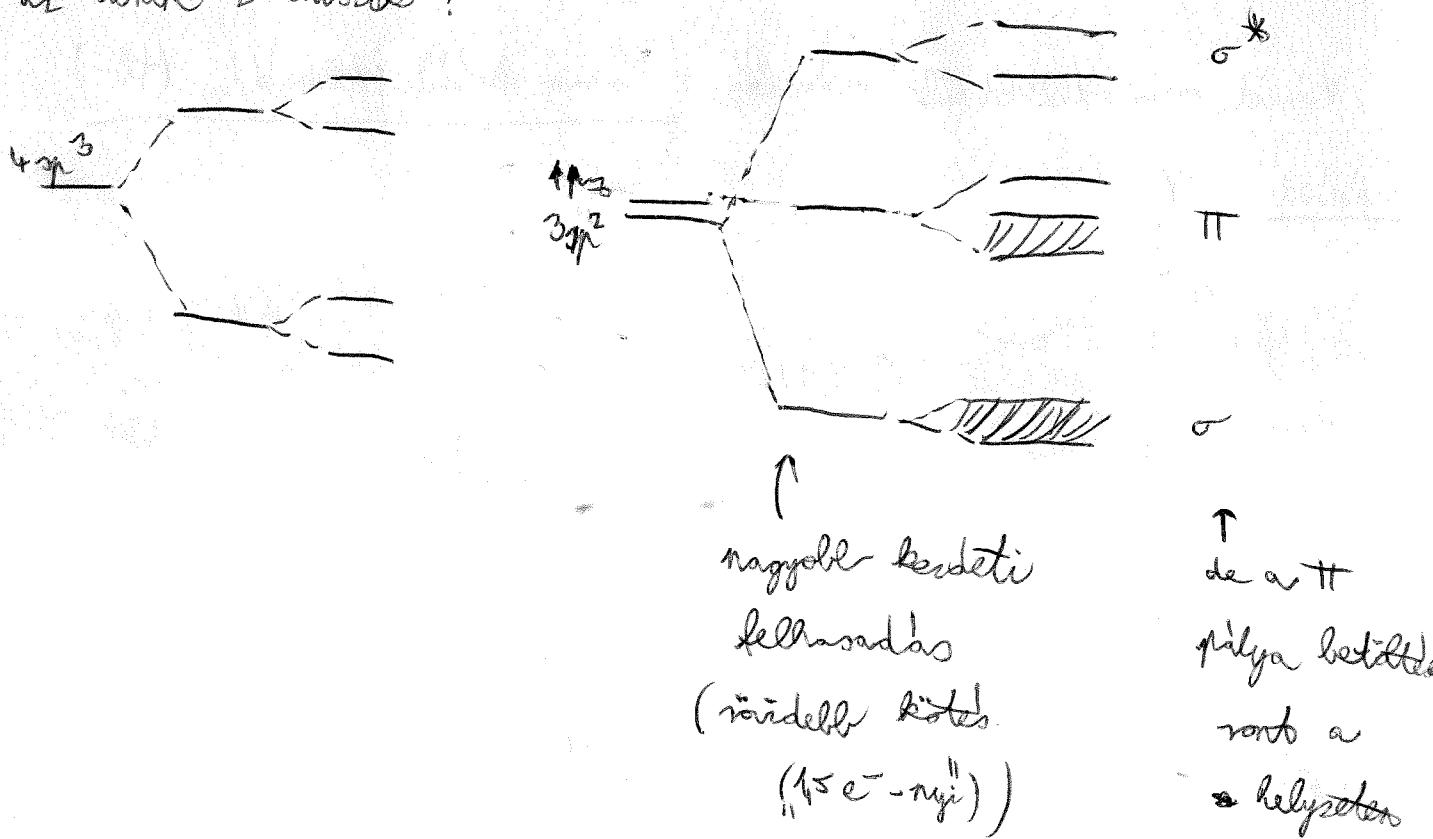




Melyik stabilabb?

a grafitnak lenne (működően is stabilabb, illetve a gyémántnak
atalakulva grafittá)

az akkor ez látván?



-16 meV a melyik gyöök?
grafit jobb

$$T=0-n$$

DE $T \neq 0-n$ elnök \Rightarrow szabadenergia kell!

$E_{\text{grafit}} < E_{\text{gyémánt}}$ $\xleftarrow{\text{xenderelhető a grafit merek.}}$

$E_{\text{grafit}} > E_{\text{gyémánt}}$ (KHW- elől a

$$F = E - T \cdot S \quad \cancel{\text{p.V}}$$

(ha van nyomás is) \rightarrow szabadentalpia

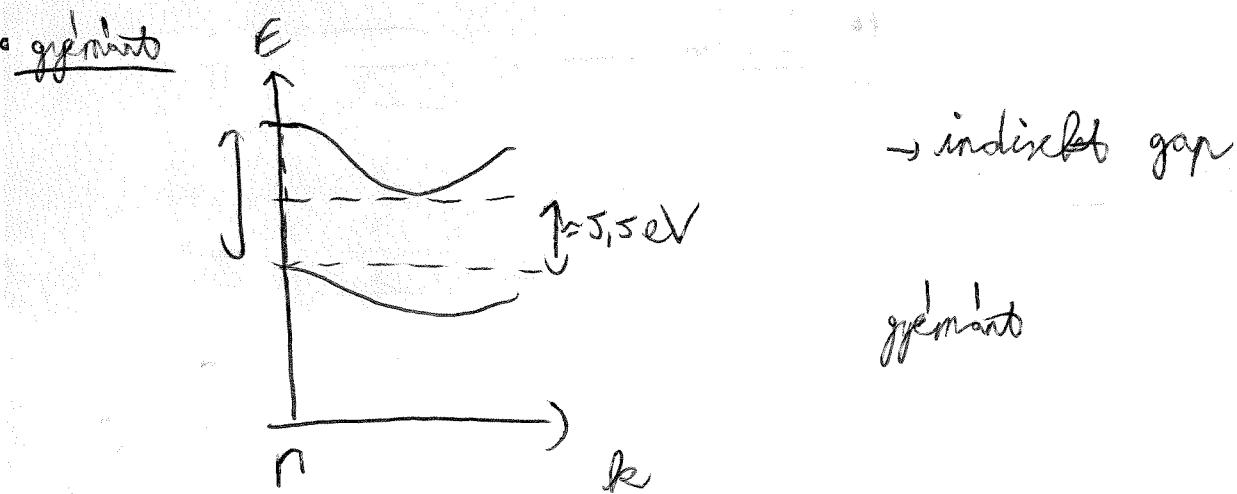
$$H = E - T \cdot S + p \cdot V$$

$V_{\text{grafit}} > V_{\text{gyémánt}}$

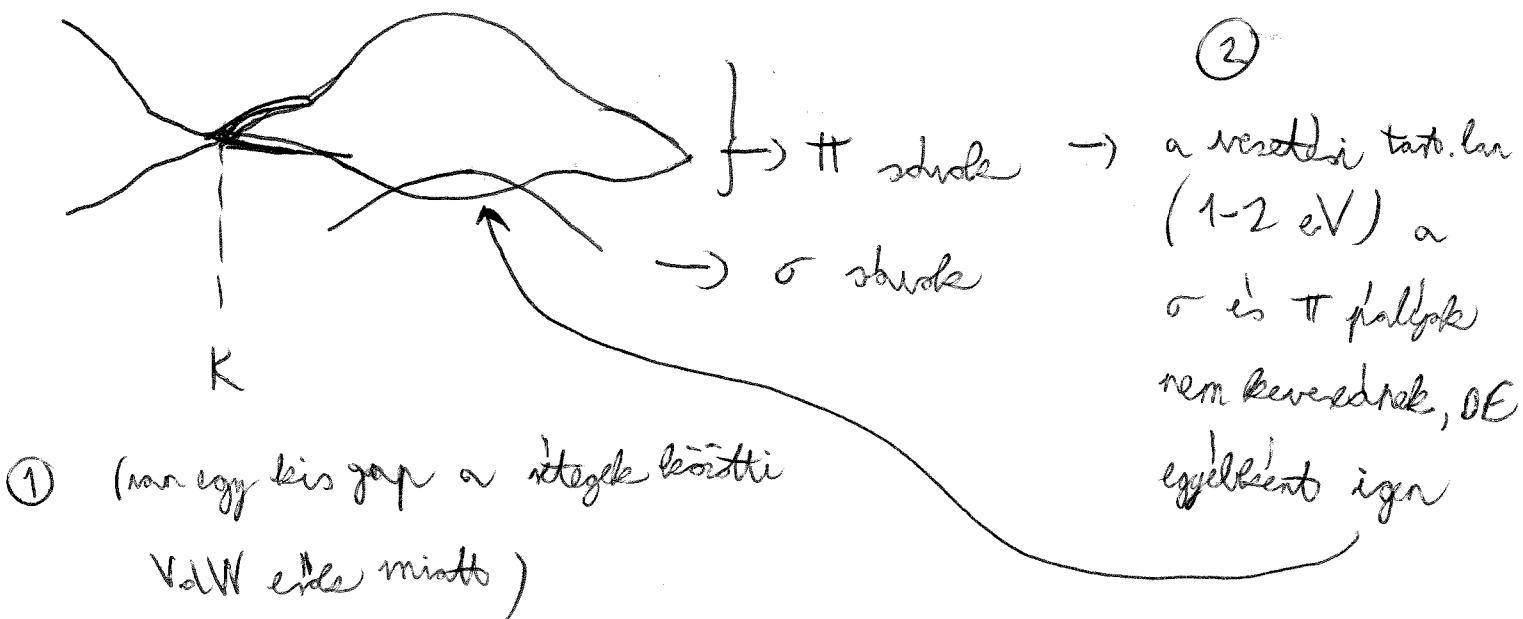
- magasabb T, akkor nyír a grafit ~~elő~~ előnyök növeli (elválasztó F)

- magas p hőellentéti a gyémánt játára ~ pV tag

kicsit robusztálásról ismétlés: rossz kötésű kisoltás (fb)



- grafit: Fermi-szint nem a Γ pontban van



- ③ Fermi-szinten 0-as illapotszínűség (felfelé)

⇒ 3 tanulság

(v. nincs 0 gap)

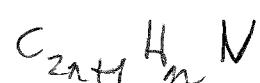
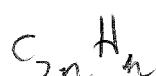
2. óra

Fullerenek

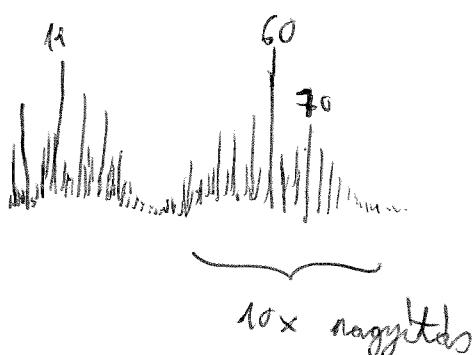
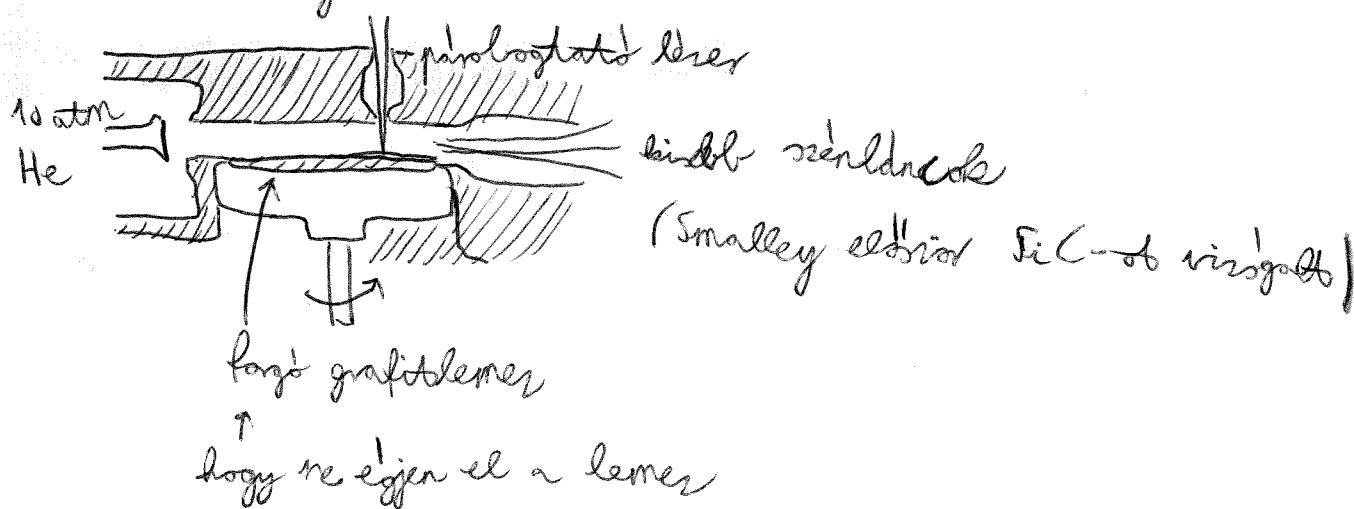
1) Károlyan kellestés 1985-ben: Kroto, Curl, Smalley

↳ Nobel-díj 1996-ban

Kroto → astrofizikai indítottak: világban néves molekulák
is találhatók, pl. Rossz szénláncok



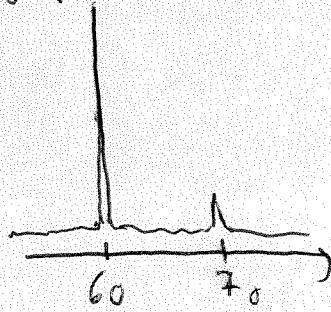
~~Smallley~~ Smallley → klárostekek előállítása



Cox, Haldor (1984)

↓
már látották a Melen a 60-as
évek, de még nem ~~tette le~~
foglalkoztak vele

rept. 1.



→ paraméterek változtatásával

is nagyon stabil volt a 60 és 70-es menetrendszer

↳ csaknem ikozáder (magas szimmetria)

rept. 13. → elbűvöltek a cikkben a Nature-be

elnevezés: R. Buckminster Fuller, amerikai építész (1895-1983)

"geodézikus kupola" matematikai világítószobor

Szög két rész, hosszú csökkenő a kerülettel

12 Szög $d \approx 0,7 \text{ nm}$

20 6 Szög

2) Előzmények:

- ókor: koromlás is van fullérén

- ókor: Platon: négyszöges testek, pl. ikozáder

Tukhinoi: 13 arkhimédési test, körtükön csaknem ikozáder

- köreplés:

• 1480: először a csaknem ikozáderrel

Leonardo da Vinci rajza - II-

$\therefore 1500$ Albrecht Dürer rajza - II-

XVI. sz., reneszánsz

Ming dinasztia → szobor (aranyban maradt csaknem ikozáderrel)

Tokugavi Tokugavi → kápolna keltt csaknem i.e.

- XX. sz.:

- 1933: Tisza László → ikoszédess pentagráf
- 1942: Thompson: molekulára 12 strig + kékben hatszög
- 1965: Schulte: geometriai megtalálásból alapján, $C_{60}H_{60}$ (szöveg: ikosz.)
- 1966: David Jones: nélkül békében anyagként részége
↳ magy. név (magy. kükörök) =) labdarúlnak
neutronokkal hatásárfeld (közös rész)

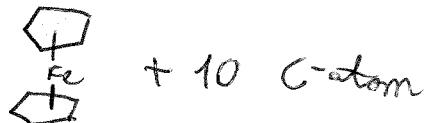
- B. Fuller: geodézikus építetik

- 1970: Eiji Osawa Nagoya-ban (Yoshida): 3D módszerrel rekonstrukció
lehetősége → C_{60} pentágórist

- 1971: Barth, Lawton → koronulen mintázik



- 1973: Bissel, Gal'pern → féncrelvezetés általánosítása → C_{20}



- 1980: Tajima (elektromér.) (→ gömbön részesek + fulleren)

- 1981: Davidson → Kückel módsz. (tight-binding)
neuklárosterekkel, kékkel $\cong C_{60}$ -ra is

- 1983: Paguette → $C_{20}H_{20}$ (dodekahedron)

- 1981-85: Hayman → C_{60} -at protált mintetízni (íketelenül)

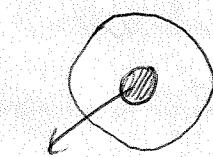
- 1985: Kroto, Smalley, Curl

↳ nem volt id lizenzhez, hogy tágleg feloldatot nyerjen
nem → csak spekulációs

- 1985. október 9.: Hayman → Kückel módsz. C_{60} -ra

→ fullerén család: 12 db 5-rög
több 6-rög

endohendrolik vegyületek:



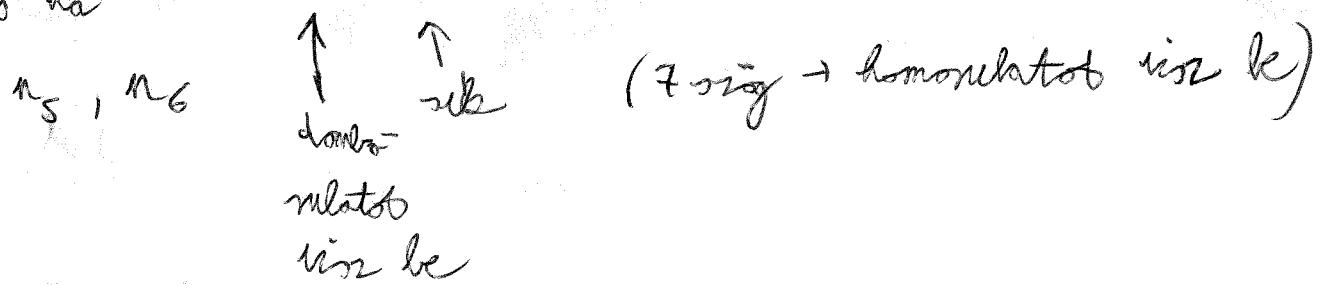
Sc

+ lehet felületek is megőrizni más kémiai molekulákat

- Mivel most 12 db 5-rög van?

A C-nél 3 db sorozatja van (benne van a poliedrás rész)

• Ez ha csak 5 és 6 rögekből lesz



C5: csúcsok száma

E: élek száma

L: lapok száma

$$C5 + L = E + 2 \quad (\text{Euler-tétel})$$

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

Végesítő 3-rög

számításuk

1.6

$$10n_5 + 12/n_6 + 6n_5 + 6/n_6 = 15n_5 + 18/n_6 + 12$$

DE zökfelé isomer lista

n	i	i' (enantiomerek)	i_p	i'_p	5-rögök 6-rögök		$n_5 = 12$
					nr	nn	
60	1812	3592	1	1			
70	8149	16091	1	1			
26	19151	38016	2	3	-10-		

↳ ezek alapján a C_{60} -nál más adatok

- konfigurációja van

↳ energetikailag beszerzésben, ha 5 röge elűszel érinthető
(Lynn's mellek munka)

↳ isolált pentagon stabilit

II

↳ nem instabil, mert itt már érinthető az 5 röge

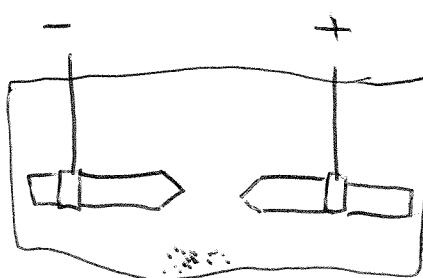
3. óra

2014. II. 24

Fülérnek (flyt)

- 1990, Nature cikk, Kratschmer, Lamb et al.

- C_{60} - az alkotottak előnnyugatosságban, és errel igazolták Koto et al. feltételeit
- előállítás:
He atmoszféra, 13 kPa



grafit ruhadék baktulási sűrűség meghatározása

↳ karbon ruhadék le

↳ feloldják oldószereben, majd kikristályosítják

↳ fly~~ad~~adiskromatográfia

(szétidárasztás differenciáló eljárás)

• Konferencia Capri - Iwan (1989)

↓ Krätschmer

IR spektrum alapján

polar coval + ionic coales



dr. se ~~sz~~ atom van, tölkök

bármely lemeze, kivéve, ha

magas szimmetriájú az oljetum



fulleren

↓
Krätschmer is megmérte az IR spektrum, és látta, ke
is a coalescens

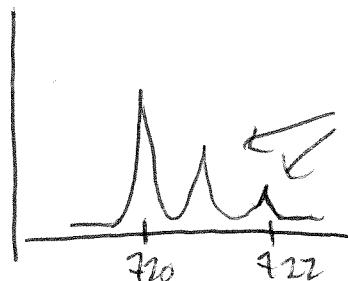
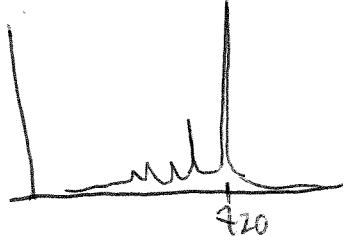
ddat → kiköt. Si rétege (~2μm)



Ar⁺ ion levezet kilökök belőle molekulákat

7660

massспектrométer

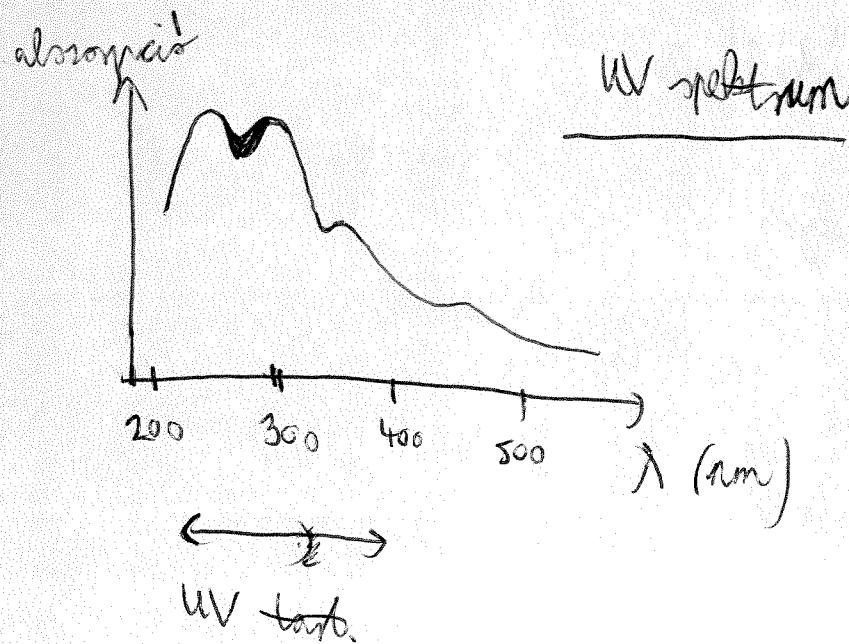


isotópikus: 1% a rétege, hogy ¹²C legtöbb

¹³C van ⇒ kb. 4% fulleren

molekulában van 1 ¹³C → 721 g/mol

-12- ⇒ a molekulában ~50% a 721-es

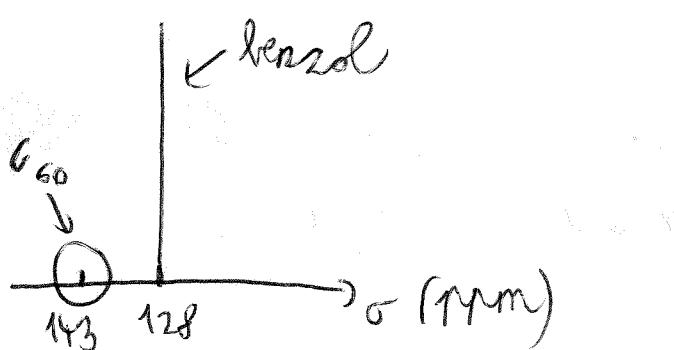


NMR:

$^{12}\text{C}_{100}$ → nincs magyarázat

$^{13}\text{C}_{100}$ → van - II-

$h\nu = g \mu_B B$



er a ^{13}C által érett fel,
amit a molekulához kötődik
tud elismerni az amylkolin!

(1- σ)

en kicsi, de
~ molekula $\leftarrow 10^{-6}$ (ppm)

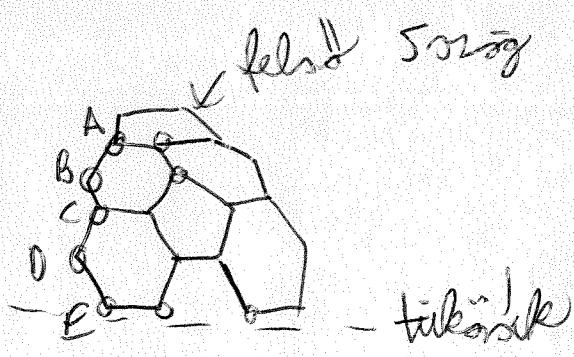
különösülő részein

magas!

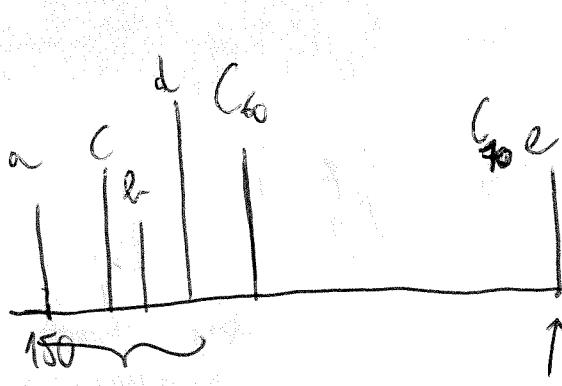
Fontos kémiai információk kezdetek

ha C_6O -ban van ^{13}C , az miatt, hol van ~~az~~ (egyenértékkel
a pozitív) \Rightarrow a rágó atomokon ellenkező (megint a magas
szimmetriai miatt) [1 NMR jel van]

C_{70} → maar een eigen elektrone



5 NMR jel van



a köropső atomok
a beszálhók rezonál!

Desugárzásos NMR

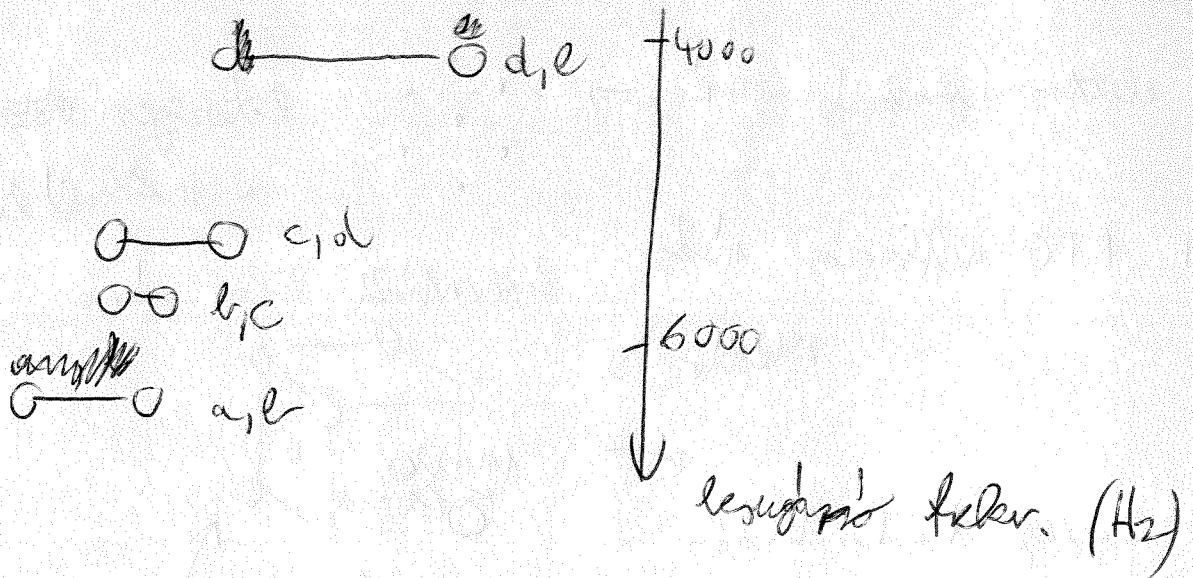
ha sziszidőnk a spirek, működés kics. Rán

↳ ez is tűg a poliszél



ha desugárzom az anyagot, meghatárolik az intensitás
(ezonácia)

⇒ akkor van változás, ha a 2 atom kötőben van



jött utani híten elmond az örö

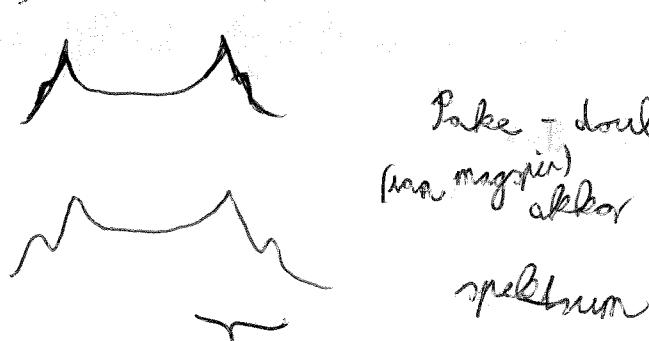
4. öra

Fülben gom. információk



^{13}C NMR-ból elso részben info

dúszts -> 2 db ^{13}C egymás mellé kerülhet

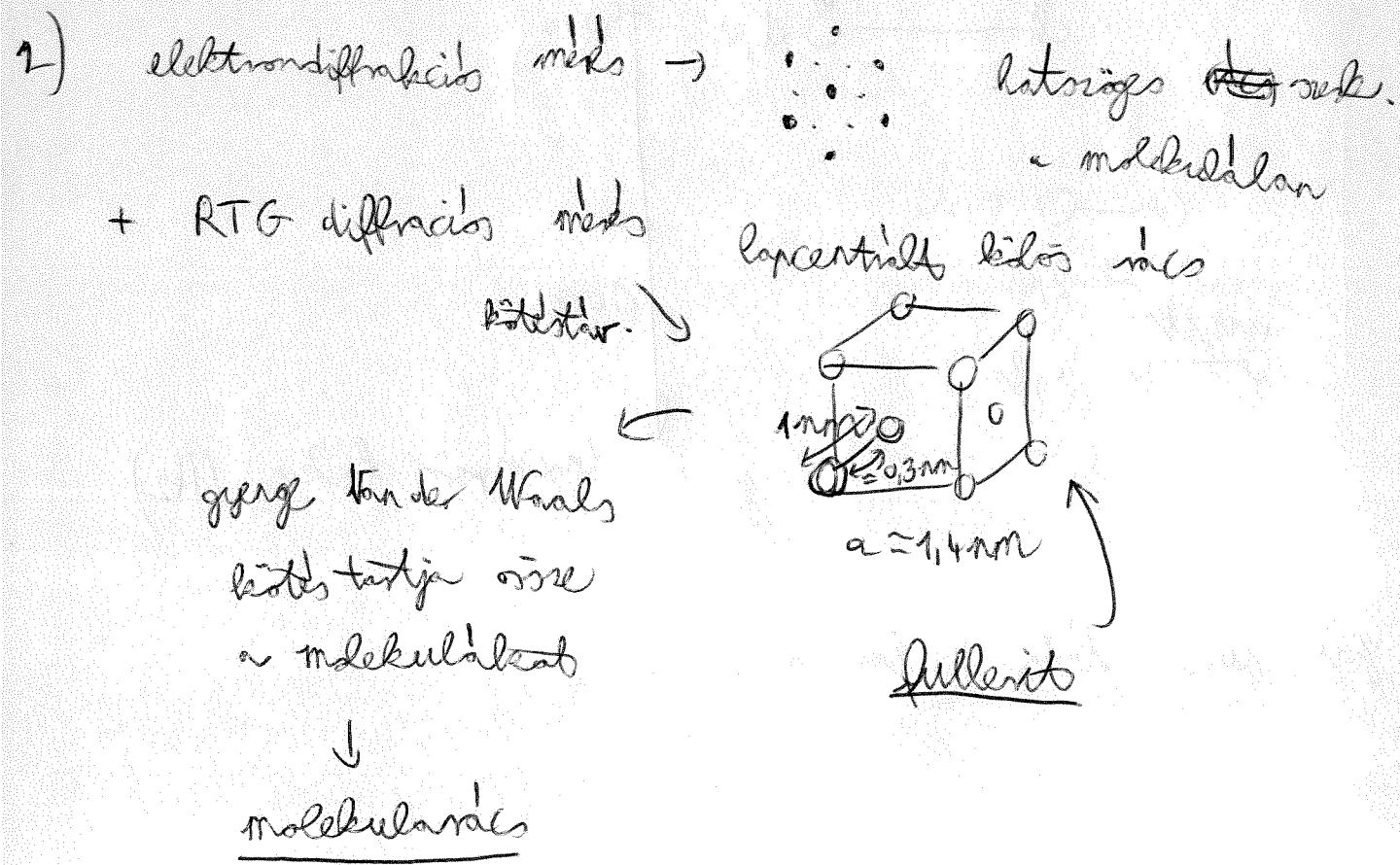


Páke - doublet: ha körül kerül 2 db ^{13}C ,
(azaz magán) akkor dipol - dipol kö. mint felhasználva
 spektrum

→ ma belső struktúrája is, mert ~~különböző~~
 szög - szög, és szög - szög köz
 - élen is egymás mellé kerülhetnek → más a kötésben

$$\gamma_{66} = 140 \text{ ppm} \quad \gamma_{55} = 145 \text{ ppm}$$

90° él, ekkor $\sqrt{30} \text{ db } \gamma_{55} \rightarrow$ fele akkoran intensitás /
 $\sqrt{60} \text{ db } \gamma_{66}$



"pörögék" a molekulák a helyükön

• ruha

3) $T > 260 \text{ K}$ $T < 90 \text{ K}$

magas hőm.

lapc. körös (Fcc)

alacsony hőm.

egyszerű körös (sc)

• valad függ

(rotatör fázis)

• nem valad

függ ("stretch
phase")

potenciálminimumok

körött móros

(körkörök helyzetek
körött)

• lefagy a függ

↓
de véletlen eloszlás

↳ az az ideális, ha

szintén összeggel szembe
kenül 2 monosz. mol. nélk

de ez nem tiszta → monosz.
dal elektronni

a) RTG differ.: se magasabb szimn.-ja
(fcc-nél kioltásra valóbb van)

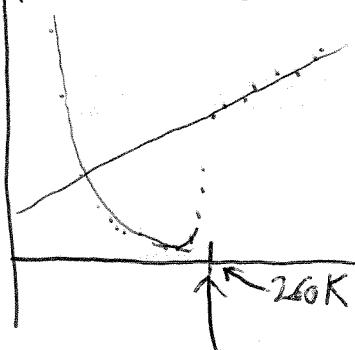


több RTG ciklus

b) NMR:

azs. van nemről diff. → a más leomlyékja a kúszó test,
de erőlegg a mol. leszálásnak → kinélezésedés
de fullerenekkel gyors forrás → nincs anizotrop kinélezésedés,
csak elágazóy form.-en

T_1 (spinrelax. idő)



szisz. stab. kúszás

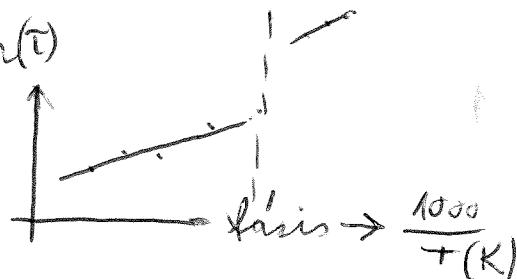
↖
A más dinamika a forrás miatt

korrelációs idő (T)

• minél rövidebb, annál bekengelő lesz az NMR jel

• $\frac{T_1}{T_{10}}$ relax. idővel szabályolt

- 17



$\xrightarrow{1000} \frac{1}{T(K)}$

$$\tau_{\text{foly}} > \tau_{\text{vill}} > \tau_{\text{gáz}}$$



Amarrall elvezető az inf. világban minden a
gyors forrás miatt!

c) STM:

molakom. → gyors forrás gomlik

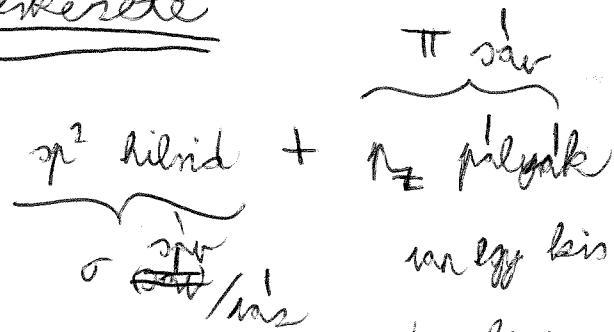
4) RTG diffúzió

különböző atom-atom távolság 1 nm. belül
(nem csak előzönör.)

elmelettel jól leírható

Füllerén elektronterkelete

1) Bevetés:



van egy kis görbület,

de leggyakrabban standardan

az elhangyolhatók
szépségek

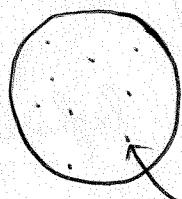
$\Rightarrow 2 \times 1 \text{ polya} (\pi_{\text{száv}}), 1 e^- / \text{atom}$

↑
spin

- 18 -

VAGY molekulapályák a nem atomi pályákból építjük fel
gömbnek tekintjük a molekulát

↳ a lehetőségek számától függően a pályákat - az indexelik
(gömbf. - es körök az egész
molekula)

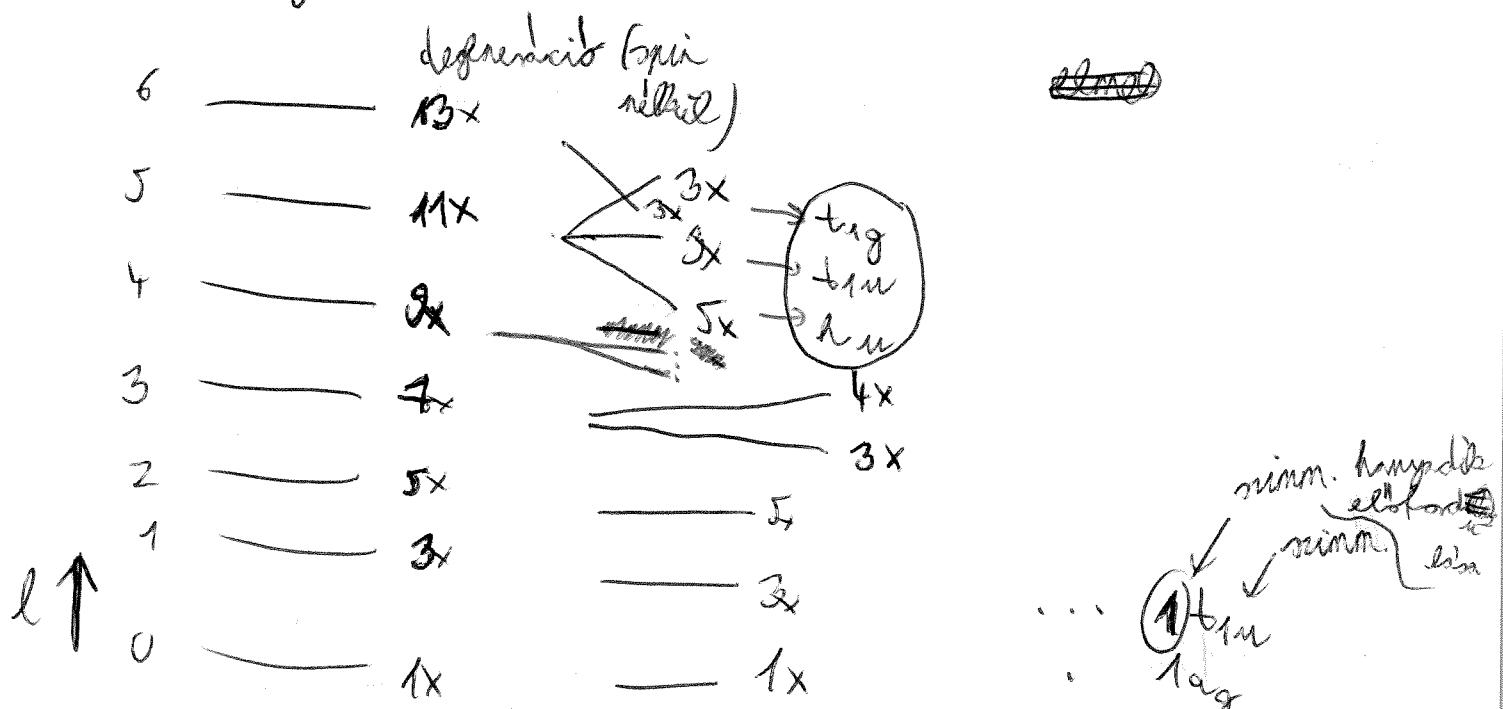


Magn. → nem $1/r^2$ -es pot.!



Függ a \vec{r} től az energia

Mivel nagyobb a föld csomája, annál magasabb
az energia



[gömb]



[ikoraielő]: Felvissza a degenerációt

7x deg. már nincs

2t_{2g} ...

LUMO = lowest unoccupied mol. orbit

↓ 2eV

1 h u

HOMO = highest occupied

molecular orbital

: ↑

ugynde

1 a_g

↑

grade

elvileg legfeljebb

gyig. energia

(gyakorlatilag titkolt
 $n \rightarrow n$ miatt)

transf. -k

csoport \rightarrow csoportműv. (minn. alkotók hozzá)

csoport \rightarrow alk. szim. áll. \leftrightarrow hirtel. elemek visszatérítés
műveletek \leftrightarrow műveletek

Ia) ikoráldás csoport

$g=120$ (csoport mértéke)

pl. 12 db 5 rész \rightarrow 6 részről (5 rész kiápolása)

de 2 részre \rightarrow 12 C₅

12 C₅² \rightarrow 2 fogatás egymás mellett

eredeti fogatás lenyegében
remétek az \rightarrow a műveletek

bármiféle egymásba átvitték

szükséges az fogatás elválasztása

szükséges az elválasztása az fogatás elválasztása

könli fog.)

6 szög k.p. kötői frg. \rightarrow $20 C_3$

$15 C_2$

i \rightarrow inverz

$12 S_{10}$ (5 fogások forg. + inverz)

$12 S_{10}^3$

$20 S_6$

15σ tükrözés (tükrözések)

5. oldal

III. 28.

Szimmetrialemelek

- identitás

2 részes 5-szög kötői forg.

12 5-szög

6 \rightarrow ötöncenkely

$\times 2$ +1 inverz

$12 C_5$

$\rightarrow 2 \times$ forgatás $12 C_5^2$

20 hatszög

\downarrow
10-tengely \rightarrow $\sqrt{2}$ kötői deriválás $\rightarrow 20 C_3$

köt. stellenes 6 rögt ködös - 15 S₂
180°

árvéde min: i

tükrözve fogatások

12 S₆

↳ felgy. tör \times tükr

12 S₁₀³

20 S₆

tükör: 15 S₂

$\Rightarrow \Sigma: 120$ minn. művelet
↳ csapatos rendje

representáció:

- lin. tr.:
elemek lin. komb.-ja kepestethetők

Az atom elrendezése \rightarrow 1D lin. rendszerek \rightarrow vibrálás elemzések

művelet \rightarrow 2 v. test átvisez egymásba

↓
matricai representálható

matrix

~~matrix~~ j¹ szer \rightarrow hullám. < Hül. - ter

↳ kifejtethető \rightarrow hár. \rightarrow lin. komb.

Hár. logy valóval a szimmetria
 \Rightarrow matrix szer.

$$\begin{pmatrix} \dots \\ \vdots \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & & 0 \\ & \square & 0 \\ 0 & & \square \end{pmatrix}$$

blokkdiag. alak

\vee matriixa megtets

eredeti xper. \rightarrow reducibilis \rightarrow kisebbek számaiból

ha ~~nem~~ \rightarrow inducibilis \rightarrow ezek gyűjteménye többi hosszú
kisebbettség

\Downarrow

nabolyok

- 2. xper. struktúra xmas

mennyi minden általános felbontás, ami nem egyszerű

szim. koop. osztályaival

itt: 10

nem

~~#~~ bázisok \rightarrow TF \rightarrow inváziós

\Downarrow Genetikai akadémia mint Monbán

karakterekkel

1. b. xper \Rightarrow H1 \rightarrow ell. sor

ell. szim. xper: Ag

ind. E ha csak fog. -a, több. -a -t: Au

ind.	E
T	dim. (matrix)

dim.-ra mol. limits van

T - ~~translació~~ → vektor (irányba eljőtt vektor)
R → általános függ - vonatkozó eljőtt)

tensor elemekkel is

E - 2D inek

F - 3D inek

G - 4D

H - 5D

60 Ⓛ

matrix → spektr.: 30: T

↓ harm.-tak is nincs. -ja

$$H(\Psi) = E(\Psi)$$

$$\text{har } \hat{\Theta}(\Psi) = \lambda(\Psi) \rightarrow j \text{ inek}$$

$$H(\phi(\Psi)) = \phi(H(\Psi)) = E(\phi(\Psi)) \quad \text{energ. nem változik}$$

degh. ~~en.~~ mint

↳ degh. függ. = dim. az inek számától

→ degh. mögött ~~minig~~ nincs. van

nincs. lezárással → en. szintek felhasználás

60 dim. szinten → P → körökben → fehér színnel

(\rightarrow egy atom se marad a helyén)

→ de tr. csak négy kör → 0

Az

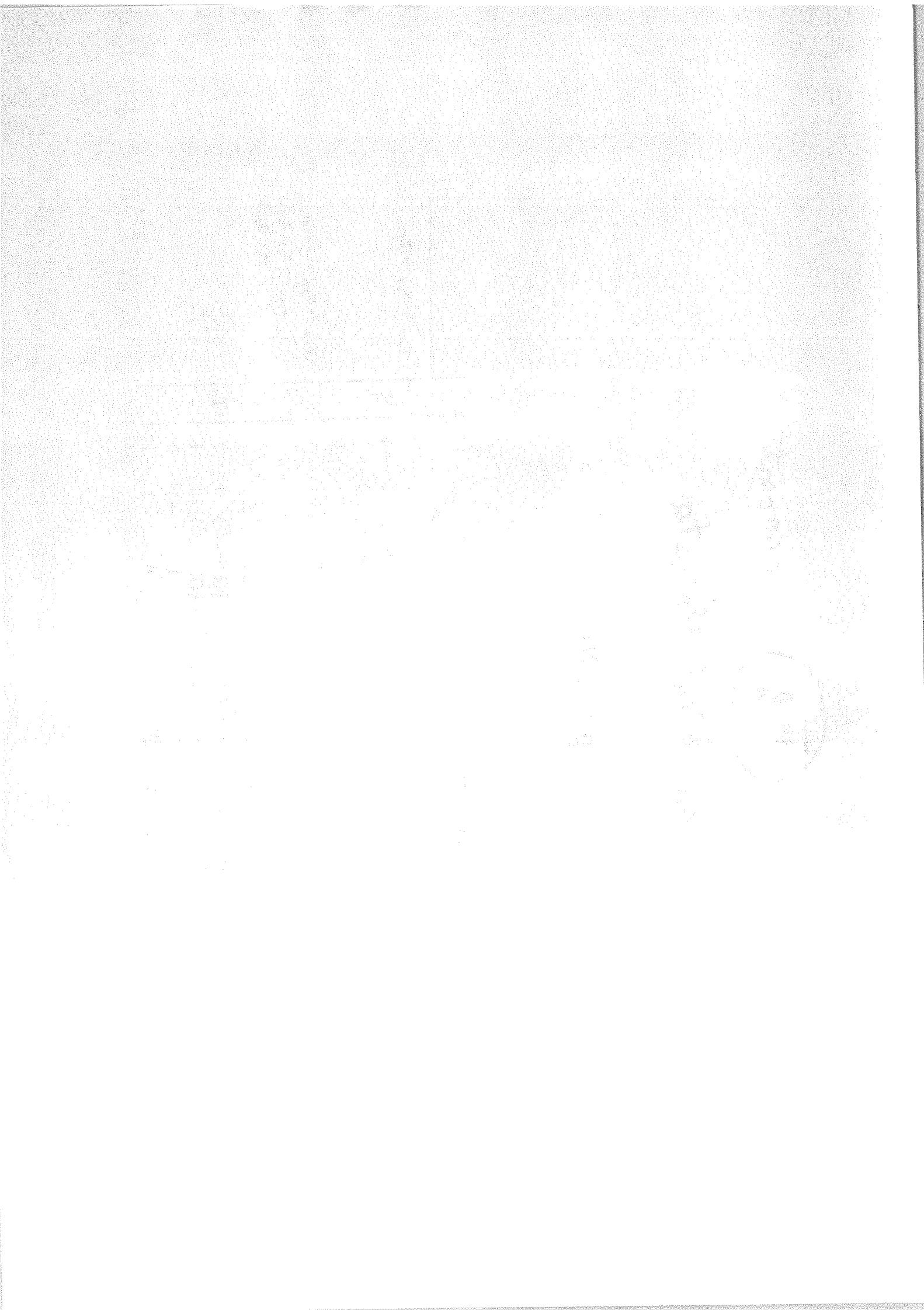
I_h

csopont

Karaktertáblázata

$$g = 120$$

\mathcal{F}_h	E	$12C_3$	$12C_3^2$	$20C_3$	$15C_2$	i	$12S_{10}$	$12S_{10}^3$	$20S_6$	15σ	
* $A_g \equiv F_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}$
$T_{1g} \equiv F_{2g}$	3	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	0	-1	3	$\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	0	-1	R
$T_{2g} \equiv F_{2g}$	3	$\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	0	-1	3	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	0	-1	
* G_g	4	-1	-1	1	0	4	-1	-1	1	0	
* H_g	5	0	0	-1	1	5	0	0	-1	1	$(\alpha_{xx} + \alpha_{yy} - 2\alpha_{zz},$ $\alpha_{xx} - \alpha_{yy}, \alpha_{xy},$ $\alpha_{yz}, \alpha_{zx})$
<u>I</u>											
* $A_u \equiv F_{1u}$	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	$\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}$
$T_{1u} \equiv F_{2u}$	3	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	0	-1	-3	$-\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	$-\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	0	1	T
$T_{2u} \equiv F_{2u}$	3	$\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	0	-1	-3	$-\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	$-\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$	0	1	
* G_u	4	-1	-1	1	0	-4	1	1	-1	0	
* H_u	5	0	0	-1	1	-5	0	0	1	-1	



	E	C_5	C_2^2	C_3	C_2	i	S_b	T_u^3	S_e	σ
n	60	0	0	0	0	0	0	0	0	+

↑
eck antiknoton
vorne

$$\text{Ag} \cdot P = \frac{60 + 15 \cdot 4 \cdot 1}{120} = 1$$

6.1a

(HF)

~~Bindungsladung~~

$$n = 1A_g + 1T_{1g} + 1T_{2g} + 2G_g + 3H_g + 2T_{1u} + 2T_{2u} + 2G_u + 2H_u$$

bindzolosok megoldalni (b) ábrázolás) \rightarrow kantkeretek

(pl. $Hg \rightarrow 3\star$

1) Fázisbeli $A_g \rightarrow 1\star$)

i) részlegi spektrum

ii) molekulapályák kezdetek:

~~atomok~~

$$H_g \cdot P = \frac{60 \cdot 5 + 15 \cdot 4 \cdot 1}{120} = 3$$

$$(1) T_{1g} \cdot P = \frac{60 \cdot 3 + 15 \cdot 4 \cdot (-1)}{120} = 1 = T_{2g} \cdot P$$

$$G_g \cdot P = 2$$

$$A_u = 0$$

$$T_{1u} \cdot P = T_{2u} \cdot P = 2 = G_u \cdot P = H_u \cdot P$$

1 atomi pálya \rightarrow kantkeret osztani a kapott
adott norm.
orientáció
határán

↓

$\Sigma \Rightarrow$ mol. pálya

(pl. $A_g \rightarrow$ V pálya ugynögyen (trivialis ábrázolás $\rightarrow A_g$)
együtthalás

iii) bindzolási pályák

Schr. - egy. megoldás \rightarrow en. módsz. feltölte e^- -körül

frontier orbitals $\begin{cases} \text{HOMO} & (1 \text{ ha}) \\ \text{LUMO} & (2t_{1u}) \\ -2s & \end{cases}$

* optikai gerjükök:

~~1~~. $1 \text{ fm} \rightarrow 2 \text{ fm}$ nem megengedett!

dipolgyorsas

$$\left| \underbrace{\langle \psi_2 | d | \psi_1 \rangle}_0 \right|^2$$

mis $\langle \psi_2^* | d | \psi_1 \rangle dV$

az integrandus nem függ

a k. m. sebességtől, csak a teljes m.

szimn.-jel

az egész integrandus \propto szimmetriás

de ψ_2^* } n pályára \rightarrow inverziora eljelöl
 ψ_1 } n pályára \rightarrow inverziora eljelöl

d: vektor \rightarrow \rightarrow II
eljelöl inverziora

\Rightarrow egész integrandus \propto , de nem szimmetria
(negatívnek látta) eljelöl változás \propto Ag
-ben nincs eljel változás)

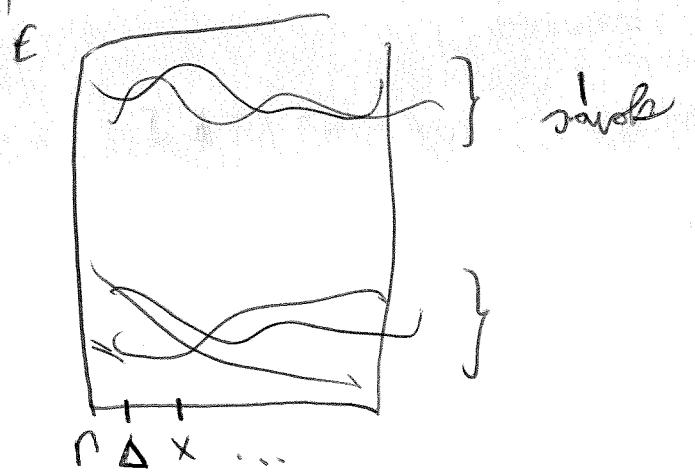
$n \rightarrow n$ átnézet nem megengedett! *

~~g~~ $\rightarrow n$ átnézet mehet ✓

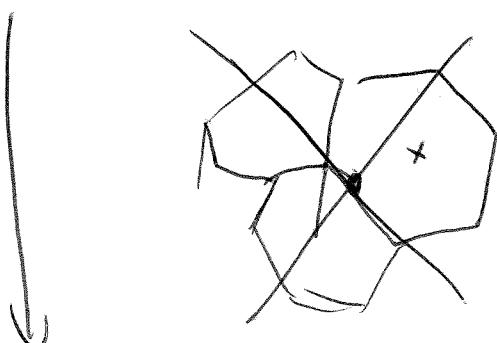
↳ másik megfogalmazási:

~~szabályos~~ ha a ~~szabályos~~ elválasztások direkt sorozata nem tartalmazza az Ag elválasztás (kisukála's után), akkor ~~az~~ tízötö az ötösest

2) nincs kristályban

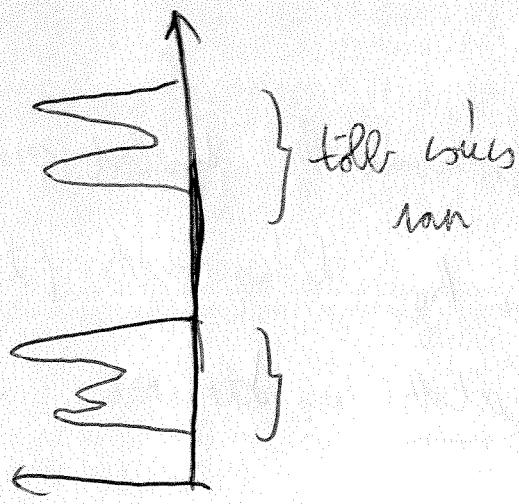


~~az~~
energia függ
az hullámzásintenzitással



a BZ magas szimmetriai pontjai

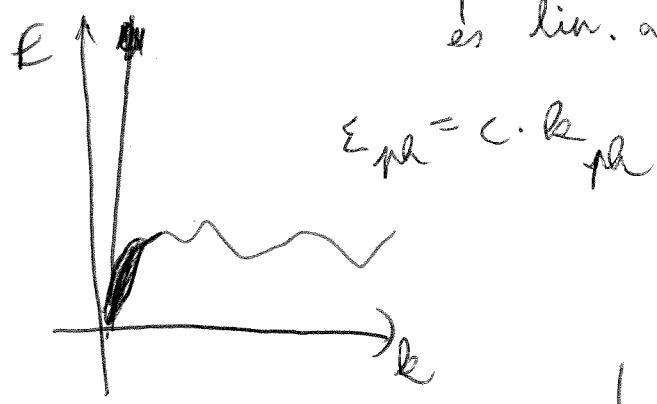




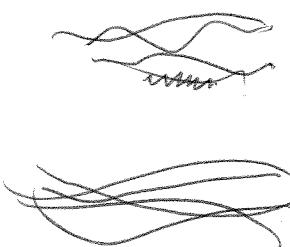
az elektronikai állapotok
DEFINÍCIÓJA POINT DENSITY OF STATES
(állapotok száma)

optikai állapot:

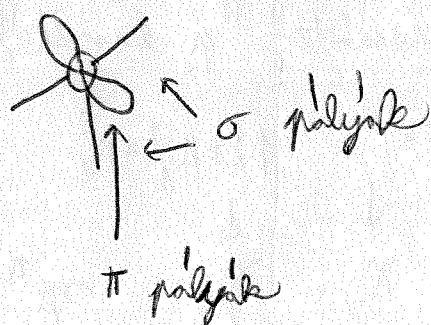
bővel függőleges disz. reláció, mely nagy a sebesség,
és lin. alakzatot



sorozatba → DFT -vel, ... mindenható

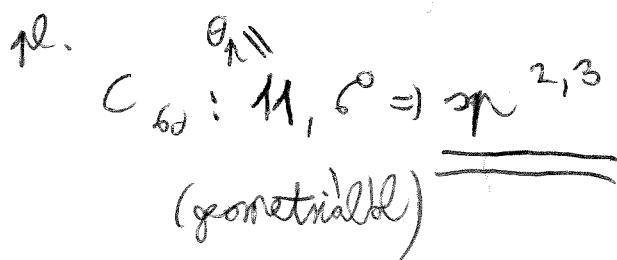
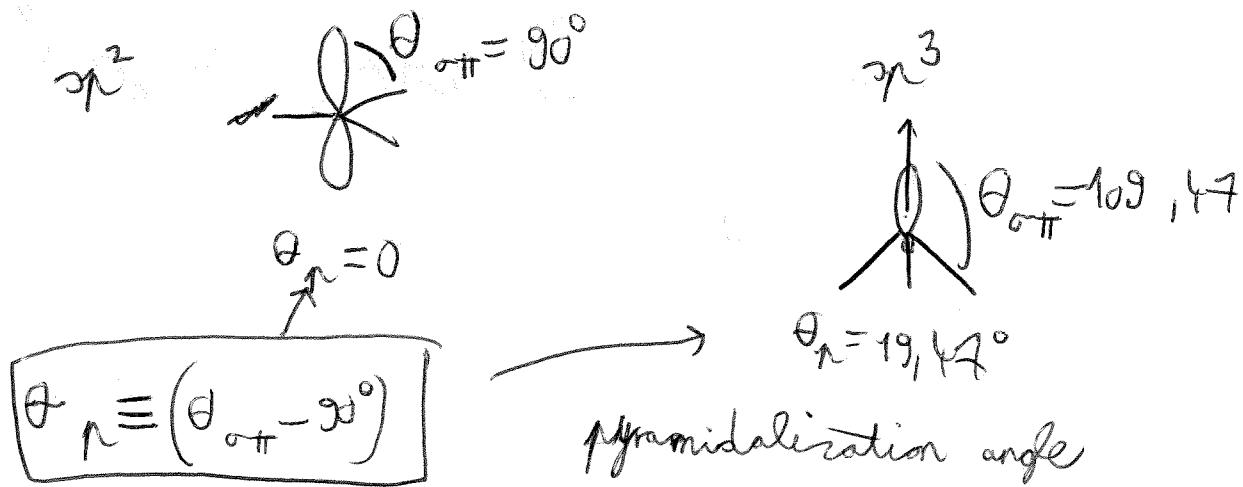


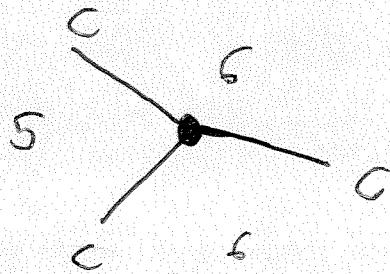
3) Kitter: zehnseitiges



grabenkel = sick pocket mitte end jf Elektronenloch
DE füllenkel = gebüllt mitt bewohnter

"pyramidalization" = σ - π zehnseitiges





" \rightarrow karakter" "p karakter"

$$\downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow$$

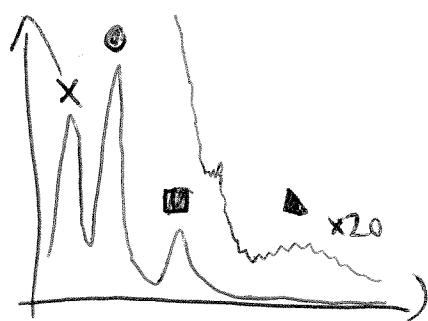
$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

<u>halmi</u>	σ	<u>Komponens</u>			x_s	x_p	$p^2 n$
		p_x	p_y	p_z			
h_1	0,669	0	-0,444	0	0,45	0,55	$\frac{0,1455}{0,1455} = 1,2$
h_2	:						
h_3	:						
h_4	0,124	0	0,255	0,924	0,08	0,92	$p^2 n$

de itt van \leftarrow sok sebén p^∞
egy kis lenne
 \rightarrow karakter

4) optikai önméret

C_{60}



- 215 nm ($5,8\text{ eV}$) \rightarrow UV-tartomány
- 220 nm ($4,6\text{ eV}$)
- 335 nm ($3,7\text{ eV}$) } a min. nagy részet
es adja
- $440\text{ nm} - 640\text{ nm}$ ($2,8\text{ eV} - 1,9\text{ eV}$) (a végő rész
egy átlaga
a melegpúrok)

• coul (singlet)



Homo \rightarrow LUMO 'tunen' (tittels)

Miekt van er?

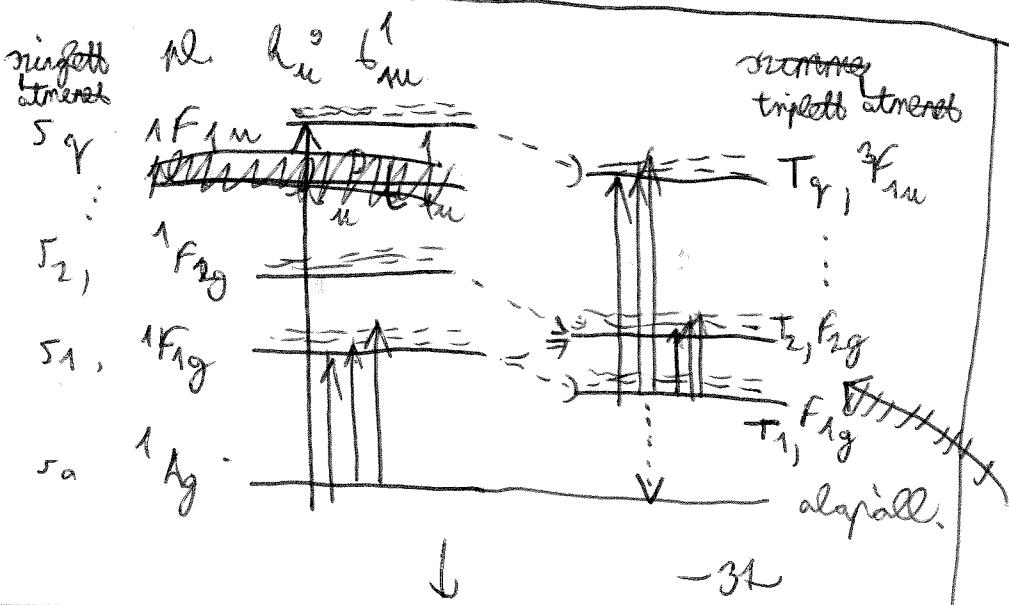
a geïmporteerde e-lynk per belettekeuk, de enke kildesontrols! \rightarrow **exciton**

(kis vorsas)

e- \rightarrow t_{1u} (f_{1u}-nake is highe)
lynk t_{1u} } min. \rightarrow exciton $a_u \otimes t_{1u}$ simmetrija
van

reduktiehalls

kilindrisch exciton
~~kooplataank~~ t_{1g}
energielost leopunk!



de varse regule is

de even tittels
mèg mindig
tittale optikailag!

a szögek az excitonok kör. - a miatt ✓
számos fizikai rezonancia fell kialakulni
(szögek exitor szimmetria összehasonlítása)

↳
lehetőségszámátmenet

Kerzenberg - Teller
- Körzetllességek

↳ ~~szimmetriareprezentan~~
az ~~spektrum~~ az exciton en. struktúrához
finomszimmetriák vannak → itt adja viszont

a legelőször megj. szövek között lényeges különbség

$S_1 \rightarrow S_0$
fluorescens

$T_1 \rightarrow S_0$
forescens

lehetőségszámátmenet
is
a spin-pályák
kör. miatt,

$T_1 \leftarrow T_2$

de jóval nagyobb az
ellettetés (kisebb
átmenet száma)

(absorpció)

5) molekuláspektrum vs nillard köröly spektrum

elt. en. nagyon eltérőek (-nél -en körökkel)
az szövek minden kialakulása miatt)

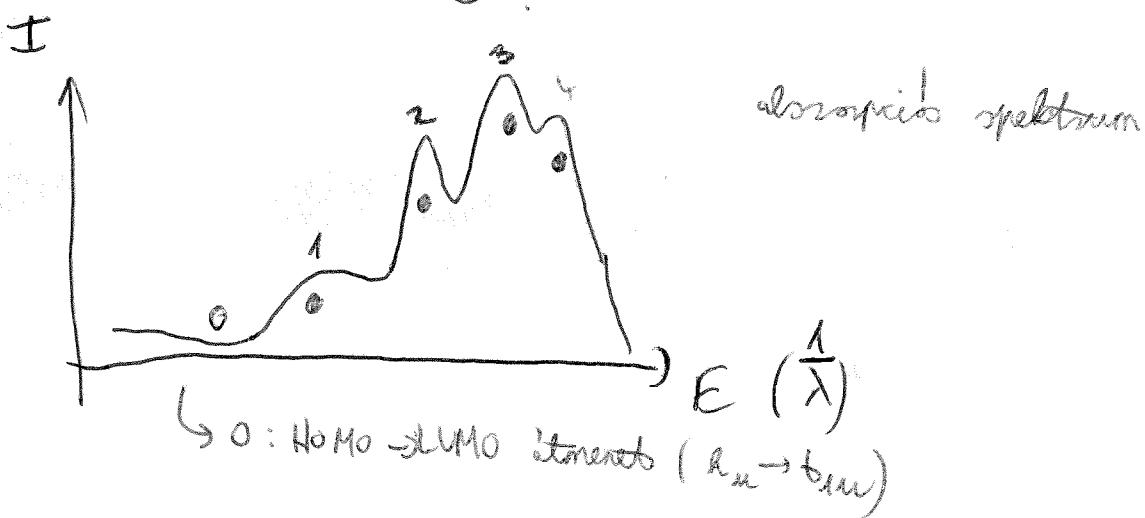
DE fülfrekvencren nincs nagy különbség!

↓

OK: szorosan kötött C₆₀-ban (≈ 95 eV),
ugyanis C₆₀ molekulák között nincs a kölcsönhatás
(gyeng VdW) !!! (nincs stabil pl. a fagás
a kristályban)

↓

jól illusztrálja a kristály spektrum a molekula-
atomról!



6) Kitteri: dielektrikus formalizmus optikában

homogén közeg: ϵ_r , $\mu_r \approx 1$

$$\Delta E = \frac{\epsilon \mu}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0$$

$$E = \frac{\epsilon_0}{\epsilon_r} e^{-i(\omega t - kx)}$$

$$|E| = \frac{w}{c}$$

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon \mu}} \approx \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0}} \frac{1}{\sqrt{\mu_0}} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} c_0$$

$$N = \frac{c_0}{c} = \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$$

~~töksmetath~~

vakuum

w_0

k_0

Kreg

w_0

$$k = \frac{w_0}{c} = \frac{w_0 N}{c_0 m} = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot m N$$

$$\epsilon_r = 1 + X$$

↑
(komplex) suscept.

$$P(w, k) = X(w, k) \cdot \epsilon_r \cdot E(w, k)$$

$$X = X^I + i X^R$$

$$\Rightarrow \epsilon_r = \epsilon^I + i \epsilon^R$$

$$N = n + i K$$

$$N = \sqrt{\epsilon}$$

$$\epsilon^I = n^2 - K^2$$

$$\epsilon^R = 2nK$$

$$\}$$

$$n = \sqrt{\frac{(\epsilon^I + \epsilon^R)}{2}}$$

$$K = \sqrt{\frac{|\epsilon^I| - \epsilon^R}{2}}$$

- 34 -

(reals)

→ töksmetath

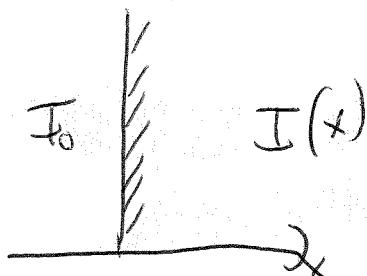
→ extinktions
egyittthatth

Kramers-Kronig reláció: (kappastrál a valós és képzetes rész körül)

$$X'(w) = \frac{1}{\pi w} \operatorname{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{w' \cdot X''(w')}{w' - w} dw'$$

$$X''(w) = \frac{-1}{\pi w} \operatorname{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{w' \cdot X'(w')}{w' - w} dw'$$

$$E = E_0 e^{-i(\omega t - Kx)}$$



$$E = E_0 e^{-i\omega t} \cdot e^{i\frac{\pi}{\lambda_0} (n + iK)} = E_0 e^{-i(\omega - \frac{2\pi}{\lambda} nx)} \cdot e^{-\frac{2\pi}{\lambda} Kx}$$

seconds

$$I = \overline{[E \times H]} \approx E_0^2 n$$

\uparrow
 $\sim E_0$ \uparrow
 $\sim E_0 \cdot n$

$$\Rightarrow I(x) = I_0 e^{-\alpha x}$$

$$\alpha = \frac{4\pi K}{\lambda_0}$$

(Lambert)-Beer-törvény

absorpciói együttható

↳ függően mérséleg van

reflexit

$$I_R = R \cdot I_0 \Rightarrow I_0 \left| \begin{array}{l} / \\ \parallel \\ / \end{array} \right. \propto \text{másodlagos köréleg}$$

↳ levezetések : $R = \frac{(n-1)^2 + K^2}{(n+1)^2 + K^2}$

vegyek reagálása anyag

$$\Rightarrow I_0 \left| \begin{matrix} \alpha \\ R \in \text{absorpció} \end{matrix} \right| \Rightarrow T \quad \text{transmissio}$$

ellenőrzi

$$I_0, (R) + mérőtű \Rightarrow \alpha$$

↓

fotós:

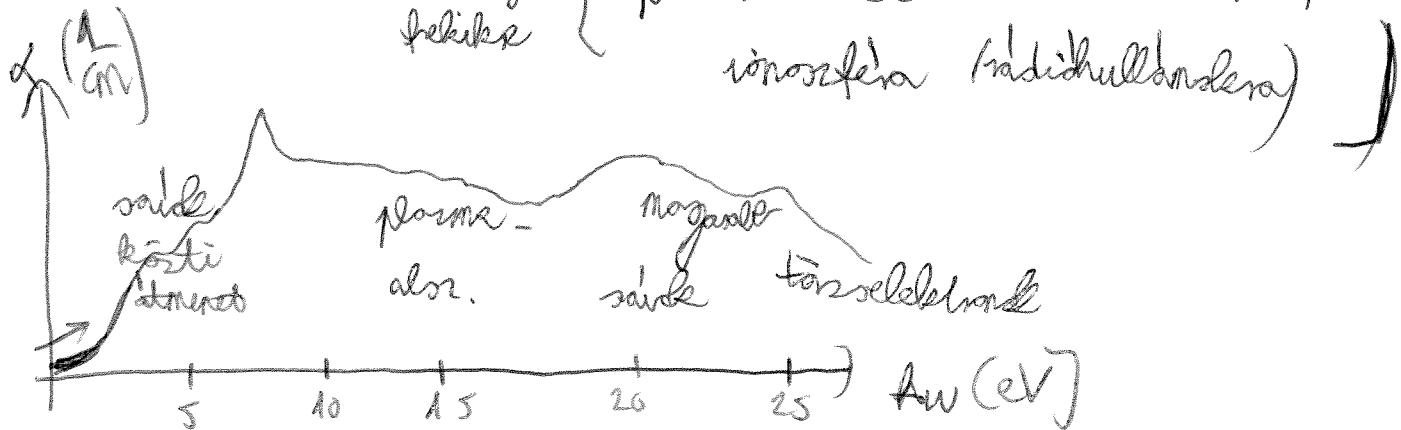
amikor ~~az~~ absorpció merül fel, nem lesz a transmissió megfordítani (~~egyenesen~~ venni)

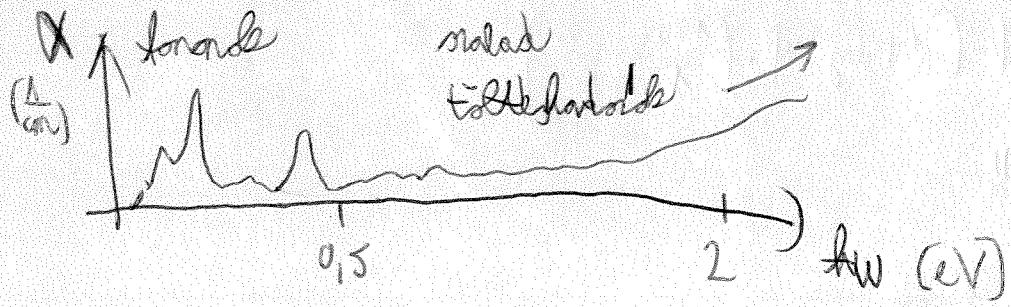
figyelem! Bell venne
a reflexot!

de nagy T, ott kicsi
az absorpció

Függ.: ha $\varepsilon < 0 \Rightarrow N$ többé lezárja $\Rightarrow n = 0$

↳ viszonyok pl. fémekkel $\leftarrow R=1$
félkristályok ionosztára (radiális hullámzásra)

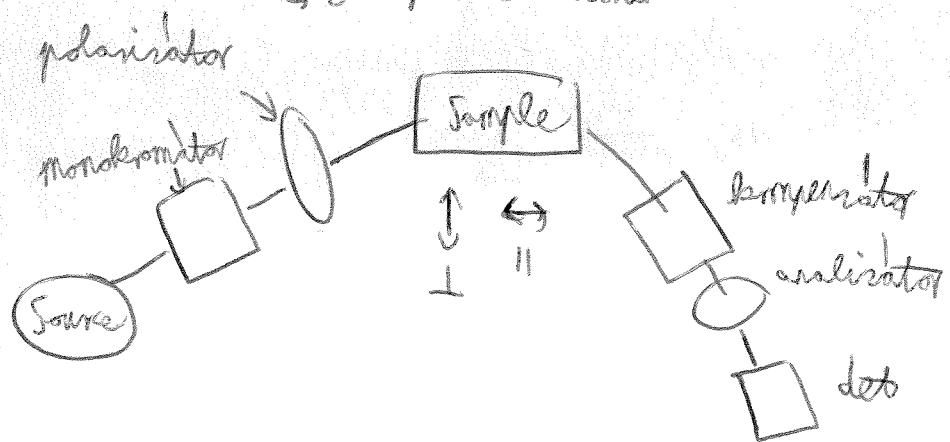




V.11.

Ellipsometry

↳ ε repres. idenek direkt mérke



$$E_0 = \begin{pmatrix} E_{0x} \cdot e^{i\delta_x} \\ E_{0y} \cdot e^{i\delta_y} \end{pmatrix}$$

$$E_0' = \underline{\underline{\mathcal{E}}} \cdot E_0 \quad \underline{\underline{\mathcal{E}}}: \text{förs-matrix}$$

pl. nem abszorb. planparallel lemez:

$$\underline{\underline{\mathcal{E}}} = \begin{pmatrix} e^{-i\delta_1} & 0 \\ 0 & e^{-i\delta_2} \end{pmatrix} \quad \delta_j = \frac{2\pi}{\lambda} n_j \alpha \quad j=1,2$$

reflexionál: $\underline{\underline{\mathcal{E}}}$ för irányába ⊥ és || a beérési síkra

földszín:

$$\left. \begin{aligned} R_{||} &= |R_{||}| \cdot e^{-i\delta_1} \\ R_{\perp} &= |R_{\perp}| \cdot e^{-i\delta_2} \end{aligned} \right\} \quad r_g = \frac{R_{||}}{R_{\perp}} \quad \begin{array}{l} \text{forgatási} \\ \text{állítható} \end{array}$$

$$\epsilon = \epsilon' + i\epsilon'' = \sin^2 \phi \cdot \left(1 + \operatorname{tg}^2 \phi \cdot \left[\frac{1-r_3}{1+r_3} \right]^2 \right)$$

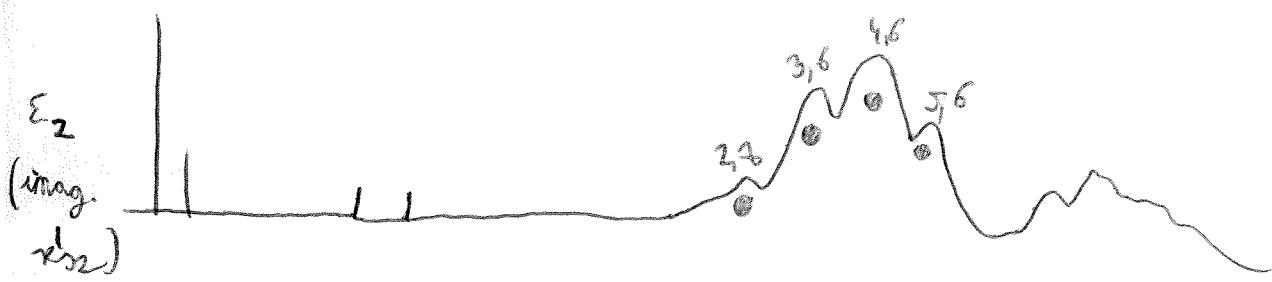
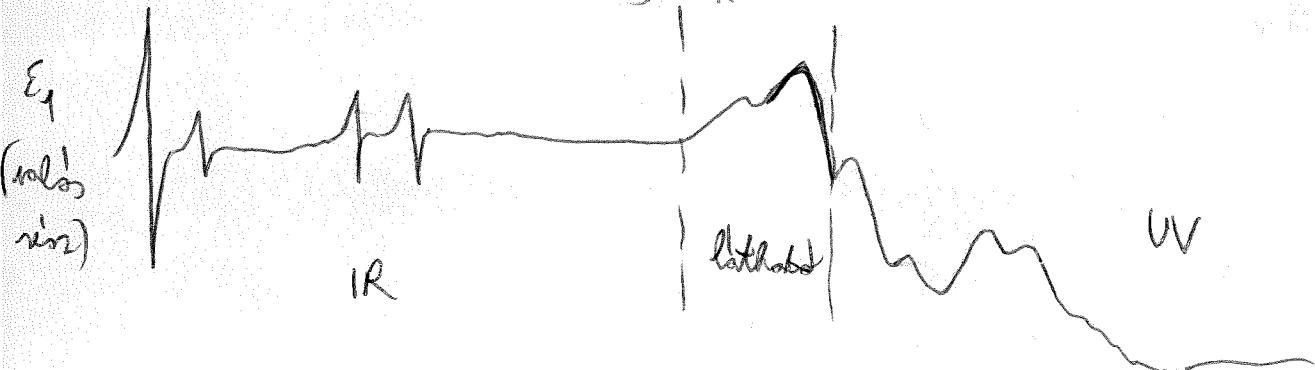
ϵ' , ϵ'' merhett

n , K minnelt

absorpcio

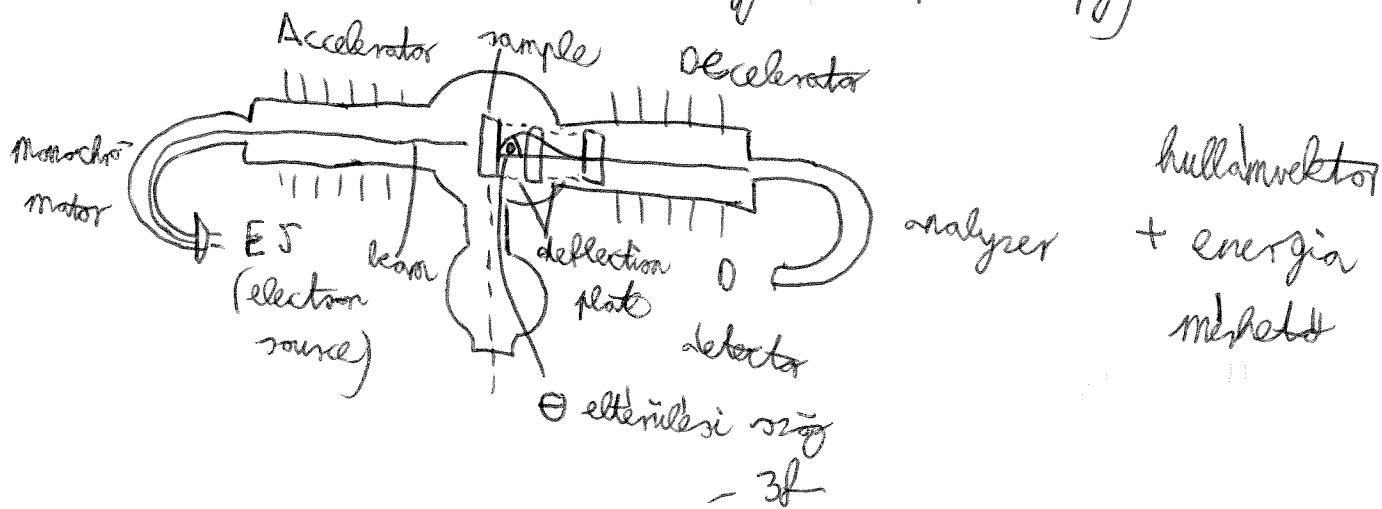
reflex

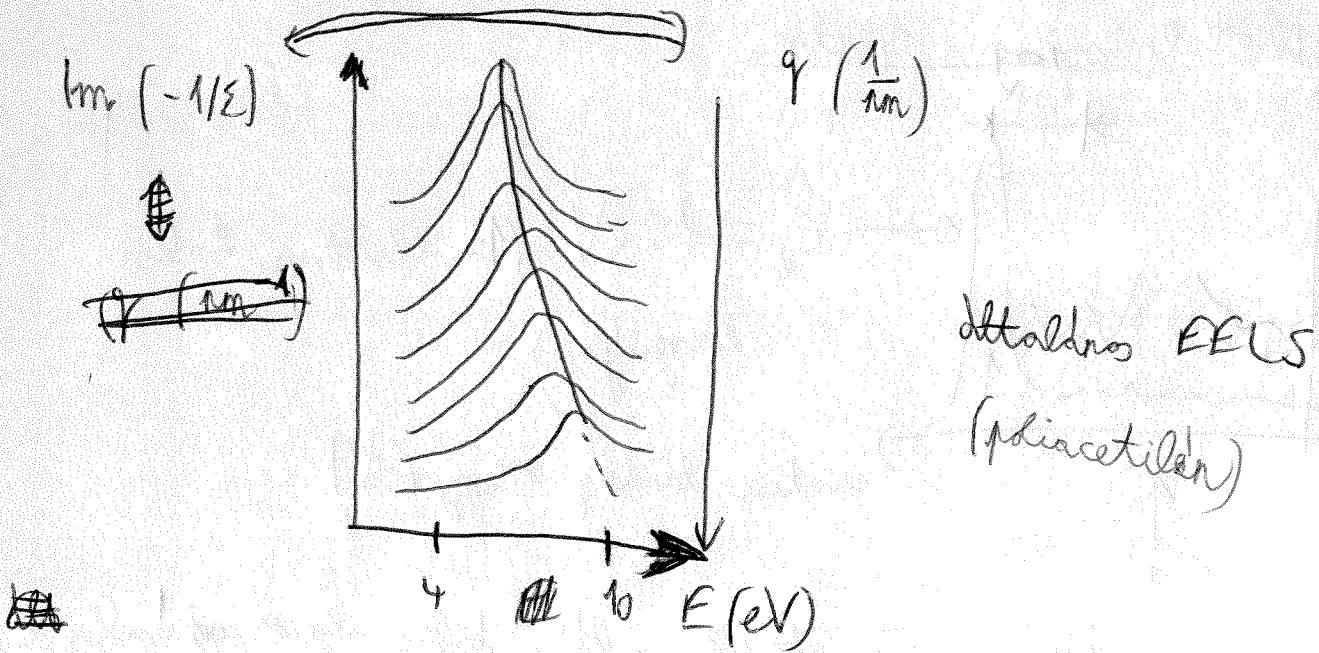
$$+ \text{beendeli: } R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}$$



EELS

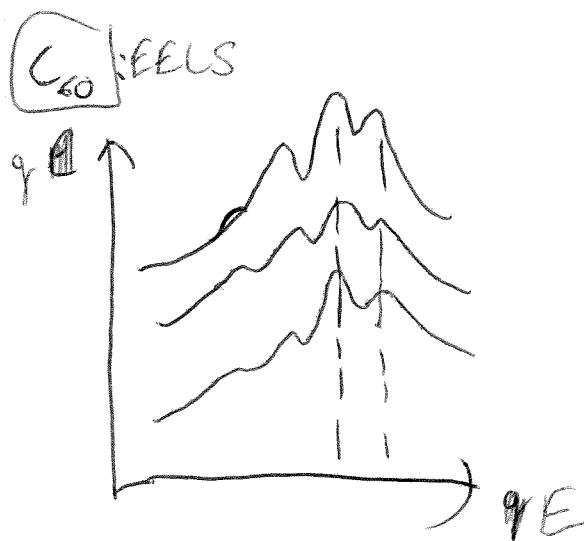
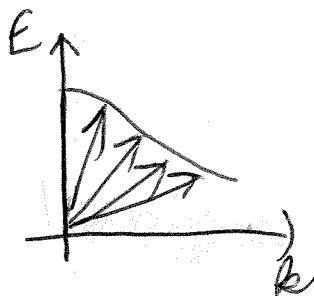
(electron energy loss spectroscopy)





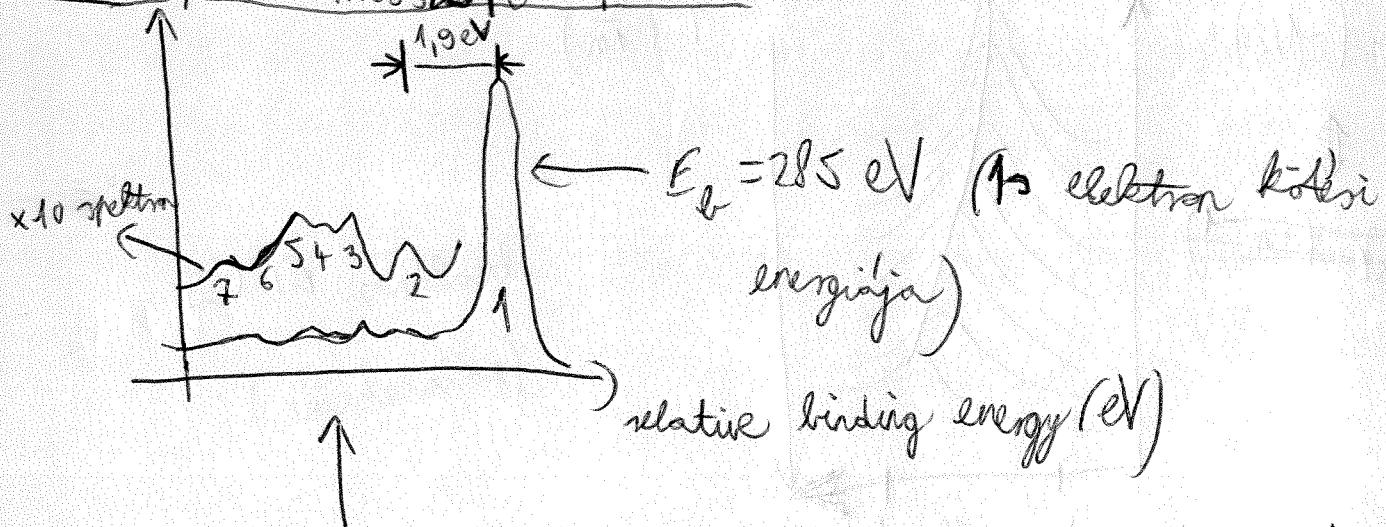
oldalról EELS
(diacetilen)

- nem csak függőleges átmérőből, mint optikai átmérőből!
- másik szabály miatt az energia változás



a csökkenő energiája nem igazán
változik gyakran, ugyanis
a szabály nem teljesül!

PES: photoemission spectr.



ha a kijövő e^- utolsó a fej fölötti elektroiglial,
kisebb lesz az energiája



- e^- gerjesztési energiák meghatárítás

- $1,9 \text{ eV} \Rightarrow \text{HOMO} \rightarrow \text{LUMO}$ átmenet, itt nem tiltos!



e^- spektrum:

\Rightarrow pöröltetű és molekulák spektruma nagyon hasonló, mert véletlenül a rácsok

~~az pöröltetű a részük miatt megfelelőnek kis interakcióval~~
~~tillós~~ átmenetek is

Molekulareszénsék

1) I_h csomó karaktertáblázat
(ikosahedron)

60 atom \rightarrow 180 időtök \rightarrow 180 O vektor
(30)

DE es nem lehet inerциális ábrázolása
a szimn. műveleteknek, mert a legmagasabb dim.-jük
ined. dr. 50 \rightarrow

redukálni kell

fogások, inverzi... \rightarrow egyik atom sem marad
a helyén

E	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$	i	$12F_{10}$	$12S_{10}^3$	$20S_6$	$15S$	Fükök.
180	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4

$T_f = 0$ kör (öffnig.
ellenke
leorosz)

reduktív:

skalározásról van írás ined.

ábrázolásról \rightarrow előnyök benn van, amelyek kaptunk
eszményeket

4 atom a helyen marad
 \rightarrow 2 részben van a többikben $\rightarrow +1+1$
 \rightarrow 1+1 részben a többikben $\rightarrow -1$

az ined. dr.

T_{1g} rotation
 T_{1u} ~~translation~~
 ered le bell vonni a 180 d-s 1 felvontatni,
 de n-nyolc ugyanaz kivonciak
 → ennek 17 dim.

180 d-s n-lan STM von

$$n = \text{Ag} + 3T_{1g} + 4T_{2g} + 6G_g + 8H_g + Au + 4T_{1u} + 5T_{2u} + 6G_u + 7H_u$$

Raman - op.

egy enyi modus van

rem enyi

DE ~~degeneracia~~ van a degeneracio modus!

a) **[IR]** 1 normalmodus van gerijpte

$$\langle 4_e^- | d | 4_o^+ \rangle$$

ground state: nincs reacs

[IR : dipolmoment] → nem szabad függenie a szim. operációkkal

→ az integrandus nem függött a szim. operációkkal

(ezekkel) ~~transformációk ugyanazt kell kaphatni~~
 eloppelhetősen lehet

$$\langle 4_e^- | d | 4_o^+ \rangle$$

\uparrow
 \uparrow
 Ag
 T_{1u}

szimmetrikus

med. általánosan nem transformálható

ha a teljes matrixben

nem függött a szim.

transform. -tól

-42

$\rightarrow T_{1u}$ nem transz. csak!

$4 T_{\text{in}} \text{ műtő} \rightarrow 4 \text{ IR módszer van}$

\Rightarrow ez mutatja a spektrumban a magas szimmetriát!

b) Raman: photons $\xrightarrow{\text{+}}$



bejövő + kienergiával photon



tensorozás van a kl.-i matrixban



* Ag polarizációs tensor (dipolmom. helyzet)

← Trace ($\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}$)

* Hg ← (...)



ezek az az általunk

lehetőséges, ami ugyanolyan

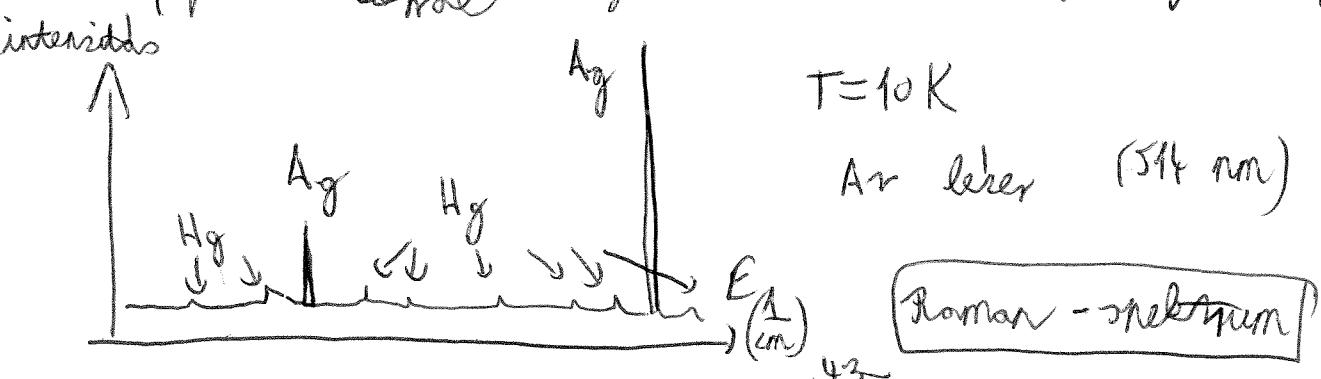
transform., mint a pol. tensor

$$R = (2 \text{ Ag}) + \dots + (\text{Hg})$$



10 Raman csúcs van

(polarizátorral meg lelőt különbsétek Ag- \rightarrow Hg-töl)

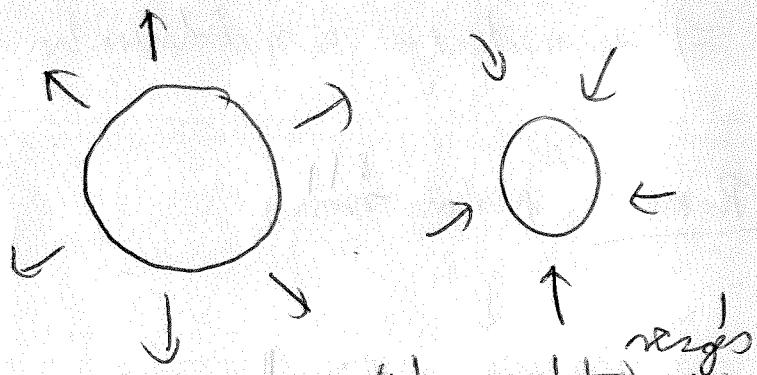


Ag^{+} : ergsi normalmodusai

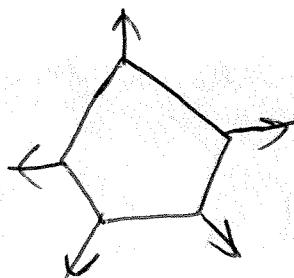
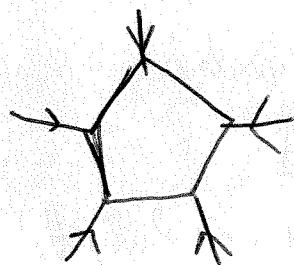
493 $\frac{1}{\text{cm}}$

• leggo mode

(breathing mode)



• pinch mode



(mindigkép, fázis)

or 5 single ~~összefüggés~~ ^{összefüggés},

bitartalás

(benne van az
elmond. vektor)

a mol. siklaja

↓
a kötőszöv

~~szem~~ szokat
vállalk

1468 $\frac{1}{\text{cm}}$

mag energia!

int.

disorder band

egys

→ harmas kötőszöv → is a legfelsőbb

grafén/grafit

$\rightarrow sp^2$

→ ha kisbb a

fulleren

$\rightarrow sp^{2,3}$

kötőszöv,

gyémánt

$\rightarrow sp^3$

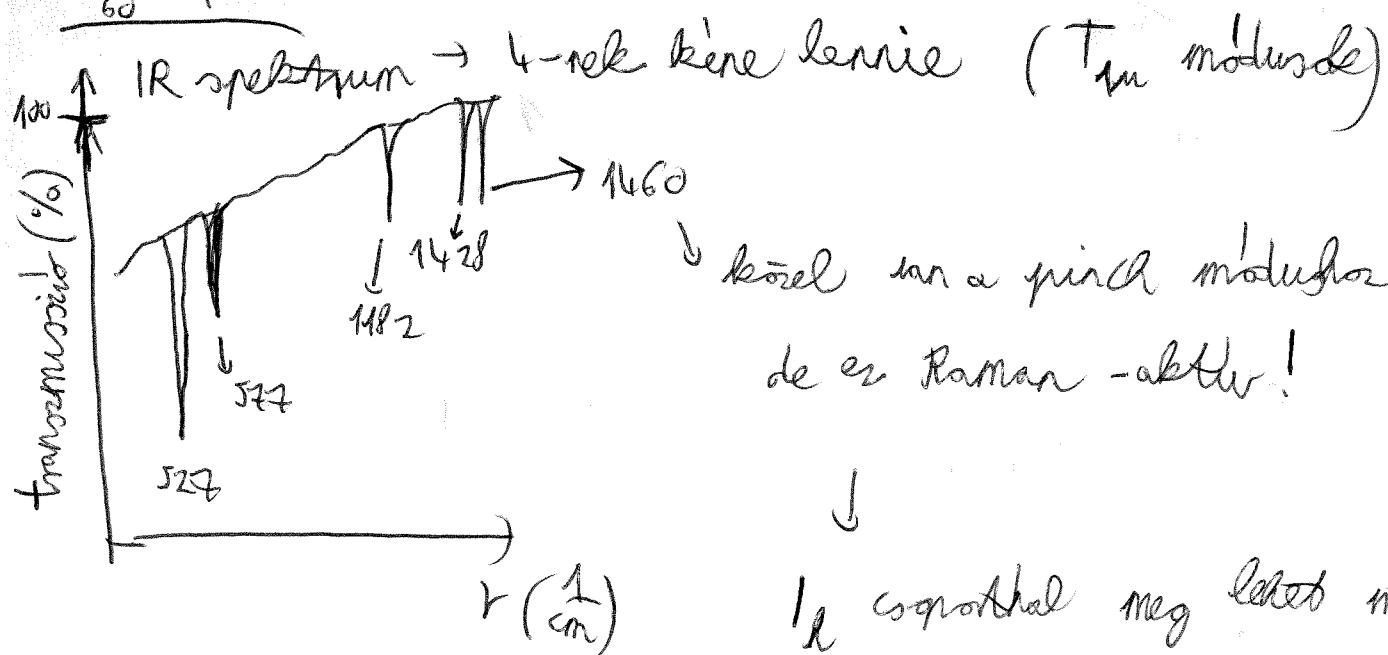
exell a
kötés → ~~nagyon~~
a magalland

C₆₀ egyszerűsítés
 C₆₀ 300 K-en a legnagyobb relatív terelő az H₂ + H₂ oxigéne

- 10 K → a kristályreaktoros (köbös) műatt frissítési jelenségek (mag mol., nincs kristály)
 ↳ megjelenik ^{eddig} tiltott átmenetek is! → + csökcs

↓
 300 K-en is kristályn van Nagy, de a függesz / szegés művekben nincs, a majdnem tiltott átmenetek kiötlögökönök

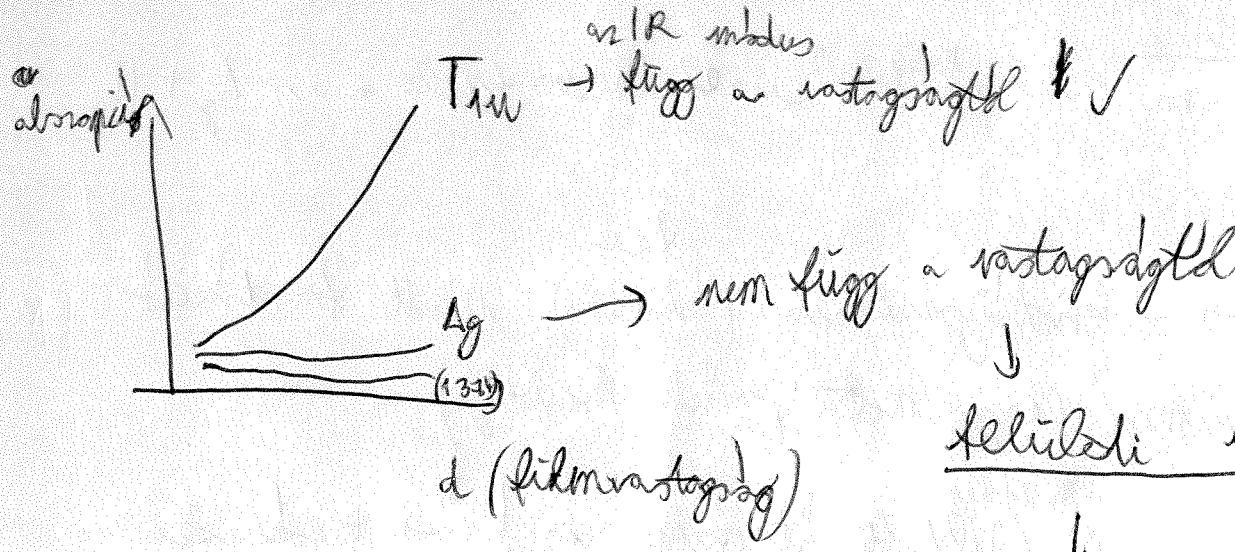
C₆₀ film



↓ közel van a gázhoz modulusz,
 de ez Raman - aktív!

hogyan lehet mégis
 egy Raman-cső?

↓
 hogyan lehet még lehet mitatni,
 hogy IR aktív modulus nem
 Raman aktív, és fordítva!
 (szint. miatt)



ellipsozatív móds (60 film)



esek kombinációs módszere (combination modes)

2 rezgési módszere gyorsodik → harmonikus rezgéknél esek tiltottak, de anharmonikus rezgéknél lehet ilyen

(2 foton szabódik el)

Hány ilyen lehet?

↳ így is működik az IR-szabolyok!

$$T_{1g} \otimes T_{1u} = A_u + \textcircled{T}_{1u} + H_u$$

$\underbrace{\phantom{A_u + \textcircled{T}_{1u} + H_u}}_{\text{2 foton működés}} \quad \text{szabályos} \quad \begin{matrix} \uparrow \\ \downarrow \end{matrix} \quad \begin{matrix} \text{ez már IR alkér} \\ (\text{megengedett összefüggés}) \checkmark \end{matrix}$

de pl.

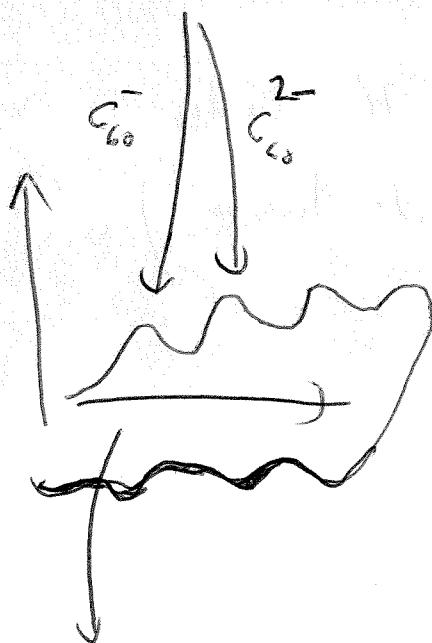
$$E_g \otimes T_{1u} = T_{2u} + E_u + H_u$$

↳ nincs $T_{1u} \rightarrow$ nem megengedett
ez a kombináció!

⇒ elvileg 3fö kombinációs módszer!

1) Ciklikus voltametria (~~C₆₀~~ oldat)

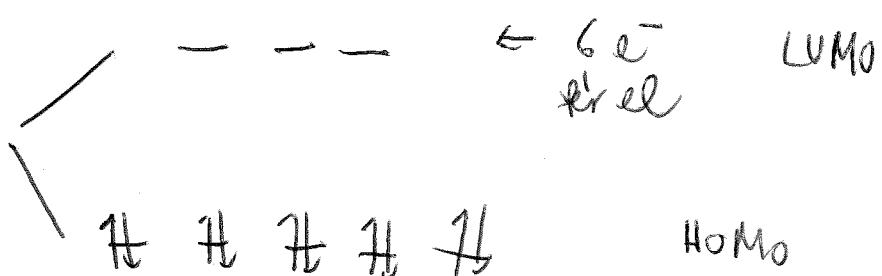
szürkekő: e⁻ felvétel



lehet ESR jelenet nemessé a töltött C₆₀-ion

C₆₀ elektronpozitív reprezentációja → részben felesz
e⁻ leb.

C₆₀⁶⁻ is lehet



2) Dópdas (szilárd C₆₀)

a) ötven atomot kell bejuttatni a fullerenbe,
ami részen lead e⁻ -t

pl. Li, Na, K, ... → melegítik →

(Ca, Mg, ...)

ribállan

visszatér

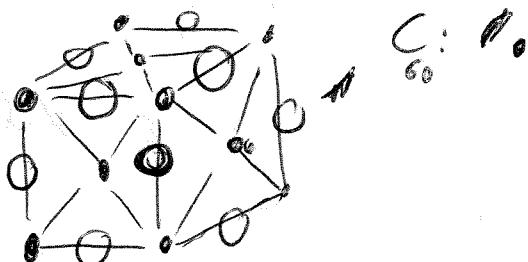
bediffundál
a fullerenbe
és lead e⁻-t

alkali atom

fulleren

A₃C₆₀: fcc

oktaéderes helyek



4 db C₆₀/kocka

3 él + 1 köre, oktaéderes poz./kocka

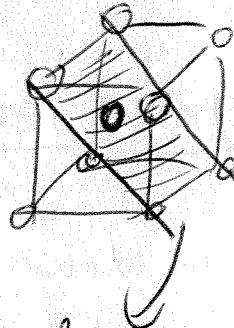
oktaéderes helyek száma = fulleren molekulák száma

$$+ \text{tetraéderes} - 11 = 2x \quad - 11 -$$

⇒ A₃C₆₀

• $A_1 C_{60}$: kcs (tetrahedrális tetrahedrális)

• $A_2 C_{60}$: bcc (tetrahedrális körök)



ha minden részük

ez pontegy

azaz lapnak fel

meg, csak a
metszállando más

Tanulás:

van hely a C_{60} -ak köül

a C_{60}^{6-} -ig itt találnunk (l. előbb)

!!

dipolással C_{60}^{6-} -ig el lehet jutni

(• $A_1 C_{60}$: összeférhető \rightarrow többoldalas helyet
nemek feltöltenek)

b) veretdipólosok:

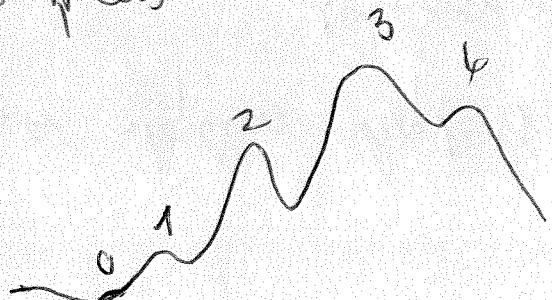
C_{60} nincs

de ha e^- ver fel $\rightarrow A_3 C_{60}$ a legjobb veretdipólos

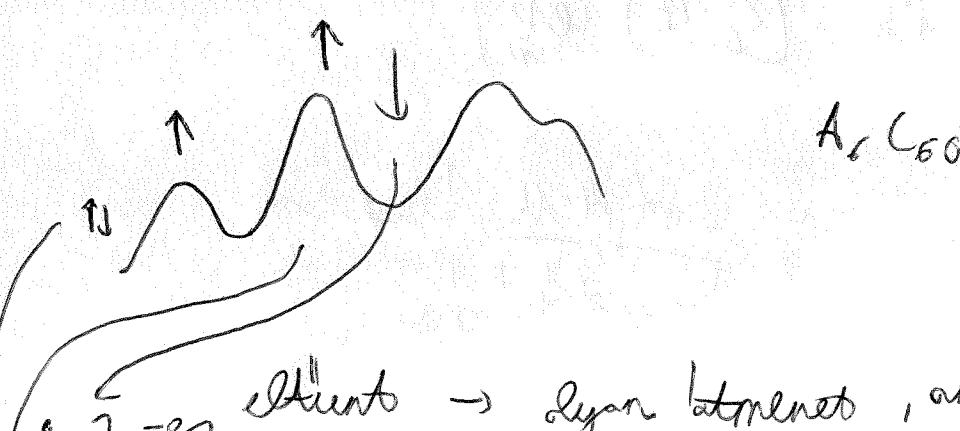
nincs nincs
lese

$\leftarrow A_5 C_{60} \rightarrow$ LMO teljesítik

c) absorption spectrum:



földgálas



ArC₆₀

2-es általános \rightarrow legyártottatott, ami a ~~LUMO~~ LUMO-RF ment (HOMO-1 \rightarrow L)

megjelenő eggyelik ciklus: extra LUMOs \rightarrow meleggyel
az általános valószínűségek, de teljesen

betöltjük

d) LUMO-szavon belüli átmenet: megjelenik, majd eltűnik
~~EELS~~, megnyelik (kis energia)

- low energy EEL'S
- high energy EEL'S } regondysa információs hozás

↳ első átmenet: $1 \rightarrow$ LUMO (\rightarrow alkototttá válik)

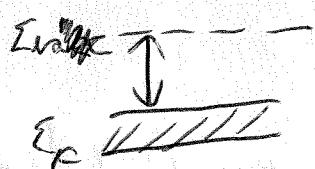
2. átmenet: $1 \rightarrow$ LUMO + 1
- ST } vezeték 6.0 földgálasnak

mozik effectus: benini ettolás:

a több miatt az is valószínűsége is eltolik

e) fotoeffektor: (PE5: photoli. sp.)

$$\epsilon_{\text{photon}} = h\nu - [\epsilon_B(\text{PE}) + \epsilon_{\text{sp}}]$$



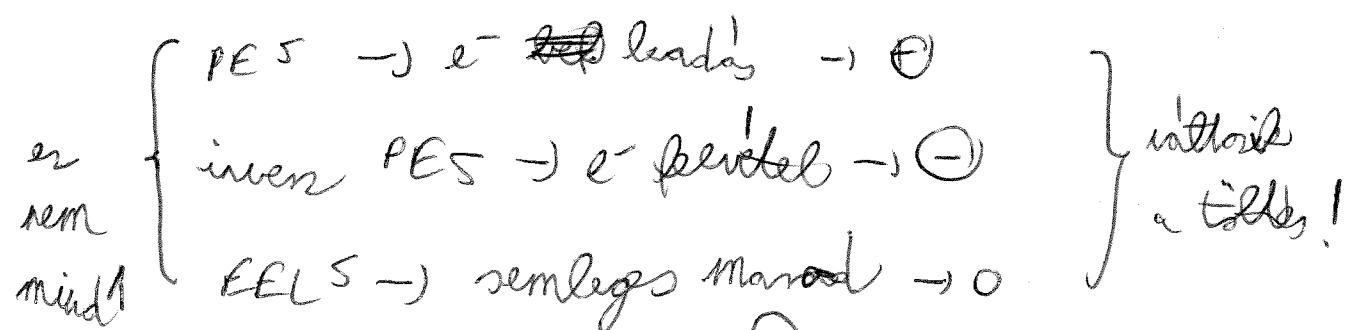
→ betöltött alapréteg
'alapréteg'"

• inves PE5: e^- befogás, majd fotonkibocsátás

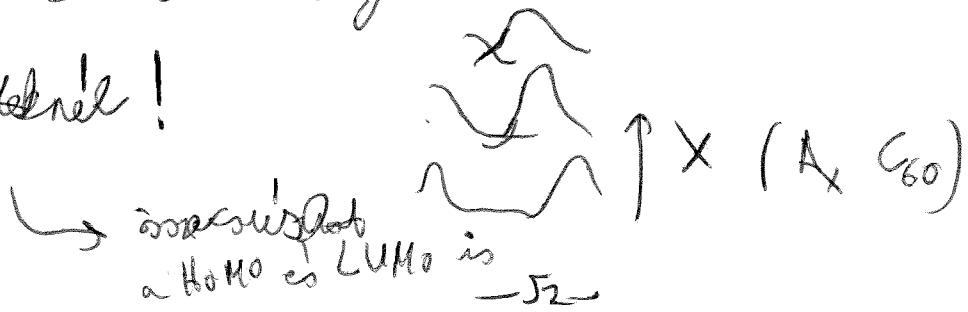
$$h\nu = E_{\text{kin}} + (e\phi + \epsilon_B) \rightarrow \text{ives alapréteg}$$

= inves folyamat

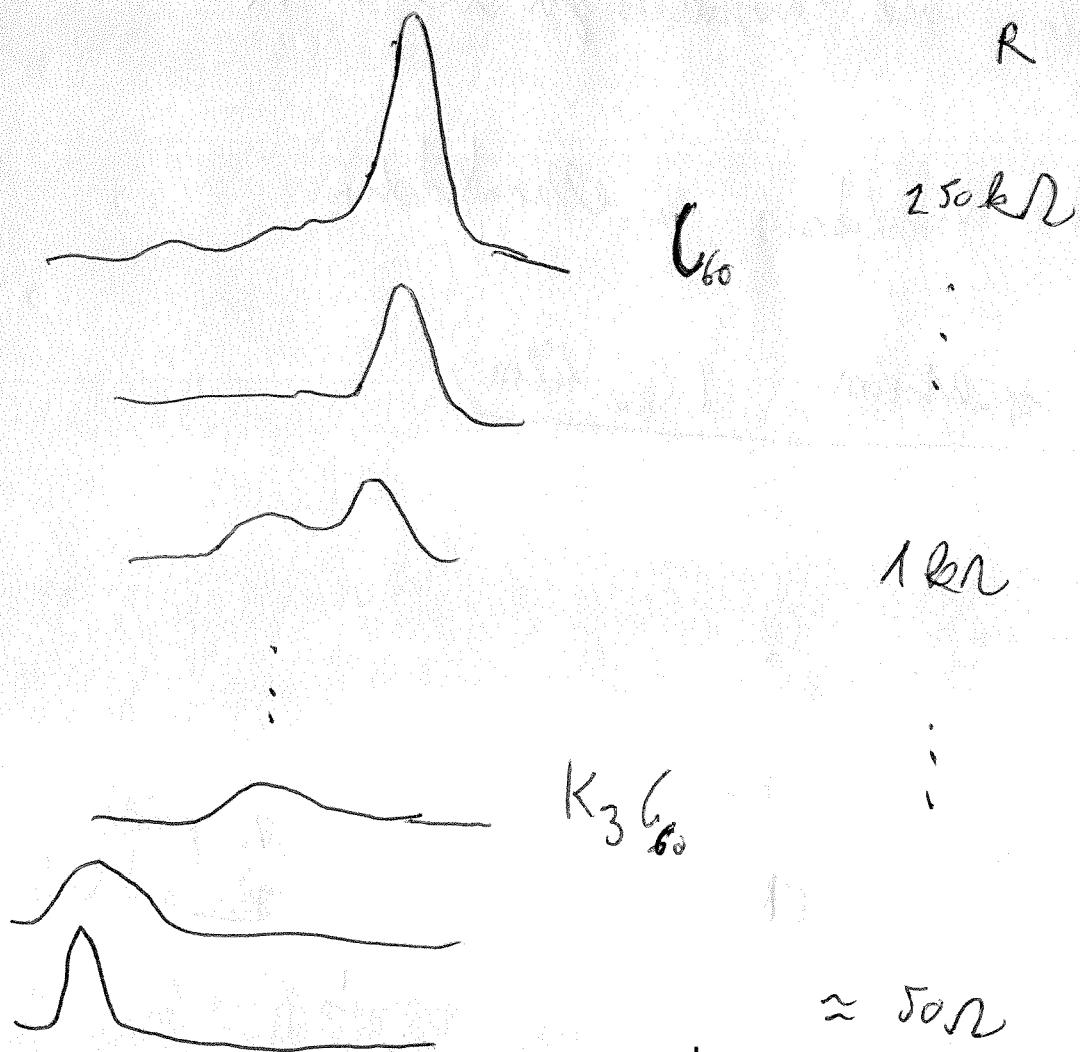
(de van egg kis eltolás a több miatt)



az átmenetben!



4) Raman és IR spektrum doppelstrichbalken



$K_{11}^{11} 660 \rightarrow$ töltőszelv minta vissza a pinch modus frekvenciájára!

↳ 3 ciklus → 3 fázis, ezek között váltakozik
de elesen



$x=0, 3, 6$ lehet csak (molalitás, legfelsi nyomás)

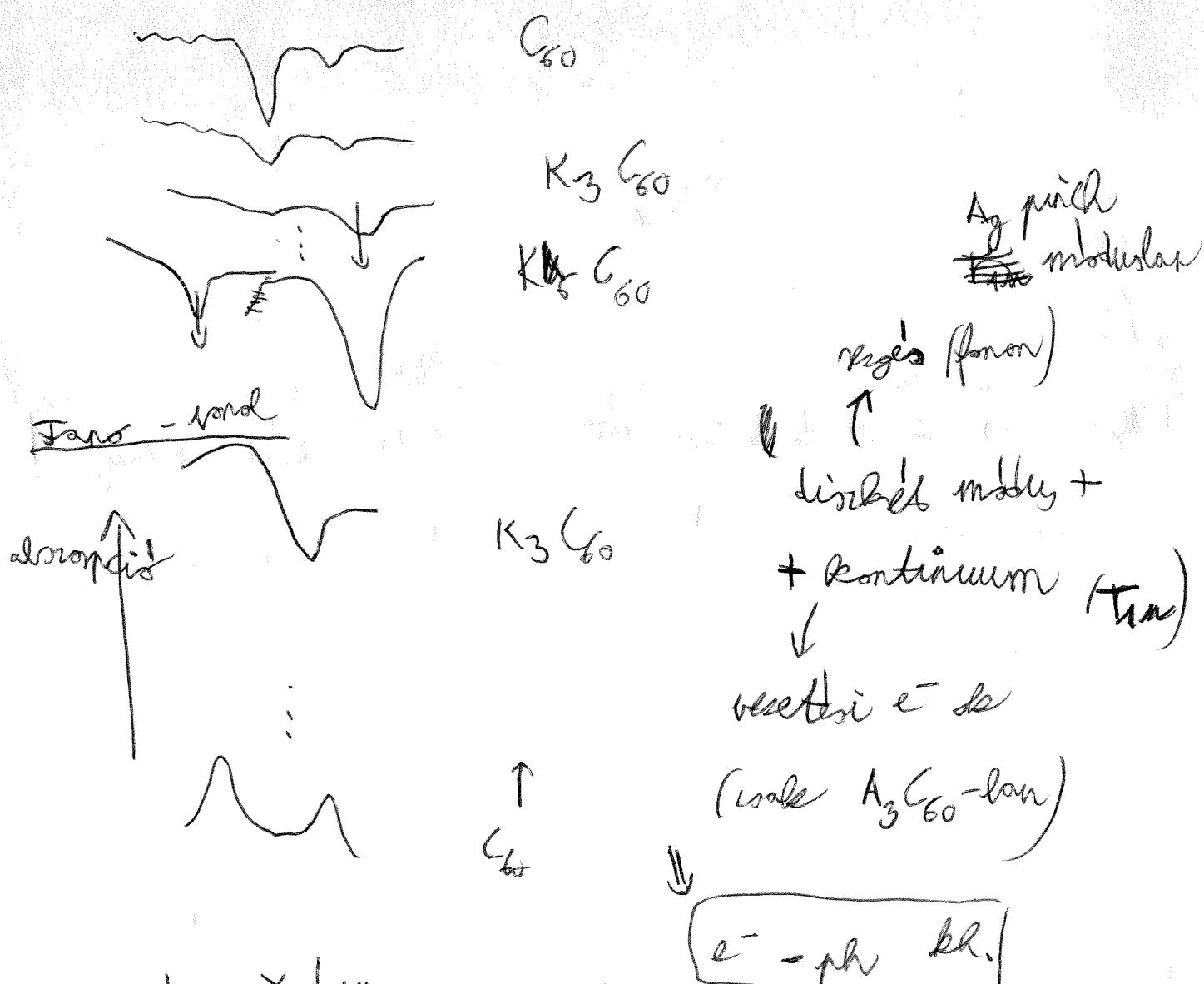
Raman-mérs → van egy behatásai melyeket

ellenállás-mérs → az egész területtel hordoz információkat

~ ~~Ag~~ ~~Ag~~ coke lassallan jut be a K

↓
van egg his friskes or elleralldan

in-situ IR spectrum (C_{60} film)



~~bin × bin~~
(el | ~~el el~~)

= $A_g + T_{rg} + H_g$

↑
(el | ~~el el~~)

→ $\epsilon_s \approx$ ~~homogeneous~~ max ~~left edge~~
- ~~SP~~

C₆₀ supervezetés

1) a dupla C₆₀ supervezető valhat

13,9 K

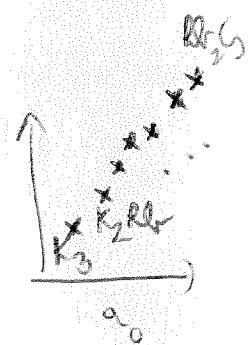
...

33 K

K₃ K₂Rb

Rb₂K ...

RbCs₂

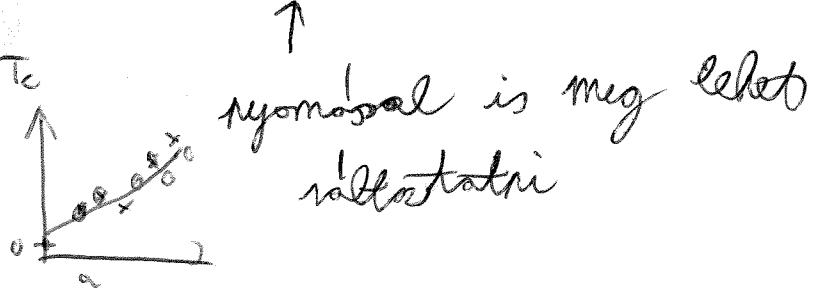


ha nincs komponensök metsz

→ nincs miscallando

nincs a kétikus h.h. is

⇒ miscallando → T_c kötőtt ennél konstanci



(a C₆₀ miatt supervez.)
nem a dupla atomok
miatt)

BGS supervezető! → Nagy T_c egy BGS

a C₆₀ miatt

Miért?

supervezetőkör legfel

állapotaink

$$\frac{1}{N(\rho)V}$$

$$B_B T_C = 1,14 \cdot f_{W_0} e^-$$

- ennek az e⁻-ph csatolás

- W₀ is nagy

• rezonancia nagg az alkotókban
 mett a szabadegcsoport 0,5 eV ! (UVMO a
 szabeg)

(az ilyen VdW erők meghatározó)

a rezonancia szabadegcsoport a molekuláris
 kölcsönhatásnak köszönhetően nem

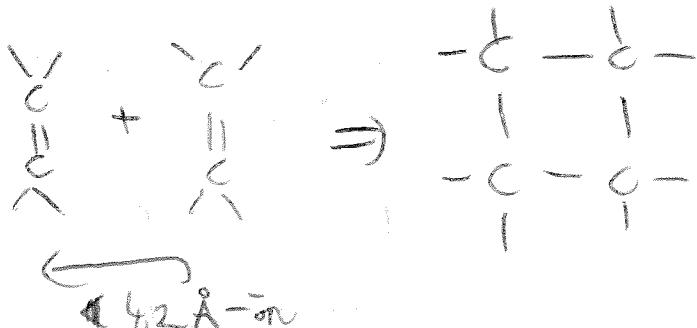
mijusd. 9⁰⁰

V. 8

9. óra

C₆₀ polimerika

2+2 cikloadditíció



Woodward - Hoffmann
malályde

(4n, 4n+2, ...)

belül kerül

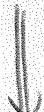
lehet:

- fotopolimerizáció
- nagy nyomású polimerizáció
- ionos polimerizáció

~~E₀, hal = 100~~

a) att. ban HOMO polya minta \rightarrow libetek fülesek

DE Ca-vel:



↳ több komplex

• UMS polypin kedvező effektek \rightarrow libetek 2+2 cikloadd.

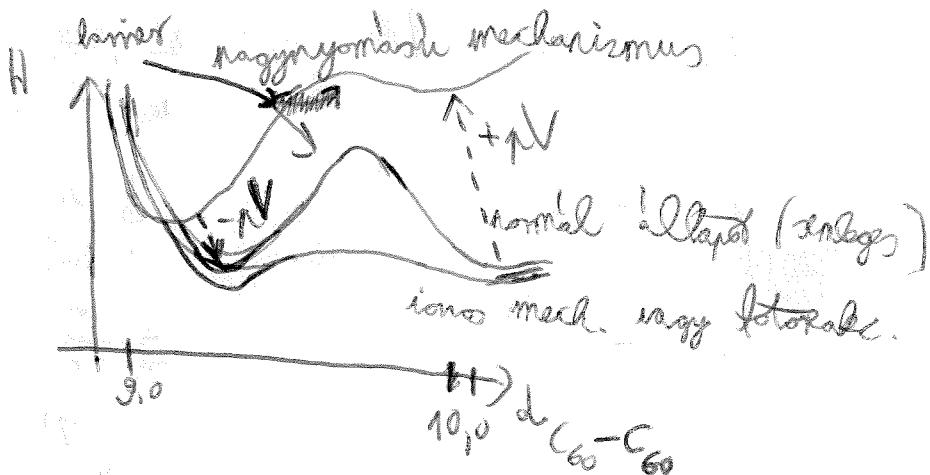
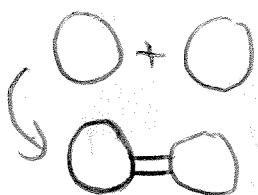
(HOMO-LL nem ~~kedvező~~ polyan kedvező)

itt kedvezőbb ha íme e^- -től juttatunk

el. fejgel felgyj. \rightarrow folyad.

mitánek { v. dipolással \rightarrow többet adnak \rightarrow e- keivel be a UMS-va
(ionos polim.)

b) nyomás: $H = E + pV$

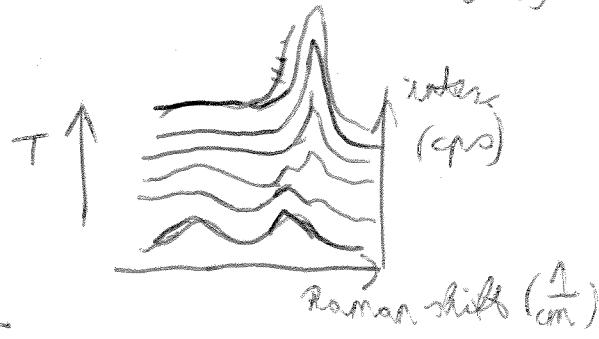
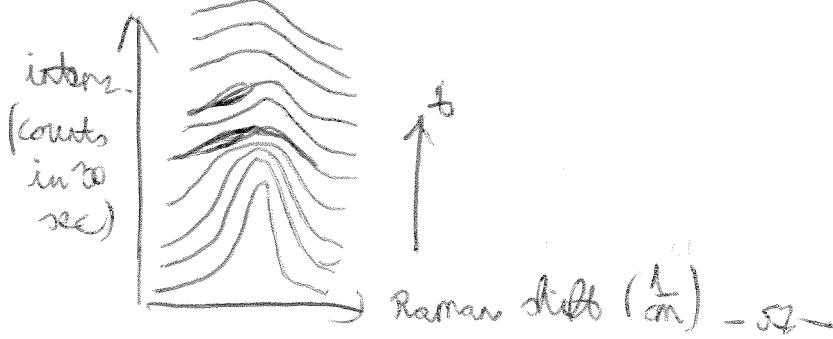


- C_{60} kist. \rightarrow foly. hatásra növekszik

ötös nem elég, de zöld, kék elég \Rightarrow polymerizáció \Rightarrow feszültségek

növekszenek

- Raman: pinch-modus elkelek, mellette több csík les



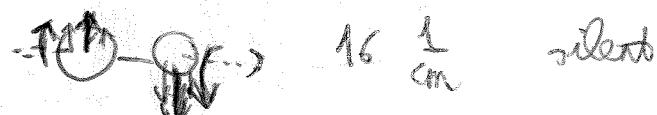
• sk: C_6 monomer előtérük, kör minden kötőtől C_6 polimer lesz
 reveribilis (kötőrendszer viszonytalankul)

• D_{2h} szimmetria → dimer

(trimer → lake, D_3 , D_6 → többé szimmetriális)

összetétes → 6 lig. módszer, ugyanis $\sqrt{2}$ -ben többet is van (2x6)
 itt csak 1x6 illetve lesz

$A_u \rightarrow$ ellentétes forgás



$B_{1g} \rightarrow$ libráció (ellőzés)



$B_{3g} \rightarrow$ másik libráció



$B_g \rightarrow$ nyílás



$B_{1g} \rightarrow$ szimmetrikus



$B_g \rightarrow$ másik nyílás



(oldalánkelt)

szimmetria
en.

c) iong. polim. → alkali csoportos alkali csoportos

$A_f C_6 \rightarrow$ szabón IR, Ram. ϕ

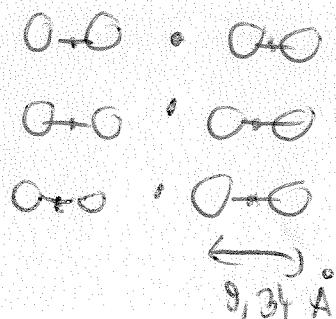
• $T > 100^\circ C$: fcc monomer → spink mod. legelő mód (6 $\frac{1}{cm}/e^-$)
 benzid mód

• lassan hűtve: otthon - I plimer - st

• δ^- : δ^+ 19.14 \AA
 • δ^- \leftarrow alkali atomok

• gyorsan kötő (gyeng) : $\text{O}=\text{O}$ - II dimer

$\text{C}_6=\text{C}_6$ hossz. (RTG mérték) $\Rightarrow 9,34 \text{ \AA}$ \Rightarrow nem polymer



- IR : díj csök \rightarrow felbontás

IR \rightarrow u modulus lehetnek aktív

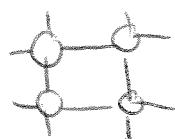
R \rightarrow g modulus

- többi lehetségszám \rightarrow 10, 20 polimerek
(enthalpia rán)

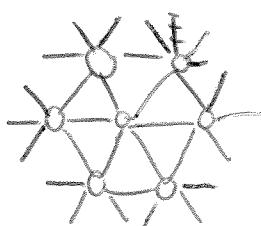
\rightarrow dörzs fr. - ében más stabil

- atomok: $\text{O}-\text{O}-\text{O}$

tetragonalis



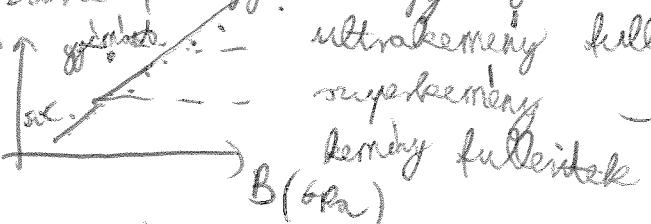
romboidalis



rekesz is lehet nagy számban

- 3D polímer is lehet \rightarrow réteg (nagyon nagy nyomás fel)

- bulk modulus $\frac{\Delta V}{V} = B$ H: hardnes $\left[\frac{\text{kg}}{\text{mm}^2}\right]$

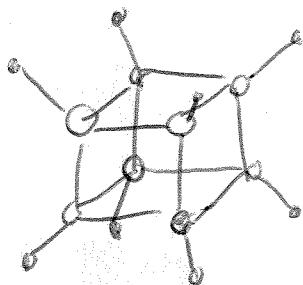


~~($\frac{1}{2}$ - $\frac{1}{2}$ - $\frac{1}{2}$)~~ \rightarrow 91% (Röntgen)

nyomkövet szállele kist. \rightarrow elág szégy, de nem körígyel
a gyakorral ~~+~~

Kulon

G-Hg kocka mű.



\hookrightarrow E-ha statikus hlyk

tud menyei \rightarrow nincs statikus éveli

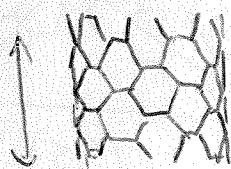
\downarrow
 \hookrightarrow E-kulon mű. kezükkel feliratba várak, raggaból
passzonos egymásba)

"motor - statika" mű.: kulon fix, E forgy

Szen nanocsövök

1) Bevezető:

S. Iijima (1991) → Káli-díj 2008-ban

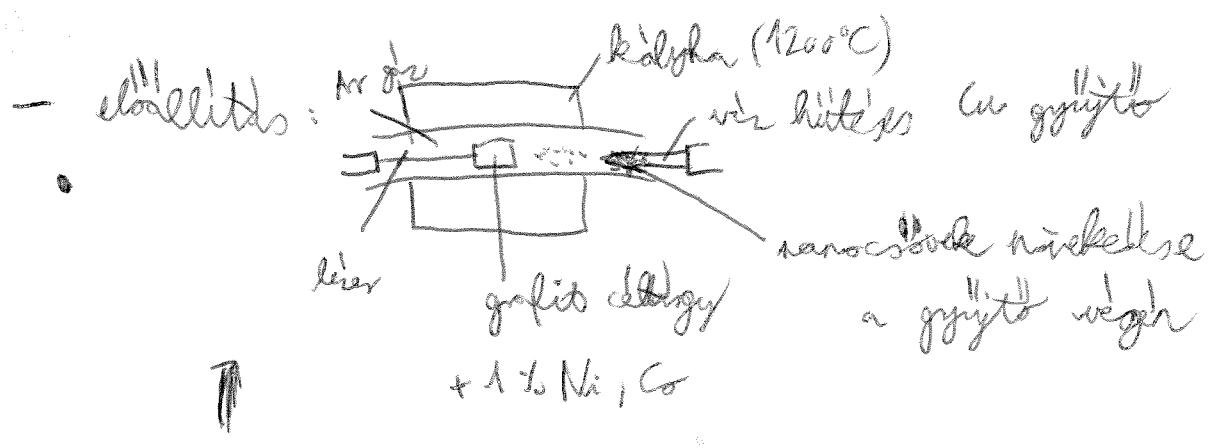


C tömör hatású révén hengerpalástok

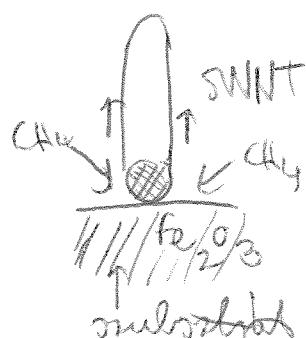
$$d \approx 1,15 \text{ nm}$$

hossz: 1-100 μm, de általában kb mm hosszúságú is!

- nyitott fullerén
- szabályos (konzentrikus) szen nanocsövek MW CNT
- kellekés TEM-rel



• CVD (chemical vapor deposition)

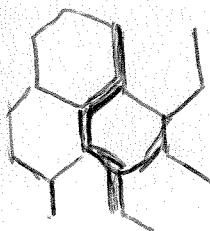


- mintában (patterned catalyst),
- viszben → „supergrowth”

- az

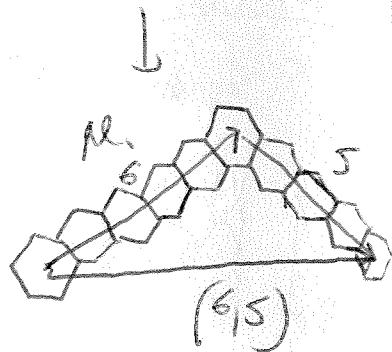
2) Kinaliták

\hookrightarrow kinalitási vektor: grafitból hozzá keletkezett ami



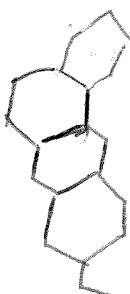
károsíték (armchair)

$$(n,m) = (5,5)$$



cikk-cikk (zig-zag)

$$(n,m) = (9,0)$$



kiváló (chiral)

$$(n,m) = (10,5)$$

$$C_a = n \cdot \alpha_1 + m \cdot \alpha_2$$

$$n-m=3q$$

forrás

} ~ 1/3 félmes

$$n-m \neq 3q$$

félvezető

armchair $\rightarrow (n,n) \rightarrow$ 4 félmes

zigzag $\rightarrow (n,0) \rightarrow$ 3-ik félmes $(6,0), (9,0)$

\rightarrow ha n és m nagy (kicsi görülni az)

- vizsgálat: AFM, STM, HRTEM

3) elektronosztikus

a) ha a (atomok) ~~nagy~~ nagy \Rightarrow Picin szövületek által befolyásolja

\Downarrow

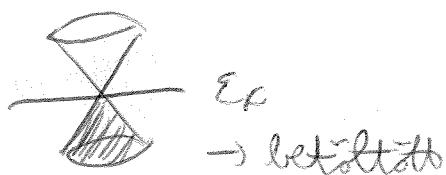
zone folding: alk 6 szig rácson \rightarrow nemek diszp. rel. -jai
 (szimmetria) maradjuk ki, majd többel periodicitásban légy.
 a hajtogság periodikus határfeltételeknél
~~szint~~ figyelembe vétele

- TBA (tight-binding): grafén

$$E^\pm(k) = \eta \cdot \sqrt{3 + 2\cos(k_1 a_1) + 2\cos(k_2 a_2) + 2\cos k(a_1 + a_2)}$$

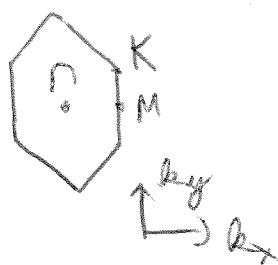
o melyen, ~~p_z~~ $p_z - k$ feltüök

• K-K' pontokban Dirac - körök



$g(E_C) = 0$, mert csak 6 ponton érintkezik

k - téren:



Körök: $\eta \sim 10$ eV gap

Dirac - pont: $K, (K', K''_{1,2}, \dots)$

köz K közö M pontok

(NT \rightarrow zone folding: feltérkéve nem minden k megengedett;

$k_n \cdot 2\pi / R = 2\pi n \rightarrow$ periodicitási feltétel $k_1 = x$

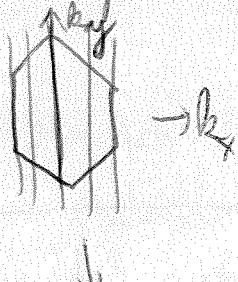
\downarrow



↳ add figyelj, hogy melyik irányba tekéjük fel:

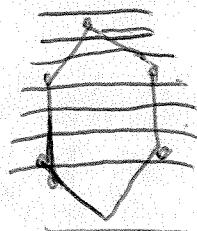
* irányba \Rightarrow k-periodikus

pl.



* irányba \Rightarrow k-periodikus

pl.



itt megy a Dirac-pontba

\downarrow
fm

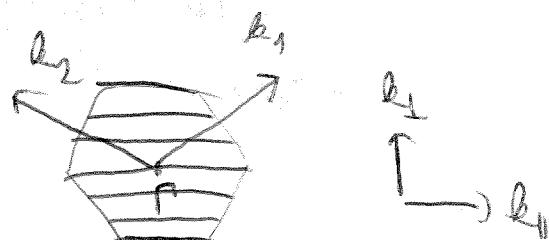
$$(n-m=3g)$$

itt nem megy át a Dirac-pontba

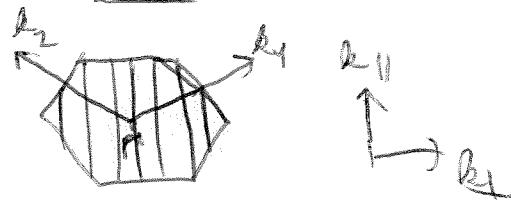
\downarrow
elvezetés

$$(n-m \neq 3g)$$

armchair



zig-zag



chiral



feltr. megállóval k-a:

$$\underline{k} \cdot \underline{c}_2 = (\underline{k}_\perp + \underline{k}_{\parallel}) \cdot (n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2) = 2\pi q \quad q \in \mathbb{Z}$$

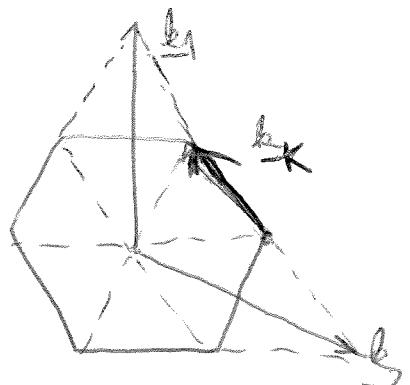
\uparrow kir. vektor \downarrow $\text{o-t ad } (\perp \underline{c}_2 - a)$

$$\underline{k}_K \equiv \frac{1}{3} (\underline{k}_1 - \underline{k}_2)$$

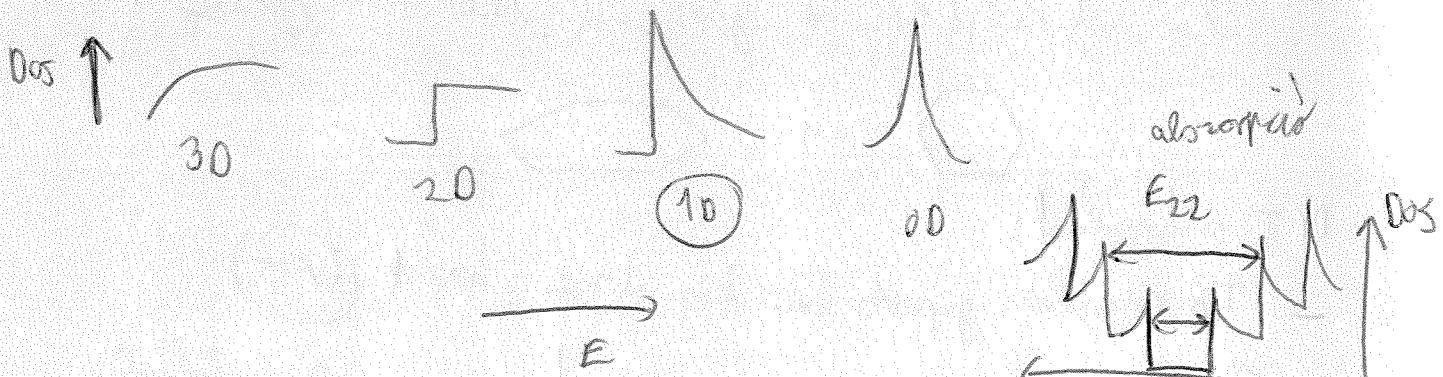
$$\Rightarrow \underline{k}_K \cdot \underline{c}_2 = \frac{1}{3} (n_1 - n_2) \cdot 2\pi$$

$$k_1 a_2 = 2\pi g$$

$$\Rightarrow \underline{k}_K \text{ megállóul van a } \underline{c}_2$$

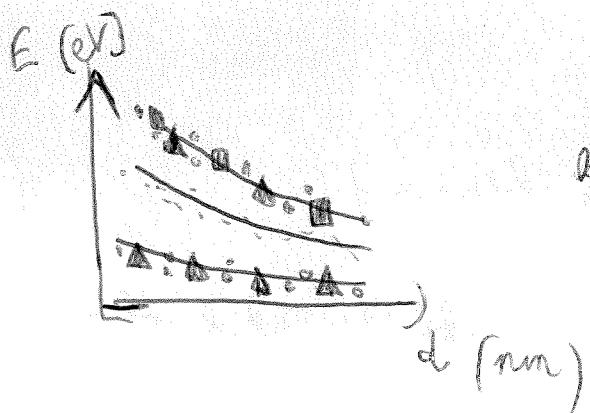


Van Hove sing.

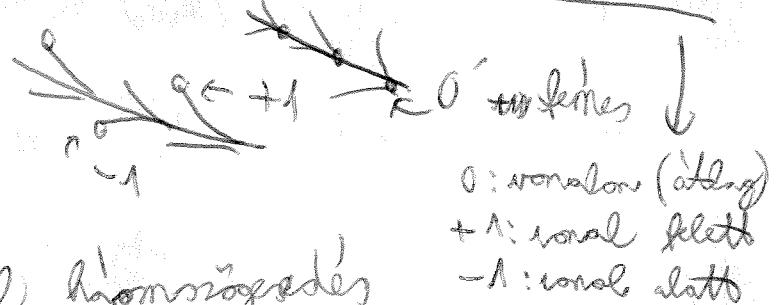


Kataura-plots

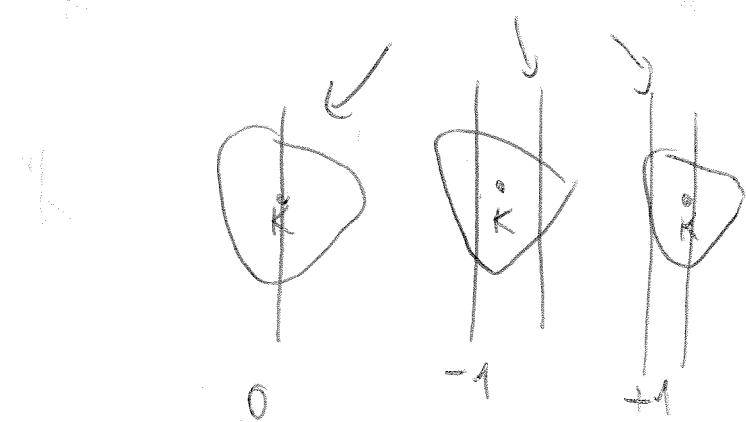
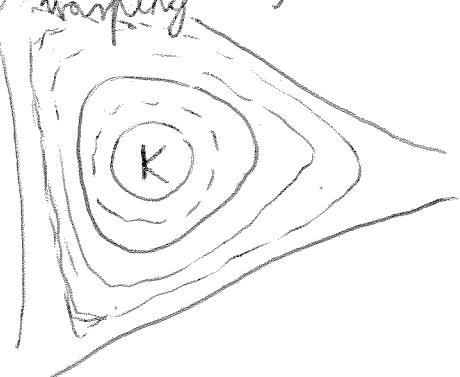
$$E_{11}, E_{22} \sim 1/\lambda \rightarrow \text{opt. filtertelen } \Delta m = 0$$



kiemelt rész helyenként \rightarrow családosodás



- trigonal warping \rightarrow K körül harmonizálás



- fluorescencia \rightarrow Ca valóság!

atomok menti nélküli részleges leletlég (Pessen, Kataura)

szigellitkék a hisztográfiákban használtak is

b) kis átmérőjű sínk nanocsövek

ha $d < 0,8 \text{ nm} \Rightarrow$ görb. eff. nem elhagyható!



DFT szabadság:

- TB nagyobb gapet ad kis $d-x$, mint DFT

↑ pl. S_10 -ra nincs gap!

(válaszgáncs)

zone-foldingos módszer

(TB vezetések
legyen)

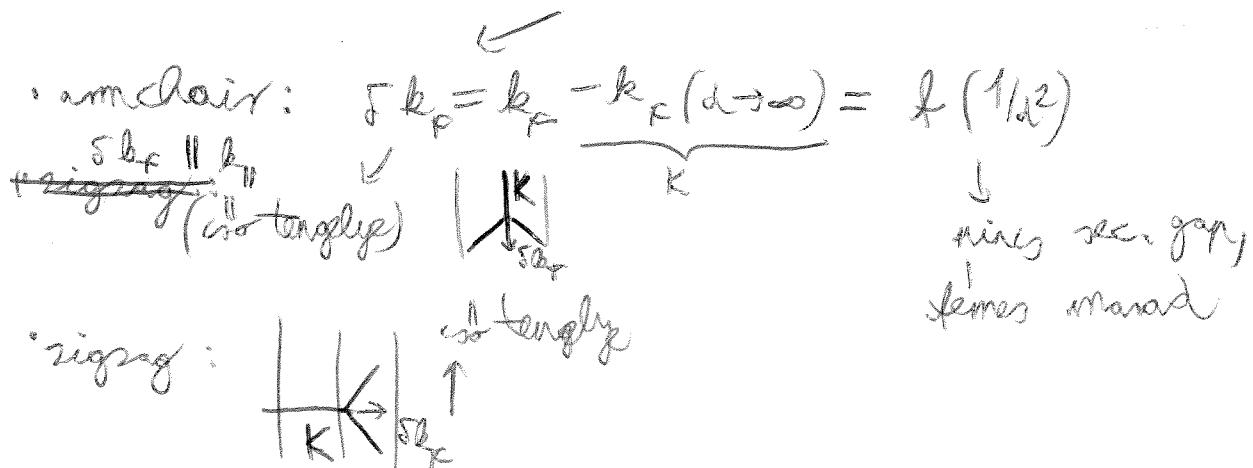
pontosabb szabadság

- TB: csak Π zárja meg

DFT: σ, Π is (kicsi $d-x$ esetben keveredik)

$\Rightarrow \sigma - \Pi$ xfibrizáció: ~~gap~~ elhárított, ahol van,

de pl. ahol nem volt jött megjelenés (secondary gap)

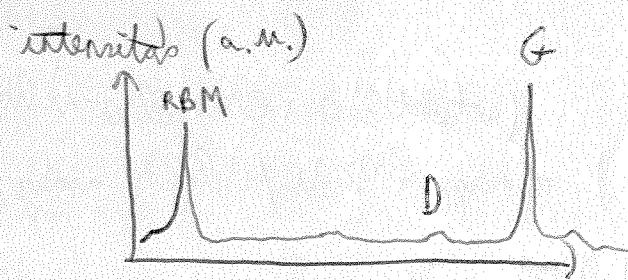


$\delta k_p \perp \text{no tangly} \Rightarrow$ itt lesz sec. gap!

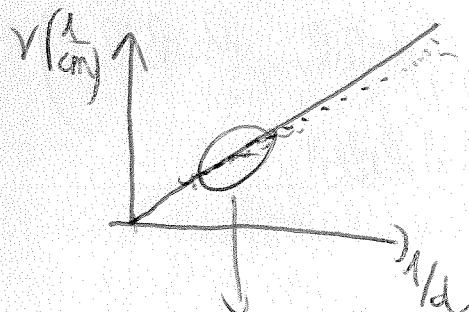
4) Rendszí teljesítőképessége

- Raman: RM (radial breathing mode) \rightarrow feltörés miatt jelentik meg





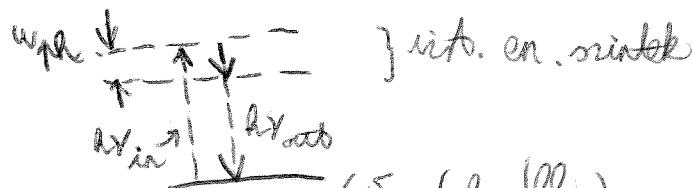
Raman shift ($\frac{1}{\text{cm}}$)



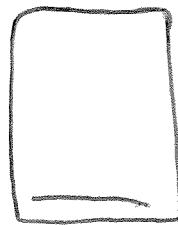
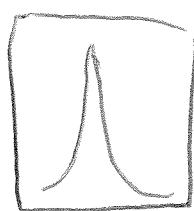
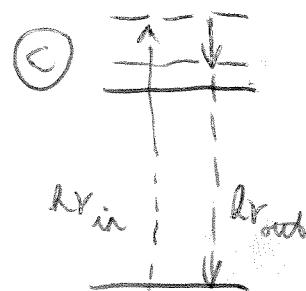
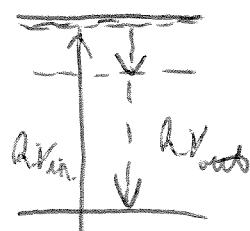
ragy d-kere közel lineáris $\frac{1}{d}$ -ben v

- rezonans Raman

① — ES (gyj. öll.)



(b)



part ellalunk egy gyj. mintet a létez energiával

↳ 5 nagyjára int. törekedés

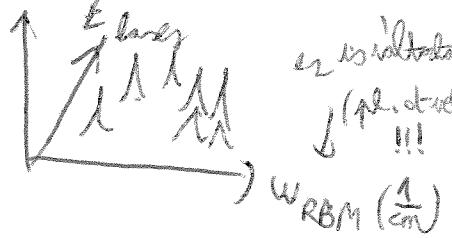
intensitas

2D map \rightarrow fluorescenciához hasonló

\rightarrow család

\rightarrow Célszín

- 67



3) Alkalmaságok

- (személyes : Ellenállás-változás)
- kémiai reakciók (funkcionális) (nagy feldolgozás arány nélkül)
 - nanoelektronika (létrehozás, felvezetők)
 - különleges mechanikai tulajdonságok (erős, könnyű, stabil, flexibilis)
"pl. "soft"