

unvollständiges

Vinag. elte. hu/ Lurti

fulleren C_{60} (beschmister fullerenen)

große grafithen & a silber $d_{cc} = 0,14 \text{ nm}$

Sitzungs: silber löst $(30 \pm ?) \text{ e}$ von TiH

detektieren a grafithen d van esien sit sil recht sit file
C atom van beune (am alab van neder es am alab neder)

sol was file kleines eluclones is van
(a falliert neder eluclones van)
geheimt.

- a extracitret sit file kypen is d lelet legeren

Lousdaleit es a geheimt
eigen netorken
van neder

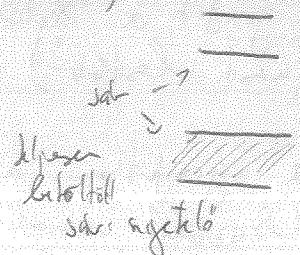
- atlatnd

- nryeklo (a grafid nert veret)

- kypen was mechanici fulgclousagel

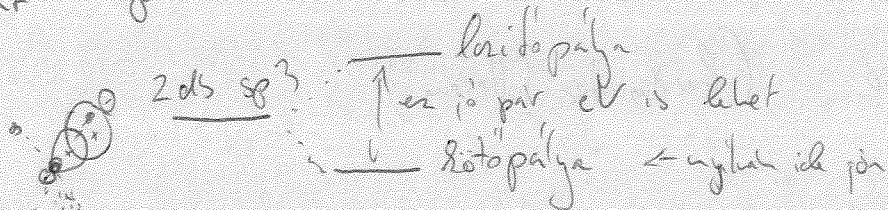
Qualitativ nagarat a grafid $\leftrightarrow$ geheimt Sitzungs.

- a Sitzungs a elektronenstrukturen van (silberseut)



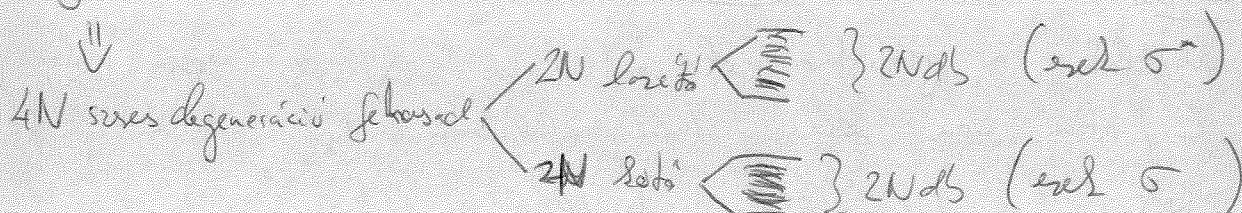
↳ gyémánt nyitva } szubsztancia
 ↳ grafittal nyitva }

gyémánt sp^3 hibridizáció



minden párra
 tényleg van egy
 pályázat

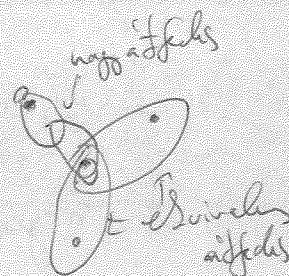
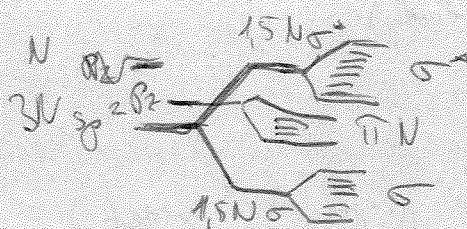
1) ha két atompálya átfelel akkor kötés. Ionit
 pályákra kerülnek



a két atomos molekulapályák is átfelelnek, de csak 2-vel
 a 4N db elektron párosítva betölti a gerjesztet

2) ha 2 elektron legyen, több nem fér be, és
 elválnak kötés nélkül, akkor 2 párt alakul ki

grafit E ↑
 $3Dsp^2$



2Ndb elektronok
 3N σ

N a π -k → itt a felbontás alacsony
 a alacsony → a Fermi szint
 a π párt nagyon van.

a grafit a legrövidebb energiatávolság
 (nem alsóbb)

a grafitban az sp^2 -es állapotok - azaz mint a gyémántban az sp^3
 (kisebbség van az elektronok) → 5 s-ek vannak van és az
 a π nem tartalmazza a nagyon kicsi szubsztancia (C atomok - 16meV)

E-TS amit valójában nem lehet (a grafít entropiája nagyobb)
erősebb lenne jónál stabilabb

ha ugyanígy is vezetne

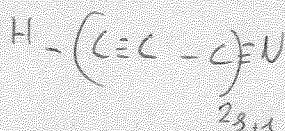
E-TS + pV a grafít térfogatát nagyobb lehet a nyomás növekedése
vont ezen

Schwarz

11.21

Bemutatás: számos molekulát mutatott ki a szilíciumot tartalmazó
kristályok között
H-C=O, H-C≡N, CO
a szilíciumot tartalmazó kristályok között
szilíciumot tartalmazó kristályok között

a szilíciumot tartalmazó kristályok között



→ utána feltekint a spektrométer és
megnézzük az eredményt

Smalley kísérletével, hogy bizonyos körülmények között lehet előállítani és
reguláris-alka fém-spektrométerrel mérni lehet

→ erre volt a cél a kőzet-alka de Smalley-nak nem sikerült

Smalley kísérletével volt gondolat a Extrakt

→ de inkább inkább
kőzet-alka (egy van az a
dolg az a kőzet-alka a kőzet

- impulzus vemi kőzet-alka fagyó van kőzet-alka
elkötés amit nagy nyomású gázal fagyó
először amoniaciával az a Heliummal fagyó

a spektrumban csak páros vértékszámai vannak

↓
elkerülve juttatni a paraméterekhez

↓
líhozni a C_{60} -at

a C_{20} nagyon instabil

a szögcsomó mindig 12-en vannak, mindig 12 C_{60}

Euler-Euler-jelle poliedrálra

C csomók WC

$WC =$ csomók L

E él E

$$C + L = E + 2$$

u_5 db szög u_6 db határ

$$L = u_5 + u_6$$

$$C = \frac{5u_5 + 6u_6}{3}$$

3 (minden csomó három éllel rendelkezik) 3 szög

$$E = \frac{5u_5 + 6u_6}{2}$$

$$\frac{5u_5 + 6u_6}{3} + u_5 + u_6 = \frac{5u_5 + 6u_6}{2}$$

$$16u_5 + 18u_6 = 15u_5 + 18u_6 + 12$$

$$u_5 = 12$$

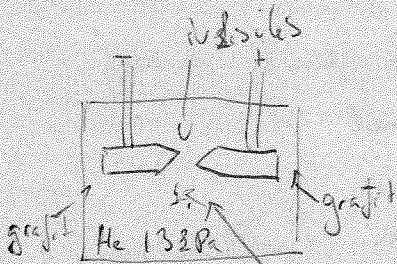
parósság $C = \frac{5 \cdot 12}{3} + \frac{6}{3} u_6 =$

$$= \text{páros szám} + 2u_6 =$$

páros szám

1990 - dij Nature 1992

veraltet: Boalljot C₆₀ Zerstörung (Krätschmer, Lamb, Fostropoulos, Huffman)



a C_{60} -at benzolban v. oldal-ban

Barom $\rightarrow$ Kristallinität : makroskopisch messbar

infrarotes spektrum: reizes: induziert gerüst

a Co 174 normal modsevan

L , een mindegeest alder 12-ten is van degeneraait
soort

elbow essen viel 4 ab Punkt 12-ten

NMR - eher als ^{13}C meist a ^{13}C - und neues NMR - je
↓
(magnetische Larmen-folge)

(imagineren Lerner-følelse)

(, nem a kálso' magasságát írta az elhírozottakról)

$$w = \gamma (1 - \frac{\sigma}{\gamma}) B$$

dia najuss obyebahs : eret usangby fidesat nobles
(open) hani ed a beliai Bone

hans ed a helmi borgefors
jollen erö



Wird ^{13}C von einem $^{13}\text{C}_{60}$ -Ba, aber ein substituiertes nicht geben
wohl ein NMR-Ba

a C_{20} - bei 5 fte neu stehende positionen $\Rightarrow$ 5 vocal
+ gestrichen

it nem istam el so halom elgort a NMR-el kapcsolatosan

Lapcentrált szöveg

3. A van az Kétszáz oldalas
a kért

↓
gyenge szöveg (módszerrel)

↓
a 600 oldalas szöveg a
hátsó részben (600)

2600 szöveg kért a szöveg és
szöveg szöveg

2600 k-vel vált át szöveg szöveg
it nem kért a szöveg
(szöveg kért a szöveg)

rendszerezett szöveg
lehet a szöveg szöveg, mint a szöveg szöveg
szöveg, a szöveg szöveg és a szöveg szöveg
szöveg

Elektron diffúzió }
DMR }
röntgen }
ilyenkor lehet mérni

C_{60} : elektronok állapota $\Rightarrow$ elektronok
optikai tulajdonságok

az C_{60} -nak 6 e^- -on

1 $1s^2$: 1. és 2. elektron energiája

0-2 közötti 2^2 13,5 eV
(szint egy többlet)

(13,6 eV a H alapállapot)

3 db sp^2 hibrid

1 db p_z pálya

↳ az ilyen gömb-szimmetrikus cucc len $\rightarrow$ gömb-függvények
(első közelítésben)

h	5	11	
d	4	5	
f	3	7	
g	2	5	$\times 2$
p	1	3	az spin miatt
s	0	1	

$\Rightarrow$ 60 db kell még $l=5$ is

l degeneráció

de ennek valójában eloszlása ~~len~~ a szimmetriája
és ezek felhasználtak
azt állítják (mivel $l=5$ legyen kell az ilyen felhasználtak megmondani)
az tanulók és évek

highest occupied molecular orbital (HOMO)
lowest unoccupied -11- (LUMO) } Frontiers - orbitals (itt lehet mérni)

az konkrétan az egy előjegyzés valószínű a tényleg ott kért és vissza
 5 g s⁻¹: konjugált pontok: ezeket ugyanaz a spúrja (karakter)

az karakterekhez 120 db szimmetria művelet

a degeneráció foka a ugyanannyi a (maximális dimenziója)

az ugyanaz mint a 3. sz. az az az egyenlő szimmetria művelet

ebben esetben jött az a anisotrófia tanulni:)

I_h csoport

	E	12C ₅	12C ₅ ²	20C ₃	15C ₂	i	12C ₆	12C ₆ ⁵	20C ₆	15C ₂
A _g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
T _{1g} ≡ F _{1g}	3									
T _{2g} ≡ F _{2g}	3									
G _g	4									
H _g	5									
A _u	1									
T _{1u} ≡ F _{1u}	3									
T _{2u} ≡ F _{2u}	3									
G _u	4									
H _u	5									

10 db ábrázolás van 10 konjugált pont van
 az ill az ábrázolás mátrix spúrja

maximális ábrázolás

A, B: a 1 dimenziós ábrázolás
 g_u: az inverzió

(C_{2v} szimmetria)

E: 2 dim

F: 3 dim

G: 4 dim

H: 5 dim

(spektrógráfia van az van az: T-vel kinyom)

a 60 ds P_2 palja go 60 dimensionis abrazaht

↙ m a ganne abrazaht

↗ m go rediciditas abrazaht enne a karakterizatsion
van nihogot
van a spirra

E	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$	i	$12S_{10}$	$12S_{10}^3$	$20S_6$	$15S_5$
Π 60	60	0	0	0	0	0	0	0	4

ahol go post nun mared heben ot ninsen f'attobeli dan
khit a gar 0

most shalar nereni kll a tobbi abrazahtsel (karakterisel)
m a erednef, log halgner van m derne nelyet abrazaht

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

a negjeb' kullafjuevt go klet negsinehi go abrazahtre, log
m neren a P_2 -t alhelmoren na a nimenon nikelitel m
a karakterisel negjeb' siljel ostendou o'el

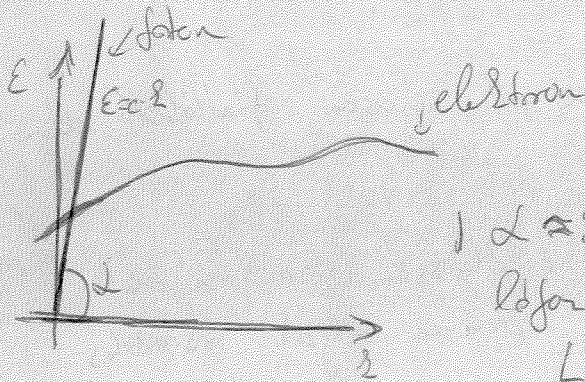
Fulleren elektrontranszisztencia:

Kristályszerkezet megváltozik az elektrontranszisztencia $\Rightarrow$ kialakul a sávszűrés
 az azist van most $\rightarrow$ nagyon keskeny sávok
 nagyon nagy határolt sávok (jobb oldalon látni kell)

Lapcentrális köbös rács

Látványos a HOMO és a LUMO
 degenerációja a rácsa a sáv-
 szerkezetben

D.O.S.: density of states



$\Downarrow$
 van egy titkos sáv, 1.5 eV döntő gap

$\alpha \approx 90^\circ$ az elektronok sebessége a
 foton a fényes sáv

$\hookrightarrow$ optikai gerjesztés az energiakapcsolat
 megmaradás miatt

$18 = 0$ fotónra

Átírás:

a π elektronok van benne, így adekvát, mert van egy p_z alatt látni
 látni

jelen esetben a sp^2 és a sp^3 sávok között
 (gátló) (gátló)

Piramidális

$sp^2: 0 - sp^3: 19,47$

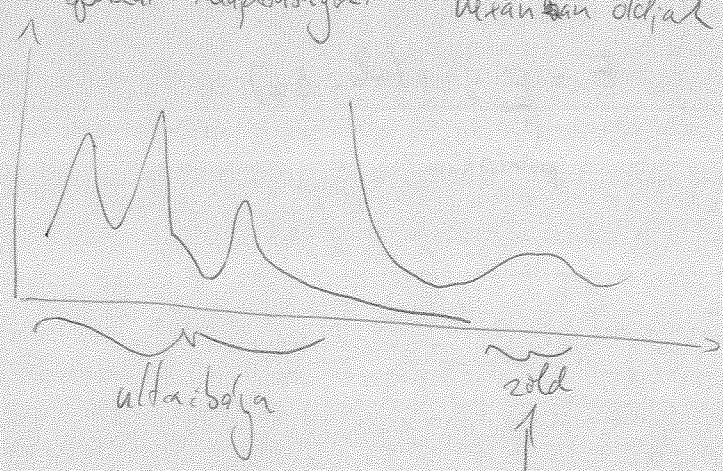
Átírás: C_{60} -ra 1/6

más néha látni is van.

Síksík a σ és a π van két sáv között, de most
 $\sigma - \pi$ hibridizáció van

Kvalitatív ábrák: az π elektronok, jobbra szemléltetve a gátló
 sávok.

optikai tulajdonságok: hirtelen elcsúsz



az a (nagyamplitúdó)
zöld a színes
nagy intenzitású színes
mint az

Jódonas átmenet: színes átmenet
↓
amikor ~~színes~~ elcsúsz
vált mörzsölés
↓
csak a → g
g → v átmenet lehet
azért nem látható optikailag
~ 1,5 eV-es HOMO-LUMO
átmenet azaz v → v lenne

magyarul az az optikai a vegyes spektrum is látható

exciton: a gerjesztett elektron és a lyuk kölcsönhatása

lehet singlet és triplet gerjesztésűek lehetnek
ilyenkor a lekelet azaz lyuk
↑
keletkezik az energia

dielektrisches Formalismus

$$\epsilon_r \quad \mu_r \approx 1$$

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_r}} \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$$

$$v = \frac{c_0}{c} = \sqrt{\epsilon_r}$$

$$\underline{E} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{polarisation}}}{E_0} e^{-i(\omega t - \underline{k} \cdot \underline{r})}$$

$$\epsilon_r = 1 + \chi_{\text{longit}}$$

$$P(\omega, \underline{r}) = \chi(\omega, \underline{r}) \cdot E_0(\omega, \underline{r})$$

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

$$\epsilon_r = \epsilon' + i\epsilon''$$

$$v = n + i\kappa_{\text{extinct}}$$

$$\epsilon' = n^2 - \kappa^2$$

$$\epsilon'' = 2n\kappa$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{|\epsilon| - \epsilon'}}{2}$$

$$n = \frac{\sqrt{|\epsilon| + \epsilon'}}{2}$$

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

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

} Kramers-Kronig