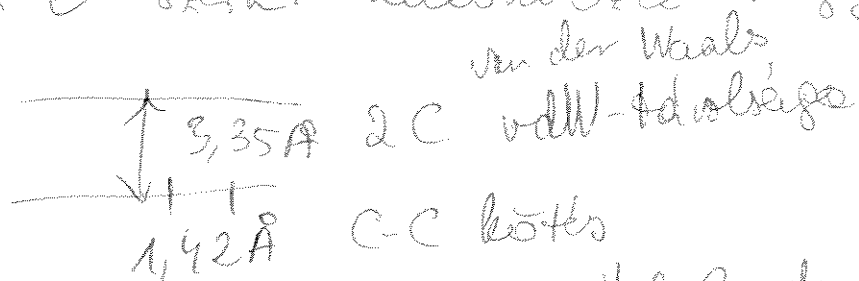


az e^- -szek. különbözöl nagyon!



2 fajta grafít: ABAB, + 2. C-atom alatt van másod

Highly Oriented Pyrolytic Graphite: nagyon tisztá

gémánt: tetraédres kötés 1,54 Å-os kötéstar, 4 szomszéd

hasznos szerkezet, de nem gémdút: lonsdaleit (mekonitban)

tetraédres, de 6-ot víre kád vagy sték

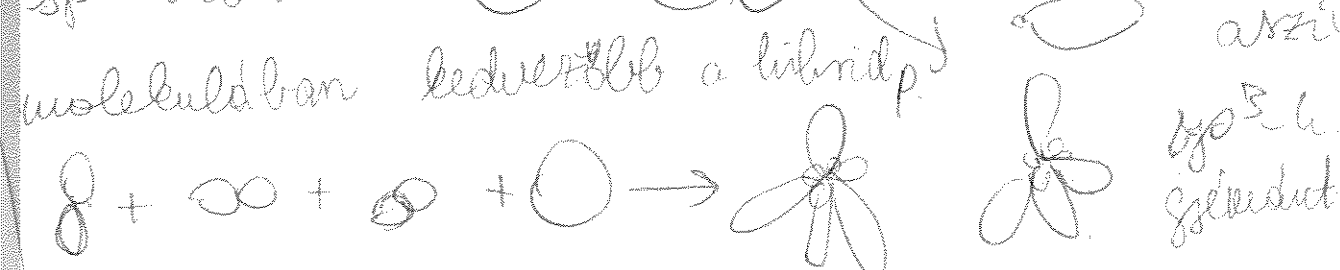
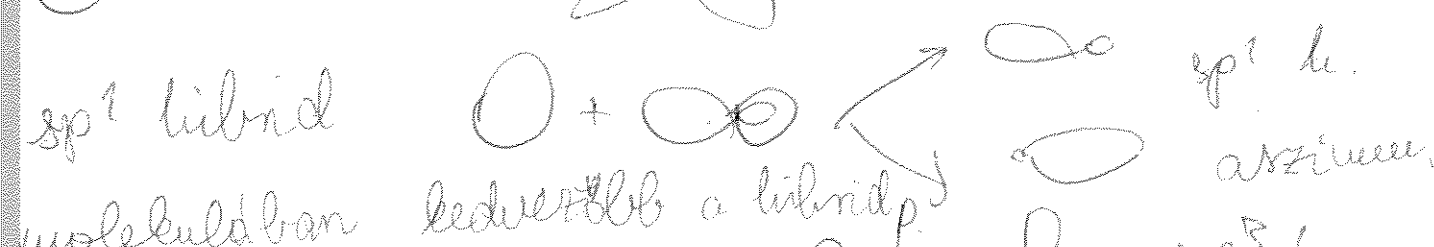
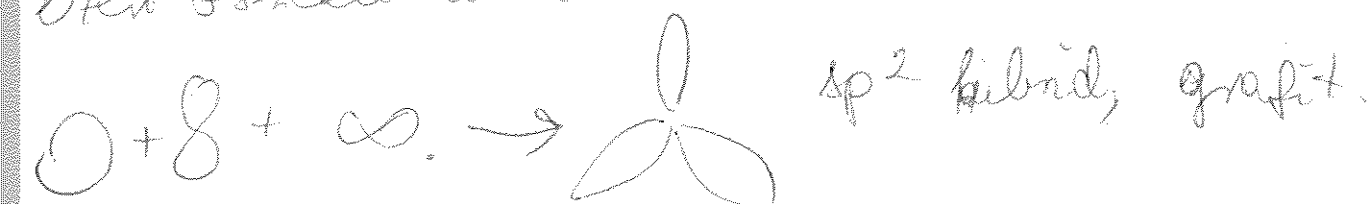
gémántban mineren sték

lonsdaleit: 6 szögelen átlétni 6 szögese irányban



hibridizáció: s és p pályák között kicsi a különbség,

↓
különböző szimmetriájú atomi pályák keveredése
erős szkeverednek



2012.11.17, P

ZEENNANO

KÜRTI JENŐ

→ 3.74

csak itt volt ezen az órán

fulleren, szén nanocsövek, végein kicsi grafén
filéket föl fogja tölteni

mag. eltc. hu/ kurti fulleren és szén nanocsővel
dikt a meten.

C₆₀

ludmisterfullerene: 1985-ben felfedezve, '96-ban
Nobel-díj $d \approx 7 \text{ Å}$ 3 szomszédos szénatomok

fulleren szén nanocső: 1-1,5 nm átmérőjű
keverékben ~ 10 atom, de akár nem hosszú.

1991 Kauli-díj: 2008-ban

↳ Norvég Királyi Akadémia: novgorod: arttali?

novgorod, idegud. : anyai pénz, mint a Nobel

grafén: Novgorod, 2004: szabad szemmel látható.

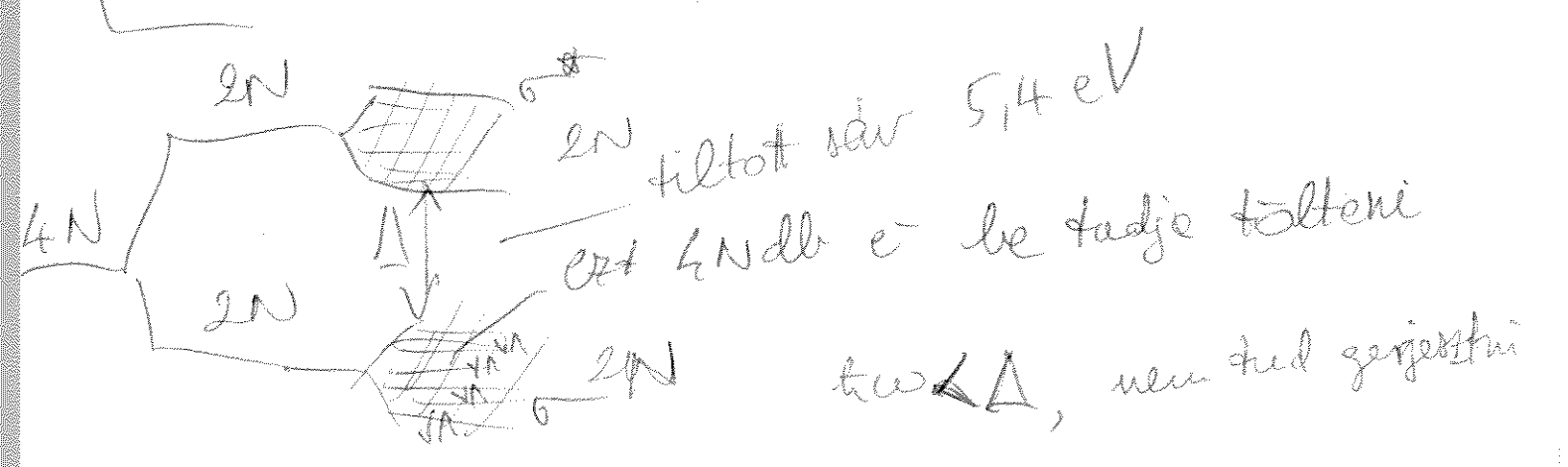
grafénból elvben létrehozható a többi

kipáro: grafén	is gáz	vezető	jó
gr. pulz	felte	szigetelő	elég jó
gr. kemény	átjáró	elektromos	hővezető
media	opt		

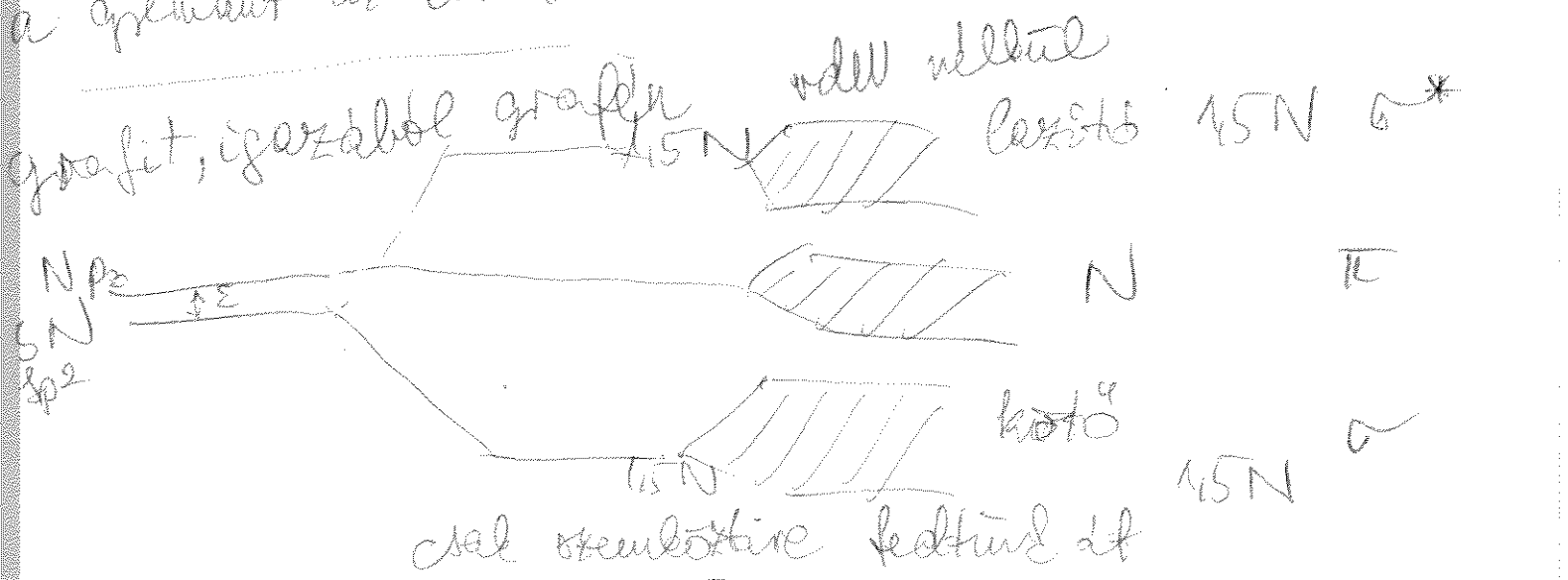
Natúrma 4N elválasztás: sp^3 az a vége szembe kerül
 4N { 2N
 2N
 fed át erőse, a többit egyaránt
 nem.

valószínű: egy molekulapáre több szomszédjával egyaránt
 működik, fed át akkor nem 2, hanem nagyon sok lehet
 a hasad, sőt lehet több!

ezek a molekulapárok
 MOLEKULAPÁROK szilárdtestben
 { 10^{23} db



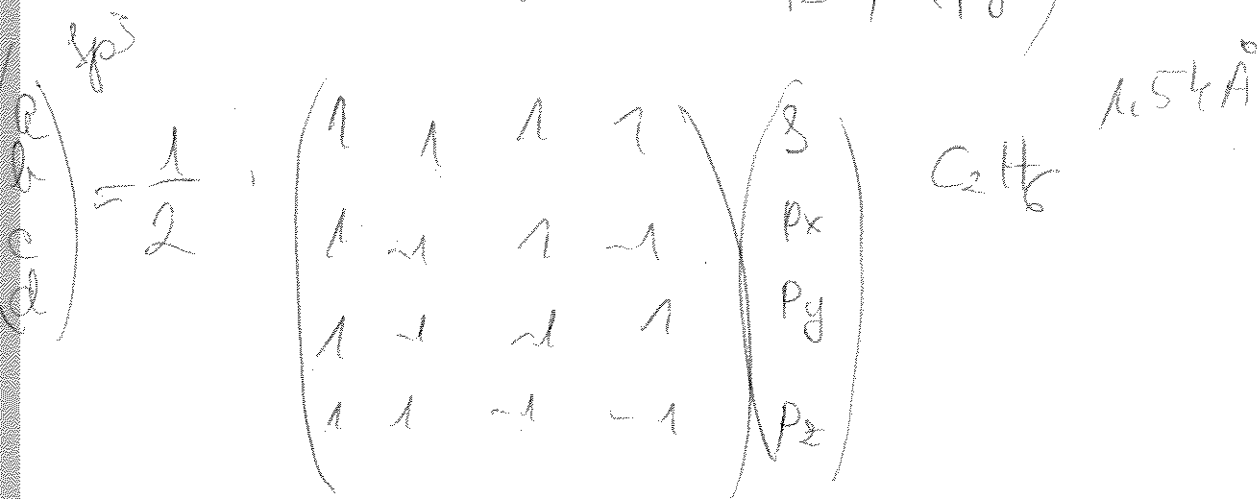
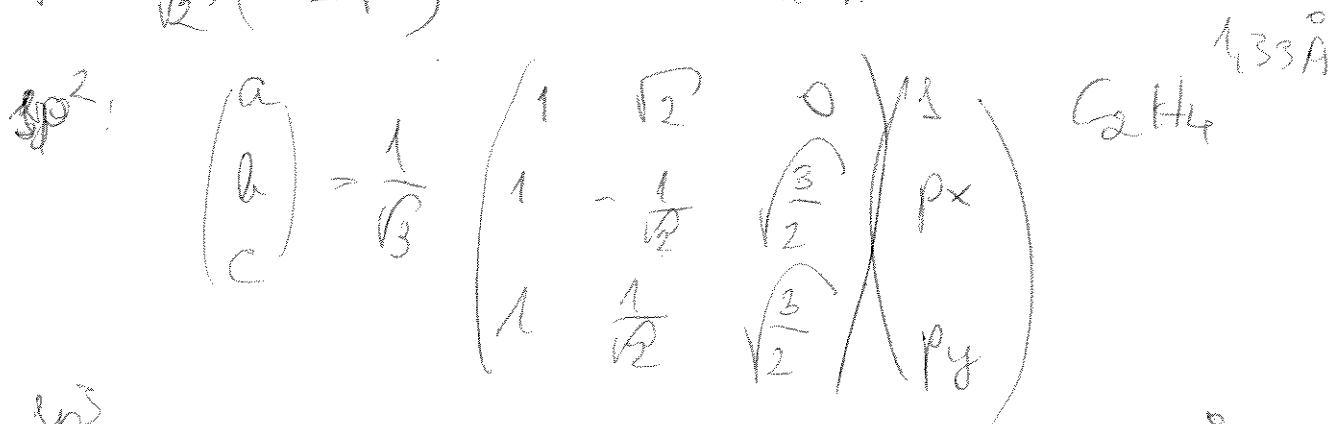
a gránit az UV-t kettő elcsúszni



a látható fény nagyon
 gerjeszti és veret a hő!
 a 3 eV-nál kisebb energiájú fotonok
 3N db, de kettővel: vége a felület
 $\Rightarrow$ veret a grafén!
 { $3N$ db

2012.11.17, P

SZÉNNANO

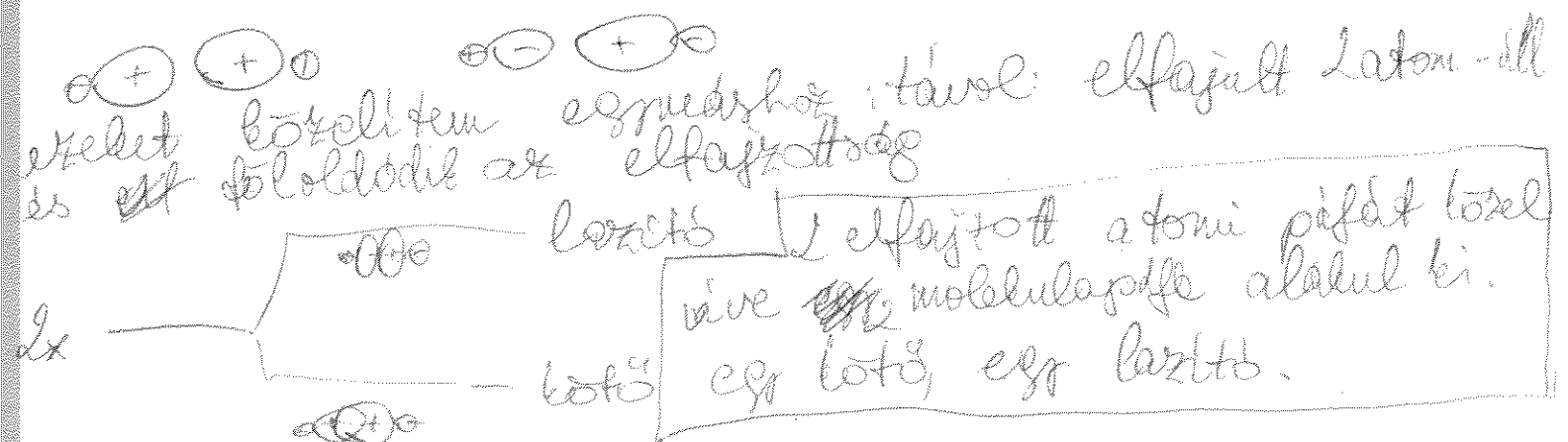


sp^1 : σ -vázat adja

első kötés: egyik σ , másik π : ezt a maradék p_z csinálja

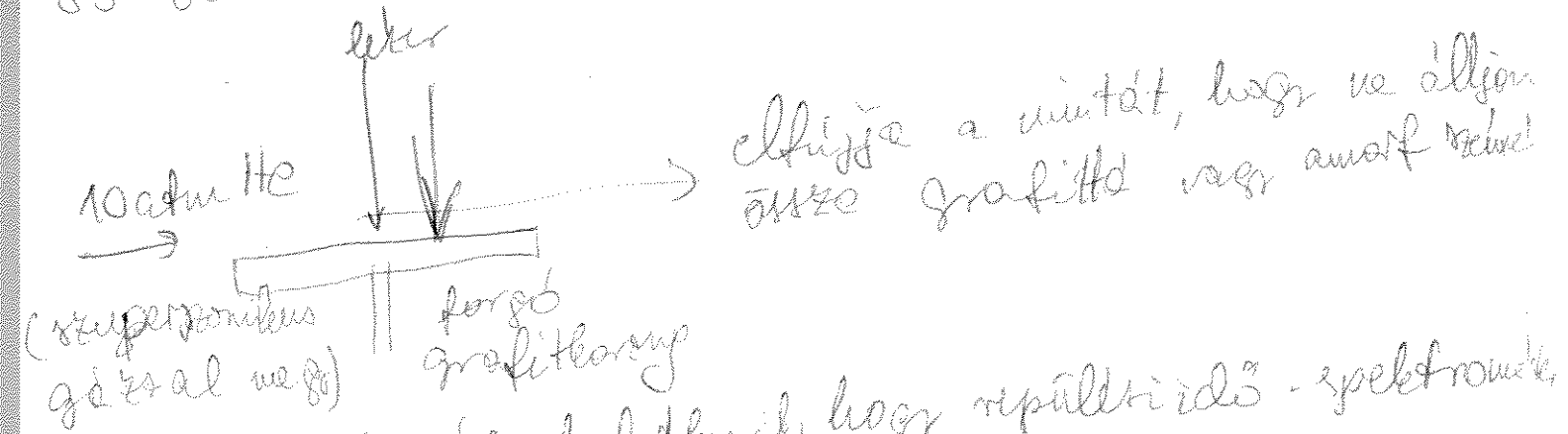
harmas kötés: $1\sigma, 2\pi$

promóció: megköltözik valahová, itt hogy a hibridizációval
alsó nagyobb (mélyebb) kötött ~~az~~ állapotot kapja.



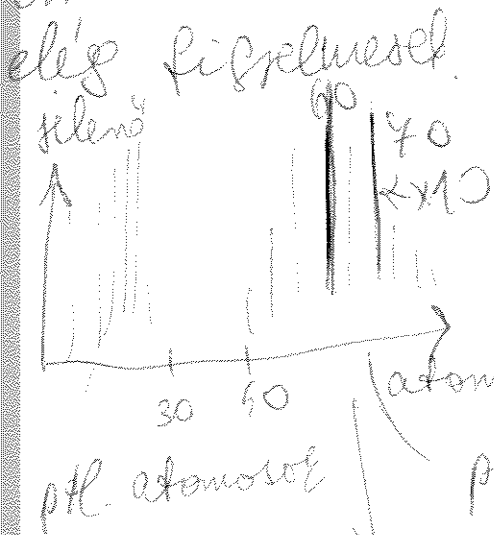
Smalley egy kékrel SiC felületét és elrobbanott nitril
dolgozott. ülégitotta

- nem akart először segíteni, mert nem tartotta komolyan.
- '85-ben adott katonának egy kék. grafitot dolgoztak



- olyan kevés termék keletkezett, hogy rögtönzített spektrumok
el lehet csak vizsgálni

Smalley már eladott egy gépet az Exxonnak Texasban,
ott már '84-ben találtak fullerenet, csak ők nem voltak
eléggé figyelmesek.



alsó tartomány: $\text{C}=\text{C}-\text{C}...$
lánc (20 körül szimul.)
felső az igazán érdekes

ptl. atomos ps. atom.
ez nem tűnt föl nekik

- a He-gáz nyomást ellátgatták és hamar órási
csúcsot kaptak a 720-ra
ezt már felfigyelték!

2012.11.17, P

grafit a stabilabb, mert közelebb vannak a ^{szennano} szennano, azaz a ΔE $\rightarrow$ 16 meV/atommól $\rightarrow$ az a grafít $\rightarrow$ inaffici $\rightarrow$ ezért lehet nagy nyomáson gémeztetést készíteni.

$E - TS = F$, amiatt a hőm segít a grafitnál

$$E_g < E_{gg} \quad S_g > S_{gg}$$

$$E - TS + pV = G$$
$$V_g > V_{gg}$$

ez a gémeztetést segít
nagy nyomáson a gémeztetést, és is lehet

Γ : fullamértékűen 0 y g
a ~~szennano~~ szennano mutatja Γ y g.

toth is ~~szennano~~ szennano a Γ H pontban, hogyultab.

III.2, P 3 hét múlva következő

1985: fullerén ~~szennano~~ szennano, 1996. kémiai Nobel-díj

Curl, Kroto, Smalley

Kroto egy asztrofizikus, lánc alakú molekulákat kutató

$H-C \equiv C-C \equiv N$ test, és effeket találta a világűrben, és

létre akarta hozni.

Curl találkozt vel, és mondta, hogy Smalley, a munkatárs
kémiai molekulákat állított elő és észlelt, hogy
szennano még is, ami Krotonat kell.

C_{60} nagyon stabil, de sokáig csak a tömegét ismerték,
 a szerkezetét csak sejtették
 endohedrális fullerén: belül egy másik atom pl. NaC_{60}
 minden belül kovalens kötés

hogyan juttatják be őket? A brindulási grafittal
 kezdnek bele számolni, akkor kicsi csillaggal lehetetlen
 be a fullerenet ifjúságot magukba.

✓ kalickaszerű molekulánál 12 ötszög van pontosan
 ✓ szimmetriának 3 szomszédja van, alapvetően 6 szög
 de a görbe felülfeleket 5 szög kell.
 - negatívület (negatív görbület): 7 szög

Euler tétele: csúsról és élről

C	L	E	$C+L = E+2$	(kockánál igazolható)
8	6	12		

$n_5 = 5 \text{ szög}$
 $n_6 = 6 \text{ szög}$

$C = (5 \cdot n_5 + 6 \cdot n_6) \frac{1}{3}$
 ✓ minosít 3x vettünk figyelembe
 a 3-as szomszédság miatt.

$$L = n_5 + n_6$$

$$E = (5 \cdot n_5 + 6 \cdot n_6) \frac{1}{2}$$

$$C+L = E+2$$

$$(5n_5 + 6n_6) \frac{1}{3} + n_5 + n_6 = 2 + (5n_5 + 6n_6) \frac{1}{2}$$

$$\frac{16-15}{6} = \frac{1}{6}$$

$$\left(\frac{5}{3} + 1\right) n_5 + 3n_6 = 2 + \frac{5}{2} n_5 + 3n_6$$

$$\frac{8}{3} n_5 = 2 + \frac{5}{2} n_5 \quad \left(\frac{8}{3} - \frac{5}{2}\right) n_5 = 2$$

$$\frac{n_5}{6} = 2$$

$n_5 = 12$

8

- C_{60} : csontolt ikozáéder
- 186: szeptemberben beküldve, novemberben a Nature című lapban
 - Buckminster Fuller: híres amerikai építész: geodetikus kupolákat épített: néhányszögletű kupola.
 - Csupa hatszöget néhányszögletűvé, néhányszög is kell bele
 - egy sugárralátkezelés is van ilyen váza, 6- és 5szög

$$d_{C_{60}} = 7 \text{ Å}$$

a körönben is található fullerén.

APXIMATÍV: ismerete a csontolt ikozáédert.

- ez a forma sok helyütt előfordul

- 20. sz.: 1933: Tizsa faszob: ikozáéderes pontcsoport leírása

- 1966: David Jones: a felfedez és józ közötti minőség típusos molekulákkal töltethető ki (nem csontolt az 5szög)

- 1970: Osawa: 3D-s atomok szerkezetekről gondolkodni kezdtek, Chem. Letters-ben szemléltet - 1 mondat erejéig

- 1971: Barth, Lawton: koronaként leírta

C_{60} fullerén alja



- 1980: Higuchi (a nanoszó felfedezője) e^- - pólissal szívalt gömböskére szerkesztés

- 1981-85: Chapman próbálta a C_{60} -at létrehozni, de nem sikerült

III. 2, P

SZENNANO

tükrözéssel együtt 3532 lehetőség van 60 nemet
3 szomszédal lenni, de így, hogy az ötszög csak
hátszöggel érintkezhetnek, csak 1 vagy van!
- zoldig csak a magas szimmetria elve volt az
én mellett (izotópt pentagon - zoldig: csak 1 lehet!)
2 db 5-ös grüni nagyon kedveseklen egymás mellett
- legkisebb: C_{20} : 12 db ötszög $\frac{5 \cdot 12}{3} = 20$
més az élettartamuk
- csak páros szimmetria: $(12 \cdot 5 + n \cdot 6) \frac{1}{3} = 4 \cdot 5 + n \cdot 2$
- nagy dörög: nagy mennyiségben előállították és már
valóban meg lehetett mérni.

III. 23, P

a Nature -cikkre kaptak Nobel -díjat.
- becsengett volna az érdeklődés, ha nem tudták volna többet
előállítani 5 év múlva Krätchmer: Solid C_{60} : a New Form of Carbon
több meg!
- ritka, 13 kPa -os He -atmoszférában inkubálással csinálták meg
oldották a komot, kikristályosították.
elektrodipozíció (7, ld. Gubicsa)
- kromatográfiával lehet véletlenszerűen
- ma már kaphatók is
- korábban találhatók, de legkorábban is felfedezhetők volna.
- KROTO kapta meg Krätchmer cikket, becsületet volt és publikál
dóra adta.

sz. rezgés, 4 frek.: szimmetrikus molekulák
 tömeg: 720, 721, 722 $\rightarrow$ ^{14}C meg 2 ^{13}C
 csak ^{12}C $\rightarrow$ 1% ^{13}C

- rezési modulusok száma: $180 \text{ szf.} - 3 - 3 = 174$
- szabálytalanság! nagyon sok vonalat adna, összesen 4 vonal
 nagyon szabályos! kinézetben szabályos, degeneráció.
- UV-ben nagyon az elcsúszás
- IR, UV: kiegészítéssel összevág a mérési adatok.
- NMR: C_{60} -ra utaló jel. δ : diamágneses disszolválás
 (kémiai eltolódás): ppm-ben mérik; a mag-Zeeman-effektus
 miatt mérik, az e^- -ok miatt tolódik el (egy kalibráló anyag
 képest mint a ppm-t)
- miért olyan erős ez? kb. 1 db ^{13}C van a C_{60} -ban,
 és csak egy jelet kapunk: ahány különböző kémiai köz-
 vet van egy molekulában, annyi másfajta jelet kapunk.
- C_{70} nem olyan szimmetrikus: 5 jel (5 fajtájú forgási sz.
 a tengelyre körül) 5 helyen lehet a szénatom (^{13}C)
- Mélik jel mélik helyet
 tartózik?
- Sokat lehet fruktóz! Pl. alacsonyabb frekvencián is sugar-
 ozunk, ezzel gerjesztjük a 2 magpín kicsérélődési kkv-t
 (az e^- -felhő közvetíti a kkv-t.) Ez $\sim 10^6 \text{ Hz}$ -ek megfelelő
 $\rightarrow$ ezzel rezgathatjuk a magokat. A szimmetria megvan
 jelenik az meg is ezáltal azonosíthatjuk a vonalakat.

STENNANO

2D spektrumak hívják.

- tökéletes mérés: dúsított CO_2 -al (^{13}C -vel)
- csomós mellé 2 ^{13}C , ezil csomós magnésium lett.
- (száradtban kiállagoldódna a dipól-ek felé, de ez folyós
- N_2 -ben lett méne)
- a maradék a kötestartól függ
- a maradék a CO_2 -ban:

(szabadon kitalálhatom a nyelvet)
 N_2 -ben lett néme)
 - 2 néme marad a jél, a maradék a kötetből függ
 Pake-duplett: ebből is 2db! $\Rightarrow$ 2 kötetből a 60-ban:
 2/6-~~szög~~ között ill. 5/6-~~szög~~ között.
 ... 60 kötet és 60 kötet

2/6-~~szög~~ köztől all. 5/6-~~szög~~ köztől
30 kötés, 12/5-~~szög~~ köztől, mind izolált: 60 kötés of es hatások
határon, 30 pedig hatások közt!! 1:2 arány!
22/1-~~szög~~ köztől

hartan, so pedig...
-rövidbl, magabb has, 6-stögel kötött
kiszab: 5-6
~ 1 szatad augstrom pontosan klet mémi!!!
~ 1/2 szatad kiszab, mint energetikailag nem fan
baderz!

—cristal: lebe, lebe

- egyristás: fekete, fényes
- röntgen: kövös kristály: FCC (fullerit)
- 14 Å a micellando, imm. a kapilláris - szorító felületén
- ⇒ 3 Å van a 2 fulleren között! a két van der Waals-távolság felhátré
- (továbbá 1 - 1,5 Å)
- molekularisztás adW-erő tartál össze (pulva)

kristályban forgóval a molekulák szabáheven.

n^o-dift.: 260K-nél fázisátalakulás: FCC $\rightarrow$ SC
Isőrendű f.-da.

30 K körül forrás:

befagy a forgás: spinning
mert nem kaphatja elő a
közö.

260K < T < 30K: nem forgó atom
gáran, 6 szög - 5 szög legyen
egyszerűsítve szemben 2 mol.

egy szomszédal jó, kötés $\leftrightarrow$ illeszkedés
átugrásokat csinál, forgási
Brown-mozgás: ugrál a kuglák
(ratchet-mozgás)

forrás pontján:
1K-en több csúcs, mint

szabáheven: FCC-ből
mégis vonal hiányzik, ami SC-ben megvan (fázisátalakulás)

kristályban nincs!
forgás: rövid időtartam szétlúgozza a vonalakat.
egyre hidegebb, egyre szelebb vonal.

megkülönböztetés szög alatti forgás $P_2(\cos\theta)$: dipólos tag ki-
átlagolása (Magic Angle Spinning) keskeny vonal.

255K fölött minden elleskesedik!

korrelációs időt lehet számolni (amíg korrelált
2 mol. mozgás?) aktiválás centé kisebb, ha hűtjük
mélánál: $\tau = 3,2$ ps, gáz: $\tau = 3,1$ ps, fofedél: 15,5 ps

szilárdban rövidebb ideig marad korrelált, mint fofedélben!
Kristályban szabádebban forog, mint fofedélben!

utókarás!
fofedélben üthető, kristályban meg nem! jobb a mozgás

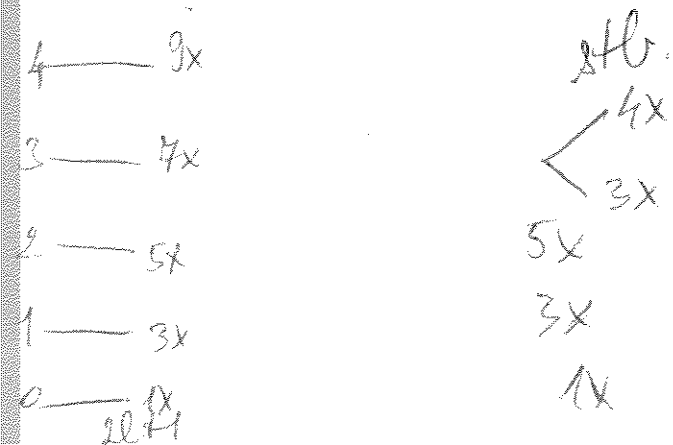
STH: 295K fölött csak a C₆₀-gombok láthatnak, 4,5K-en
pedig (az egyéb atomokat is látni) látnak szélesedni.

e⁻-diff.: gázban
 - szerkezeti állandót lehet mérni (igaz elmozdítva)
 - kötéshosszakat illésztve megkaphatjuk a szerkezetet.
 a különböző a tömör mol-n belüli távolságát
 megkaphatjuk (mivel 2-n hajlott el az e⁻)
 - kiszedés után, megkaptuk a távot. fő kérdés, de nem
 azonos. Más számolás, más eredmény.
 ED 1,401 / 1,458
 NMR 1,40 / 1,45
 XRD 1,355 / 1,467
 } más adat!!!
 különböző módszerek más-más nagyságú meg, más az
 időskala !!!

III. 30, P

a C₆₀ E-szintjei: legegyszerűbb, ha gömbszimmet. potenciált képzelünk el.

e⁻-ok hfor: $R(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi)$
 H-atom: e-ben elfoglalt E-szintek az $\frac{1}{r}$ -es potenciál függvényében
 számunkra miatt (Runge-Lenz-vektor, $Q(1)$)
 a fullerénnek még gömbi köz.-nél is más a pot. je
 közönséges sz. : felhasznál a degeneráció



1hu: Highest Occupied Mo. HOMO
 2lu: Lowest unocc. Mo. LUMO
 (a 2 felső szint), az alsó van
 betöltve. Kül.: 2 eV

sokat egyeztettem a szimmetriával: csopelve
2 szemléltető
6-6 közepe körül 120° : C_3

6-6 közepe körül 180° : C_2

inverzió (pos. tükrözés)
2 szemléltető par

6-6 közepe körül által meghatározott síkra tükrözhető.

120 db szimmetria művelet adódik!

~~120 db~~ 1 axioma szimmetria: csoport

pontcsoport: pont mérése helyben
tércsoport, vonalcsoport: átfelémozgás, eltolás is nagyon fontos.

ívek: I_h , legtöbb elemű pontcs., elől csak az
PCS-ok vannak.

az ábrázolási terület szűkít

E-szerű és rezgésel befeléintéssel szűkít sokat.

konkretizáció: $12C_5$: 2 5-rés körül f. 72° -kal
 $12C_5^2$: 144° -kal

$20C_3$: szemléltető 6-6 körül k. 120° -kal

$15C_2$: 6-6 közepe körül k. 180° -kal

i : inverzió

$12S_6$: $C_5 + i$ (forg. + tükr.)

1/10-et forgatva, ~~maximálisan~~ síkra
tükrözöm (kevesebb menőleges síkra)

$20C_6$: $C_3 + i$

$15C_6$: C_2 + tükrözés

$12S_{10}$: ?

III. 30., P

SZENNANO

reducibilis ábr., inep.

→ spin, bázistétel

→ trivialis, teljes szám: A

→ ha van invariáns: g (páros) v - u (pár) interakció

Ag és Au

1D: A v B

2D: C már foglalt, D is, E

3D: F, 4D: G, 5D: H ...

→ T spektroszkópia miatt

erősen belül $A_1, A_2, \dots$ sorozat

→ ortogonalitási összefüggés: véges sor inep!
sorok ϕ , ψ állapotok: elemek közötti kapcsolat, a konstans

elemzés centralizátorát $(\frac{|G|}{|K_{\text{elem}}|})$

$\chi_{\text{elem}}^2 = |G|$: Burnside-tétel.

→ a szimmetria használata: csak azonos n -jú hálók
között van H-nak mátrixeleme! $\langle \psi | H | \psi \rangle = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases}$
 $\langle \psi | S | \psi \rangle = \langle \psi | S | \psi \rangle$

→ 2 különböző E-jü áll. mátrixeleme 0. ha nem.
a degenerációnál megfelelő blokkokra ezek szét/H.

→ vizsgálhatjuk $|\psi\rangle$ -t az összes ψ operátorral, és
ha mind befelé mutat, akkor a trivialis ábr.

→ ahány ψ -re zárt a számok rendszere, annyi
dimenziós az ábr. → 1 E-szinten belül

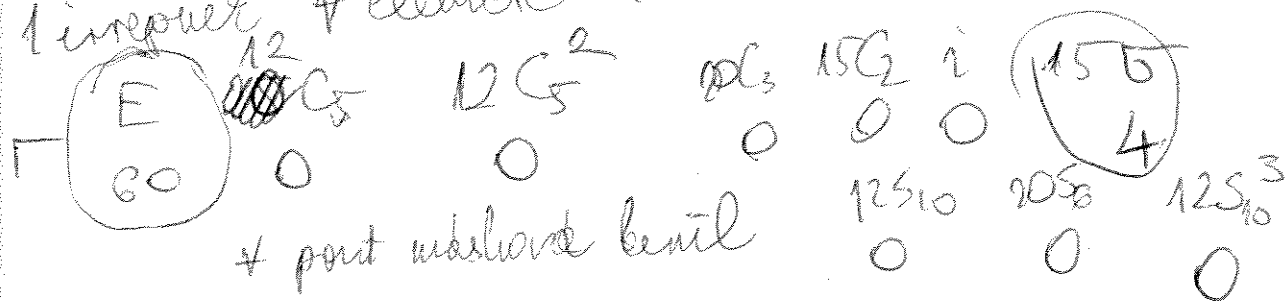
→ a számok elemeket beemutató mátrixot nem lehet
blokkosítani, mert akkor ezek állapotból nem lehetnek el
15

a másikat.

- ∇E -szint a rézium. csoport egyik üregje. Miért?
- emiatt hasadnak föl az gömbi L - és d -elektronok állapotok!
- 1, 3, 5 D : maradhat de a $7D$ -s szubszerkezeten folhasad!!!

- χ és I , U és χ : a delokalizálódó π -pályákat vettől figyelembe. Ez egy $60D$ -s alra, ki kell redukálni a skalar-szorzat
- folírom a karaktereket, és beszorom a különféle ir-
akkal.

vélhetően deg.: 2 üregű azonos E -je: H -atomnál
1 üregű 4 eleműre (kvádré). azonos az E .



$$A_g = \frac{60+60}{120} = 1$$

ha történetesen kapok: vagy osztom redukáltam vagy nem
az a molekula 17 -csoportja

$\Gamma = A_g(+)$...
 H : ezt elviselem + hogyan van-e figyelembe a molekula
megjelenését? ki kell ezt is redukálni.

III. 13. P

SZENNANO

eg-eg degenerált min a csoport 1-1 irreps-ek tartóik

listázom a HOMO-LUMO-ból képezhető diszperziós relációkat (sávokat) is.

- nagyon szimmetrikus pontokhoz kell, pl. $\Gamma: \underline{L} = 0$ pontokon vannak még

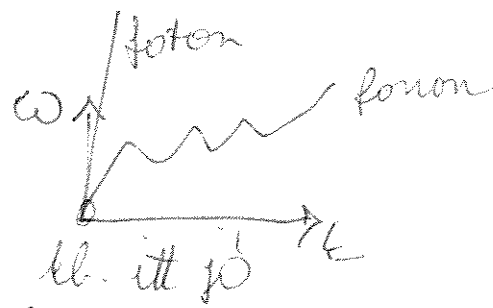
- a sávok ~ 0.5 eV szélesség: nagyon keskenyek!

fémekre ~ 10 eV a szélesség.

- a kkv. adja a kizárólagos: itt nagyon gyenge a kkv., vdw.

- hogyan kapjuk meg a fényelvezést a szűrőkezeléssel? Kiválasztási szabályok: csak azonos hullámhosszú atomok megerősödtek.

- EMT, HT-nel teljesülnie kell.



- e^- λ -ja: nm
fotonok: 400-700 nm: k-je közel kisebb!

relativizáció: görbült a fulleren és nem szel es

sp^2 ~~szel~~ szel
piramidizáció

$$\varphi_p = \varphi_{6\pi} - \frac{\pi}{2} = 90^\circ$$

$$\varphi_p = 19.47^\circ \text{ TETRAEDERNEK!!!}$$

$$\varphi_p = 0^\circ$$

$$C_{60}: \varphi_p = 11.6^\circ$$

$sp^{2.3}$ sp^2 és sp^3 között

mindig atomok között hibrid.
ortonomált a 4 hibrid

$$\chi_s = \frac{1}{\sqrt{4}} \left| \frac{\chi_f}{\chi_s} \right|^2$$

is lehet megkérdezni

a görbületen kívül valószínűleg vannak e^- -ok.

elyeleli szintje: UV, 3 csúcs, egy széles, "föld" sáv

fény nem tud spint átellenként: dipólmoment.

szerkezet: rezgési szintekből. a forgás infrában látható

oldatban és szilárd fázisban eltérővel egymáshoz képest a csúcsok. Kicsi a különbség.

- rövidelt élettartam: szilárdan szélesek a vonalak

- más anyagoknál is lehet ismerni a molekula-spektrumra szilárd esetben.

- más mérés is kellene, hogy meg tudjuk, meddig szintről meddigre gerjednek az e^- -ok.

- HOMO - LUMO nem látható: dipólmom. változik.
inverzió előjelet vált a dip. mom.: $u \rightarrow g$ átmenet
változik a paritás

- mégis, mint látni ott valami. $H \rightarrow L$
- szilárd fázisban, eltér az inverzió, mégis előfordul, de gyöngy

dielektromos formalizmus

homogén közegben: $\epsilon_r > 1$, $\mu_r \approx 1$

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_r}} c_0$$

$$\square_c \underline{E} = 0 \quad \mu = \frac{c_0}{c} = \sqrt{\epsilon_r}$$

$$\omega_0 \quad \omega_0$$

$$k_0 \quad \left| \quad b = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda_0} N \quad \lambda < \lambda_0 \right.$$

$$P(\omega, \underline{\epsilon}) = \epsilon_0 \chi(\omega, \underline{\epsilon}) E(\omega, \underline{k})$$

$$\chi = \chi' + i\chi'' \quad \text{1-et hozzáadok.} \quad \epsilon_r = \epsilon_r' + i\epsilon_r''$$

$$N = n + i\kappa \quad \text{tan. extinkciós eh.} \quad | = 1 \cdot e^{-\alpha x} \quad \alpha = \frac{4\pi}{\lambda} \kappa \quad \text{absz. eh.}$$

függ a vörös és képzetes rész egyenlőség. Kramers-Kronig-
-of.

$$I \sim |E \times H| \sim E_0^2$$

elnyelési koeff. - Beer-tv.

2. részénél

$$R = \frac{(n-1)^2 + \kappa^2}{(n+1)^2 + \kappa^2}$$

itt előbb jön az el-
 ∞ vastag anyag.

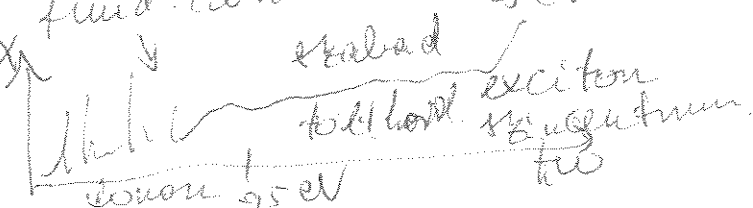
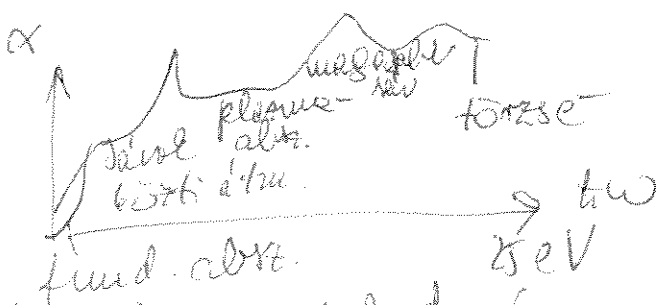
ha $\epsilon_r < 0$, a tisztán képzetes: teljesen visszaverődik!
véges vastagság: átmegeg valamennyi és vissza is verődik.

Érdemes anyagból visszaverést fejt nekünk.

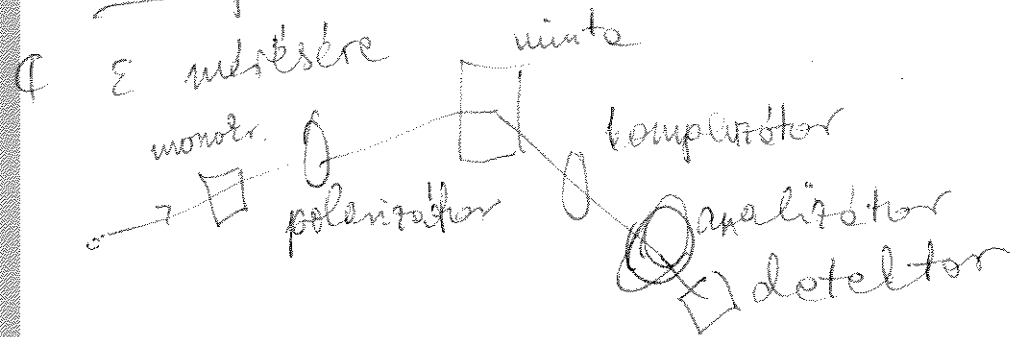
- az elnyelés nem egyenlő az $1-T$, mert nagyon kis

1. Adat, a többi függ tőle a KK miatt.

KK: $-\infty \rightarrow +\infty$, elég csak $0 \rightarrow \infty$ -ig
elválasztó plazmagépj: plazmon. (UV kelt.)
 α -t mérni!!!



Ellipszometria



$$\underline{E}_o' = \underline{T} \underline{E}_o \quad \text{Jones mátrix}$$

T 2 fő irányra a pol. II. vagy
 $\perp$ a beesési síkra.
 irányrendszernél.

2 spektrumot vizsgálunk, azaz két

$$r_s = \frac{R_{11}}{R_{12}} = R_{11}/e^{i\phi}$$

és van egy képlet $\epsilon - n$ r_s felhívás
 és ϕ

K mérhető, belőle ϵ is.

III. sz. P

június első felében kell vizsgáznunk VI. 14. előtt.

EELS: E^- - Energy loss Spectroscopy

100 nm vastag mintán

míg át az e^- - yaláb

- oldalirányú elterjedést is lehet mérni

E felében az elterjedést méri, mennyire térül el az e^-

- BE - van ferde gerjesztéseket is lehet mérni

- kicsi q : optikai gerjesztéssel hasonló

- nagyon kicsit másként el a spektrumok egymáshoz képest

- fotoe- - spek. (röntgen XPS
 UV UPS)

- szemmel törzse ~ 285 eV körüli E -jű, az $1,5$ eV-es foton

símaán kilöki

- más értéke az a kilökött (törzse) e^- kb. a fölönnél, $E +$

veszt. Az első az a legalsó $\sim 1,9$ eV az nagyon.

- az nem látható az fényesítés sp.-on, mert az a kivételként

☺

11.20., P

SZENNANO

vezérlési spektrumot

60 atom, $3 \cdot 60 = 180$ szab. fok - 6: eltola's forgas

csak 4 módus infravertu!!!

a rezgéseket is úgy kell vizsgálni, mint a redukálást végrehajtani

180 D-s ábrázolás: redukálható

E	12C ₅	12C ₅ ²	20C ₃	15C ₂	i	12C ₁₀	12C ₅	60
180	0	0	0	0	0	0	0	4

tutórság

minden: $(180 + 4 \cdot 15) \frac{1}{120} = \frac{240}{120} = 2$

elvon. eltolas és forgas benne van.
a kar. + k. b. l. b. a transz. rot. (etel közzül
T_{1u} T_{1g} 1-et kell eldobni
mert 3D ábr.)

10 Raman-ekes, 4 infra
vektoroként transz. mint eltolas, T_{1u} infrában az Raman

- Raman: polarizálhatóság változik.
spis: Ag (tenszor spinge)
módus: örvénylő Hg

2 Ag módus: lélegző (breathing) mozgású
- püch: érintő irányú, az ötszöget lehet
ez a lélegző

- egyenként, gráfit: egy erős Raman-ekes 1300 il
- fullitok = 2 között 1500-
nál

- karbon (carbyne) $C \equiv C - C \equiv C - C \equiv - C \equiv$ alternáló
 $C = C = C = C =$ kumulált 2-s
sín ucsó b. j. b. elérhető, nagyon nehéz

10 K -en jól látszik az oldat, mint pl. szilárd, de
 - fázisok, kristályos, lecsúszó szim, más szemek
 kell kideríteni, több vonal.

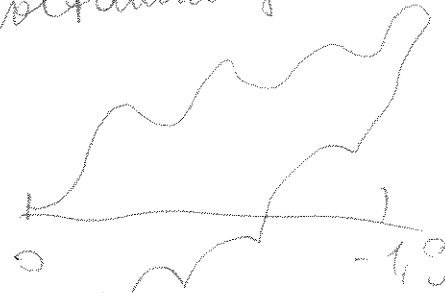
- infra: a pinch módszer is bevezetve.
 - ha nagyon kicsi, a Raman is infra. Nem látszik
 egyáltalán.

csendes módok csúcsban sem látszanak.

- felületi hatás: kicsit eltérő a szim, más li-
 - mintási szabályok.

- spaltm. intenzitás: magasabb rendű fázisok: 2 ~~szim~~ szim.
 anharmonikus jellegű: 2 fázis összege, különbsége
 tenzorok: 380 kombináció marad - csendes módok

- ciklikus voltamogram



CoO: inkább fém-szerű
 nagy ionizációs lépés

∞ lassan mennek: minden részterület.
 - ha ezt befogadjuk a csúcsoknál, ESR-t ~~szim~~ szim.

- 2 e-: 1-es eredő spinel állás.

- 6 csúcs a voltamogram ábráján: 6 e- os ionizációs
 (még) Tm alul 3D-s, 3x2 e)

II. 20. P

SZENNANO

ápolás: félvezetőiparból a mi
a C_{60} kristályban van hely a fémbebe közt.
grafitréteget közt: interkalálás
vezetést viszunk be

oktáéderes, tetraéderes helyek.

1 elemi cellába 4 fullerén fér
okt: $12 \cdot \frac{1}{4} + 3 + 1 = 4$ 1:1 arány

tetra: $2:1:8$ db
(alkáli) fullerén elvben 3x annyi alkáli, mint fullerén

A_3C_{60} : fcc, A_4C_{60} : bct, A_6C_{60} bcc

body centered
~~hexagonal~~ (?)
tetragonal
bct, tetragonal.

változik a kristál-
szerkezet.

megfelel a LUMO-szín is!

→ fényessé válik a rendszer A_3 -nál a lépezésként, csökken
a fényesség, utána megint növekszik A_6 -ra

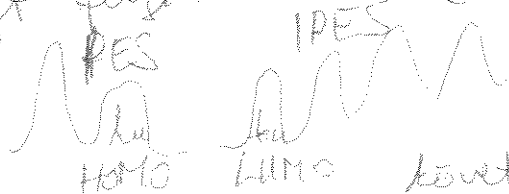
III. 27. P EELS kicsi E (< 10 eV)

homo-nak megfelelő csúcs eltűnik, L új felül meg
nagy E-s EELS: eltűnik a spektrum a szimmetriával együtt
is egy nagy csúcs eltűnik.

- fotoe-spek.: alsó sávokat (homo alatt) nélkülül.

- inverz fotoe-spek.: belőlről egy e^- -t és egy befogadtil

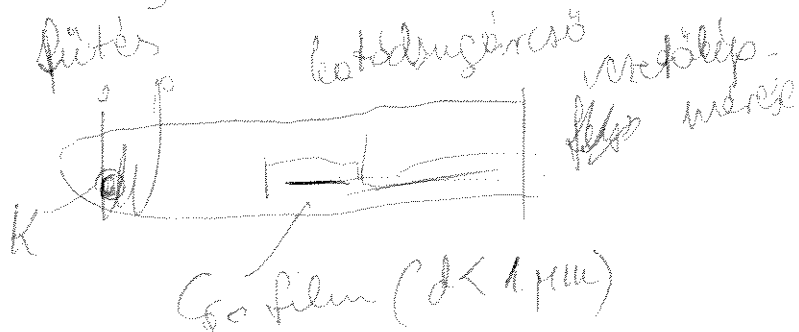
és kibocsátást fejt: eredetileg üres sávokat mérhetünk.
2 csúcs különbsége (H-L) NEM
ADJA MEG a gapot, mert van a Fermi-E



következő az E-sávok változása. 25

semleges $\rightarrow +$ PES e^- $\rightarrow$ $\rightarrow -$ PES e^- } Eltölje a Fermi-szintet

- szennyezés folyamata



mivel a vezetőképességet

$$20 \text{ k}\Omega \rightarrow 50 \Omega$$

eltűnik az $1467 \frac{1}{\text{cm}}$ -es csúcs

1467: megjelenik, majd eltűnik
1429: nemra nő a csúcs

- K-mal szennyezve valószínűleg el, mert 3 csúcs látszik.
(párul a minta a szennyezőstől)



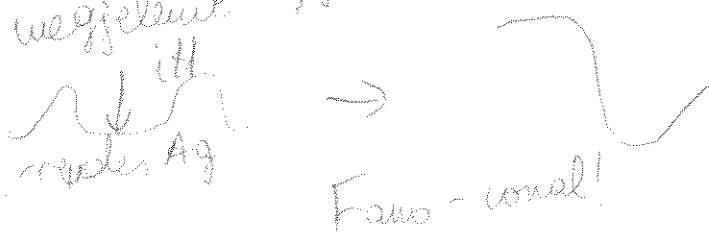
minden

eltöltődés: $67 \frac{1}{\text{cm}}/e^-$

- ez a 3 fázis az infravörös spektrumban is megfigyelhető
- az elyjelése megmúl K_3 -ra, megint erősebb K_6 -nál.

- magas hőmérsékleten K_1Co is megjelenik

- megjelenik egy új csúcs; Az a felületi hatások miatt,
diszkrét gerjesztési E egy fázis
mivel ez is csatlakozik a 2.
- a fázisok stb. első gerjesztési
aktiválva a diszkrét is.
- az 3. mintánál K_3Co -nál jelenik meg



Fano-vonal!

III. 27, P

SZENNANO

csatolás: Ag (pinch)

$$\langle e\text{-}all. / Q / e\text{-}all. \rangle \quad t_{au} \otimes t_{ue} = A_g \oplus T_{1g} \oplus H_g$$

normál modulus
matrix

Szokás az az. - jü állapotok között nem nulla! (ld. Cordé)

Q: Ag sz. - jü, a direkt szorzatban is kell ifem. Es van!

Mint pl. a szupravezetés érdekében.

a Co a fémek vezető!

K₃ Na₃ stb. kell hozzá, de pl. K₂ Rb is jó

T_C: kb. minél nagyobb az alkáli, annál magasabb a T_C
elég magas ez a T_C!!!

BCS, Cooper - párok: bozon-szerűek, ezt kondenzálódnak.
fononok csatolás - 24 K fölött túl nagy rezgések kellene

és bozonikus ionok tudnak-e kondenzálódni?

- a fulleren valóban BCS!
- a halmazmázas BCS akusztikus fononokra vonatkozik,
itt optikai fononokkal csatolódnak.

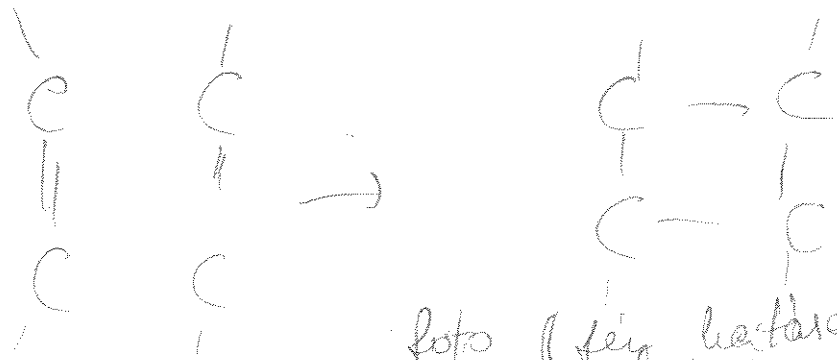
$$kT_C = 1.17 \hbar \omega_D e^{-\frac{1}{N(E_F) V}}$$

e⁻-sűr. a Fermi-szinten
e⁻-f. - csat. áll.

Debaj-frek. nagy, mert optikai fononok rezonanciával.
N(E_F) meg ~~nagy~~ nem jó, ha T_C + ez a tényező.
N(E_F) meg ~~nagy~~ kicsi, kis a sűr, kicsi g(ε_F)!!!

- nagyobb alkáli: növeli a rácsállandót, még kisebb a C_{60} -ok csatlakozása, még kisebb a ráv: Nét) még nagyobb.

- Mivel van 1 szabvány a C_{60} -on, kovalens kötés alakulhat ki 2 molekula között.



Itt 2 csatlakozás

polimerizáció
 - foto (fény hatására)
 - nagy nyomás
 - ionos

kötés: Woodward-Hoffmann-szabályok

2 HOMO nem polimerizálódik

2 LUMO már igen! - fotó kell gerjesztani az e^- -okat.

- lényeg: E^- kell befektetni, folgerjednek az e^- -ok, LUMO $\rightarrow$ kötés

- entalpiát kell figyelni, potenciálgáton kell átnemni.

- spektrumon is látható, hogy eltűnt néhány mikros

- visszafordítható: meleg hatására bomlik a polimer
 nem folytatjuk

V.4, P

D_{2h} a kettős kötés legalacsonyabb energija

de ha $\neq C_{60}$ -ról húzzuk ki 1 kötés: 1 db kötés a legkisebb. Meglepő, hogy egy kötés is stabilizálja

V-4, P

polimer: $1D \rightarrow 2D$ kém. semleges, széthasadnak az F_{1u} módusok

dimer: eltűnik az interjúk kém. + módus infra-aktívok válik.

polimer: 1D elég stabil pl $Na_2 Pb Co$, 1 kötés

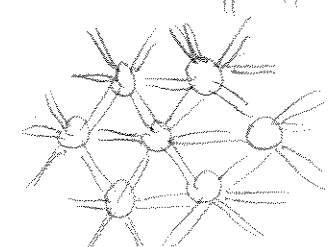
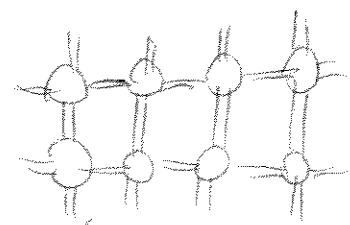
$Na_4 Co$: 2D polimer, 1 kötés
ki is számozták!!!

fotopol: 2+2 akción.

ionos pol: ez az 1D, 2D, 1 kötés!

vagy nyomás: 3 félép: ortorombos (2+2) $\text{O}=\text{O}=\text{O}=\text{O}$ 1D
tetragonális: 2 irányban kettős kötés!!!

2D: {
monoklin



- a fullerenek nagyon bonyolult a fázisdiagramja, pl.
lehet belső grénként is.

- hát még allodical dimerok!

- ultrakemény anyagok nanos. (fullerenek)
országok mikor a keménységet a kompresszibilitás felel meg
teljesen logikus összefüggés (ax+b af)

- szűrités: nyomás alatti kém., 3D polimereket előállít
ki a gép $\rightarrow$ nem szilárdított megismételt az ország eredményét

C₆₀-kubán C₈H₈: kubán



a kubán pont befér a C₆₀-al közre: C₈H₈ homotí, C₆₀ dombock

- rotor - sztatikus - rendszer: világra és felfelé lökötti szed.
- még keskenyebb bázis a BE-ban: de még így is maradt hely alkáliaknak! 3 alkáli: szupravezető, magas hőmérséklet.
- LiBi: nem tud bediffundálni az alkáli.
- 3 nem fér be: Ca, Ba is jó, az 2 töltést ad át.
- most még nem tudják megoldani.

Nanocsővek

vége vagy le van kerekítve, vagy nyitott
hossz: 1-100 μ m, átmérő: 1-15 nm
már már a grafén fűtött föl.

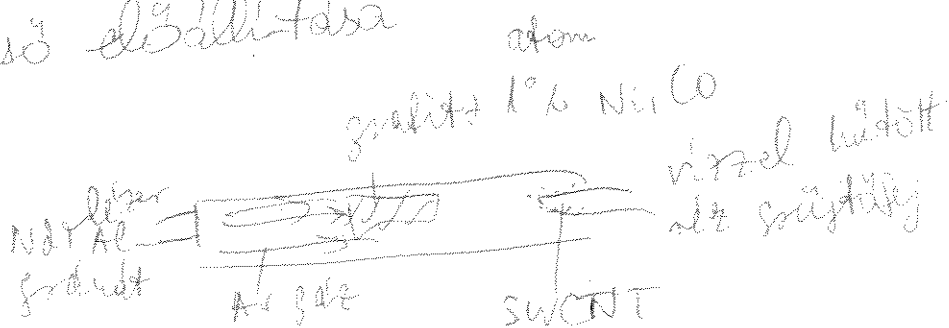
- előállítás: grafitból, ívű: a grafitból végéről
szedte le, nem a ~~le~~ kemény feléről, mint a
fulleren

- több fajú nanocsövet talált. Ijima

- damascuszi acél: szén nanocsövet tartalmaz!

- '93: csőfalú nanocső előállítása

- SWNT előállítás:



a szemcsés kőzet, és 2 kőzet használtak.

V. 4., P

SZÉNNANO

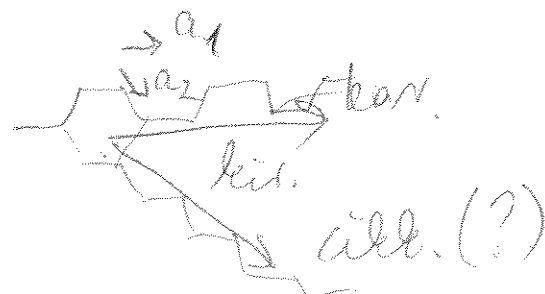
összetapadtak a művel töteggé
~ 1,4 nm-es ~~cs~~ átlag, a lumineszcencia μm^{-1} mérés (gauss)
- lézeres abláció $\nearrow$

- CVD, Chemical Vapor Deposition a leggyakoribb
gáz alulról nő a cső



katalizátor
- a katalizátort megfelelő módon keretül párolóztatjuk
a felzárk.

- karosszék, átkell, kiralis cső



- határozatlan síkban melyik pontját megfigyelhetünk
fedésbe.

- átkell: egyet jelölő D.

- főtelenít wrapping, kiralitási / chirality vektor

- $u = u$: karosszék

- 0-30° között: kiralitási szög

- transzlokációs vektor: mikor ismétli önmagát
(a cső mentén az elemi cella hossza)

V. 18., P

Szén nanocsőek jellezése

$n-m = 3q$ fémes
 $n-m \neq 3q$ félvezető

a nanocső fémes
 $\neq 3$ ciklikus fémes
 körhálójánál melytől megmondani, hogy befektet-e el a ^{fémes}

$n = m$ nanocső
 $n \neq m = 0$ ciklikus
Elektronos tulajdonságok

Miért az ok?

Nagyon egyszerű jó közelítés, ha feltételezzük grafénnal felépítve
 elhanyagolva a görbületet.

A grafén elemi cellája 2 szénatomot tartalmaz, a nanocső
 jóval nagyobb. Amint a BZ-jé jóval kisebb mint a
 graféné. 1. kör. -ben behajtogatom a grafén diszp. rel-
 ját a nanocső BZ-jébe. Ebből kijön a $3\pi(n-m)$ -es sz.

Grafén a 6 szög 6 csúcson találkozik a vezetési és a
 vezetési (Dirac-körp.). 6 pont a Fermi-felület!

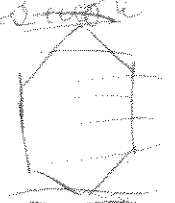
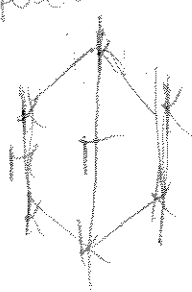
Felfűz: mindegyikre, de a Fermi-felületen 0 az áll. sz.
 (a 6 pont miatt)

Szén kötésű közelítés
 ezzel papíron lehet számolni

$$E(k) = \gamma_0 \sqrt{3 + 2\cos(k_x) + 2\cos(k_y) + 2\cos(k_z)}$$

H-nál átlós körüli nire
 2.5-3.0 eV
 ezt szét kell ábrázolni.

Feltételezés: valódi periodikus határfeltétel a d.
 $2\pi k_n R = 2\pi n \quad k_n R = n \quad k_n = \frac{n}{R}$ a megengedett hullám-



fémes

félvezető

Ha egy metrikus átvég. a K ponton
 akkor fűz, mert a BZ-ben 1/3 hullám
 marad a Dirac-körp. körülbelül fél-
 vezet.

V. 18. P

NANOCSD
SZENWANO

Mert a BZ-ban csak a metakrónalok vannak benne. & jól,
de diszkrét vonal.

Körösszélre jó az fény.
3-mal való polarizáció

$\underline{k} \cdot \underline{C} = (\underline{k}_1 + \underline{k}_2) \cdot \underline{C} = \underline{k}_1(u_1 \underline{a}_1 + u_2 \underline{a}_2) = 2\pi q$ q egész

feltételén vektor

$\underline{k}$ reciprok házisektor, $\underline{k}_2 \underline{a}_2 = 2\pi \delta_{k2}$

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

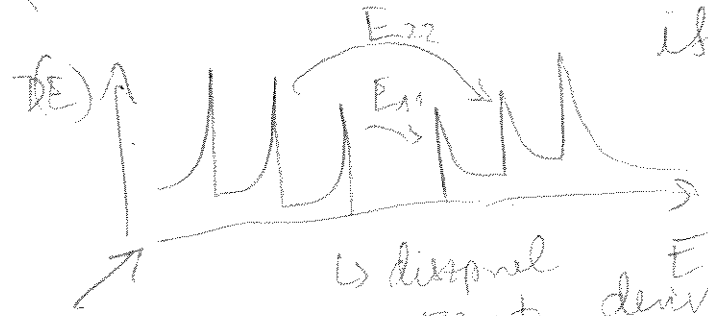


és $\underline{k}_K \underline{C} = \frac{1}{3}(\underline{k}_1 - \underline{k}_2)(u_1 \underline{a}_1 + u_2 \underline{a}_2) = \underline{k}_1$
 $= \frac{1}{3}(u_1 - u_2) 2\pi$ #2 k-re igaz a feltétel.

ez legyen elég!!!

1D: állapotelmélet

Van mindig ugrás itte.
van Hove-singularitás



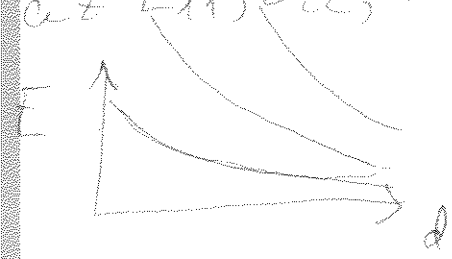
ilyen fotonokat
szel el.
mivel a spektrum
ban.

is diszkrét
& nem a deriváltja 0.

csak szim. jeleztes: imp. mom.
megmaradása miatt van.

egyet tud változni, ha cirkulárisan polarizált fényt használunk.

Kötés-átvitel: a az átmenéskor felelő ábrázolt
az E_{11}, E_{22} , stb. energiákat



M_{11}, S_{11}, S_{22}
fines kiterjedés átmenet
1/d-s görbe illészkedést ezal

nem teljesen 1/d alatt nagy felület

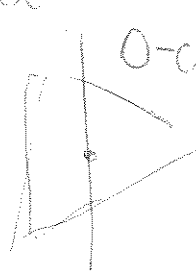


Dirac-kúpok keresztmetszete
nem kör $\neq$ magasságban
trigonal warping

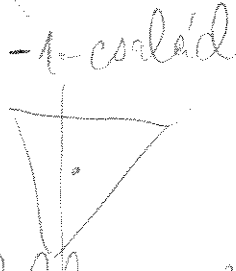


Δ -es torzulás

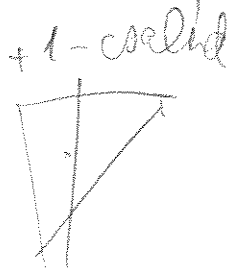
3 féle csatlód



0-csatlód



-1-csatlód



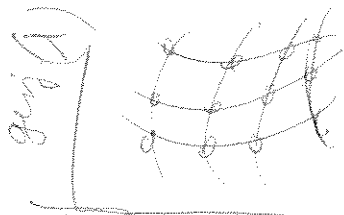
+1-csatlód

kétféle legközelebbi vonal.

kísérleti Katauro-plot egyrétül álló

- megvárta az egész (micellákba csomagolt) nanocsövet.
több gázszűrő fele mellett emissziós spektrumot kell mérni.
(fluoreszcencia)

- nagy intenzitás. Le lehetett az E_{12} gerjesztő $E-1$,
de E_{11} -et becsapott ki.



U. ifjú ábrát
kapunk.

azonosították vele a nanocsövet. (1)

- szűk gradients ultracentrifugáz, 270000g

lefelőlre rendezésre, többször is megcsinálják.

- 1 nm-nél kisebb átmérő esetén lehet öket meghatározni
vastagabból már túl sok van.
- nagy görtületűek elmondják a kóros-kötésű modell, DFT model

