

10. Horváth G., Malik P., Kriska G., Wildermuth H.: Ecological traps for dragonflies in a cemetery: the attraction of *Sympetrum* species (Odonata: Libellulidae) by horizontally polarizing black gravestones. *Freshwater Biology* 52 (2007) 1700–1709.
11. Horváth G., Kriska G.: Polarization vision in aquatic insects and ecological traps for polarotactic insects. In: J. Lancaster R. A. Briners (szerk.) *Aquatic Insects: Challenges to Populations*. UK: CAB International Publishing, Wallingford, Oxon, (2008) 204–229.
12. Kriska G., Malik P., Szivák I., Horváth G.: Glass buildings on river banks as “polarized light traps” for mass-swarming polarotactic caddis flies. *Naturwissenschaften* 95 (2008) 461–467.
13. Malik P., Hegedüs R., Kriska G., Horváth G.: Imaging polarimetry of glass buildings: Why do vertical glass surfaces attract polarotactic insects. *Applied Optics* 47 (2008) 4361–4374.
14. Schwind R.: Sehen unter und über Wasser, Sehen von Wasser. *Naturwissenschaften* 72 (1985) 343–352.
15. Schwind R.: Polarization vision in water insects and insects living on a moist substrate. *Journal of Comparative Physiology A* 169 (1991) 531–540.
16. Schwind R.: Spectral regions in which aquatic insects see reflected polarized light. *Journal of Comparative Physiology A* 177 (1995) 439–448.

## SZÉN NANOSZERKEZETEK ELMÉLETI VIZSGÁLATA

Rusznyák Ádám, Koltai János, Zólyomi Viktor, Kürti Jenő

ELTE Fizikai Intézet, Biológiai Fizika Tanszék

A nanoszerkezetek vizsgálata napjaink elméleti és kísérleti kutatásainak élvonalába tartozik. A nanométeres objektumok makroszkopikusan is mérhető tulajdonságainak magyarázata már csak a kvantummechanika fegyvertárával lehetséges. A nanotechnológia alkalmazási lehetőségeit kutatva ebben a mérettartományban keresik – egyebek között – az orvosi műszerek új generációját vagy a korlátait súroló félvezető alapú mikroelektronika lehetséges alternatíváit. Éppen ezért minden elméleti munka döntő fontosságú lehet, amely a költséges kísérleteknek irányt mutat, értelmezi, vagy éppen egyszerűsíti azokat.

A nanométeres mérettartományba esnek a tisztán szénatomokból álló kalitkaszzerű alakzatok is, melyek tipikusan öt-, illetve hatszögekből épülnek fel. Ilyenek például a fullerének és a szén nanocsövek.

A szerzők egyikének a *Fizikai Szemle* hasábjain korábban napvilágot látott népszerűsítő írásaival szemben, amelyek a fullerének és szén nanocsövek alapvető tulajdonságait és felhasználási területeit mutatták be [1, 2], ezen cikkünkben elméleti eredményeket tárgyalunk. Illusztráljuk a számítások technikai nehézségeit, a szén nanocsövek esetére bemutatjuk, hogyan lehet a molekulák szimmetriatulajdonságait messzemenően kihasználva drasztikusan csökkenteni a numerikus számolások gépidejét, ugyanakkor meg-

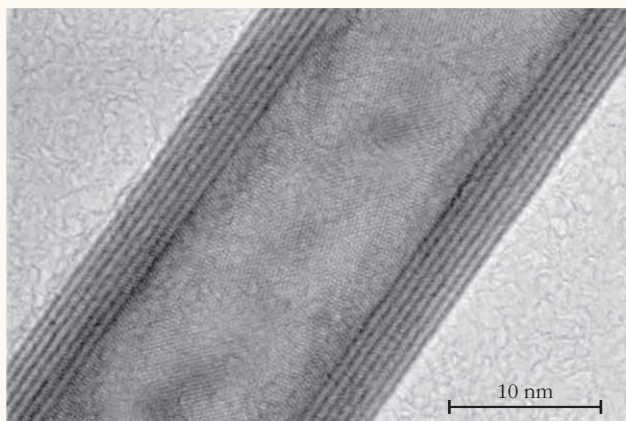
tartva a fizikai pontosságot, és hogyan lehet a kísérleti munkában jól felhasználható adathalmazt készíteni. Továbbá bemutatjuk a  $C_{60}C_8H_8$  fullerén–kubán molekulakristály modelljét, és ennek keretében rámutatunk, hogy egy jó modell jóslatai miként mozgíthatják elő a kísérleti kutatást.

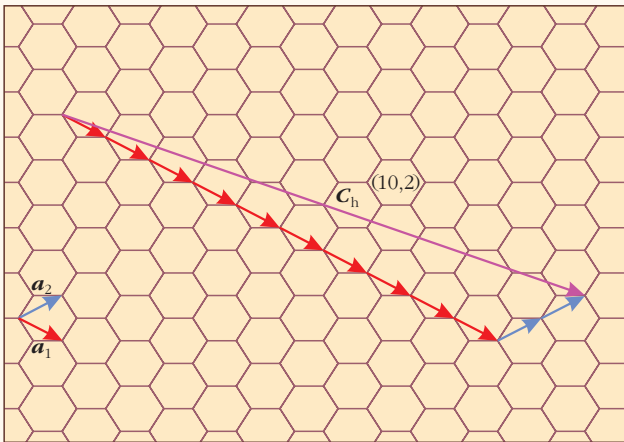
### A szén nanocsövekről általában

A kalitkaszzerű szénszerkezetek közül talán a szén nanocsöveket övezi a legnagyobb figyelem. Számos kedvező, illetve különleges tulajdonságuk miatt mind a technikai felhasználás területén, mind pedig elméleti szempontból is igen érdekes molekulák. Elnevezésük onnan ered, hogy olyan hengerek, melyek palástja hatszöges szénatomrácsból épül fel, és e hengerek átmérője a nanométeres nagyságrendbe esik. Léteznek egyfalú, illetve több koaxiális hengerből álló többfalú nanocsövek is (1. ábra). Az egyfalú nanocsövek hossza több mikrométert is elérhet, sőt a gyorsan fejlődő előállítási módszereknek köszönhetően már pár centiméteres hosszúságú darabokat is készíthettek. A hengerek végei lehetnek nyitottak, illetve zártak, ez utóbbi esetben a lezáró „sapkák” már ötszögeket is tartalmaznak. Maga a kiterített palást a grafit egy hatszöges síkjának, azaz a grafénnek egy darabját képezi. Emiatt a szén nanocsövek egyes fizikai tulajdonságai első közelítésben a grafén viszonylag egyszerűen meghatározható tulajdonságaiból származtathatók. A részletes elemzés helyett itt csak néhány, a szimmetriatulajdonságok szempontjából fontos dolgot említünk meg. (Megjegyezzük, hogy legújabban – amióta kísérletileg hozzáférhetővé vált – a grafén is intenzív kutatások tárgya lett.)

A szén nanocsövek palástja egyértelműen jellemezhető úgy, mintha a grafénsík egy véges szélességű darabkájából keletkezett volna, megfelelő felcsavarással. Ez a felcsavarás igen sokféleképpen lehetséges annak függvényében, hogy a grafénsíkot alkotó atomok közül mely párok kerülnek fedésbe. A fedésbe kerülő atomokat összekötő *kiralitási vektort* szemlél-

1. ábra. Dupla falú szén nanocsövek HRTEM-felvétele





2. ábra. A hatszöges grafénsík egy darabja, amelyen  $\mathbf{a}_1$  és  $\mathbf{a}_2$  az elemi rácsvektorok. A  $\mathbf{C}_h$  vektor a (10,2) számpárral jellemzett szén nanocső kiralitási vektora, amely a felcsavarás után kialakuló henger palástján fedésbe kerülő két atomot köt össze.

teti a 2. ábra. Minden szén nanocső egyértelműen jellemezhető e vektorral. Ez a vektor pedig felírható a grafénsík két elemi rácsvektorának lineáris kombinációjaként. A lineárkombinációk együtthatók egészek, és természetesen egyértelműen jellemzik a kiralitási vektort, s ezzel a szén nanocső típusát is. Az  $(n_1, n_2)$  együtthatópárt kiralitási indexeknek nevezzük.

A grafénsík eltolási szimmetriája (a 2. ábra  $\mathbf{a}_1$ , illetve  $\mathbf{a}_2$  elemi rácsvektorai mentén) öröklődik a föltekert molekulán. A grafén elemi eltolásvektoraiból két vektor képezhető: az egyik a föltekert cső hossz tengelyének irányába mutat, a másik erre merőleges. A cső tengelyének irányába mutató vektor kijelöli a henger eltolási szimmetriáját, vagyis található a hengernek egy olyan gyűrűje, amire ezt a vektort alkalmazva önmagára képezzük le a csövet. A hossz tengelyre merőleges irányba mutató vektor pedig, a nanocsőre nézve egy forgatást határoz meg. Az eltolási szimmetria elemi cellájában lévő atomok száma, valamint a képzett henger más geometriai paraméterei mind egyszerűen kifejezhetők az  $(n_1, n_2)$  számpár segítségével – amennyiben a görbületi effektusokat elhanyagoljuk (1. táblázat).

## A csavartengely-szimmetria

A szén nanocsövek alkalmazása szempontjából az egyik legfontosabb probléma az, hogy előre megadott kiralitási indexű, egyfalú szén nanocsövek előállítására jelenleg még nem megoldott. A mintákban egyszerre sokféle kiralitású cső van jelen. A kísérleti vizsgálatok közül a Raman-spektroszkópia képes arra, hogy az egyfalú szén nanocsövekből álló „keverék” minta spektrumából azonosítsa az  $(n_1, n_2)$  számpárt, vagyis a mintában lévő szén nanocsövek típusát. Ez az azonosítás egy jellegzetes csúcs, a szén nanocső teljesen szimmetrikus, sugár irányú rezgési módusa, a „lélegző módus” segítségével vihető véghez (Radial Breathing Mode, RBM). E módus megfelel a grafén síkra merőleges eltolásának, így annak spektrumában nem szerepel, speciálisan csak a szén nanocsövekben fordul elő.

1. táblázat

### A szén nanocsövek néhány geometriai paraméterének függése a kiralitási indexektől

$$n = \text{Inko}(n_1, n_2)$$

$$R = \begin{cases} 3, & \text{ha } \frac{n_1 - n_2}{n} \text{ osztható } 3\text{-mal} \\ 1, & \text{egyébként} \end{cases}$$

$$\mathbf{c}_0 = -\frac{n_1 + 2n_2}{nR} \mathbf{a}_1 + \frac{2n_1 + n_2}{nR} \mathbf{a}_2$$

$$a_0 = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2|$$

$$c = |\mathbf{c}_0| = \frac{\sqrt{3}}{nR} a_0 \sqrt{n_1^2 + n_1 n_2 + n_2^2}$$

$$d = \frac{a_0}{\pi} \sqrt{n_1^2 + n_1 n_2 + n_2^2}$$

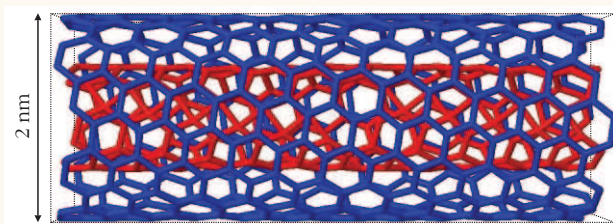
$$N = 2q = 4 \frac{n_1^2 + n_1 n_2 + n_2^2}{nR}$$

$(n_1, n_2)$  a kiralitási indexeket,  $\text{Inko}(n_1, n_2)$  az  $n_1$  és  $n_2$  szám legnagyobb közös osztóját,  $\mathbf{c}_0$  a nanocső hossz tengelyének irányába mutató rácsvektort,  $c$  az utóbbi hosszát, vagyis az egydimenziós rács-állandót,  $d$  a cső átmérőjét jelöli, míg  $N$  az eltolásinvariáns elemi cellában lévő szénatomok száma. Megjegyzendő, hogy az átmérőre és a rácsvektorra vonatkozó, itt látható összefüggések csak addig igazak, amíg a görbületi effektusok elhanyagolhatók.

Célunk olyan kiterjedt elméleti adatbázis elkészítése, amely minél több egyfalú nanocsőre tartalmazza nemcsak az RBM-módusok azonosítására alkalmas frekvenciákat, hanem a teljes fononspektrumot is. Az irodalomban már sok olyan munka látott napvilágot, amelyben foglalkoztak a különböző típusú egyfalú szén nanocsövek RBM-frekvenciájának kérdésével, a sok különböző matematikai módszer alkalmazása miatt azonban azok egységes rendszerbe nem foglalhatók. Az alábbiakban egy olyan egységes tárgyalásmódot mutatunk be, melyben azonos matematikai módszer alkalmazható minden egyfalú szén nanocsőtípusra [3].

Egy molekula rezgési módusainak elméleti úton való kiszámítása abból áll, hogy elvégezzük a molekula teljes rezgési analizisét ahhoz hasonlóan, ahogy a mechanikában egy rugórendszer normálmódusait határozzuk meg, vagyis harmonikus közelítésben kiszámítjuk az erőállandó-mátrixot. Az előállított erőállandó-mátrixból a diagonalizálási eljárással kapott sajátvektorok adják meg a magok elmozdulását leíró vektorokat, míg a sajátértékek a normálmódus frekvenciájának négyzetével arányosak.

A rezgési analízis elvégzése során általában az erőállandó-mátrix kiszámítása a legidőigényesebb lépés. A mátrix elemeinek száma egy  $N$  atomos molekula esetén éppen  $3N \times 3N$ . Az egy mátrixelem kiszámításához szükséges gépidő az alkalmazott numerikus módszertől függ. A kísérleti eredményekkel való összevetés fenntartása érdekében a széles körben használt sűrűségfüggő elméletet (Density Functional Theory, DFT) alkalmaztuk. Ez a legmagasabb szintű,



3. ábra. Koaxiálisan egymásba helyezett szén nanocsövek. A másfél nanométernél nagyobb átmérőjű szén nanocsövekben kisebb átmérőjű csövek helyezkedhetnek el.

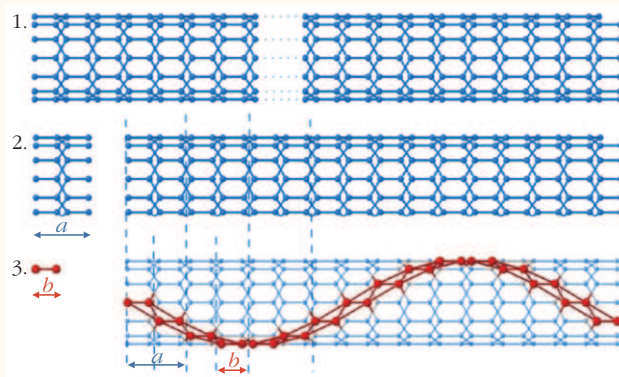
úgynevezett első elvű (*first principles*) módszer, amivel több száz atomot tartalmazó rendszerek is még kezelhetők.

Az adatbázis elkészítése több szempontból is nehézségekbe ütközik. Ezek közül az első az, hogy elméletileg rendkívül nagy számú szén nanocső képezhető. Pontosabban, annyi, ahány számpár képezhető az egész számokból ( $n_1, n_2$ ) alakban. A kísérleti szempontból érdekes nanocsövek száma természetesen ennél sokkal kevesebb. A számpárok egyértelműen meghatározzák a cső átmérőjét (1. táblázat), és így könnyen kiválaszthatók belőlük a fizikailag érdekesek. A nagyon kis és nagyon nagy átmérőket nem érdemes figyelembe venni. Ennek oka az, hogy nagy átmérő esetén a nanocső tartalmazhat, és leggyakrabban tartalmaz is más, kisebb átmérőjű nanocsöveket (3. ábra). Ezekre a többfalú szén nanocsövekre az itt tárgyalt módszerek már nem alkalmazhatók, míg kis átmérők mellett egyrészt az egyre jelentősebb görbületi effektusok nehezítik a számítást, másrészt a valószínűségben nem is fordulnak elő, ha  $n_1 < 3$ .

A másik probléma abban áll, hogy a kiralitási indexek növelésével nő az átmérő és az atomok száma is (1. táblázat). A napjainkban elérhető számítógépekkel legföljebb 400–500 atomos molekulák vizsgálhatóak, ezzel szemben egy valós egyfalú szén nanocső több százezer szénatomot is tartalmazhat.

A számításokat nagyban megkönnyíti a minden eltolási szimmetriával rendelkező rendszerre, így a szén nanocsövekre is alkalmazható, a szilárdtestfizikában gyakran használt *periodikus határfeltétel* módszere. Ennek keretében az eltolási szimmetriát kihasználva, elegendő a rendszernek csak az eltolási invariáns elemi cellájára végezni számításokat. A rendszert leíró hullámfüggvény a *Bloch-tétel* szerint kiterjeszthető a teljes molekulára, és a *Born-Kármán-féle periodikus határfeltétellel* végtelen hosszú csövet modellezhetünk. E közelítésnek azért van jogosultsága, mert a szén nanocsövek hossztengetelyirányú kiterjedése több nagyságrenddel nagyobb, mint az átmérője, s ezért a fizikai tulajdonságait a henger palástja fogja meghatározni, ezekhez csak elhanyagolható járulékot ad a csöveket lezáró sapka, illetve a nyílt csővég.

Az eltolási szimmetria kihasználásával a feladatunk mégsem válik megoldottá – két okból. A fizikailag érdekes átmérőtartományban képezhetőek olyan csövek is, amelyek sok száz atomot tartalmaznak az elemi cellájukban, és ezért numerikusan nem vizsgálhatók. A modell másik gyengesége, hogy a hosszútávú



4. ábra. Az ábra azt szemlélteti egy akirális cső példáján, miként változik az elemi cella mérete annak függvényében, hogy a szén nanocsövek melyik szimmetriatulajdonságát alkalmazzuk. Az 1. esetben nem használunk ki szimmetriát, az elemi cella a teljes molekula. A 2. esetben alkalmaztuk az eltolási szimmetriát, ekkor az eltolásra invariáns elemi cellát és a belőle építhető csövet ábrázoltuk (az eltolási vektor nagyságát  $a$  szemlélteti). A 3. eset pedig a csavartengely-szimmetria alkalmazása esetén mutatja az elemi cellát és a molekula fölépítését. Ekkor az elemi cella hosszát  $b$  mutatja.

vú kölcsönhatásokat nem veszi helyesen figyelembe, az elektronok közötti kölcsönhatás hatótávja csupán az eltolási invariáns elemi cella fele.

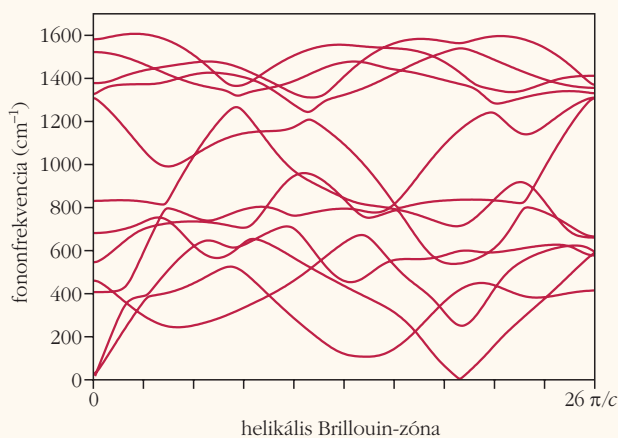
A megoldást abban a szimmetriatulajdonságban találhatjuk meg, amit az irodalomban helikális, illetve csavartengely-szimmetriának neveznek. Ennek műveletei egy ( $a$  cső hossztengetelye körüli) forgatásból, illetve egy (forgatási tengely irányú) eltolásból állnak. Alapos vizsgálat után, a szén nanocsövekre ezt a szimmetriát kihasználva fény derül arra, hogy az elemi cellák ( $a$  kiralitási indextől függetlenül) két atomból állnak éppen úgy, mint a grafén esetében. Szemléletesen a 4. ábra mutatja a (7,0) számpárral jellemzett egyfalú szén nanocső felépítését egy véges darab esetén, valamint a periodikus határfeltétel, illetve a csavartengely-szimmetria kihasználásával.

A csavartengely-szimmetria felhasználásával az erőálló mátrix meghatározása és a hosszútávú kölcsönhatások figyelembevétele igen egyszerűvé válik. A numerikusan igen költségesen előállítható erőálló mátrixelemek közül csak kisszámú kell meghatározni, a többi szimmetriaműveletek segítségével származtatható. A hosszútávú kölcsönhatások hatótávjának növelése is sokkal kisebb gépidőt igényel, mert az alkalmazott eltolásinvariáns cellák számával csak lineárisan, míg a periodikus határfeltétel alkalmazása mellett négyzetesen nő a kiszámolandó mátrixelemek száma.

A most bemutatott módszer segítségével kiszámítottuk 50 különböző szén nanocső fonondiszperzióját. Nemcsak a nulla hullámszámnak megfelelő, úgynevezett  $\Gamma$  pontban, ahová az említett lélegző módus is tartozik, hanem a teljes helikális Brillouin-zónában, amely az 1. táblázat jelöléseivel  $6n$  sávot tartalmaz. Példaként az 5. ábra mutatja a (6,2) számpárral jellemzett nanocső fonondiszperzióját, amely 12 sávot tartalmaz.

A numerikus számítási részletek mellőzésével most pár eredményt mutatunk be. Elsőként az elemieltolás-





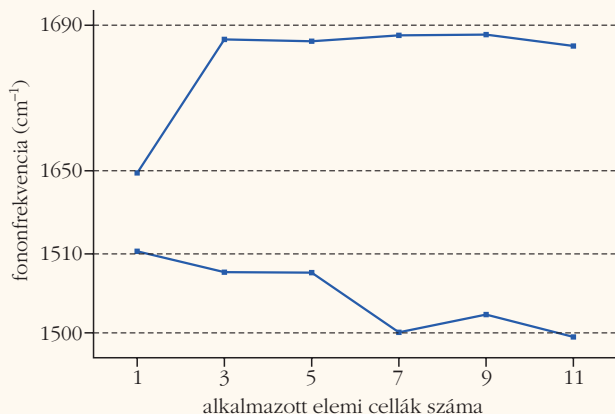
5. ábra. A (6,2) kiralitási indexekkel jellemzett szén nanocső fonondiszperziója. A helikális Brillouin-zóna a  $[0, 26\pi/c]$  tartományban értelmezett, ahol  $c$  az eltolásinvariáns elemi cella hossza.

invariáns cellák számának kérdésével foglalkozunk. Mint korábban említettük, ezek száma szemléletesen azt határozza meg, hogy a hosszútávú kölcsönhatásoknak numerikusan milyen maximális hatótávot engedünk meg. Azt tapasztaltuk, hogy a numerikus frekvenciaértékek a cellák számának változtatásával konvergálnak. A 6. ábra a helikális Brillouin-zóna egy szabadon választott pontjában mutatja pár sáv konvergenciáját.

További tapasztalatunk szerint a fémcsővek helikális Brillouin-zónája tartalmaz olyan pontokat, ahol nem elérhető a konvergencia. E pontokban az egydimenziós fémekre jellemző anomális viselkedés, az úgynevezett Kohn-anomália lép fel. Kiküszöbölésükhöz végtelen sok elemi cella figyelembevétele lenne szükséges, de ez numerikusan nem érhető el. Egy másik megoldás lehetne a *perturbatív sűrűség-funkcionál-elmélet* alkalmazása.

Összehasonlító vizsgálatokat végeztünk, amelyek során olyan csőpárok spektrumát vetettük össze, melyekre a kiralitási indexek  $(n, m)$  és  $(2n, 2m)$  voltak. Ez azért érdekes, mert ekkor a grafén diszperziós relációjából származtatható minden második fonondiszperziós vonalnak meg kellene felelnie egymásnak. Az

6. ábra. A (4,2) kiralitási indexekkel jellemzett szén nanocső fonondiszperziójából, a helikális Brillouin-zóna tetszőleges pontjában, a két felső sáv frekvenciaértékeit ábrázoltuk az alkalmazott elemi cellák számának függvényében. A numerikus pontosság körülbelül 4–5 hullámszám, ennek figyelembevételével azt mondhatjuk, hogy 7 elemi cella esetén már konvergáltak a görbék.



ettől való eltérés lehetőséget nyújt a numerikusan számolt fonondiszperzió átmérőfüggésének, vagyis a görbületi effektusoknak a tanulmányozására is. Azt tapasztaltuk, hogy az átmérő csökkenése az optikai módusok lokális minimumában felvett értékének és az ottani második deriváltjának is a csökkenését okozza. Ezzel értelmezni tudtuk a kettősfalú szén nanocsővek Raman-spektrumában megjelenő rendezetlenség indukálta sávra (D-sáv), illetve annak a „felharmonikusára” (D\*-sáv) vonatkozó kísérleti eredményeket.

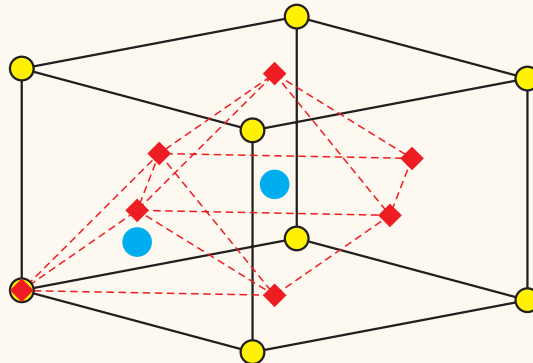
## A $C_{60}C_8H_8$ fullerén-kubán ko-kristály

Régóta ismert tény, hogy a  $C_{60}$  fullerénmolekula kristálya szobahőmérsékleten lapcentrált köbös rács. A molekularács pontjaiban elhelyezkedő molekulák közötti térrész két csoportba sorolható. Az egyik típusú üreg tetraédes, míg a másik oktaédes (7. ábra). Az előbbit négy, az utóbbit hat  $C_{60}$  molekula veszi körül. Korábbi vizsgálatok kimutatták, hogy az üregek feltölthetők. A vizsgálatok eddig főleg az üregek alkáli ionokkal való feltöltésére irányultak, és kimutatták, hogy az alkáli atomok és a fullerének arányának függvényében a keletkezett termék szigetelő, vezető, speciális esetben szupravezető is lehet.

A fullerénrács üregei azonban feltölthetők más jellegű molekulákkal is. Egy nemrégiben elvégzett kísérletben a kocka alakú kubán ( $C_8H_8$ ) volt a töltőanyag, az oktaédes üregekben [4]. A teljes kristályt úgy képzelhetjük el, mintha a fullerén lapcentrált köbös rácsában elhelyeznénk egy másik, eltolt lapcentrált köbös rácsot, amit kubánmolekulák alkotnak. A továbbiakban ennek elméleti vizsgálatát mutatjuk be részletesebben [5].

A fullerén-kubán ko-kristály numerikus modellezésénél elsőként azt kell figyelembe venni, hogy a kísérleti eredmények szerint a kubánmolekulák rögzített állásúak, míg a fullerének szobahőmérsékleten szabadon elforoghatnak. Mivel az egyszerűen vizsgálható atomok száma itt is korlátozott, olyan modellt készítettünk, amelyben az elemi cella pusztán csak egy  $C_{60}$  molekulát tartalmaz. Ekkor elhanyagoljuk azt a kölcsönhatást, ami abból adódna, hogy egy rácson belül

7. ábra. A  $C_{60}$  fullerén lapcentrált köbös rácsában a két világoskék pont egy tetraédes, illetve egy oktaédes üreg helyét mutatja, a rombuszok pedig az üregeket körülvevő rácspontokat jelölik.



2. táblázat

A különböző irányultsággal figyelembe vett fullerénekkal optimalizált geometria rácsállandói a kísérleti eredményekkel összevetve

	$T_h$	$C_3$	$D_{3d}$	kísérlet
$C_{60}$	1,417 nm	1,420 nm	1,429 nm	1,415 nm
$H_8C_8C_{60}$	1,454 nm	1,457 nm	1,462 nm	1,474 nm

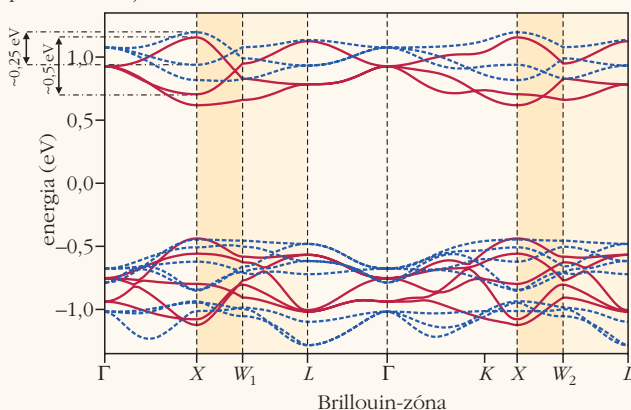
a rácspontokban lévő fullerének különböző irányultsággal állhatnak be. Numerikusan a fullerének szabad forgása nem vehető figyelembe maradéktalanul. Modellünkben három magas szimmetriájú beállást vizsgáltunk meg, amelyeket szimmetriacsoportjukkal ( $T_h$ ,  $C_3$ , illetve  $D_{3d}$ ) jellemezhetünk.

Első lépésként geometriai optimalizálást végeztünk a  $C_{60}$ , illetve a  $C_{60}C_8H_8$  rácsra. A kapott rácsállandókat összevetettük a kísérleti eredményekkel (2. táblázat). Megállapíthatjuk, hogy numerikus modellünkben mindhárom irányultságnál a rácsállandóra a  $C_{60}$  rácsban kicsiny felülbecslést, míg a  $C_{60}C_8H_8$  esetén alulbecslést kapunk. Továbbá az is jól látható, hogy a kubán beillesztését követő rácsállandó növekedése nem mutat jelentős irányultságfüggést.

Második lépésként az elektronok sávszerkezetét tanulmányoztuk. A lapcentrált köbös rács Brillouin-zónájában a lehetséges  $k$  pontokat, azok szimmetriatulajdonságait, illetve ezeken keresztül az elektronok sávszerkezetét erősen befolyásolja a rács valós térbeli szimmetriája. Ezt numerikus számításaink során reprodukálni tudtuk. Érdekesség ezzel szemben az, hogy az állapotsűrűség nem rendelkezik számottevő irányultságfüggéssel. Összevetettük a  $C_{60}$ , illetve a  $C_{60}C_8H_8$  sávszerkezetét, és világosan látható a kubán behelyezése miatt keletkezett rácsállandó-növekedés, hiszen ez az energiasávok összehúzódására vezet.

Külön érdekes megvizsgálni a legalacsonyabb betöltetlen sávot. E sávnál éppen olyan összeszűkülést, tehát állapotsűrűség-növekedést tapasztaltunk (8. ábra), mint a káliummal dúsított  $C_{60}$  rács esetén ( $K_3C_{60}$ ).

8. ábra. A fullerén–kubán ko-kristály (szaggatott vonal) és a fullerén molekulkristály (folytonos vonal) sávszerkezete. A Fermi-energiát mindkét esetben a 0 eV pontba helyeztük el. Jól látható, hogy a sávok a két esetben megfeleltethetők egymásnak, és a  $(C_8H_8C_{60})$  esetében a sávok energiában összeszűkülnek. Ezt szemléltetik a X pontban berajzolt értékek.



Ennek értelmében, hasonlóan a  $K_3C_{60}$  rácsához, a  $C_{60}C_8H_8$  is potenciális jelölt lehet szupravezető anyagnak, feltéve, hogy megfelelően lehet adalékolni. Ezt az elméleti eredményt kísérleti megfigyeléssel még alá kell támasztani.

További érdekes eredménye az elméleti modellnek a két alkotóelem közötti töltésátvitel nagysága, illetve iránya. Eredményeink szerint annak ellenére, hogy a fullerénmolekula közismerten nagy elektronegativitással rendelkezik, a  $C_{60}C_8H_8$  rácsban mégis a kubánmolekulákon jelentkezik elektrontöbblet. Az egyes atomokon található töltésmennyiség kiszámítására a Bader-analízist alkalmaztuk. A töltésátvitel nagysága igen csekély, csupán csak  $0,0025 e^-/CH$  a  $C_8H_8$ , illetve  $0,0005 e^-/C$  a  $C_{60}$  esetében. Ez a kis töltésátvitel az alrendszer molekulapályáinak igen kicsiny hibridizációjára utal.

## Összefoglalás

Röviden bemutatunk néhány példát a szén nanosztruktúrák világából, illusztrálva az elméleti vizsgálatok nehézségeit. A szén nanocsövek példáján keresztül tárgyaltuk a molekula szimmetriatulajdonságait kihasználó egyszerűsítő módszereket. A szimmetriák felhasználásával egységes módon számíthattuk ki igen sok különböző szén nanocső fonondiszperzióját. Ez elősegíti a szén nanocsövek kísérleti azonosítását. A numerikus módszer korlátai közé tartozik, hogy a Kohn-anomália miatt fémes szén nanocsövek nem vizsgálhatók kellő pontossággal ilyen módon.

A fullerén–kubán ko-kristály elméleti vizsgálata során rámutattunk arra, hogy ez a szerkezet megfelelő adalékolással esetleg alkalmas lehet a szupravezetésre, így a kísérleteket érdemes ebbe az irányba is folytatni. Az alkalmazott modell keretein belül megvizsgáltuk az alkotóelemek közötti töltésátvitelt is. Arra az érdekes következtetésre jutottunk, hogy hiába magas a fullerénmolekula elektronegativitása, ebben a kristályszerkezetben elektronleadóként működik. Továbbá a modell keretein belül vizsgáltuk az eredményeket a forgó fullerénmolekulák pár lehetséges irányultságánál. Arra a következtetésre jutottunk, hogy különböző szimmetriájú elrendezések az elektronok sáv szerkezetében természetesen változást okoznak, ezzel szemben az állapotsűrűséget csak alig befolyásolják.

## Irodalom

1. Kürti J.: A varázslatos szénatom. *Fizikai Szemle* 47 (1997) 274–278.
2. Kürti J.: Szén nanocsövek. A jövő – és részben már a jelen – ígéretes anyagai. *Fizikai Szemle* 57 (2007) 106–109.
3. Zólyomi V., Koltai J., Kürti J., Kuzmany H.: Phonons of single walled carbon nanotubes. In: V. Basiuk, S. Irlé (szerk.) *DFT Calculations on Fullerenes and Carbon Nanotubes*. Research Signpost (2008) Chapter 7, 297–332.
4. Pekker S., Kovács É., Oszlányi G., Bényei G., Klupp Gy., Bortel G., Jalsovszky I., Jakab E., Borondics F., Kamarás K., Bokor M., Kriza G., Tompa K., Faigel G.: Rotor-stator molecular crystals of fullerenes with cubane. *Nature Materials* 4 (2005) 764–767.
5. Zólyomi V., Koltai J., Kürti J., Pekker S.: Theoretical study of the electronic structure of fullerene–cubane cocrystals. *Phys. Rev. B* 78 (2008) 115405 (6)