

# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Fullerene	1
1.2 Kohlenstoffnanoröhren	2
<b>2 Höhere Fullerene</b>	<b>3</b>
2.1 Allgemeine Betrachtungen	3
2.1.1 Symmetriebetrachtungen zu Fullerenen	3
2.1.1.1 $^{13}\text{C}$ NMR	5
2.1.1.2 Schwingungsspektren	6
2.1.2 IP-Regel	7
2.1.3 Isolierte hohe Fullerene bei Beginn der Arbeit	10
2.2 Darstellung	13
2.2.1 K-H-Verfahren und Aufarbeitung	13
2.2.2 Eigene Trennung	15
2.3 $^{13}\text{C}$ NMR	20
2.3.1 Allgemeine Betrachtungen	20
2.3.2 Literatur	21
2.3.3 Messungen	23
2.3.3.1 Chemische Verschiebung und Strukturmotive	26
2.4 Elektronische Struktur	35
2.4.1 Literatur	35
2.4.2 Allgemeine Betrachtungen	36
2.4.3 TDDFT	39
2.4.4 Messungen	42
2.4.4.1 $C_{60}$	42
2.4.4.2 $C_{70}$	46
2.4.4.3 $C_{76}$	47
2.4.4.4 $C_{78}$	49
2.4.4.5 $C_{80}$	51
2.4.4.6 $C_{82}$	52

<b>2.5 IR</b>	<b>55</b>
2.5.1 Literaturübersicht	55
2.5.2 DRIFT-Messungen	56
2.5.3 DFT-Rechnungen	58
2.5.4 Messungen und Diskussion	58
2.5.4.1 $C_{60}$	58
2.5.4.2 <i>Höhere Fullerene <math>C_{70}</math>, <math>C_{76}</math>, <math>C_{78}</math> (<math>C_{2v}</math>, <math>C_{2v}'</math>, <math>D_3</math>) und <math>C_{82}</math> (<math>C_2</math>)</i>	66
<b>2.6 Raman-Spektroskopie</b>	<b>74</b>
2.6.1 Messungen	74
2.6.2 Lamb-Theorie	76
2.6.2.1 <i>Monopolare Schwingungsmoden</i>	78
2.6.2.2 <i>Quadrupolare Schwingungsmoden</i>	84
<b>3 Fullerendimere</b>	<b>93</b>
3.1 Literatur	93
3.2 Darstellung/Aufarbeitung	96
3.3 Welche $C_{130}O$ -Isomere wurden hergestellt?	99
3.4 PM3-Rechnungen	102
<b>3.5 DRIFT-Spektroskopie</b>	<b>102</b>
3.5.1 $C_{120}$ , $C_{120}O$ , $C_{120}O_2$	102
3.5.2 $C_{130}O$	108
<b>3.6 Raman</b>	<b>112</b>
3.6.1 Systematik der Käfig-Käfig-Schwingungen	112
<b>4 Nanoröhren</b>	<b>119</b>
4.1 Literatur	119
4.1.1 Nomenklatur	119
4.1.2 Darstellung/Aufarbeitung	123
4.1.3 Reinigung	125
4.1.4 Chemisches Zerschneiden der SWNTs	126
4.1.5 Charakterisierung	128
<b>4.2 Eigene SWNT-Herstellung</b>	<b>129</b>
4.2.1 Karlsruher Apparatur zur Herstellung von SWNTs	129
4.2.2 Reinigung	131
4.2.3 Charakterisierung	132

<i>4.2.3.1 Rasterelektronenmikroskopie (SEM)</i>	132
<i>4.2.3.2 Elektronische Struktur/UV-vis-NIR-Spektren</i>	134
<i>4.2.3.3 FT-Raman-Spektroskopie</i>	139
<b>4.3 Chemische Modifikation</b>	<b>144</b>
<b>5 Zusammenfassung</b>	<b>149</b>
<b>5.1 Höhere Fullerene</b>	<b>149</b>
<b>5.2 Fullerendimere</b>	<b>150</b>
<b>5.3 Nanoröhren</b>	<b>151</b>
<b>6 Anhang</b>	<b>153</b>
<b>7 Literatur</b>	<b>179</b>