

Válaszok Dr. Kukovecz Ákos bírálatára

Mindenekelőtt szeretném megköszönni Bírálom alapos munkáját, észrevételeit. A nyelvi, nyelvtani, szerkesztési és stilisztikai megjegyzéseket külön köszönöm. Döntő többségükkel egyetértek és ezekre a jövőben jobban oda fogok figyelni.

A Bíráló további megjegyzéseire adott válaszaim:

A 33. oldal tetején találunk először olyan információt, ami a doktori munka konkrét motivációjára utal. Nagyon szerencsétlen szerkesztési mód ilyen sokáig várni az olvasót. A célok („2.1 Objectives”) alfejezetnek a Kísérleti rész („2. Experimental”) elejére történő illesztése szokatlan, indokolatlan és kissé értelemzavaró is. Maga a szerző is küszködik itt: keveredik a nagyon specifikus és a nagyon általános tárgyalásmód, és végül nem is derül ki világosan, hogy mi volt ennek a doktori munkának a célja.

Valóban, az említett fejezet kissé nehezen érthető lett. A célok megfogalmazása már az Introduction fejezet elején célszerű lett volna. A munka elsődleges célja a nanocső kötegek reaktivitásának vizsgálata volt, hiszen valójában ebben a formában léteznek és a kötegek felbontása nehézkes. Céлом egy olyan reakció vizsgálata volt, amely a kötegek belsejében megy végbe, de anélkül, hogy a kötegeket felbontaná. Ezt a reakciót hasonlítottam össze egy olyan hasonló reakcióval, ami viszont szétszedi a kötegeket.

25 évvel a felfedezésük után szerintem ilyen részletesen felesleges bevezetni egy PhD disszertációban a szén nanocsöveket. Elég lett volna az alapokra ismert tényekként hivatkozni, így több hely jutott volna a munkában ténylegesen felhasznált P2, HiPco, CoMoCat csövekkel kapcsolatos korábbi eredmények bemutatására.

Az 1.10 és 1.11 ábrák együtt 1,5 oldalt foglalnak el a disszertáció összesen 70 oldalnyi érdemi részéből. Maguk az ábrák önmagukban persze nagyon érdekesek és hasznosak, de közismert irodalmi összefoglalás mindkettő. Érzésem szerint a jelölt hasznosabban tölthette volna ki ezt a helyet akkor, ha többet ír a konkrétan vizsgált reakciók irodalmáról.

Az általános bevezető rész a nanocsövek szerkezetéről és előállítási módszereiről ábrákkal együtt összesen 7,5 oldal terjedelmű, és tények közléséből áll, nem tartalmaz levezetéseket vagy hosszabb gondolatmeneteket. Ez valóban lehetett volna rövidebb. A nanocsövek elektronszerkezetét és optikai tulajdonságait tárgyaló rész 6,5 oldal terjedelmű. Mivel a következtetések levonásakor az optikai mérések kulcsfontosságúak, és egy nem nanocsövekkel foglalkozó vegyész számára nem triviális a spektrumok eredete (nem molekula- vagy kristályrezgéseket vizsgálunk az infravörös tartományban, hanem elektronátmeneteket), ezért célszerűnek találtam ezt a részt részletesebben tárgyalni, de még ez sem tartalmaz levezetéseket.

A vizsgált reakciók irodalmáról azért nem írtam részletesebben, mert a szén nanocsövek funkcionálizálása Birch redukcióval Pekker Sándor és Borondics Ferenc, illetve Andreas Hirsch csoportjának munkájára korlátozódik, ezekre hivatkoztam a dolgozatban. Az alkálifém interkaláció és a grafit interkalációs vegyületek irodalmának egy fejezetet szenteltem.

Ez valóban lehetett volna hosszabb és részletesebb.

Indokolt lett volna legalább vizsgált nanocsőtípusonként egy-egy HRTEM képet és Raman RBM tartományt bemutatni. A doktori disszertáció érvelésének leghangsúlyosabb pontja a nanocsövek átmérője és reakcióképessége közötti összefüggések elemzése, így különösen furcsa, hogy az átmérő meghatározásának két legfontosabb kísérleti módszerével nyert eredményeket egyáltalán nem találunk benne.

A Raman RBM tartományok bemutatása valóban indokolt lett volna és valóban elmaradt. A HRTEM képek akkor lettek volna relevánsak, ha az általam használt nanocső mintákkal azonos preparációból (azonos batch-ből) származó nanocsövekről készültek volna. A HRTEM méréssel a dolgozat témájával kapcsolatban kapható többletinformáció ezt a mérést véleményem szerint nem indokolta. A mérést még tovább bonyolította volna, hogy olyan speciális, alacsony gyorsítófeszültségű HRTEM készülék, ami a nanocsövek méréséhez megfelelő, Magyarországon nem elérhető.

A 3.1 és 3.2 ábrák diszkussziójában írja: “On the Raman spectra of both series of samples (shown in Figures 3.1 and 3.2), it can be seen ...”. Valójában a 3.1 ábráról képtelenség megállapítani a D/G arány aprócska megváltozását, a számszerű értékeket pedig nem közli a szerző. A 3.2 ábrán az “1x” minta D/G aránya tényleg nagyobbnak látszik a kiindulásinál, de ugyanez a “2x” és “3x” mintákra már nem igaz, azok a kiindulási minta spektrumára jobban hasonlítanak, mint a “1x”-re. A P2 és a CoMoCat csövek interkalációját bemutató Raman spektrumsorozatokon (3.9 és 3.10 ábrák) a kiindulási minta és az „1x” spektrum D/G aránya közötti különbség látható, de a további hidrogénezési lépések hatását szabad szemmel nem lehet megállapítani.

A dolgozatban valóban nem közöltem táblázatos formában a D/G arányokat az egyes minták esetében. Az 1. táblázat tartalmazza a számszerű adatokat. Ezekből látható, hogy főleg a kiindulási nanocső és az 1x minta D/G arányában van nagyobb különbség, az 1x és a további minták között sokkal kisebb.

Minta neve	D/G arány
Kiindulási P2	0,12
P2, 1x	0,23
P2, 2x	0,25
P2, 3x	0,27
Kiindulási HiPco	0,08
HiPco, 1x	0,11
HiPco, 2x	0,12
HiPco, 3x	0,11
Kiindulási CoMoCat	0,11
CoMoCat, 1x	0,21
CoMoCat, 2x	0,24
CoMoCat, 3x	0,24
HiPco, Birch redukció, 1x	0,09
HiPco, Birch redukció, 2x	0,10
HiPco, Birch redukció, 3x	0,12

1. táblázat. A minták normált Raman spektrumának D/G arányai.

24. oldal: „...from a simple Raman experiment, the quantitative determination of the amount of a nanotube with a specific diameter is not possible...” Ez a fogalmazás arra utal, hogy több Raman kísérletből talán meg lehetne határozni az adott átmérőjű nanocsövek mennyiségét kvantitatíven. Bár ez elvileg persze nem kizárt, valójában a CNT Raman spektroszkópiát abszolút mennyiségek meghatározására használni nagyon komoly kalibrálás után lehetne csak, így a fogalmazását félrevezetőnek érzem.

A mondat valóban félrevezető lehet. Itt azt próbáltam hangsúlyozni, hogy a nanocsövek Raman spektrumának mérésénél előny a rezonancia-effektus, mert jelentősen megnöveli a mérhető intenzitást, mindazonáltal éppen ez az egyik legjelentősebb oka annak, hogy egyetlen Raman mérésből nem határozhatók meg a különböző átmérőjű csövek összetételarányai.

1.1.6 fejezet: az 1.8 ábra diszkussziójába még említés szintjén sem került be az 500-1200 cm^{-1} közötti és az 1750 cm^{-1} fölötti sávok magyarázata, pedig ezek intenzitása a bemutatott spektrumon összemérhető a D sávával.

A funkcionizálatlan nanocsövek Raman spektrumában az RBM és D sáv közötti rész a kevésbé vizsgált, a dolgozat szempontjából nem releváns ún. köztes módusokhoz (IFM, Intermediate Frequency Modes) tartozik. Ezek eredhetnek pl. a rövid (< 50 nm) nanocsövektől, optikai és akusztikus fononok kölcsönhatásából [1]. Az 1750 cm^{-1} feletti csúcsok összegmódusokhoz tartoznak. A D sáv kis intenzitása arra utal, hogy a minta nagyon jó minőségű nanocső volt (a dolgozat 1.8 ábráján látható spektrum saját mérés a kiindulási P2 nanocsőről).

1.2.4 fejezetben „The base of the reaction is ...” Ez félrevezető fogalmazás. A “base” angol kémiai szövegben alapértelmezésben bázist jelent, nem pedig “alap”-ot ahogyan a szerző itt használja a szót.

Egyetértek a Bírálóval a “base” szó 1.2.4 fejezetben történő helytelen használatával kapcsolatban. Helyesebb lett volna pl. a “starting process” kifejezés használata.

Valamennyi Raman spektrum normálva van ábrázolva, de a disszertációban nem találtam meg, hogy mire történt a normálás.

A disszertációban valóban nincs feltüntetve. A normálás minden esetben az 1x funkcionizált minta G sávjára történt.

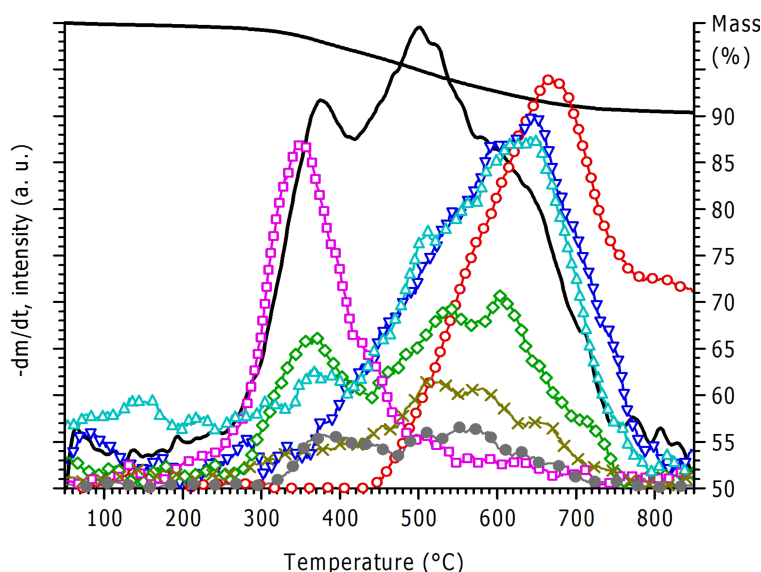
A 3.3 és 3.4 ábrákon “tipikus” TG-MS görbéket látunk. Szerencsésebb lett volna pontosan megmondani, hogy melyik mintához tartoznak, ha már a 3.1 és 3.2 ábrákon olyan gondosan megkülönböztette az egyes hidrogénezési lépéseket.

Egyetértek a Bírálóval abban, hogy a TG-MS görbéken szerencsésebb lett volna feltüntetni, hogy melyik mintához tartoznak, a “tipikus” szó használata helyett. A Raman spektrumokon azért különböztettem meg a mintákat és ábrázoltam minden mérést, mert ott általában látható a változás tendenciája, míg az egymás mellé feltüntetett TG-MS görbéken nem, csak az abból számolt adatokon.

A 3.4 ábra tömegvesztési tengelye tetszőleges egységben (a.u.) van ábrázolva, ennek nem sok értelme van. Helyesebb lett volna a 3.3 ábrához hasonlóan a TG görbét tömegvesztési százalékban ábrázolni.

A dolgozatba sajnálatos módon egy korábbi ábra került bele. Az 1. ábra mutatja az ábra

végleges változatát.



1. ábra. A dolgozat 3.4 ábrájának végleges változata a tömegvesztési tengely skálájának feltüntetésével. Fekete görbék: TG, DTG. Piros: m/z 2 hidrogén; kék: m/z 16 metán; zöld: m/z 29 $-CHO$; rózsaszín: m/z 31 metanol; szürke: m/z 128 naftalin.

78. oldal második bekezdésének szövege („Below a certain limit...”) ellentétes a kapcsolódó 3.23 ábrával. Az ábra szerint a rács tágulásához szükséges energia nem egy adott ionméret alatt, hanem pont a fölött válik nullává.

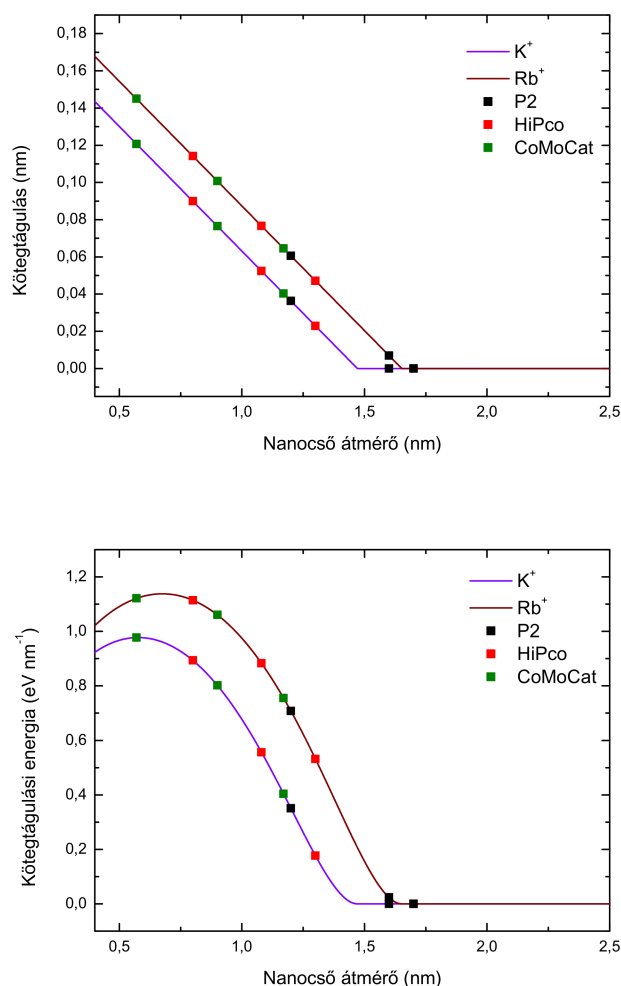
Az idézett mondat valóban nem jól érthető. A nanocső átmérőnek a beépítendő alkáli ion méretétől függő kritikus minimális értéke van. Ennél nagyobb átmérőjű nanocsövek esetén nem szükséges kötegtágulás az alkáli ion beépüléséhez. Ennél a kritikus átmérőnél a három nanocső által bezárt csatorna mérete éppen akkora, hogy az alkáli ion pont belefér.

A Bíráló kérdéseire adott válaszaim:

1. *Miért nem próbálta ki mindkét alkálifémet mindhárom nanocsőre? Nekem úgy tűnik, így sokkal biztosabb lábakon állhatnának az átmérőszelektivitással kapcsolatos megállapításai.*

Az alkálifém ionsugár/nanocső átmérő arány két szélsőértékével elvégzett reakciók szelektivitásában is nagyon kicsi a különbség, a köztes arányoknál elvégzett reakciók esetén ezek a még kisebb különbségek nem biztos, hogy kimutathatóak lennének. Ennek szemléltetése a 2. ábrán látható. A HiPco nanocsövek jellemző átmérői a kötegtágulási energia-nanocső átmérő görbe ugyanazon szakaszára esnek Rb^+ esetén is, tehát itt is fordított átmérő-szelektivitás várható. Ugyanakkor, mivel a görbe ezen szakaszának meredeksége kisebb, a fordított átmérő-szelektivitás is várhatóan kisebb mértékű lesz. Másrészt, mivel a kötegtágulási energia nagyobb, kisebb H-tartalom várható. P2 nanocső esetén a jellemző átmérők szintén a görbe azonos szakaszain vannak, kivéve a középső átmérő, amely a Rb^+ esetén már a görbe felszálló ágának kezdetén van. Itt tehát az alkalmazott modell alapján fordított átmérő-szelektivitás várható (hasonlóan a HiPco/K rendszerhez, de a

P2/K rendszertől eltérően), de ez a gyakorlatban jó eséllyel kimutathatatlanul kis mértékű.



2. ábra. Nanocső köteg belsejébe történő K⁺ és Rb⁺ interkalációhoz szükséges kötegtágulás és kötegtágulási energia.

2. A színváltozásnál kvantitatívabb lehetőséget nyújt az interkaláció követésére például a nanocsőfilm elektromos ellenállásának mérése. Miért nem élt ezzel a lehetőséggel?

A disszertáció témája szempontjából az ellenállásmérés nem nyújtott volna releváns többletinformációt, és technikai okokból nem is minden esetben lett volna kivitelezhető. Egyrészt, az interkaláció során a nanocső és alkálifém együttes hevítése egy zárt üvegcsőben történt. A hőkezelés után a bemért alkálifém nagy része mindig "eltűnt" az üvegcsőből, vagyis interkalálódott a nanocső kötegekbe. Ezzel párhuzamosan mindig tapasztalható volt kisebb-nagyobb színváltozás. Másrészt, az ellenállásméréshez legalább buckypaper minta szükséges, por alakú mintán nem lehetséges. Ehhez a nanocső mintát a dryboxban pl. száraz toluolban kellett volna diszpergálni, majd a boxban szűrni, ami a laboratóriumunkban található dryboxban nem volt lehetséges.

3. A 41. oldalon azt írja, hogy az interkaláció sikerességét a minta arany/réz-színűvé válása jelezte. Ugyanakkor a 2.2 ábra fényképén a minta feketének látszik, pedig a szöveg szerint káliummal interkalált. Kérem, magyarázza!

Az ábraaláírás valóban nem pontos. A 2.2 ábra fényképén a minta valóban fekete, ugyanis a fénykép a metanol hozzáadása után készült, amikor a minta K-tartalma már elreagált (a tölcser már üres). A lombikban tehát már nem a K-mal interkalált, hanem a hidrogénezett nanocső látható.

4. Miért használt $1/3 - 1/5$ mennyiséget a HiPco csövekből az NMR mérésekhez, mint a másik két csőfajtából?

Az NMR mérésekhez viszonylag nagy mennyiségű minta szükséges, főleg, ha a minta H-tartalma alacsony. A mérések sorában az NMR mérés volt az utolsó, a HiPco mintákból már csak ez a kevesebb mennyiség állt rendelkezésre. A mérést ennek ellenére elvégeztük abban reménykedve, hátha ennyi minta is elegendő lesz.

5. A 2.5 ábra szerint az optikai átmenetek illesztésére nagyszámú Lorentz függvényt használt. Kérem, fejtse ki, hogy miért pont ennyi függvénnyel illesztett és pontosan hogyan, mely paraméterek rögzítésével végezte az illesztéseket? Véleménye szerint mennyiben befolyásolhatná munkája következtetéseit az illesztés bizonytalansága?

Az optikai vezetőképesség-spektrumok illesztésénél először a háttérrel kell megfelelően illeszteni. Ehhez 0 cm^{-1} -nál rögzítettem egy kis félérték-szélességű Lorentz-görbét, ez lesz a Drude-csúcs egyik komponense, illetve egy nagy félérték-szélességűt, amely a háttér járuléka lesz. A $25000\text{--}30000\text{ cm}^{-1}$ feletti részhez a háttérrel illesztendő, több széles Lorentz-görbét adtam, figyelembe véve a spektrum nagyobb jellegzetességeit. Ez a háttér-járulék főleg az UV tartományban lévő $\pi\text{--}\pi^*$ átmenet, mint háttér illesztéséhez kell. Ezek az átmenetek azonban az egész spektrum-tartományban adnak járulékot a háttérhez. Az S_{11} , S_{22} ... csúcsokhoz egy-egy olyan Lorentz-görbét rendeltem, ami a csúcsok helyének és teljes szélességének nagyjából megfelel, ezek paramétereit rögzítettem. A háttér illesztése után a háttérhez tartozó Lorentz függvények paramétereit rögzítettem, és az S_{11} csúcstól kezdve adogattam hozzá annyi Lorentzet, amennyi a látható csúcsok és vállak száma volt. Végül, amikor az illesztett spektrum már nagyban hasonlított a mérthez, a két 0 cm^{-1} -ű Lorentz-görbe helyét kivéve elengedtem az összes paramétert.

Fontos, hogy a következtetések levonásához az eredeti, mért spektrumból vontam le az illesztett háttérrel és a nem oda tartozó csúcsok Lorentz-görbéit.

Az illesztés kiindulási paramétereit változtatva, beleértve az illesztett Lorentz-görbék számát is, a háttér és a többi csúcs levonásával kapott S_{11} , S_{22} ... csúcsok lényegében nem változtak (ami a funkcionális mértekével történő változás trendjét illeti). Az illesztésnél nem volt cél, hogy minden egyes nanocsövet külön Lorentz-görbével illesszek. A konklúziók levonásakor minden háttérrel (valódi háttér és a többi csúcs) konzekvensen vontam le, így véleményem szerint az így kapott relatív változások az ezzel a kiértékelési módszerrel elérhető legmegbízhatóbbak [2].

6. Mi lehet az oka a 3.2 ábra "2x" Raman spektrumán 1640 cm^{-1} körül megjelenő éles csúcsnak, miért hiányzik ez a többi spektrumból?

Az említett éles csúcs két kiugró pontból áll, és a kozmikus sugárzás okozta detektor-beütésnek tulajdonítható. Intenzitása azért ilyen kicsi, mert az ábrázolt mérés több (10) egymást követő egyedi mérés összege, melyek közül csak az egyik tartalmazza a kozmikus

sugárzás által okozott kiugró mérési pontokat.

7. *Változott-e az alkálifém-interkaláció közben a Raman spektrumban a lélegző rezgés tartománya?*

Az alkálifémmel interkalált nanocsöveken nem történtek Raman mérések. Nagymértékű dőpolás hatására az RBM csúcsok intenzitása drasztikusan lecsökken [3].

A 3. ábrán feltüntettem a hidrogénezett termékeken mért Raman spektrumok RBM tartományát. Az ábrából látható, hogy az RBM tartomány nem változott, intenzitása kevésbé és nem konzekvensen csökken a funkcionálizáltsági fokkal. Ennek oka valószínűleg az alacsony funkcionálizáltsági fok.

8. *Mi lehet az oka annak, hogy a csak káliummal interkalált HiPco nanocsövek esetén a hidrogénfejlődés fő tömegét az elsődleges, C-H kötés szakadással járó folyamat adja (3.3 ábra), míg a Birch redukcióval készült mintában a másodlagos folyamatok okozta hidrogénfejlődés a meghatározó? Kizárható-e kísérleteiben teljesen a molekuláris hidrogén adszorpciója a nanocsöveken?*

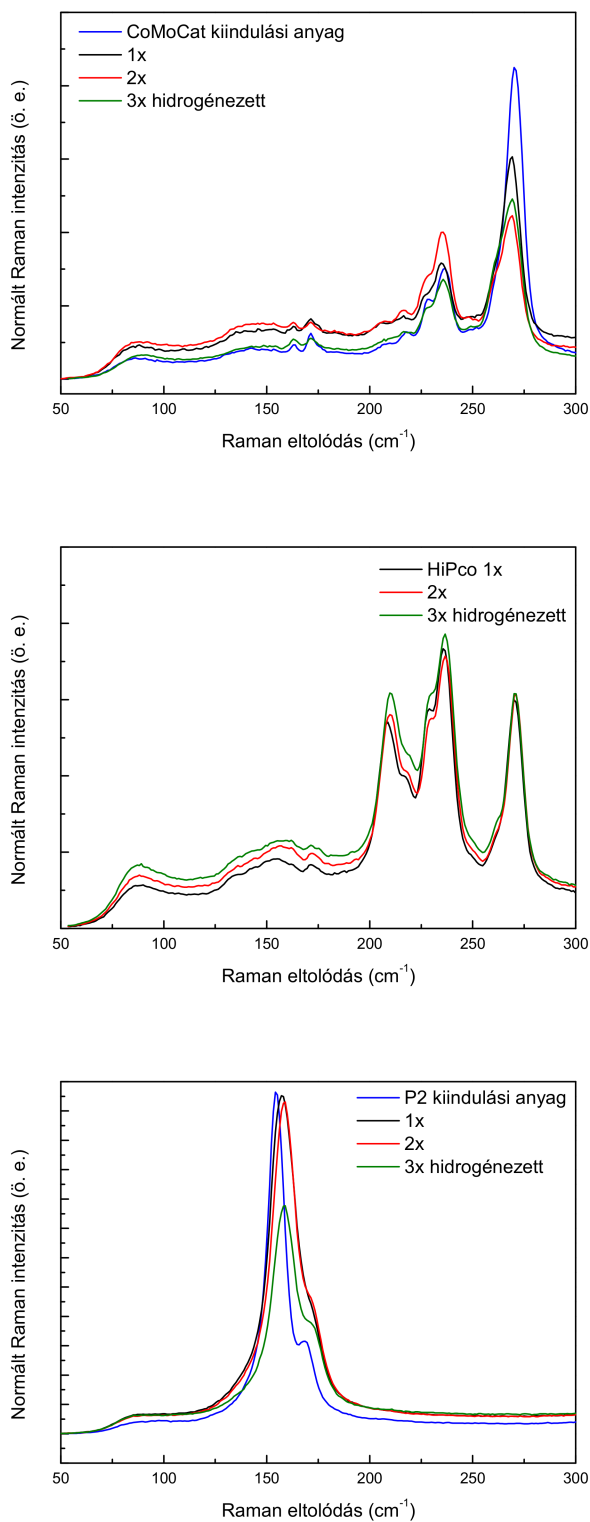
Az alkálifémmel interkalált és a Birch redukcióval készült kétféle minta előállítása során különböző kémiai anyagokkal érintkezett. A Birch redukció során az interkalált mintához képest többféle H-tartalmú anyaggal és nagyobb mennyiségben érintkezett a nanocső, melyek egy része a végső hőkezelés után is benne maradhatott a mintában (a kötegek között adszorbeálódva, esetleg a nyitott nanocsövek belsejében, ahonnan az alkalmazott végső hőkezeléssel nem távolítható el) és bomlástermékei megjelennek a TG-MS görbén.

Összevetve a dolgozatban vizsgált kétféle hidrogénezési reakció eltérő átmérő-szelektivitását (a spektroszkópiai mérések alapján, 3.5 és 3.6 ábrák a dolgozatban), az sem kizárható, hogy a Birch redukcióval hidrogénezett nanocső (mely esetben a kisebb átmérőjű csövek reaktívabbak, tehát azok tartalmazznak több H-t, amely C-H kötés magasabb hőmérsékleten bomlik) TG-MS görbéjén a H₂ -váll 550 °C-nál a nagyobb átmérőjű funkcionálizált nanocsövek C-H kötéseiből eredő elsődleges H₂, míg a fő maximum 650 °C körül együtt tartalmazza a másodlagos H-t és a kis átmérőjű nanocsövek C-H kötéseiből származó elsődleges H-t.

A molekuláris hidrogén adszorpciója a nanocső felületén gyakorlatilag kizárható. Ugyan a mintakészítés során az egyik mellékreakció éppen a hidrogénfejlődés, és a másodlagos bomlástermékek között is lehet molekuláris hidrogén, de a hidrogén TG-MS görbék jellege egyértelműen hőbomlásra utal (csúcs jellegű), és nem adszorpciós jellegű (a hőmérséklettel fokozatosan emelkedő intenzitás, majd hirtelen intenzitás esés, amikor az adszorbeált H₂ elfogy) [4–7].

9. *TG mérései szerint a hidrogénezett nanocsöveket inert atmoszférában melegítve azok 800 Celsius fokig elveszítik tömegük több, mint 12%-át. Kérem, hasonlítsa össze ezt az adatot az irodalomban korábban leírtakkal és a saját referencia méréseivel (feltételezve, hogy voltak ilyenek, hiszen a dolgozatban nem szerepelnek!) Mások is ilyen jelentős tömegvesztést mértek? Elkészíthető-e a rendszer szénmérlege?*

A 12%-os tömegvesztés egy kiugró érték, átlagosan inkább 8-10%. A kiindulási nanocsövek TG-MS mérései szerint a teljes tömegvesztés 800 °C-ig 2-3%, ennek nagy része 250-500 °C között van, a maximum 500 °C-nál. A fennmaradó 5-7% tulajdonítható a funkcionálizálás hatásának: funkciós csoport-tartalom, maradék oldószerek, reagensek, amiket a minták végső hőkezelése sem távolított el (a kötegek belsejéből vagy a nyitott nanocsövek belsejéből). A tömegvesztés nagy része itt is megtörténik 500 °C-ig, tehát ennek



3. ábra. Alkálifém-interkalációval hidrogénezett minták RBM módusai ($\lambda=785$ nm).

legnagyobb része maradék oldószer és reagensek.

Az irodalomban mások is 10% körüli tömegvesztést mértek olyan nanocsövekre, amik va-

lamilyen reakcióban részt vettek (tehát szennyezőket nagy valószínűséggel tartalmaztak) vagy eleve kisebb tisztaságúak voltak. Ezek közül is kiemelkednek az alkálifémmel érintkezett nanocsövek. Az irodalomban még nem teljesen tisztázott okokból az alkálifémek olyan reaktív környezetet teremtenek a nanocsövek kötegeiben, ami ellenőrizetlen mellékreakciókhoz és -termékekhez vezet [5, 8–11].

A nanocső minták hidrogéntartalmának TG-MS-sel történő meghatározásánál különösen fontos, hogy ne pusztán az adott hőmérséklet-tartományban bekövetkező tömegvesztésből induljunk ki, hanem megfelelő, TiH_2 -del történő kalibrációból nyert adatokkal korrigáljuk a TG-ből számolható H-tartalmat, ugyanis az ugyanabban a hőmérséklet-tartományban bomló nagyobb tömegszámú (szennyező) részecskék torzítják a mérést és a H-tartalom túlbecsléséhez vezetnek [5, 6, 8].

A rendszer szénmérlege (anyagmérlege) akkor lenne elkészíthető, ha minden bomlásterméket ismernénk, és azok mennyiségét pontosan ismernénk az MS mérések által. Ez a nanocső mintákra nem áll fent, mivel egyrészt nem ismerünk minden mellékreakciót és bomlásterméket, az ismertek közül sem mértük mindegyiket, illetve a bomlástermékek egy része el sem jut a tömegspektrométerig. Egy ilyen bonyolult rendszer szénmérlegét csupán a TG görbére alapozva nem lehet elkészíteni.

10. *A butilezett HiPco csövek hőbomlásának vizsgálatakor miért a propilcsoportot követte butil helyett (3.7 és 3.8 ábrák)? Van esetleg olyan irodalmi adat, ami szerint az n-butilezett szén nanocsövekről a csőhöz kötött első szénatom termikusan nem hasad le? Ha igen, ezt hivatkozni kellene!*

A TG-MS mérések beállításainál, illetve kiértékelésénél ismert volt, hogy a minták milyen anyagokkal érintkeztek a reakciók során. Ennek ismeretében spektrumkönyvtárakat használva lettek megválasztva azok a részecskék, amiket detektáltunk. A beállítások és a hőmérséklet függvényében ezen anyagok különböző, bonyolult mechanizmusok szerinti bomlást szenvednek [8, 12].

Az alifás szénhidrogének tömegspektrumában a molekulaion nagyon kis intenzitású. A bután legintenzívebb ionja a 43 relatív molekulatömegű ion, ami propil-ionnak felel meg, ezért ennek az intenzitását mértük és tüntettük fel az ábrákon. Tehát a propil-ion a tömegspektrométerben keletkezik, nem pedig a hőbomlás során. A bután molekulaionja is keletkezik és detektálható, de ennek intenzitása csak kb. 15%-a a fő bomlástermék, a propil-ion intenzitásának, ezért nem is lett követve a mérés során.

Olyan irodalmi adatot, mely szerint a nanocsőhöz kötődő első szénatom nem hasadna le, nem találtam.

Hivatkozások

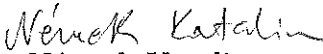
- [1] C. Fantini, A. Jorio, M. Souza, R. Saito, Ge. G. Samsonidze, M. S. Dresselhaus, and M. A. Pimenta. Steplike dispersion of the intermediate-frequency Raman modes in semiconducting and metallic carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, 72:085446, 2005.
- [2] Á. Pekker, D. Wunderlich, K. Kamarás, and A. Hirsch. Diameter selectivity of nanotube sidewall functionalization probed by optical spectroscopy. *phys. stat. sol. (b)*, 245:1954, 2008.

- [3] N. Bendiab, A. Righi, E. Anglaret, J.L. Sauvajol, L. Duclaux, and F. Béguin. Low-frequency Raman modes in Cs- and Rb-doped single wall carbon nanotubes. *Chem. Phys. Lett.*, 339:305, 2001.
- [4] I. Cabria, M.J. López, and J.A. Alonso. Density functional study of molecular hydrogen coverage on carbon nanotubes. *Comput. Mater. Sci.*, 35:238, 2006.
- [5] S. Pekker, J.-P. Salvetat, E. Jakab, J.-M. Bonard, and L. Forró. Hydrogenation of carbon nanotubes and graphite in liquid ammonia. *J. Phys. Chem. B*, 105:7938, 2001.
- [6] F. E. Pinkerton, B. G. Wicke, C. H. Olk, G. G. Tibbets, G. P. Mesiner, M. S. Meyer, and J. F. Herbst. Thermogravimetric Measurement of Hydrogen Absorption in Alkali-Modified Carbon Materials. *J. Phys. Chem. B*, 104:9460, 2000.
- [7] D. Silambarasan, V. J. Surya, V. Vasu, and K. Iyakutti. Single Walled Carbon Nanotube-Metal Oxide Nanocomposites for Reversible and Reproducible Storage of Hydrogen. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 5:11419, 2013.
- [8] F. Borondics, M. Bokor, P. Matus, K. Tompa, S. Pekker, and E. Jakab. Reductive functionalization of carbon nanotubes. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, 13:375, 2005.
- [9] F. Borondics, E. Jakab, and S. Pekker. Functionalization of carbon nanotubes via dissolving metal reductions. *J. Nanosci. Nanotechnol.*, 7:1, 2007.
- [10] F. Hof, S. Bosch, S. Eigler, F. Hauke, and A. Hirsch. New Basic Insight into Reductive Functionalization Sequences of Single Walled Carbon Nanotubes (SWCNTs). *J. Am. Chem. Soc.*, 135:18385, 2013.
- [11] C. T. Kingston, Y. Martínez-Rubí, J. Guan, M. Barnes, C. Scriver, R. E. Sturgeon, and B. Simard. Coupled thermogravimetry, mass spectrometry, and infrared spectroscopy for quantification of surface functionality on single-walled carbon nanotubes. *Anal Bioanal Chem*, 396:1037, 2010.
- [12] F. Borondics. Egyfalú szén nanocsövek optikai vizsgálata és funkcionálizálása (PhD disszeráció). *Eötvös Loránd Tudományegyetem*, 2007.

Végezetül szeretném ismételtlen megköszönni Bírálóm lelkiismeretes munkáját.

Budapest, 2016. január 31.

Tisztelettel:


Németh Katalin
doktorjelölt