



دانشگاه رازی

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه ی کارشناسی ارشد رشته ی فیزیک گرایش حالت جامد نظری

عنوان پایان نامه:

بررسی رسانندگی گرمایی نانوریون و نانولوله های کربنی نوع زیگزاگ با استفاده از

شبه سازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی

استاد راهنما:

دکتر رستم مرادیان

نگارش:

زهرا محمد پور راد

بهمن ماه ۱۳۸۷

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات و
نوآوری های ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه
متعلق به دانشگاه رازی است.



دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه ی کارشناسی ارشد رشته ی فیزیک گرایش حالت جامد نظری

خانم زهرا محمد پور راد

تحت عنوان

بررسی رسانندگی گرمایی نانوریون و نانولوله های کربنی نوع زیگزاگ

با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی

در تاریخ ۱۳۸۷/۱۱/۲۱ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه به تصویب نهایی رسید.

۱- استاد راهنمای پایان نامه دکتر رستم مرادیان با مرتبه ی علمی دانشیار امضاء

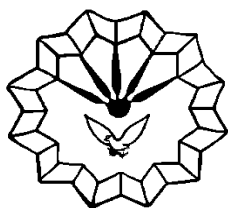
۲- استاد داور داخل گروه دکتر علی فتحعلیان با مرتبه ی علمی استادیار امضاء

۴- استاد داور خارج از گروه دکتر منوچهر بابائی پور با مرتبه ی علمی استادیار امضاء

تقدیم به پدر و مادر بزرگوار

و

همسر مهربانم



Razi University
Faculty of Science
Department of physics

M.Sc.Thesis

Investigation of Thermal Conductivity of Zigzag Carbon Nanoribbons and Nanotubes Using Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulation

By: Zahra Mohamad Pour Rad

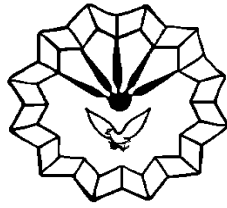
Evaluated and approved by thesis committee: As.....

Dr. R. Moradian , Supervisor (Associate Prof.).....

Dr. A. Fathalian , Internal Examiner(Assistant Prof.).....

Dr. M. Babaeipour , External Examiner(Assistant Prof.).....

February 2009



Razi University

Faculty of Science
Department of Physics

M.Sc.Thesis

**Investigation of Thermal Conductivity of Zigzag Carbon Nanoribbons
and Nanotubes Using Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulation**

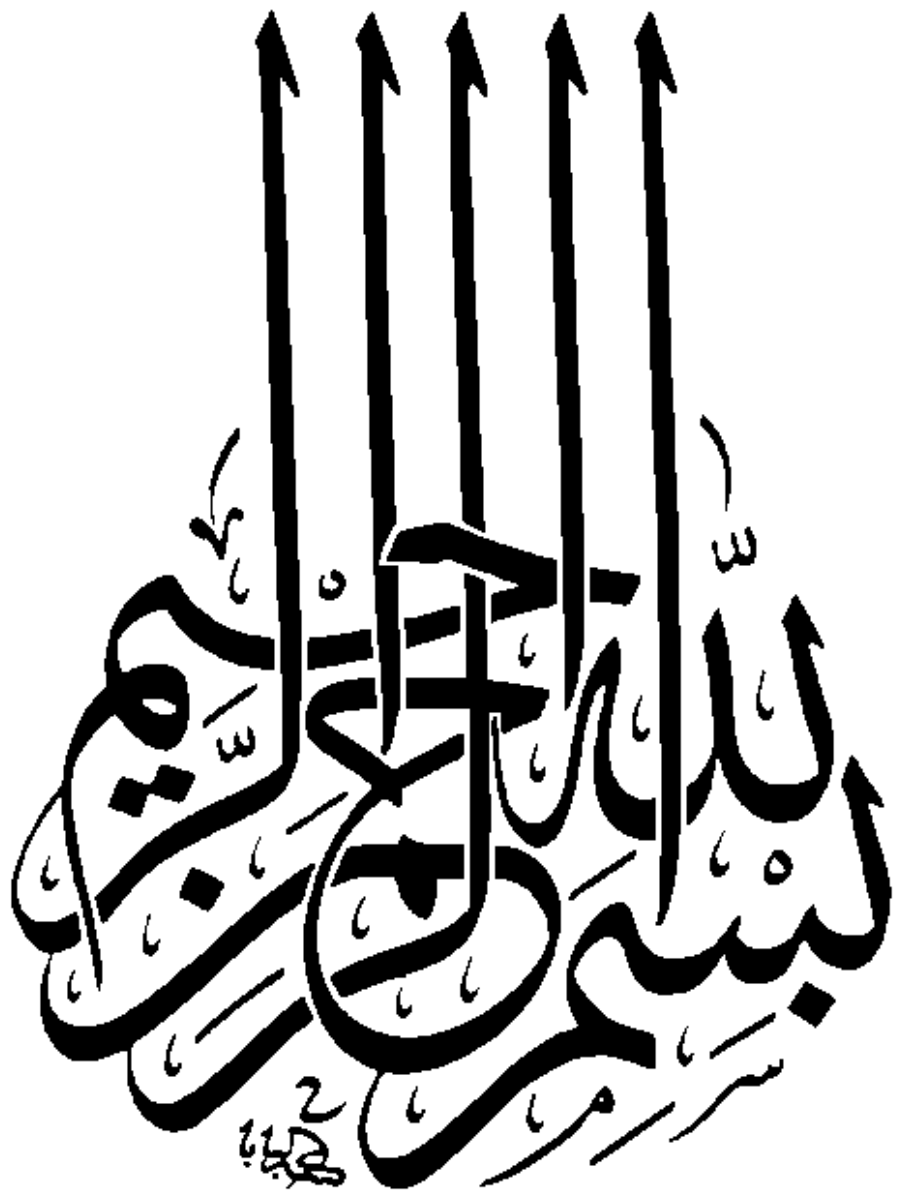
Supervisor:

Dr R.Moradian

By:

Zahra Mohamad Pour Rad

February 2009



فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	فصل اول : کربن
۲	۱-۱- مقدمه
۳	۲-۱- کربن
۶	۳-۱- انواع شکل های کربن
۷	۱-۳-۱- گرافیت
۸	۲-۳-۱- الماس
۱۰	۳-۳-۱- فولرین
۱۱	۴-۳-۱- نانولوله
۱۱	۴-۱- نانولوله های کربنی
۱۲	۱-۴-۱- انواع نانولوله های کربنی
۱۵	۲-۴-۱- ساختار هندسی نانولوله های کربنی
۱۷	۳-۴-۱- روش های تولید نانولوله های کربنی
۱۸	۱-۳-۴-۱- روش تخلیه قوس الکتریکی
۲۳	۲-۳-۴-۱- روش ذوب لیزری
۲۵	۳-۳-۴-۱- روش رسوب گذاری بخار شیمیایی به کمک حرارت
۲۹	۴-۴-۱- کاربرد های نانولوله های کربنی
۳۲	۵-۴-۱- خواص و ویژگی های نانولوله های کربنی
۳۵	۶-۴-۱- انواع نقص شبکه ای در نانولوله های کربنی
۳۶	فصل دوم: مقدمه ای بر شبیه سازی دینامیک مولکولی
۳۷	۱-۲- مقدمه
۳۸	۲-۲- یک ایده برای شبیه سازی
۳۸	۳-۲- مراحل یک برنامه نویسی شبیه سازی
۴۰	۱-۳-۲- مقدار دهی اولیه
۴۱	۲-۳-۲- محاسبه ی نیرو
۴۳	۳-۳-۲- انتگرال گیری معادلات حرکت
۴۶	فصل سوم: شبیه سازی دینامیک مولکولی یک نانولوله ی کربنی
۴۷	۱-۳- مقدمه
۴۷	۲-۳- تعیین مکان اولیه اتم ها در یک نانولوله
۵۷	۳-۳- پتانسیل حاکم بر سیستم

۶۲	۴-۳- تعیین نیروی وارد بر هر ذره
۶۷	فصل چهارم: رسانندگی گرمایی
۶۸	۴-۱- مقدمه
۶۸	۴-۲- رسانندگی گرمایی جامدات در حالت کلی
۷۱	۴-۳- روش های محاسبه ی رسانندگی گرمایی در یک شبیه سازی دینامیک مولکولی
۷۲	۴-۴- مروری بر کارهای انجام شده در این زمینه
۷۵	۴-۵- مزیت های روش NEMD
۷۶	۴-۶- رهیافت این پایان نامه در محاسبه ی رسانندگی گرمایی نانولوله ها
۷۹	فصل پنجم: نتایج
۸۰	۵-۱- مقدمه
۸۱	۵-۲- وابستگی رسانندگی گرمایی به دما
۸۲	۵-۳- وابستگی رسانندگی گرمایی به طول نانولوله
۸۶	۵-۴- وابستگی رسانندگی گرمایی به شعاع نانولوله
۸۷	۵-۵- رسانندگی گرمایی برای نانولوله های دارای نقص تهی جا
۸۸	۵-۶- رسانندگی گرمایی برای نانولوله های دارای نقص Stone-Wales
۹۰	۵-۷- رسانندگی گرمایی نانوریبون ها
۹۳	مراجع

فهرست شکل ها

صفحه	عنوان
۵	شکل ۱-۱- اربیتال های هیبریدی
۵	شکل ۲-۱- پیوند π بین دو اربیتال p
۶	شکل ۳-۱- انواع پیوند های اتم های کربن
۷	شکل ۴-۱- گرافیت
۸	شکل ۵-۱- شمایی از اربیتال های گرافیت
۹	شکل ۶-۱- ساختار الماس
۹	شکل ۷-۱- اربیتال های الماس
۱۰	شکل ۸-۱- ساختار فولرین C_{60}
۱۱	شکل ۹-۱- نوع پیوند در نانولوله ی کربنی
۱۲	شکل ۱۰-۱- (a) نانولوله کربنی تک دیواره (b) نانولوله کربنی چند دیواره
۱۳	شکل ۱۱-۱- لوله کردن یک لایه گرافن و ایجاد نانولوله
۱۳	شکل ۱۲-۱-
۱۴	شکل ۱۳-۱- نانو هورون کربنی تک دیواره
۱۴	شکل ۱۴-۱-
۱۵	شکل ۱۵-۱- شبکه ی شش گوشه و بردار های پایه ی a_1 و a_2
۱۷	شکل ۱۶-۱- الگوی قرار گیری اتم های کربن در امتداد محیط نانولوله زیگزاگ و آرمچیر
۲۱	شکل ۱۷-۱- تصویری از ناحیه ی فیلتراسیون تحت شرایط کنترل شده دبی گاز هلیوم
۲۲	شکل ۱۸-۱- تصویری از مجموعه دستگاه به کار رفته برای تولید نانولوله تک دیواره با خاص بالا به روش قوس الکتریکی
۲۴	شکل ۱۹-۱- شمایی از یک سیستم تولید نانولوله تک دیواره به روش برداشت لیزری
۲۸	شکل ۲۰-۱- دستگاه سنتز نانولوله های تک دیواره به روش رسوب گذاری بخار شیمیایی با گاز متان
۲۹	شکل ۲۱-۱- شمایی از نمودار جریان یک واحد تولید صنعتی SWCNT به روش CVD
۳۵	شکل ۲۲-۱- یک نقص تهی جا در نانوریبون
۳۵	شکل ۲۳-۱- یک نقص Stone-Wales در نانوریبون
۴۸	شکل ۳-۱- یک لایه ی گرافیت

- شکل ۳-۲- ساختار های زیگزاگ و آرمچیر و کایرال ۴۹
- شکل ۳-۳- مکان اتم ها در شبکه ی شش گوشه ۵۳
- شکل ۴-۱- شمایی از فرآیند های نرمال و واگرد ۷۰
- شکل ۴-۲- شار گرمایی در راستای محور نانولوله ۷۷
- شکل ۵-۱- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب دما برای نانولوله ی (۵,۰) ۸۱
- شکل ۵-۲- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب دما برای نانولوله ی (۸,۰) ۸۱
- شکل ۵-۳- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب دما برای نانولوله ی (۱۰,۰) ۸۲
- شکل ۵-۴- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب طول نانولوله در دمای $T=300\text{ K}$ برای نانولوله ی (۵,۰) ۸۳
- شکل ۵-۵- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب طول در دما های مختلف برای نانولوله ی (۵,۰) ۸۳
- شکل ۵-۶- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب طول نانولوله در دمای $T=300\text{ K}$ برای نانولوله ی (۸,۰) ۸۴
- شکل ۵-۷- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب طول در دما های مختلف برای نانولوله ی (۸,۰) ۸۴
- شکل ۵-۸- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب طول نانولوله در دمای $T=300\text{ K}$ برای نانولوله ی (۱۰,۰) ۸۵
- شکل ۵-۹- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب طول در دما های مختلف برای نانولوله ی (۱۰,۰) ۸۵
- شکل ۵-۱۰- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب شعاع نانولوله ها ۸۶
- شکل ۵-۱۱- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب درصد نقص تهی جا برای نانولوله ی (۵,۰) ۸۷
- شکل ۵-۱۲- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب درصد نقص تهی جا برای نانولوله ی (۸,۰) ۸۷
- شکل ۵-۱۳- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب درصد نقص تهی جا برای نانولوله ی (۱۰,۰) ۸۸
- شکل ۵-۱۴- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب درصد نقص SW برای نانولوله ی (۵,۰) ۸۹
- شکل ۵-۱۵- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب درصد نقص SW برای نانولوله ی (۸,۰) ۸۹
- شکل ۵-۱۶- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب درصد نقص SW برای نانولوله ی (۱۰,۰) ۹۰
- شکل ۵-۱۷- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب دما برای نانوریبون (۵,۰) ۹۱
- شکل ۵-۱۸- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب دما برای نانوریبون (۸,۰) ۹۱
- شکل ۵-۱۹- نمودار رسانندگی گرمایی بر حسب دما برای نانوریبون (۱۰,۰) ۹۲

فهرست جداول

صفحه	عنوان
۵۹	جدول ۱-۳- مقادیر پارامترهای ثابت برای مدل انرژی پتانسیل برنر
۶۴	جدول ۲-۳- مقادیر مشتقات جزئی برای تابع درونیاب چند جمله ای
۷۴	جدول ۱-۴- رسانندگی گرمایی یک نانولوله در $T=300\text{ K}$

چکیده

در این پایان نامه، پس از معرفی کربن و انواع شکل های آن، به نوع خاص نانولوله های کربنی پرداخته و انواع آن، ساختار هندسی، خواص و ویژگی ها، روش های سنتز، کاربرد ها و انواع نقص در آنها معرفی شده است. سپس اصول اولیه ی یک شبیه سازی دینامیک مولکولی را شرح داده و آن را برای نانولوله های کربنی به کار برده ایم. شبیه سازی دینامیک مولکولی یک تکنیک برای محاسبه ی خواص تعادلی و انتقالی سیستم های بس ذره ای است، که با انتگرال گیری معادلات حرکت نیوتن، مکان و سرعت اتم ها را در Δt ثانیه بعد، حدس زده و رفتار یک سیستم N ذره ای را در طول زمان شبیه سازی، پیشگویی می کند.

رسانندگی گرمایی از جمله خواص انتقالی جامدات است که می توان گفت تقریباً یکی از سخت ترین ضرائب برای محاسبه است. با این رهیافت، اقدام به محاسبه ی رسانندگی گرمایی نانوریون و نانولوله های نوع زیگزاگ، برای چند نوع خاص، کرده و نمودار رسانندگی گرمایی برحسب دما، طول و شعاع نانولوله ها بدست آوردیم. همچنین اثر نقص های تهی جا و Stone-Wales روی رسانندگی گرمایی نانولوله ها را نیز بررسی کردیم.

نتیجه ی مهم این پایان نامه اینست که، نانولوله های کربنی دارای رسانندگی گرمایی بسیار بالایی هستند (بیشتر از هر جامدی که تا کنون دیده شده). رسانندگی گرمایی نانولوله ها با افزایش طول یا شعاع، افزایش ، و با افزایش درصد چگالی نقص تهی جا یا Stone-Wales کاهش می یابد.

Abstract

In this thesis, first we introduce different structures of carbon such as diamond, graphite, fullerene and nanotube, then we proceed special kind of carbon nanotubes, and its forms, geometric structures, properties, synthesis methods, applications and kinds of defects is introduced. Then we explain primary principles of a molecular dynamics simulation and apply it for carbon nanotubes. Molecular dynamics simulation is a technique for computing the equilibrium and transport properties of many-body systems, which guesses by integrating Newton's equation of motion, positions and velocities of particles at subsequent Δt seconds and predicts behavior of a system with N particles during time of simulation.

Thermal conductivity is one of the transport properties that can be said it is one of the most difficult coefficients for computing. By this approach, we proceed computing of thermal conductivity of zigzag nanoribbons and nanotubes, and obtain diagrams of thermal conductivity in terms of nanotube's temperature, length and radius. Also we investigate the effect of vacancy and Stone-Wales defects on nanotubes thermal conductivity. Important result of this thesis is that, nanotubes have a very high thermal conductivity, (more than any solid that ever seen). Thermal conductivity increases by increasing of length or radius and decreases by increasing percent of vacancy or Stone-Wales defects density.

۱-۱- مقدمه

امروزه نانو تکنولوژی را در خط مقدم تحقیقات به عنوان یک عامل تاثیرگذار در علم، فناوری و صنعت می‌شناسند و آن را اساسی ترین فناوری در دسترس بشر به حساب می‌آورند که قادر است در دهه های آینده تحول عظیمی در زندگی جوامع انسانی ایجاد کند. نانو تکنولوژی، توانمندی تولید مواد، ابزارها و سیستمهای جدید با در دست گرفتن کنترل در سطوح مولکولی و اتمی و استفاده از خواصی است که در آن سطوح ظاهر می‌شود. هدف اصلی اکثر تحقیقات نانو تکنولوژی شکل دهی ترکیبات جدید، یا ایجاد تغییراتی در مواد موجود است.

در واقع نانو تکنولوژی فناوری جدیدی است که تمام دنیا را فرا گرفته است و به تعبیر دقیق تر " نانو تکنولوژی بخشی از آینده نیست بلکه همه آینده است ". از همین تعریف ساده برمی آید که نانو تکنولوژی یک رشته ی جدید نیست بلکه رویکردی جدید در تمامی رشته هاست.

برای نانو تکنولوژی، کاربردهایی را در حوزه های مختلف از غذا، دارو، تشخیص پزشکی و بیو تکنولوژی تا الکترونیک، کامپیوتر، ارتباطات، حمل و نقل، انرژی، محیط زیست، مواد، هوافضا و امنیت ملی بر شمرده اند. کاربردهای وسیع این عرصه به همراه پیامدهای اجتماعی، سیاسی و حقوقی آن، این فناوری را به عنوان یک زمینه فرا رشته ای مطرح نموده است.

اولین جرقه فناوری نانو (البته در آن زمان هنوز به این نام شناخته نشده بود) در سال ۱۹۵۹ زده شد. پنجاه سال پیش ریچارد فاینمن^۱ متخصص کوانتوم نظری و دارنده جایزه نوبل، درسخرانی معروف خود با عنوان « فضای زیادی در سطوح پایین وجود دارد» اساس تفکر کوچک شدن اجسام بزرگ صنعتی را ایجاد و به دنبال آن، در اواسط دهه ۷۰، اریک درکسلر^۲، نسبت به وسایل بسیار کوچک فاینمن علاقمند شده بود و قصد داشت تا در مورد تواناییهای آنها به کاوش بپردازد و نام "نانو تکنولوژی" را بر ایده های جدید خود که برگرفته از نظر فاینمن بود انتخاب کرد.

یک نانومتر، یک میلیاردم متر ($10^{-9} m$) یعنی حدوداً ۴ برابر قطر یک اتم است. مکعبی با ابعاد ۵ نانومتر حدوداً ۱۰۰۰ اتم را شامل می شود. در مقایسه یک جسم نانومتری به اندازه حدود ۱۰ نانومتر، هزار برابر

^۱.Richard Feynman

^۲.Eric Drexler

کوچک تر از قطر موی سر انسان است. کوچکترین IC های امروزی، با ابعاد حدود ۲۵۰ نانومتر در هر لایه به ارتفاع یک اتم، حدود یک میلیون اتم را در بردارند.

حالا این سوال پیش می آید که چرا این مقیاس طول اینقدر مهم است؟

خواص موجی شکل (مکانیک کوانتمی) الکترونها داخل ماده و اثر متقابل اتمها با یکدیگر، از جابجایی مواد در مقیاس نانومتر اثر می پذیرند. با تولید ساختارهایی در مقیاس نانومتر، امکان کنترل خواص ذاتی مواد، از جمله دمای ذوب، خواص مغناطیسی، ظرفیت بار و حتی رنگ مواد، بدون تغییر در ترکیب شیمیایی، به وجود می آید. استفاده از این پتانسیل، به محصولات و تکنولوژی های جدیدی با کارایی بالا منتهی می شود که پیش از این میسر نبود.

کربن یکی از عناصر طبیعی است که در شکل های مختلف در طبیعت وجود دارد و نام نانو ساختار های کربنی، امروزه، در اکثر زمینه های پژوهشی و تحقیقاتی و حتی کاربردی بسیار به گوش می خورد. در این فصل به کربن و انواع ساختار های آن می پردازیم و نانولوله های کربنی (که نانو ساختار اصلی شبیه سازی در این پایان نامه است)، را از نظر انواع ساختارها، خواص و ویژگی ها، روش های تولید و سنتز، کاربرد های کنونی و انواع نقص در شبکه، به طور مفصل بررسی می کنیم.

۱-۲- کربن

کربن با عدد اتمی ۶، عنصری غیر فلزی، فراوان و چهار ظرفیتی، ششمین عنصر در جدول تناوبی است که شکل الکترونی آن به صورت $1s^2 2s^2 2p^2$ می باشد، که از ۲ الکترون در لایه K (اریتال $1s$) و ۴ الکترون در لایه L (دو تا در $2s$ و دو تا در $2p$) تشکیل شده است، که دو الکترون اریتال $2p$ الکترونهاى ظرفیت (والانس) هستند. در حالت پایه، اریتال s اتم کربن یک تقارن کروی دارد و اریتال p به صورت دمبلی شکل^۱ است، که حول محورها تقارن دارد. در نتیجه اریتال s جهت مشخصی ندارد و اریتال p دارای خواص جهتی است [۱].

اتم های کربن در شکل های مختلف مثلاً الماس، گرافیت، فولرین و نانو ریون و نانولوله، با به اشتراک گذاشتن الکترونها، پیوندهای کووالانسی تشکیل می دهند. برای اینکه این پیوندها تشکیل شوند، آرایش

¹-Elongated Barbell

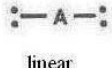

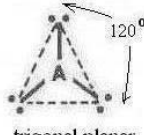
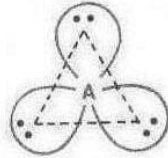
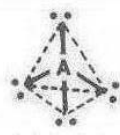
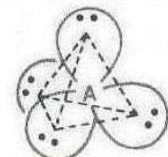
حالت الکترونی به صورت $1s^2 2s^2 2p^2$ باید به گونه ای تغییر پیدا کند که بیش از دو الکترون به صورت الکترون والانس قابل استفاده باشد. این تغییر حالت آرایش الکترونی، بوسیله فرآیند شناخته شده ی هیبریداسیون^۱ اتفاق می افتد که در آن آرایش الکترونی در پوسته L در حالت پایه تغییر می کند، به این ترتیب که یکی از دو الکترون اربیتال $2s$ با اربیتال بالاتر $2p$ ترکیب می شود و اربیتال های هیبریدی که ترکیبی از اربیتالهای $2s$ و $2p$ است را به وجود می آورد. این فرآیند هیبریداسیون تعداد الکترون های والانس را از ۲ به ۴ تبدیل می کند.

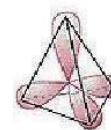
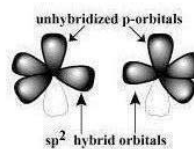
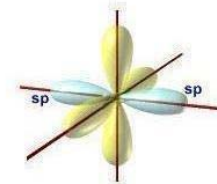
اگر اربیتال هیبریدی از یک اربیتال $2s$ و سه اربیتال $2p$ تشکیل شده باشد، آنگاه چهار اربیتال هیبریدی sp^3 ایجاد می شود. در این حالت آرایش الکترونی، کربن شامل آرایش الکترونی پوسته K است که بدون تغییر باقی مانده و به جای پوسته اصلی L که قبلاً داشتیم چهار اربیتال هیبریدی $2s p^3$ خواهیم داشت. هر اربیتال $2s p^3$ در این مورد در چهار گوشه یک چهار وجهی قرار می گیرد. باید توجه کنیم که چنانچه اتم کربن را در مرکز یک مکعب در نظر بگیریم، این چهار اربیتال هیبریدی در راستای مرکز مکعب به رأس های آن به طور یک در میان قرار خواهند گرفت که همان آرایش چهار وجهی منتظم است.

اگر اربیتال های هیبریدی از یک اربیتال $2s$ و دو اربیتال $2p$ تشکیل شده باشند آنگاه سه اربیتال هیبریدی sp^2 خواهیم داشت و در این حالت آرایش الکترونی، کربن شامل آرایش الکترونی پوسته K است که بدون تغییر باقی می ماند و به جای پوسته اصلی L که قبلاً داشتیم سه اربیتال هیبریدی $2s p^2$ و یک الکترون آزاد غیر هیبریدی، که در اربیتال $2p$ قرار دارد، خواهیم داشت. در این حالت سه تا از چهار الکترون والانس بوسیله اربیتال های هیبریدی اشغال می شود و یک الکترون به طور غیر جایگزیده باقی می ماند هر کدام از سه الکترون اربیتال هیبریدی $2s p^2$ یک آرایش مثلثی دارند، که در یک صفحه دوطبقه، مثلاً $X-Y$ ، قرار می گیرند و جز در راستای گسترش تفاوتی با یکدیگر ندارند.

همچنین نوع سومی از اربیتال های هیبریدی، یعنی اربیتال های هیبریدی sp ، وجود دارد که این اربیتال هیبریدی از یک اربیتال $2s$ و یک اربیتال $2p$ تشکیل شده است. پیوند ایجاد شده توسط اربیتال های هیبریدی sp ، خطی است. در این حالت چهار الکترون والانس بوسیله دو الکترون آزاد (غیر جایگزیده، غیر هیبریدی) که در اربیتال $2p$ قرار دارد، و دو اربیتال هیبریدی $2s p$ اشغال می شود [۱] شکل (۱-۱).

¹-Hybridization

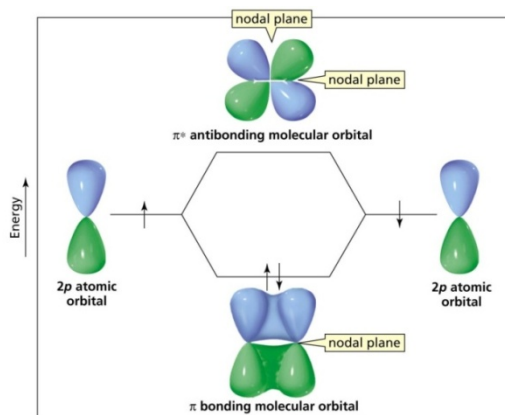
Number of electron clouds	Electron Geometry	Hybridization at central atom	shape
2	 linear	sp 180°	
3	 trigonal planar	sp^2 120°	
4	 tetrahedral	SP^3 $109/28^\circ$	



شکل ۱-۱- اربیتال های هیبریدی

تمام انواع اربیتال های هیبریدی، در طی فرآیندهای واقعی پیوند اتم های کربن ایجاد می شوند و نمایش دهنده ی ساختار واقعی اتم کربن آزاد نیستند. در این طرح های پیوندی که در بالا ذکر شد اگر اربیتالها همپوشانی محوری داشته باشند پیوند ایجاد شده را سیگما (σ) می گویند. در این نوع پیوند چگالی بار در فضای بین دو اتم کربن بیشترین مقدار است. پیوند بین دو اربیتال هیبریدی نیز از این نوع می باشد.

البته برای اربیتال های p نوع دیگری از همپوشانی نیز ممکن است. این نوع پیوند که پیوند π نام دارد، هنگامی رخ می دهد که، دو اربیتال p همپوشانی جانبی داشته باشند. در این حالت بیشترین چگالی بار در بالا و پایین یا چپ و راست محوری که هسته دو اتم را به هم متصل می کند قرار دارد که در شکل (۱-۲) نمایش داده شده است.



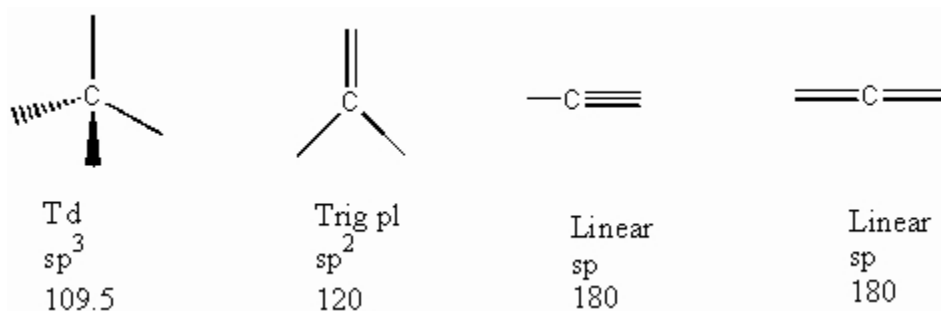
شکل ۱-۲- پیوند π بین دو اربیتال P

سه نوع پیوند بین اتم های کربن ممکن است وجود داشته باشد که عبارتند از:

الف- پیوند یگانه $C-C$ که هیبریداسیون آن از نوع SP^3 است، با طول پیوند 1.54 Å

ب- پیوند دوگانه $C=C$ که هیبریداسیون آن از نوع SP^2 است، با طول پیوند 1.3 Å

پ- پیوند سه گانه $C\equiv C$ که هیبریداسیون آن از نوع SP است، با طول پیوند 1.2 Å [۱] شکل (۳-۱).



شکل ۳-۱- انواع پیوندهای اتم های کربن

۳-۱- انواع شکل های کربن

کربن به چهار صورت مختلف در طبیعت یافت می شود، که همه این چهار فرم جامد هستند و در ساختار آنها، اتم های کربن به صورت کاملاً منظم در کنار یکدیگر قرار گرفته اند.

این ساختارها عبارتند از:

۱- گرافیت^۱

۲- الماس^۲

۳- فولرین^۳

۴- نانولوله^۱

¹.Graphite

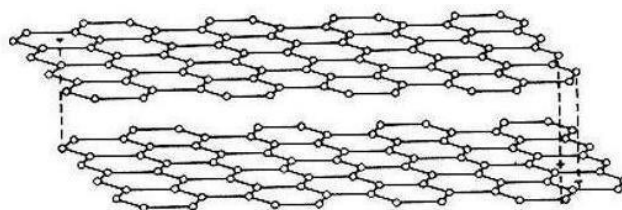
².Diamond

³.Fullerene

۱-۳-۱- گرافیت

کربن در نوع غیر بلورین آن اساساً گرافیت است، اما بصورت ساختارهای بزرگ بلورین وجود ندارد. این شکل کربن بیشتر بصورت پودر است که بخش اصلی موادی مثل ذغال چوب و سیاهی چراغ (دوده) را تشکیل می‌دهد. در فشار و دمای اتاق، کربن به شکل گرافیت، پایدارتر است، ساختار آن از قرار گرفتن شش اتم کربن در کنار یکدیگر به وجود آمده است. این اتم‌های کربن به گونه‌ای با یکدیگر ترکیب شده‌اند که هر اتم با سه اتم دیگر بصورت حلقه‌های شش وجهی - درست مثل هیدروکربنهای معطر - به هم متصل شده‌اند و یک شش ضلعی منتظم را پدید می‌آورند و از مجموع آنها صفحه‌ای به دست می‌آید که به عنوان یک لایه گرافیت در نظر گرفته می‌شود.

یک لایه تکی از گرافیت، یک ماده دو بعدی که نانوریون یا گرافن نامیده می‌شود را تشکیل می‌دهد. چنین کربنی همسانگرد و مانند شیشه محکم است. شکل (۱-۴) یک گرافیت را نشان می‌دهد.



شکل ۱-۴- گرافیت

اتمهای کربن در گرافیت با هم پیوندی از نوع sp^2 با طول پیوند 1.42 \AA دارند، که پیوندی از نوع سیگما است [۱].

ثابت شبکه یک کریستال گرافیتی برابر 2.4612 \AA است. ۱۲ همسایه نزدیک برای یک اتم مخصوص در داخل صفحه، در سه پوسته شش وجهی قرار دارند. سه همسایه اول در $r_1 = a$ ، و شش همسایه دوم در $r_2 = \sqrt{3}a$ و سه همسایه سوم در $r_3 = 2a$ هستند.

محورهای سه اوربیتال هیبریدی sp^2 در یک صفحه قرار دارند و به گونه‌ای به سه گوشه جهت گرفته‌اند که زوایای بین آنها 120° باشد. این مجموعه برای توصیف حالت پیوندی مولکولهای مثلثی مسطح که اتم

¹.Carbon Nanotube