بسم الله الرحمن الرحيم

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 جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته ی فیزیک گرایش حالت جامد

عنوان پایان نامه

اثر برهمکنش الکترون–فونون به صورت مدل هولشتاین روی خواص ترابری نانولوله های کربن زیگزاگ

استاد راهنما:

دکتر حامد رضانیا

نگارش:

مهناز آبتین

مهر ماه ۱۳۹۱

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک گرایش حالت جامد

خانم مهناز آبتین

تحت عنوان:

اثر برهمکنش الکترون–فونون به صورت مدل هولشتاین روی خواص ترابری نانولوله های کربن زیگزاگ

در تاریخ ۱۳۹۱/۷/۳۰ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه به تصویب نهایی رسید.

۱- استاد راهنما	دکتر حامد رضانیا	با مرتبه ی علمی استادیار	امضاء
۲- استاد داور داخل گروه	دکتر رستم مرادیان	با مرتبه ی علمی استاد	امضاء
۳- استاد داور داخل گروه	دکتر حمزه موسوی	با مرتبه ی علمی استادیار	امضاء

تقدیم به پدر و مادر مهربان و فداکارم

چکیده

هدف از این تحقیق بررسی رفتار دمایی ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های تک جداره زیگزاگ با تغییرات دما وشعاع نانولوله و شدت برهمکنش الکترون- فونون می‌باشد.جهت بررسی دینامیک الکترون در بلور از مدل هولشتاین که معادل برهمکنش الکترون- فونون اپتیکی، انرژی جنبشی فونون‌ها و مدل تنگ بست است استفاده می‌شود. برای یافتن ضریب هدایت حرارتی از روش تابع گرین و نظریه پاسخ خطی کوبو و از تقریب دوم اختلال برای محاسبه خودانرژی استفاده شده است. در این پایان نامه همچنین چگالی حالت برهمکنشی برای نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر بررسی می‌شود.

فهرست

عنوان **صفحه**

فصل اول : مقدمه

۱-۱-مقدمه ۲

۱-۲- کربن واربیتالهای پیوندی ۳

۱-۳- انواع شکل های کربن ۶

۱-۳-۱- الماس ۷

۱-۳-۲- گرافیت ۸

۱-۳-۳- فولرین ۹

۱-۳-۴- نانولوله ۱۰

۱-۴- نانولوله های کربنی ۱۱

۱-۴-۱- انواع نانولوله های کربنی ۱۲

۱-۴-۲- ساختارهندسی نانولوله های کربنی تک دیواره ۱۴

۱-۴-۳- روش های تولید نانولوله های کربنی ۱۷

۱-۴-۴- ویژگی های نانولوله های کربنی ۱۸

۱-۴-۵- کاربردهای نانولوله های کربنی ۲۲

فصل دوم: مدل هامیلتونی برهمکنش الکترون-فونون هولشتاین و توابع گرین الکترونی

۲-۱- مقدمه ۲۸

۲-۲- انوع مدل‌های بس ذره‌ای و دلیل استفاده از این رهیافت ۲۸

۲-۳- هامیلتونی مدل تنگ بست و هولشتاین برای گرافن ۲۹

۲-۳-۱ - هامیلتونی مدل تنگ بست ۲۹

۲-۳-۲- جمله برهمکنشی در هامیلتونی مدل هولشتاین ۳۲

۲-۴ تابع گرین و نمایش آن در فیزیک بس ذره‌ای ۳۵

۲-۴-۱ محاسبه توابع گرین نابرهمکنشی در پایه‌های مختلف شبکه لانه زنبوری ۳۷

۲-۵ محاسبه نمایش زمانی موهومی تابع گرین فونونی ۴۲

۲-۶ محاسبه تابع گرین برهمکنشی ۴۳

فصل سوم: محاسبه ضریب هدایت گرمایی بر حسب توابع گرین الکترونی

۳-۱-مقدمه ۴۹

۳-۲-محاسبه ضریب هدایت گرمایی ۵۰

فصل چهارم: نتایج

۴-۱-مقدمه ۵۹
۴-۲-۱- رسم نمودار چگالی حالات نابرهمکنشی و برهمکنشی زیگزاگ ۵۹
۴-۲-۲- چگالی حالت برهمکنشی نانولوله زیگزاگ فلزی برای ضریب برهمکنش ثابت
در دماهای مختلف ۶۲
۴-۲-۳-مقایسه چگالی حالات نابرهمکنشی و برهمکنشی برای شعاع های مختلف
فلزی ۶۳
۴-۲-۴- رسم نمودار چگالی حالات نابرهمکنشی و برهمکنشی نانولوله آرمچیر ۶۴
۴-۳-ضریب وزن برانگیختگی تک ذره‌ای برای نانولوله زیگزاگ ۶۶
۴-۴- بررسی ضریب هدایت گرمایی برای نانولوله زیگزاگ ۶۷
۴-۴-۱-بررسی ضریب هدایت گرمایی نانولوله فلزی با تغییر ضریب برهمکنش ۶۷
۴-۴-۲- بررسی ضریب هدایت گرمایی نانولوله فلزی با تغییر شعاع ۶۸
پیوست ۶۹
منابع ۷۸

فهرست اشکال

شکل **صفحه**

شکل ۱-۱- اربیتال های هیبریدی ۵
شکل۱-۲- پیوند π بین دو اربیتال P ۵
شکل ۱-۳- انواع پیوندهای اتم های کربن ۶
شکل۱-۶- ساختار الماس ۷
شکل۱-۷- اربیتالهای الماس ۷
شکل۱-۴- گرافیت ۸
شکل۱-۵- شمایی از اربیتال های گرافیت ۹
شکل۱-۸- ساختار فولرینC_{60} ۱۰
شکل ۱-۹- نوع پیوند در نانولوله ی کربنی ۱۱
شکل۱-۱۰- (a) نانولوله کربنی تک دیواره (b) نانولوله کربنی چند دیواره ۱۲
شکل ۱-۱۱- لوله کردن یک لایه گرافن و ایجاد نانولوله ۱۳
شکل۱-۱۲- ۱۳
شکل۱-۱۳- نانوهورن کربنی تک دیواره ۱۴
شکل ۱-۱۴- ۱۴
شکل ۱-۱۵- شبکه شش گوشی و بردارهای پایه a_1 و a_2 ۱۵
شکل ۱-۱۶- الگوی قرارگیری اتم های کربن در امتداد محیط نانولوله زیگزاگ و آرمچیر ۱۶
شکل ۱-۱۷- مقادیر محاسبه شده برای هدایت حرارتی نانولوله با (نمودار خط ممتد)، هدایت حرارتی صفحه‌ی گرافن با(نمودار خط و نقطه ای) و گرافیت با (نمودار خط چین) نشان داده شده است ۲۱
شکل ۱-۱۸- مقادیر رسانایی حرارتی محاسبه شده برای یک نانولوله‌ی کربنی تک دیواره در دماهای مختلف
شکل۲-۱. شبکه مستقیم لانه زنبوری که δ و δ' شناسه پایه‌ها و بردارهای Δ فاصله بین یاخته های همسایه با یاخته مرکزی را نشان می‌دهند ۳۰
شکل ۳-۱:شبکه مستقیم لانه زنبوری با نمایش مکان δ_1 و δ_2و δ_3 ۵۳
شکل۴-۱- نمودار چگالی حالت(انرژی) نابرهمکنشی نانولوله(۰و۹) برحسب انرژی الکترون ۶۰
شکل۴-۲- نمودار چگالی حالت(انرژی) نابرهمکنشی نانولوله(۰و۱۳) برحسب انرژی الکترون ۶۰
شکل۴-۳- نمودار چگالی حالت(انرژی) برهمکنشی نانولوله(۰و۱۵) برحسب انرژی الکترون ۶۱
شکل۴-۴- نمودار چگالی حالت(انرژی) برهمکنشی نانولوله(۰و۱۶) برحسب انرژی الکترون ۶۱
شکل۴-۵- نمودار چگالی حالت(انرژی) برهمکنشی نانولوله(۰و۱۵) در دماهای ۶۲

شکل۴-۶- نمودار چگالی حالت(انرژی) نابرهمکنشی نانولوله زیگزاگ با شعاع‌های ۶۳
شکل۴-۷- نمودار چگالی حالت(انرژی) برهمکنشی نانولوله زیگزاگ با شعاع‌های ۶۴
شکل۴-۸- نمودار چگالی حالت(انرژی) نابرهمکنشی نانولوله آرمچیر(۹و۹) برحسب انرژی الکترون ۶۵
شکل۴-۹- نمودار چگالی حالت(انرژی) برهمکنشی نانولوله آرمچیر(۹و۹) با تغییرات ۶۵
شکل۴-۱۰- نمودار ضریب وزن برانگیختگی تک ذره‌ای نانولوله (۰و۱۵) برحسب ۶۶
شکل۴-۱۱- نمودار ضریب هدایت گرمایی برهمکنشی نانولوله (۰و۹) ۶۷
شکل۴-۱۲- نمودار ضریب هدایت گرمایی نابرهمکنشی نانولوله زیگزاگ ۶۷
شکل۴-۱۳- نمودار ضریب هدایت گرمایی برهمکنشی نانولوله زیگزاگ باتغییرات ۶۸
شبکه مستقیم لانه زنبوری ۶۹
شبکه وارون لانه زنبوری ۷۰

فصل اول

مقدمه

۱-۱-مقدمه

در دو دهه اخیر،پیشرفتهای تکنولوژی در وسایل ومواد با ابعاد بسیار کوچک بدست آمده است و به سوی تحولی فوق العاده که تمدن بشر را تا پایان قرن دگرگون خواهد کرد،پیش می رود. امروزه نانوتکنولوژی را یک عامل تاثیرگذار در علم، فناوری و صنعت می‌شناسند و آن را اساسی ترین فناوری در دسترس بشر به حساب می آورند که قادر است در دهه های آینده تحول عظیمی در زندگی جوامع انسانی ایجاد کند. نانوتکنولوژی، توانمندی تولید مواد، ابزارها و سیستمهای جدید با در دست گرفتن کنترل در سطوح مولکولی و اتمی را دارد.

در واقع نانوتکنولوژی فناوری جدیدی است که تمام دنیا را فرا گرفته است و به تعبیرِ دقیق تر " نانوتکنولوژی بخشی از آینده نیست بلکه همه آینده است" . همچنین نانوتکنولوژی یک رویکردی جدید در تمامی رشته هاست.

نانوتکنولوژی، در حوزه های مختلف از غذا، دارو، تشخیص پزشکی و بیوتکنولوژی گرفته تا الکترونیک، کامپیوتر، ارتباطات، حمل‌ونقل، انرژی، محیط زیست، مواد، هوافضا و امنیت ملی اثر می گذارد و سلامتی و رفاه مردم را بالا می برد. کاربردهای وسیع این عرصه به همراه پیامدهای اجتماعی، سیاسی و حقوقی آن، این فناوری را حائز اهمیت قرار داده 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[1] متخصص کوانتوم نظری و دارنده جایزه نوبل، درسخنرانی معروف خود با عنوان « فضای زیادی درسطوح پایین وجود دارد» اساس تفکر کوچک شدن اجسام بزرگ صنعتی را ایجاد و به دنبال آن، در اواسط دهه ۷۰ ، اریک درکسلر[2] ، نسبت به وسایل بسیار کوچک فاینمن علاقمند شده بود و قصد داشت تا در مورد تواناییهای آنها به کاوش بپردازد و نام "نانوتکنولوژی" را بر ایده های جدید خود که برگرفته از نظر فاینمن بود انتخاب کرد.

[1]-Richard Feynman
[2]-Eric Drexler

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 کوچک تر از قطر موی سرانسان است.

خواص موجی شکل (مکانیک کوانتومی) الکترونهای داخل ماده و اثر متقابل اتمها با یکدیگر، از جابه جایی مواد در مقیاس نانومتر اثر می پذیرند، به همین دلیل این مقیاس طول اینقدر مهم است. با تولید ساختارهایی در مقیاس نانومتر، امکان کنترل خواص ذاتی مواد، ازجمله 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 می‌شود که پیش از این میسر نبود.

کربن یکی از عناصر طبیعی است که در شکل های مختلف در طبیعت وجود دارد ونام نانوساختار های کربنی، امروزه، در اکثر زمینه ها ی پژوهشی و تحقیقاتی و حتی کاربردی بسیار به گوش می خورد. در این فصل به معرفی کربن و انواع ساختار های آن می پردازیم و نانولوله های کربنی را از نظر انواع ساختارها، روش های تولید، خواص و ویژگی‌ها و کاربرد های کنونی بررسی می‌کنیم.

۱-۲- کربن واربیتالهای پیوندی

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

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

[1] - valence
[2]-Elongated Barbell

والانس قابل استفاده باشد. این تغییر حالت آرایش الکترونی، بوسیله فرآیند شناخته شده ی هیبریداسیون[1] 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.

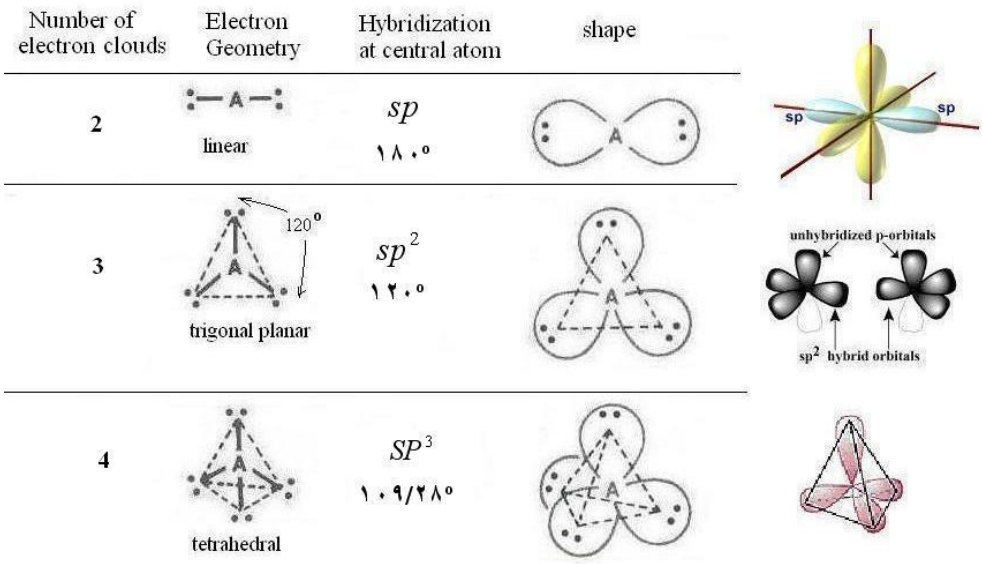
در زیر سه نوع اربیتال هیبریدی را معرفی می‌کنیم:

اگراربیتال هیبریدی از یک اربیتال $2s$ و سه اربیتال $2p$ تشکیل شده باشد، آنگاه چهاراربیتال 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 چهاراربیتال هیبریدی $2sp^3$ خواهیم داشت. هر اربیتال $2sp^3$ در این مورد در چهار گوشه یک چهار وجهی قرار می گیرد. باید توجه داشت که چنانچه اتم کربن را در مرکز یک مکعب در نظر بگیریم، این چهار اربیتال هیبریدی در راستای مرکز مکعب به رأس‌های 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 $2sp^2$ و یک الکترون آزاد غیرهیبریدی، 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 غیرجایگزیده باقی می ماند هر کدام از سه الکترون اربیتال هیبریدی $2SP^2$ یک آرایش مثلثی دارند، که در یک صفحه دوبعدی، 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 (غیرهیبریدی) که در اربیتال $2p$ قرار دارد، و دو اربیتال هیبریدی $2sp$اشغال می شود [۱] شکل(۱-۱).

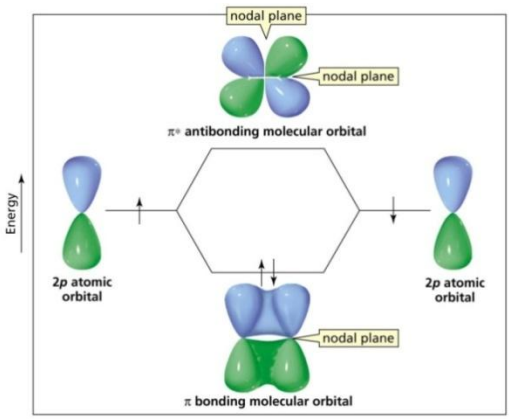
[1]-Hybridization



شکل ۱-۱- اربیتال های هیبریدی

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.



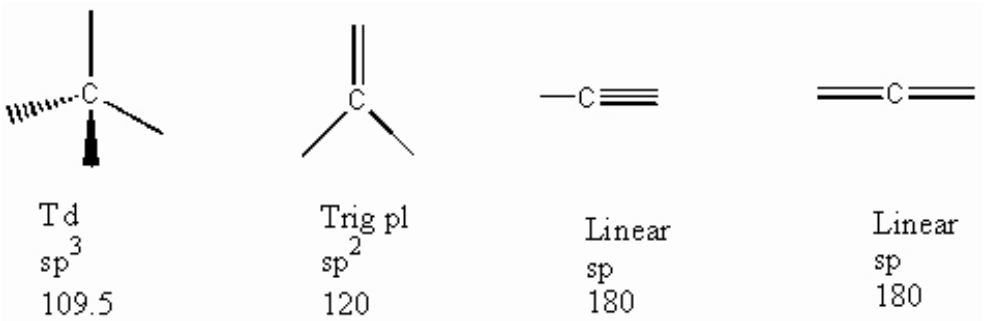
شکل۱-۲- پیوند π بین دو اربیتال P

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 (۱-۳).



شکل ۱-۳- انواع پیوندهای اتم های کربن

۱-۳- 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، اتم‌های کربن به صورت کاملاً منظم در کنار یکدیگر قرار گرفته‌اند.

این ساختارها عبارتند از:

۱- الماس[۱]

۲- گرافیت[۲]

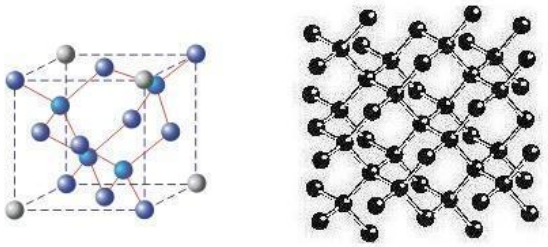
۳- فولرین[۳]

۴- نانولوله[۴]

[1]- Diamond
[2]- Graphite
[3]-Fullerene
[4]-Carbon Nanotube

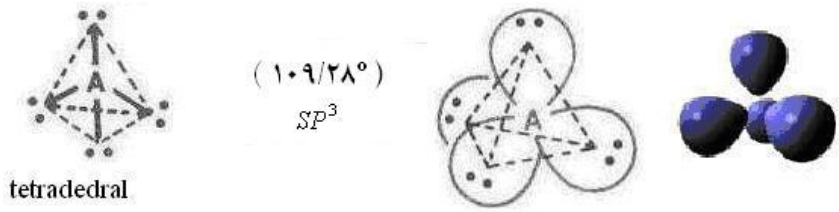
۱-۳-۱- الماس

کربن در دما و فشارهای خیلی بالا، به صورت الماس پایدار است. شکل(۱-۶) ساختار الماس را نشان می-دهد.



شکل ۱-٦- ساختار الماس

الماس یک کربن چند شکلی است. در الماس، اربیتال‌های هیبریدی اتمهای کربن با پیوند sp^3 در طرح ۴ وجهی به سوی گوشه های یک چهار وجهی منتظم جهت گیری می کنند و هر اتم کربن با ۴ تا از نزدیکترین همسایه هایش ۴ پیوند یگانه سیگما به طول ۱/۵۴ Å دارد. شبکه الماس یک شبکه سه بعدی است که ثابت شبکه ۳/۵۶۷۰ Å و زاویه بین پیوندهایش ^{o}۱۰۹/۲۸ است. الماس دارای گاف انرژی در حدود eV ۵/۴ است. شکل(۱-۷) چگونگی قرار گرفتن اربیتالهای الماس را نشان می دهد.



شکل ۱-۷- اربیتالهای الماس

ساختار چهاروجهی و چگالی بار بالا در الماس، پیوندهایی با استحکام خیلی زیاد ایجاد می کند. در الماس بین هر دو کربن، پیوند کووالانسی بسیار شدیدی وجود دارد. در اینجا دیگر نیروی واندروالسی وجود ندارد[۱].

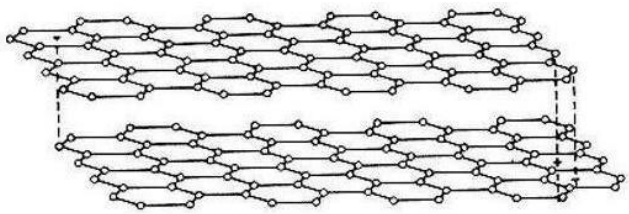
الماس عایق الکتریسیته است، به سبب نیروی پیوندهای کربن– کربن سخت ترین جسم از نظر مقاومت در برابر سایش به شمار می رود. تبدیل الماس به گرافیت در حرارت اتاق به قدری کند است که محسوس

نیست. الماس جهت تزئین(به عنوان ماده‌ای زیبا و کمیاب) ونیز در مته‌ها و سایر کاربردهایی که سختی آن مورد نظر است، کاربرد دارد.

۱-۳-۲- گرافیت

کربن در نوع غیر بلورین آن اساساً گرافیت است. 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 قرارگرفتن شش اتم کربن در کنار یکدیگر به وجود آمده است. این اتم های کربن به گونه ای با یکدیگر ترکیب شده اند که هر اتم با سه اتم دیگر بصورت حلقه‌های شش وجهی به هم متصل شده‌اند و یک شش ضلعی منتظم را پدید می آورند و از مجموع آنها صفحه ای به دست می آید که به عنوان یک لایه گرافیت در نظر گرفته می شود.

یک لایه تکی از گرافیت، یک ماده دو بعدی که گرافن نامیده می شود را تشکیل می دهد. شکل(۱-۴) یک گرافیت را نشان می دهد.



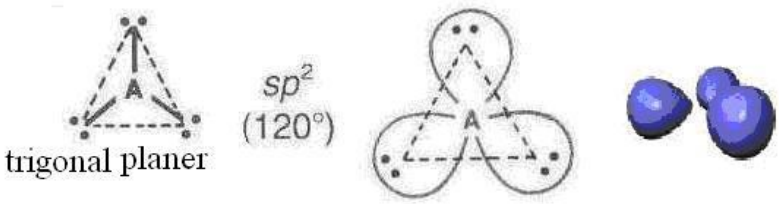
شکل ۱-٤- گرافیت

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

ثابت شبکه یک کریستال گرافیتی برابر Å 2.4612 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 گرفته اند که زوایای بین آنها ۱۲۰° باشد. این مجموعه برای توصیف حالت پیوندی مولکولهای مثلثی مسطح که اتم

مرکزی آنها سه جفت الکترون غیرپیوندی دارد (مانند BF_3) بکار برده می شود. شکل(۱-۵) شمایی از اربیتال های گرافیت را نشان می دهد.



شکل۱-۵- شمایی از اربیتال های گرافیت

گرافیت بر خلاف الماس رسانای الکتریسیته است. این ماده نرم بوده و ورقه های آن که اغلب به وسیله اتمهای دیگر تفکیک شده‌اند، تنها به وسیله نیروهای واندروالس به هم چسبیده‌اند به گونه‌ای که به راحتی یکدیگر را کنار می زنند. اتم‌های کربن با پیوندهای کووالانسی ـ که پیوندی قوی و محکم است ـ به یکدیگر متصل شده‌اند. لازم به ذکر است که اتم های کربن به کار رفته در یک لایه گرافیت نمی توانند با کربنی خارج از این لایه پیوند کووالانسی بدهند. بنابراین یک لایه گرافیت از طریق پیوندهای واندروالس ـ که پیوندهایی ضعیف هستند و به راحتی شکسته می شوند ـ به لایه زیرین متصل می شود. این مساله باعث می شود که صفحه‌های گرافیت به راحتی روی یکدیگر بلغزند به همین دلیل از این ترکیب در روغن کاری و روان کاری استفاده می شود. علت نرمی نوک مداد نیز همین نکته می باشد. گرافیت در ترکیب با خاک رس به‌عنوان مغز مداد بکار می رود. چگالی گرافیت در دمای ۳۰۰ K و فشار $1atm$ برابر $\rho = ۲/۲۶\ g/cm^3$ است.

۱-۳-۳- فولرین

از سال ۱۹۸۵، با کشف آلوتروپهای جدیدی از کربن به نام فولرین‌ها،(از آزمایشات پرتو مولکولی)، تحولی عظیم درعلوم پایه و مهندسی به وجود آمد، که کشف آن امکان تولید گسترده ای از ساختارهای کربن با اندازه ها، شکل ها و بعدهای مختلف را اثبات کرد[۲]. فولرین ها که مولکولهایی از کربن در حالت هیبریدی sp^2، متشکل از ۶۰ اتم کربن می باشند، مانند یک توپ فوتبال به نظر می رسند. شکل(۱-۸) ساختار یک فولرین را نمایش می دهد.