دانشگاه پیام نور

دانشکده: علوم پایه

نام مرکز: پیام نور مرکز تهران

پایان نامه

برای دریافت مدرک کارشناسی ارشد

رشته: فیزیک

گروه: فیزیک

عنوان پایان نامه:

بررسی خواص اپتیکی نانولوله های کربنی و گالیم نیتریدی با استفاده از روش تابعی چگالی

مولف:

فاطمه قربانی آوارسی

استاد راهنما:

دکتر علی اصغر شکری

بهمن ۹۰

بسم الله الرحمن الرحيم

جمهوری اسلامی ایران
وزارت علوم تحقیقات و فناوری

مجتمع علوم پایه و کشاورزی

دانشگاه پیام نور
دانشگاه پیام نور استان تهران
العلم علل لولیک الفرج والعافیه والنصر

شماره .....
تاریخ .....
پیوست .....

صورتجلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

جلسه دفاع ازپایان نامه کارشناسی ارشد خانم فاطمه قربانی آوارسی

د انشجوی رشته فیزیک حالت جامد به شماره دانشجویی۸۸۰۳۲۲۴۹۵

تحت عنوان:

" بررسی خواص اپتیکی نانو لوله های کربنی و گالیم نیتریدی با استفاده از روش تابعی چگالی "

جلسه دفاع با حضور داوران نامبرده ذیل درروز شنبه مورخ ۱۱/۰۸/ ۱۳۹۰ ساعت۱۱الی۱۲درمحل مرکز تهران شرق برگزار شد. و پس از بررسی پایان‌نامه مذکور با نمره به عدد...۱۹.۰۰... به حروف .....نوزده و هیجده صحیح..... و با درجه ارزشیابی.....عالی.....مورد قبول واقع شد☑ نشد☐

ردیف	نام و نام خانوادگی	هیات داوران	مرتبه دانشگاهی	دانشگاه/ موسسه	امضاء
۱	دکتر علی اصغر شکری	استاد راهنما	دانشیار	پیام نور	
۲	دکتر افشین نمیرانیان	استاد داور	استادیار	علم و صنعت	
۳	دکتر سیدعلی هاشمی زاده عقدا	نماینده علمی و تحصیلات تکمیلی گروه	استادیار	پیام نور	

تهران، خیابان استاد نجات اللهی
خیابان شهید فلاح پور، پلاک ۲۷
تلفن: ۸۸۸۰۰۲۵۲
دورنگار: ۸۸۳۱۹۴۷۵
WWW.TPNU.AC.IR
science.agri@tpnu.ac.ir

اینجانب **فاطمه قربانی آوارسی** دانشجوی ورودی سال ۱۳۸۸ مقطع کارشناسی ارشد رشته فیزیک گواهی می نمایم چنانچه در پایان نامه خود از فکر، ایده و نوشته دیگری بهره گرفته ام با نقل قول مستقیم یا غیر مستقیم منبع و ماخذ آن را نیز در جای مناسب ذکر کرده‌ام . بدیهی است مسئولیت تمامی مطالبی که نقل قول دیگران نباشد بر عهده خویش می دانم و جوابگوی آن خواهم بود.

دانشجو تأیید می نماید که مطالب مندرج دراین پایان نامه(رساله) نتیجه تحقیقات خودش می باشد و در صورت استفاده از نتایج دیگران مرجع آن را ذکر نموده است.

فاطمه قربانی آوارسی

تاریخ و امضاء

اینجانب **فاطمه قربانی آوارسی** دانشجوی ورودی سال ۱۳۸۸ مقطع کارشناسی ارشد رشته فیزیک گواهی می نمایم چنانچه براساس مطالب پایان نامه خود اقدام به انتشار مقاله، کتاب، و ... نمایم ضمن مطلع نمودن استاد راهنما، با نظر ایشان نسبت به نشر مقاله، کتاب، و ... و به صورت مشترک و با ذکر نام استاد راهنما مبادرت نمایم.

فاطمه قربانی آوارسی

تاریخ و امضاء

کلیه حقوق مادی مترتب از نتایج مطالعات ، آزمایشات و نوآوری ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه متعلق به دانشگاه پیام نور می باشد.

بهمن ۹۰

تقدیم به:

پدر و مادر عزیزم که در تهیه این پایان نامه دلسوزانه مرا یاری نمودند

تقدیر و تشکر

با تشکر از زحمات بی‌پایان پدر و مادر عزیزم و کمک‌های بی‌دریغ جناب آقای دکتر خزایی، دکتر بنام و آقای پرتوی آذر.

چکیده

در این پایان‌نامه، خصوصیات اپتیکی فاز جدیدی از ماده گالیم نیترید (GaN) به شکل نانولوله را با استفاده از محاسبات تابعی چگالی (DFT) بررسی می‌کنیم. ساختار نانولوله گالیم نیترید مانند نانولوله کربنی پایدار و تحت شرایطی قابل سنتز می‌باشد. از آنجایی که نانولوله بورون نیترید و بورون کربن نیترید قبلاً به وسیله روش قوس الکتریکی در تجربه مشاهده شده است انتظار می‌رود که سنتز نانولوله نیتریدی دیگری مانند کربن نیترید (BN) و گالیم نیترید نیز ممکن شود. همچنین نوع فلزی و نیم‌رسانا بودن و گاف انرژی آنها نیز قابل اسخراج و قابل مقایسه با انواع نانولوله کربنی باشد. برای بررسی خصوصیات فوق از نرم‌افزار محاسباتی SIESTA[1] استفاده می‌کنیم که در آن از رهیافت تابعی چگالی خودسازگار که از شبه‌پتانسیل‌های بهنجار در شکل غیرموضعی کلیمن- بیلندر[2] و ترکیب خطی عددی از مجموعه پایه‌های اربیتال اتمی استفاده می‌شود. برای برهمکنش‌های تبادلی و همبستگی از تقریب چگالی اسپین موضعی (LSD) و یا تقریب گرادیان تعمیم‌یافته (GGA) استفاده می‌کنیم. از جمله مزایای این نرم‌افزار اجرای آن در محیط Linux بوده که در آن از یک مجموعه بردار موج تخت به عنوان پایه برای تعیین انرژی سیستم و حل معادلات کوهن- شم استفاده می‌کند. سپس با در نظر گرفتن یاخته واحد نانولوله‌گالیم نیترید تک دیواره و همچنین پارامترهای اولیه آنها، خصوصیات الکترونی مانند چگالی حالات الکترونی، ساختار نوار انرژی و توزیع بار الکترونی را تعیین می‌کنیم. چنین خصوصیاتی می‌توانند برای طراحی ادوات الکترونیک در مقیاس نانو به دلیل کنترل روی خواص الکترونی آنها مفید باشند.

واژگان کلیدی: ساختار الکترونی، خواص اپتیکی، چگالی حالات، اصول اولیه، نانولوله‌های کربنی، نانولوله‌های گالیم نیترید.

[1] Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms (SIESTA)
[2] Kleinman-Bylander

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل ۱: مقدمه..... ۱

۱-۱- پیشگفتار..... ۲

۱-۲- تعریف برفناوری نانو..... ۲

۱-۳- نانولوله کربنی..... ٦

۱-۳-۱- ساختمان اتم کربن..... ٦

۱-۳-۲- ایزومرهای کربن..... ۷

۱-۳-۳- گرافیت..... ۸

۱-۳-٤- تاریخچه نانولوله‌های کربنی..... ۱۱

۱-۳-۵- ساختار نانولوله‌های کربنی..... ۱۱

۱-۳-٦- فرآیند تشکیل پیوند در نانولوله کربنی..... ۱٦

۱-۳-۷- خصوصیات فیزیکی و شیمیایی نانولوله کربنی..... ۱٦

۱-۳-۸- خواص نوری نانولوله‌های کربنی..... ۱۷

۱-۳-۹- روش‌های ساخت نانولوله‌های کربنی..... ۱۹

۱-٤- نانولوله‌های گالیم‌نیتریدی..... ۲۱

۱-٤-۱- ساختمان اتم‌های نیتروژن و گالیم..... ۲۱

۱-٤-۲- تاریخچه نانولوله‌های گالیم‌نیتریدی..... ۲۳
۱-٤-۳- ساختار نانولوله‌های گالیم‌نیتریدی..... ۲٤
۱-٤-٤- فرآیند فرآیند تشکیل پیوند در نانولوله‌های گالیم‌نیتریدی..... ۲۵
۱-٤-۵- خصوصیات فیزیکی و شیمیایی نانولوله گالیم‌نیتریدی..... ۲۵
۱-٤-٦- خواص نوری نانولوله‌های گالیم‌نیتریدی..... ۲٦
۱-۳-۷- روش‌های ساخت گالیم‌نیتریدی..... ۲۷
فصل ۲: نظریه تابعی چگالی..... ۲۹
۲-۱- پیشگفتار..... ۳۰
۲-۲- تقریب بورن- اپنهایمر..... ۳۱
۲-۳- تقریب هارتری..... ۳٤
۲-٤- تقریب هارتری- فوک..... ۳۵
۲-۵- تئوری توماس- فرمی..... ۳٦
۲-٦- نظریه‌ی تابعی چگالی..... ۳۷
۲-٦-۱- تئوری هوهنبرگ- کوهن..... ۳۸
۲-٦-۱-۱- معادله کوهن- شم..... ٤۰
۲-٦-۱-۲- انرژی کل..... ٤۲
۲-٦-۱-۳- تقریب‌هایی برای محاسبه $E_{xc}[n]$..... ٤۲

۲-٦-۱-٤- تقریب چگالی محلی یا موضعی *LDA* ٤٢
۲-٦-۱-٥- تابع تصحیح گرادیانی *GGA* ٤٣
۲-۷- نقاط قوت *DFT* ٤٤
۲-۸- نقاط ضعف *DFT* ٤٥
۲-۹- روش بستگی قوی ٤٥
فصل ۳: محاسبات اپتیکی ٤٦
۳-۱- پیشگفتار ٤٧
۳-۲- نوارهای انرژی ٤٧
۳-۳- ویژگی‌های اپتیکی در فلزات ٤٨
۳-۳-۱- نظریه ماکروسکوپی ثابت‌های اپتیکی مواد مشابه ٤٨
۳-۳-۲- رابطه موضعی بین رسانندگی و ثابت‌های اپتیکی ٥١
۳-۳-۳- تئوری درود درباره ویژگی‌های اپتیکی حاملین آزاد ٥٥
۳-٤- ویژگی‌های اپتیکی در نیمرساناها و عایق‌ها ٦١
۳-٤-۱- گذارهای میان‌نواری الکترونی ٦١
۳-٤-۲- بیان کوانتومی تابع دی‌الکتریک عرضی در مواد ٦٣
۳-٤-۳- ثابت‌های اپتیکی ماده همسانگرد در تئوری پاسخ خطی ٨٠
۳-٤-٤- تابع رسانندگی عرضی و گذارهای درون‌نواری ٦٩

۳-٤-۵- تئوری کوانتومی گذارهای اپتیکی نوار به نوار و نقاط بحرانی..... ۷۰

۳-۵- روابط کرامرز- کرونیگ..... ۷۳

فصل ٤: بررسی خواص اپتیکی نانولوله‌های کربنی و گالیم‌نیتریدی..... ۷۷

٤-۱- پیشگفتار..... ۷۸

٤-۲- مراحل همگرایی در نانولوله کربنی و گالیم‌نیتریدی..... ۷۸

٤-۲-۱- همگرایی ثابت شبکه..... ۷۹

٤-۲-۲- همگرایی منخورست- پک..... ۸۰

٤-۲-۳- همگرایی انرژی قطع..... ۸۱

٤-۳- ثابت‌های اپتیکی نانولوله کربنی $(5,5)$ ۸۲

٤-۳-۱- تابش موازی با محور اصلی لوله..... ۸۲

٤-۳-۱-۱-بخش موهومی تابع دی‌الکتریک ε_2 ..... ۸۶

٤-۳-۱-۲-بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک ε_1 ..... ۸۹

٤-۳-۱-۳- ضریب جذب $\alpha(\omega)$ ۹۱

٤-۳-۱-٤-بازتابندگی R ۹۳

٤-۳-۱-۵-ضریب خاموشی $k(\omega)$ ۹٤

٤-۳-۱-۶-شاخص شکست $n(\omega)$ ۹۵

٤-۳-۱-۷-رسانندگی اپتیکی..... ۹۷

٤-٣-٢- تابش عمود بر محور اصلی لوله..... ٩٨
٤-٤- ثابت‌های اپتیکی نانولوله گالیم‌نیتریدی (5 و 5)..... ١٠٣
٤-٤-١- تابش موازی با محور اصلی لوله..... ١٠٣
٤-٤-١-١- بخش موهومی تابع دی‌الکتریک ε_2..... ١٠٥
٤-٤-١-٢- بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک ε_1..... ١٠٨
٤-٤-١-٣- ضریب جذب $\alpha(\omega)$ ١٠٩
٤-٣-١-٤- بازتابندگی R..... ١١٠
٤-٤-١-٥- ضریب خاموشی $k(\omega)$..... ١١١
٤-٤-١-٦- شاخص شکست $n(\omega)$..... ١١٢
٤-٤-١-٧- رسانندگی اپتیکی..... ١١٤
٤-٤-٢- تابش عمود بر محور لوله..... ١١٥
فصل ٥: نتیجه‌گیری و پیشنهاداتی برای ادامه کار..... ١٢٠
٥-١- مقایسه ثابت‌های اپتیکی در نانولوله‌های کربنی و گالیم‌نیتریدی..... ١٢١
٥-٢- پیشنهاداتی برای ادامه کار..... ١٢١
پیوست..... ١٢٣
مراجع..... ١٣٠

فصل اول

مقدمه

۱-۱- پیشگفتار

یک نانومتر یک هزارم میکرون است و اگر بخواهیم احساس فیزیکی نسبت به آن داشته باشیم

می‌توان گفت که یک نانومتر ۱/۸۰۰۰ قطرموی انسان می‌باشد اما این تعریف مقیاس نانو، نمی‌تواند مقایسه درستی باشد چرا که ضخامت موی انسان باتوجه خصوصیات فردی هرانسان از چند ده میکرومتر تا چند صدمیکرومتر متغیر می‌باشد.بنابراین نیاز به یک استاندارد برای بیان مفهوم مقیاس نانو وجود دارد. با ایجاد ارتباط میان اندازه اتم‌ها و مقیاس نانو می‌توان یک نانومتر را راحت‌ترتصورکرد. یک نانومتر برابر قطر ۱۰ اتم هیدروژن و یا۵ اتم سیلسیم می‌باشد. درک این موضوع برای افراد معمولی نیز راحت‌تر می‌باشد. علی‌رغم اینکه درک اندازه یک اتم برای افراد غیرعلمی ساده نمی‌باشد، با این‌حال اندازه دقیق اتم برای فهماندن این مقیاس زیاد اهمیت ندارد. چیزی که با این تشابه مشخص می‌شود، این است که نانوفناوری عبارت است از دستکاری کوچکترین اجزای ماده یا اتم، فناوری نانو عبارت است از هنر دستکاری مواد در مقیاس اتمی یا مولکولی و به خصوص ساخت قطعات و لوازم میکروسکوپی مانند روبات‌های میکروسکپی، فناوری- نانو فناوری بر پایه دستکاری تک‌تک اتم‌ها و مولکول‌ها استوار است بدین منظور که بتوان ساختاری پیچیده را با خصوصیات اتمی تولید کرد.

۱-۲-تعریف فناوری نانو

تعاریف مختلفی برای فناوری نانو ارائه شده‌است که به سه تعریف از مهمترین آن‌ها می‌پردازیم.

۱. توسعه و استفاده از ادوات و قطعاتی که اندازه آنها تنها چند نانومتر است. تحقیق بر روی قطعات و ادوات بسیار کوچک که خواصشان به خواص الکترونیکی این قطعات وابسته است و خواص الکتریکی آنها احتمالاً متأثر از حرکت تعداد معدودی الکترون در طی عملکرد قطعه می‌باشد. این ادوات، سریع‌تر از ادوات بزرگتر عمل می‌کنند. مسئله قابل توجه این است که می‌توان چنین ساختارهای در ابعاد مولکولی را

به کمک انتخاب مناسب مراحل واکنش‌های شیمیایی تولید کرد. همچنین می‌توان چنین ساختارهایی را از طریق دستکاری اتم‌ها روی سطح به وسیله میکروسکوپ‌های نیروی اتمی بدست آورد (سایت نانو تکنولوژی).

۲. شاخه‌ای از علوم که هدف نهایی آن کنترل بر روی تک‌تک اتم‌ها و مولکول‌ها می‌باشد تا بتوان به کمک آن تراشه‌های کامپیوتری و سایر ادواتی تولید کرد که هزاران بار کوچکتر از ادوات فعلی باشند که فناوری امروز امکان ساخت آنها را برای ما فراهم آورده است. در فناوری فعلی تولید مدارات نیمه هادی از روش لیتوگرافی برای ایجاد طرح مدار بر روی مواد نیمه هادی استفاده می‌شود. پیشرفت شگرفی که در لیتوگرافی طی دو دهه اخیر رخ داده است به ما این امکان را می‌دهد که با بهره‌گیری از دستگاه‌های جدید بتوانیم مداراتی کوچکتر از ۱ میکرون (۱۰۰۰نانومتر) را تولید کنیم. البته باید توجه داشت که این مدارات هنوز از میلیون‌ها اتم تشکیل شده‌اند. بیشتر دانشمندان بر این باور هستند که لیتوگرافی به مرزهای محدودکننده فیزیکی خود نزدیک شده است. بنابراین برای کوچکتر کردن اندازه نیمه‌هادی‌ها می‌بایست از فناوری‌های جدیدی که می‌توانند تک‌تک اتم‌ها را سازماندهی کنند، استفاده کرد و طبعاً چنین فناوری جزء محدوده فناوری نانو محسوب می‌شود. اگر چه تحقیق در زمینه فناوری نانو به زمانی باز می‌گردد که ریچاردپی فاینمن[1] طی سخنرانی کلاسیک خود در سال ۱۹۵۹ به این فناوری اشاره کرد اما عبارت فناوری نانو اولین بار توسط کی‌اریک درکسلر[2] در سال ۱۹۸٦ در کتابی از وی با عنوان موتورهای آفرینش بسط داده شد. در مقالات و نوشته های عمومی واژه فناوری نانو گاهی به هر فرآیند کوچکتر از اندازه‌های میکرون اطلاق می‌گردد که می‌تواند فرآیند لیتوگرافی را نیز شامل شود. به خاطر همین بسیاری از دانشمندان هنگامی که می‌خواهند درباره فناوری نانو به معنی واقعی و علمی کلمه صحبت کنند از آن به عنوان فناوری نانومولکولی یاد می‌کنند که به معنی فناوری نانو در ابعاد مولکولی می‌باشد (سایت نانو تکنولوژی).

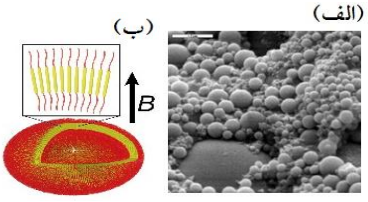
[1]Richard P. Feynman
[2]K. Eric Drexler

۳. فناوری نانو که گاه به آن فناوری ساخت مولکولی نیز گفته می‌شود، شاخه‌ای از مهندسی است که با طراحی و ساخت مدارات الکترونیکی و اداوات مکانیکی بسیار کوچک (در ابعاد مولکولی) سر و کار دارد. پژوهشگاه فناوری نانو انگلستان تعریف فناوری نانو را بدین گونه بیان می‌کند: قلمرویی از علم و فناوری که به ابعاد و تلورانس‌های ۰,۱ تا ۱۰۰ نانومترمی‌پردازد در جایی که این ابعاد و یا تلورانس‌ها بتوانند نقش مهمی در خواص قطعه ایجاد کنند. بحث فناوری نانو اغلب مشابه بحث سیستم‌های میکرومکانیکی-الکترونیکی[1] $(MEMS)$ می‌باشد.در واقع فناوری نانو زیر مجموعه $(MEMS)$ است و $(MEMS)$ به فناوری‌های بزرگتر از ابعاد مولکولی (ابعاد نانو) نیز می‌پردازد (سایت نانو تکنولوژی).

تفاوت اصلی فناوری نانو با فناوری‌های دیگر در مقیاس مواد و ساختارهایی است که در این فناوری مورد استفاده قرار می‌گیرند. البته تنها کوچک بودن اندازه مد نظر نیست؛ بلکه زمانی که اندازه مواد دراین مقیاس قرار می‌گیرد، خصوصیات ذاتی آنها از جمله رنگ، استحکام، مقاومت خوردگی و ... تغییر می‌یابد. در حقیقت اگر بخواهیم تفاوت این فناوری را با فناوری‌های دیگر به صورت قابل ارزیابی بیان نماییم، می‌توانیم وجود "عناصر پایه" را به عنوان یک معیار ذکر کنیم. عناصر پایه در حقیقت همان عناصر نانومقیاسی هستند که خواص آنها در حالت نانومقیاس با خواص‌شان در مقیاس بزرگتر فرق می‌کند.

اولین و مهمترین عنصر پایه، نانوذره است. منظور از نانوذره، همان‌گونه که از نام آن مشخص است، ذراتی با ابعاد نانومتری در هر سه بعد می‌باشد. نانوذرات می‌توانند از مواد مختلفی تشکیل شوند، مانند نانوذرات فلزی، سرامیکی، ... .

شکل (۱-۱): (الف) نانوذره و (ب) نانوکپسول

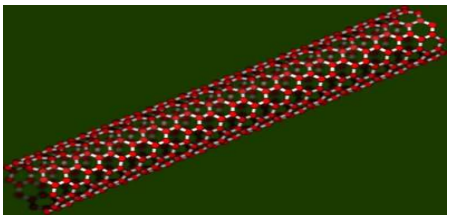


[1]micro-electromechanical systems

دومین عنصر پایه، نانوکپسول است. همان طوری که از اسم آن مشخص است، کپسول‌هایی هستند که قطر نانومتری دارند و می‌توان مواد مورد نظر را درون آنها قرار داد و کپسوله کرد. سال‌هاست که نانوکپسول‌ها در طبیعت تولید می‌شوند؛ مولکول‌های موسوم به فسفولیپیدها که یک سر آنها آبگریز و سر دیگر آنها آبدوست است، وقتی در محیط آبی قرار می‌گیرند، خود به خود کپسول‌هایی را تشکیل می‌دهند که قسمت‌های آبگریز مولکول در درون آنها واقع می‌شود و از تماس با آب محافظت می‌شود. حالت برعکس نیز قابل تصور است.

عنصر پایه بعدی نانولوله کربنی است. این عنصر پایه در سال ۱۹۹۱ توسط سامیو ایجیما[1] در شرکت *NEC* در ژاپن کشف شد و در حقیقت لوله‌هایی از گرافیت می‌باشند. اگر صفحات گرافیت را پیچیده و به شکل لوله در بیاوریم، به نانولوله‌های کربنی می‌رسیم که در قسمت بعدی به توصیف آن‌ها می‌پردازیم. این نانولوله‌ها دارای اشکال و اندازه‌های مختلفی هستند و می‌توانند تک دیواره یا چند دیواره باشند. این لوله‌ها خواص بسیار جالبی دارند که منجر به ایجاد کاربردهای جالب توجهی از آنها می‌شود.

شکل (۱-۲): نانولوله کربنی تک‌دیواره



در حقیقت کاربرد فناوری نانو از کاربرد عناصر پایه نشأت می‌گیرد. هر کدام از این عناصر پایه، ویژگی‌های خاصی دارند که استفاده از آنها در زمینه‌های مختلف، موجب ایجاد خواص جالبی می‌گردد. مثلاً از جمله کاربردهای نانوذرات می‌توان به دارورسانی هدفمند و ساده، باندژهای بی‌نیاز از تجدید،

[1] Sumio Iijima

شناسایی زود هنگام و بی‌ضرر سلول‌های سرطانی، و تجزیه آلاینده‌های محیط زیست اشاره کرد. همچنین نانولوله‌های کربنی دارای کاربردهای متنوعی می‌باشند که در بخش بعدی آن‌ها را بیان خواهیم کرد.

اینها تنها مواردی از کاربردهای بسیار زیادی هستند که برای عناصر پایه قابل تصور می‌باشند. در ادامه به ارائه توضیحاتی درباره ساختار و روش ساخت نانولوله‌های کربنی و گالیم‌نیتریدی می‌پردازیم.

۱-۳- نانولوله کربنی

نانولوله کربنی از عنصر کربن ساخته شده‌است، بنابراین برای آگاهی از ویژگی‌ها و ساختار آن ابتدا باید ویژگی‌های عنصر سازنده آن یعنی کربن را بررسی کرد. در قسمت بعدی به مطالعه کربن و ایزومرهای آن پرداخته‌ایم و در ادامه روش تولید نانولوله کربنی را بررسی میکنیم.

۱-۳-۱- ساختمان اتم کربن

عنصر کربن دارای نشانه‌ی C و عدد اتمی ٦ است یعنی ٦ پروتون در هسته دارد. اتم خنثی ٦ پروتون و ٦ الکترون دارد. به علاوه هسته شامل ٦ نوترون است (برای کربن ایزوتوپ ۱۲).

اتم کربن ششمین عنصر جدول تناوبی با ساختار $1S^2\ 2S^2\ 2P^2$ درگروه چهارم قرار گرفته است. $1S^2$ اوربیتال پر بوده و دو الکترون دارد که شدیداً به هسته مقید هستند و به الکترون‌های مغزی مشهور هستند ولی چهار الکترون $2S^2\ 2P^2$ به طور ضعیف به هسته مقیدند و الکترون‌های ظرفیت یا والانس نام دارند، در حالت متبلور اوربیتال‌های تراز آخر $2S$ و $2P_x$ و $2P_x$ و $2P_x$ هستند که نقش اساسی در تشکیل پیوند کوالانسی در مواد کربنی دارند. از آنجاییکه اختلاف انرژی میان تراز $2P$ و تراز $2S$ در اتم کربن نسبت به انرژی بستگی پیوندهای شیمیایی کم است توابع موج الکترونی این چهار الکترون به آسانی با هم مخلوط می‌شوند، بدین ترتیب پیوند اوربیتال‌های اتمی به وجود آمده با اتم‌های مجاور قوی‌تر می‌شود. فرایند مخلوط شدن اوربیتال‌های $2S$ و $2P$ را هیبریداسیون می‌نامند. مخلوط شدن یک اوربیتال $2S$ با ۳و۲و۱=n اوربیتال

SP را هیبریداسیون SP^2 می‌گویند.

در کربن هیبریداسیون SP ،SP^2 وSP^3 وجود دارد، دیگر عناصر گروه چهار مانند*Ge*و *Si*هم هیبریداسیون SP^3 دارند (هوگ[1]،۱۹۹۳).

۱-۳-۲- ایزومرهای کربن

عنصر در جدول تناوبی است که ایزومرهایی با ابعاد ۰D تا ۳D را داراست. در هیبریداسیون SP^2 ، $n+1$ پیوند σ به ازای هر اتم کربن وجود دارد. این پیوندها اسکلت لازم برای ساختن یک ساختار n بعدی را می‌سازد. در هیبریداسیون SP دو پیوند σ یک زنجیر یک‌بعدی را می‌سازد که این ساختار به کربن‌ها مشهور است. در هیبریداسیون وSP^3 چهار پیوند σ اسکلت یک چهاروجهی را می‌سازد که تشکیل‌دهنده یک ساختار سه‌بعدی است که همان الماس می‌باشد. هیبریداسیونSP^2 یک ساختار صفحه‌ای را می‌سازد که ماهیتی دوبعدی دارد و گرافیت نمونه‌ای از آن است. ساختار دوبعدی ممکن است موضعی باشد، مانند چندوجهی‌های بسته (۰D) که به خانواده فولرین‌ها مشهور است، یا به‌صورت استوانه‌ای (۱D) باشد که به آن‌ها تیوب می‌گویند. فیبرهای کربنی ارتباط نزدیکی با نانولوله‌ها دارند، درواقع می‌توان آن‌ها را در حالت ماکروسکپی مواد کربنی یک‌بعدی دانست.

فیبرهای کربنی از تعداد زیادی صفحات گرافیتی ساخته شده‌اند که از لحاظ ماکروسکوپیکی خواص الکترونیکی دوبعدی بر آن‌ها حاکم است (فیلد[2]،۱۹۹۳). در جدول زیر ایزومرهای کربن به‌همراه هیبریداسیون و خواص الکتریکی آن‌ها نشان داده شده‌است.

[1].Hugh
[2] .Field

جدول(۱-۱) : ایزومرهای کربن

بعد	صفربعدی	یک‌بعدی	دوبعدی	سه‌بعدی	سه‌بعدی
ایزومر	فولرین	نانولوله	گرافیت	*DLC*	الماس
هیبریداسیون	SP^2	SP^2	SP^2	SP^3 و SP^2	SP^3
خواص الکتریکی	نیمه‌رسانا	رسانا یا نیمه‌رسانا	شبه‌فلز	شبه‌فلز	عایق

۱-۳-۳- گرافیت

گرافیت از کلمه یونانی گرافین به معنی نوشتن می‌آید. زیرا از آن برای نوشتن و ترسیم کردن استفاده می‌شد. مدادهای اولیه در قرن پانزدهم در انگلستان ساخته شد. در قرن هجدهم گرافیت به عنوان یکی از ایزومرهای کربن شناخته شد (کاملی،۱۳۷٦).

شکل گرافیت به‌صورت لایه‌های حاوی آرایش شش‌ضلعی اتم کربن است که پیوندهای SP^2 بین اتم‌های کربن برقرار می‌باشد، بدین ترتیب زوایای پیوند 120° ساختار مسطح با واحدهای شش‌گوشه‌ای که صفحات با پیوندهای ضعیف واندروالس با یکدیگر متصل هستند، تشکیل شده‌است. طول این پیوندها $1,42\,A^\circ$ فاصله بین آن‌ها $6,7\,A^\circ$ است که بین این صفحات نیروی ضعیف واندروالس وجود دارد که عامل رسانندگی بالای آن است. در شکل ۳ ساختمان گرافیت نشان داده شده‌است.

شکل (۱-۳): ساختمان گرافیت