



石墨烯材料性能研究系列丛书

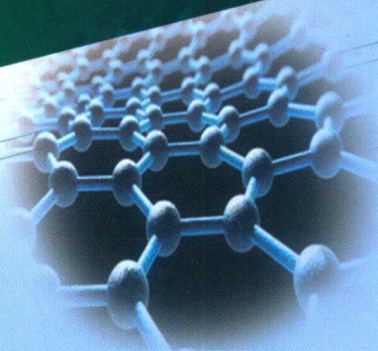
SHIMOXI CAILIAO XINGNENG YANJIU XILIE CONGSHU

石墨烯材料热学和 电学性能研究 ——从非简谐效应视角

SHIMOXI CAILIAO REXUE HE
DIANXUE XINGNENG YANJIU
——CONG FEIJIANXIE XIAOYING SHIJIAO

郑瑞伦 夏继宏 杨文耀 著

杨邦朝 主审

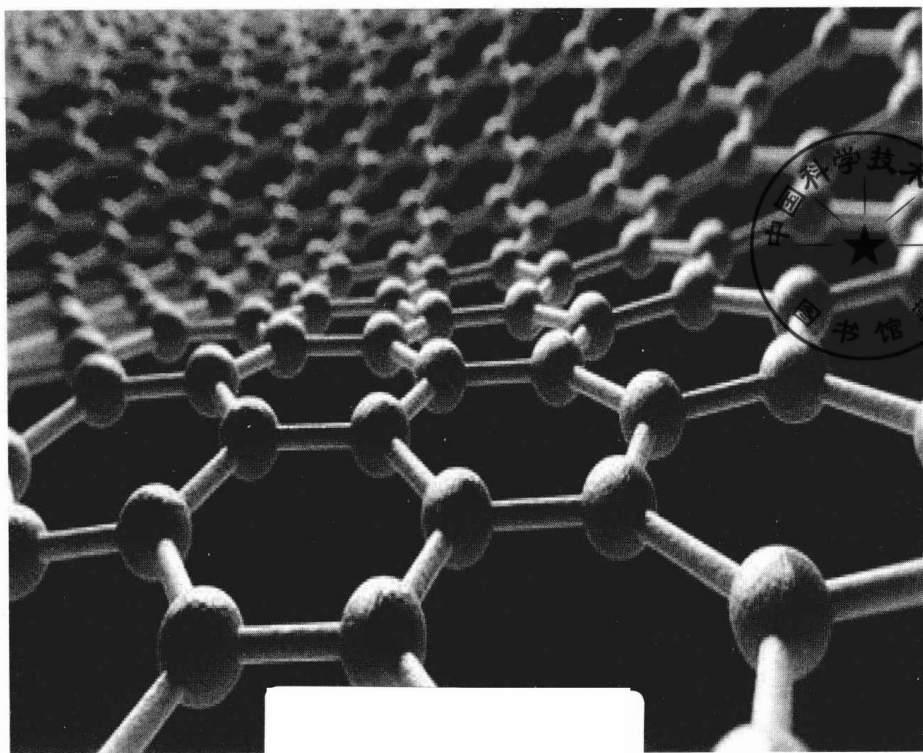


西安交通大学出版社

石墨烯材料性能研究系列丛书

石墨烯材料热学和电学性能研究 ——从非简谐效应视角

郑瑞伦 夏继宏 杨文耀 著
杨邦朝 主审



西南交通大学出版社
· 成 都 ·

内容简介

本书反映了作者科研团队多年来在石墨烯材料热力学和电学性质,特别是非简谐效应理论领域的主要研究成果。在介绍石墨烯材料的有关概念、分类、制备方法、普遍的物理化学性质以及石墨烯的结构和晶体结合的基础上,论述非简谐效应理论的有关概念、基本观点、研究问题的基本方法及其在三维、二维、纳米系统热学和电学性能等方面的一些应用。基于石墨烯、外延石墨烯、类石墨烯等石墨烯材料的结构以及组成粒子的相互作用和运动特点,对石墨烯材料的热力学和电学性能的变化规律及其非简谐效应,从理论上进行深入的定量研究。

图书在版编目(CIP)数据

石墨烯材料热学和电学性能研究:从非简谐效应视角/郑瑞伦,夏继宏,杨文耀著. —成都:西南交通大学出版社, 2019.5

(石墨烯材料性能研究系列丛书)

ISBN 978-7-5643-6707-7

I. ①石… II. ①郑… ②夏… ③杨… III. ①石墨-复合材料-热学-研究②石墨-复合材料-电学-研究
IV. ①TB332

中国版本图书馆CIP数据核字(2018)第290963号

石墨烯材料性能研究系列丛书

石墨烯材料热学和电学性能研究
——从非简谐效应视角

郑瑞伦
夏继宏
杨文耀

著

责任编辑 牛 君
封面设计 何东琳设计工作室

印张 21 字数 366 千
成品尺寸 170 mm×230 mm

版次 2019年5月第1版

印次 2019年5月第1次

印刷 成都勤德印务有限公司

书号 ISBN 978-7-5643-6707-7

出版发行 西南交通大学出版社

网址 <http://www.xnjdcbs.com>

地址 四川省成都市金牛区二环路北一段111号
西南交通大学创新大厦21楼

邮政编码 610031

发行部电话 028-87600564 028-87600533

定价 88.00元

图书如有印装质量问题 本社负责退换
版权所有 盗版必究 举报电话:028-87600562

序 言

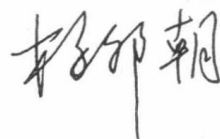
石墨烯作为一种新兴的二维纳米材料，其独特的性质和广泛的应用前景，使石墨烯材料的研究成为当前国内外最受关注的研究领域之一，并在制备、性能、应用等方面已进行了大量的实验和理论研究。在石墨烯材料的各种性质中，最重要的电学、热学和力学性质是与应用联系最紧密，而且，也是理论上最需要深入研究的性质。但目前对石墨烯材料电学和热学性质的理论研究著作还较少，特别是对石墨烯材料的各种性质（包括物理、化学性质等）中，与应用联系最紧密的电学和热力学性质的非简谐效应的研究更少。这些年来，在实验上已发现石墨烯材料的许多新现象、新规律，特别是电学和热力学性质随温度变化的规律以及表现的非简谐效应现象，但从理论上深入研究还远不够。为了深入对石墨烯材料的研究，更好地应用于生产、科技和生活等领域，需要一部有关石墨烯材料热电性能研究的理论著作。

重庆文理学院新型储能器件及应用工程研究中心，长期以来对三维、二维和纳米等各类材料的电学和热力学性质的变化规律及其原子振动的非简谐效应进行了较系统深入的研究，提出了非简谐理论。近几年来，该科研团队紧跟世界科技发展前沿，对石墨烯材料的制备、性能等进行了大量的实验和理论研究，特别是对它的电学、热学和力学性能的非简谐效应，通过实验和理论相结合，在实验基础上，构建物理模型，应用固体物理理论，采用格林函数等方法，对石墨烯材料热、电和力学性能的非简谐效应及其变化规律进行较深入的研究，并取得了有价值的研究成果，本书正是该科研团队所做工作的总结。

本书特点是：① 系统性、逻辑性强，内容次序符合认知规律；② 理论与实验紧密结合，理论有深度、广度及前沿性；③ 反映了国内外有关石墨烯材料热

学和电学性能的新进展，特别反映了科研团队近期科研成果以及提出的新理论，新方法；④ 突出了物理学科的特点，做到物理图像清晰，物理概念明确，便于阅读理解。

该书的编写得到重庆文理学院领导的热情鼓励、大力支持和许多老师的热情帮助，是科研团队的老师们共同努力的结果。该书的出版，对该科研团队对石墨烯材料的研究将起重要的促进作用，使其研究更上一个新水平、新台阶。同时也将使读者较系统和深入地了解石墨烯材料的制备、结构、热力学和电学性质的变化规律以及研究方法、基础研究过程，为同行进行相关研究和应用提供可靠的理论和实验支撑，对促进学术交流和科学技术的进步起积极作用。

A handwritten signature in black ink, appearing to read '杨朝' (Yang Zhao), written in a cursive style.

2018年6月

前 言

自 2004 年 Geim 和 Novoselov 采用机械剥离法获得石墨烯并于 2010 年获得诺贝尔物理学奖以来,石墨烯作为一种新兴的二维材料,它的完美晶体结构和独特的电学、光学、热学、力学等性能,使其在电子器件、能量储存、环境科学等领域具有广泛的应用前景和科学价值,对石墨烯材料的研究,已成为当前最受关注的研究领域之一,目前已有许多学者对石墨烯材料(包括石墨烯、外延石墨烯、类石墨烯、氧化石墨烯、石墨烯复合材料等)的制备、性能、应用等展开研究,主要是性能实验和定性分析。但缺乏理论上的深入研究,特别是对石墨稀材料各种性质的非简谐效应的研究较少,缺乏这方面的具有一定理论深度的著作。为了深入对石墨烯材料的研究,使其更好地应用于生产、科技、生活等领域,需要一部有关石墨烯材料热、电性能及其应用的著作,期望从实验和理论上更深入地揭示石墨烯材料的电学、热学和力学等非简谐性质遵从的规律以及这些性质的应用。

重庆文理学院新型储能器件及应用工程研究中心,长期以来对三维、二维、纳米等各类材料的电学、热学和力学性质及其原子振动的非简谐效应进行研究,提出了非简谐效应理论。特别是 2004 年 Novoselov 等首次用机械剥离法得到单原子厚度的石墨烯以来,该科研团队紧跟世界科技发展,对石墨烯材料的制备、性能等进行了大量的实验和理论研究,采取实验和理论相结合的方法,在实验基础上,构建物理模型,应用固体物理理论,采用格林函数法、密度泛函方法等方法,对石墨烯材料热、电和力学性能的非简谐效应及其变化规律进行较深入的研究,并取得成效。为了将已有的研究成果深入化、系统化及理论化,使我们对石墨烯材料的研究更深入,再上新台阶;为新器件、新材料的应用提供可靠的理论和实验支撑;使读者较系统和深入地了解石墨烯材料的制备、结构、热力学和电学性质的变化规律,特别是非简谐效应及其应用;了解主要的理论研究方法和采用的理论模型以及基础研究过程,并由此发现新现象;也为了使我们的研究被同行所了解,促进学术交流,我们将所做的工作进行总结,撰写

了一本有关石墨烯材料热学和电学性能非简谐效应及其应用的著作。

本书共 8 章,第 1、2 章分别介绍石墨烯材料的有关概念、分类和制备方法、物理化学性质以及石墨烯的结构和晶体结合;第 3 章论述非简谐效应理论的有关概念、基本观点、研究问题的基本方法和它在研究三维、二维、纳米系统的热学、电学和光学等性质方面的一些应用;从第 4 章起,按照石墨烯、外延石墨烯、类石墨烯材料的顺序,依次论述了石墨烯材料的热力学、电学性质的非简谐效应;第 8 章论述了石墨烯的热电效应及其应用。

本书第 1 章、第 8 章由杨文耀撰写,第 2 章、第 6 章由夏继宏撰写,第 3、4、5、7 章由郑瑞伦撰写。全书经郑瑞伦、夏继宏统一修改,保证了各章内容的协调和风格的一致性。

本书的出版得到重庆文理学院的资助。著者衷心感谢重庆文理学院领导的热情鼓励和大力支持、帮助,感谢电子科技大学杨邦朝教授对本书撰写的策划组织并审阅全书,感谢西南科技大学彭同江教授的热情指导。在所写的内容中,许多是我们科研团队的老师,如程正富、任晓霞、申凤娟、杜一帅、周虹君、高君华、李杰、杨保亮等老师的研究成果,在修改和整理的过程中,还得到学校许多老师的热情帮助,在此向他们表示衷心感谢。

限于作者水平,书中难免存在错误和不妥之处,敬请读者指正。

著 者

2018 年 6 月

目 录

1 石墨烯材料简介	001
1.1 石墨烯材料的起源及分类	001
1.1.1 石墨烯材料的起源	001
1.1.2 石墨烯材料的分类	004
1.2 石墨烯材料的基本性质	007
1.2.1 石墨烯的力学性质	007
1.2.2 石墨烯的光学性质	008
1.2.3 石墨烯的化学性质	008
1.2.4 石墨烯的导电性	009
1.2.5 石墨烯的导热性	010
1.2.6 石墨烯的阻隔性	010
1.3 石墨烯材料的制备方法简介	011
1.3.1 机械剥离法	011
1.3.2 外延生长法	013
1.3.3 氧化还原法	014
1.3.4 溶剂热法	019
1.3.5 有机合成法	020
1.3.6 化学气相沉积法	021
1.3.7 电弧放电法	024
1.3.8 等离子增强合成法	025
1.3.9 火焰法	027
参考文献	029

2 石墨烯的结构和晶体结合	035
2.1 石墨烯的结构和显微形貌以及电子结构	035
2.1.1 石墨烯的晶体结构	035
2.1.2 石墨烯的电子结构	036
2.1.3 多层石墨烯的晶体结构和电子结构	038
2.2 石墨烯的晶体结合	041
2.2.1 石墨烯的原子相互作用能	041
2.2.2 石墨烯的结合能	042
2.2.3 温度对石墨烯原子相互作用能的影响	043
2.3 石墨烯与吸附原子的结合	044
2.3.1 石墨烯的吸附模型	045
2.3.2 吸附引起的石墨烯态密度的改变	046
2.3.3 吸附原子性质对石墨烯吸附系统结合强弱的影响	048
2.3.4 吸附原子覆盖度随温度的变化	049
2.4 石墨烯与吸附原子的键能随温度的变化	051
2.4.1 石墨烯与吸附原子之间的相互作用能	051
2.4.2 吸附原子性质对石墨烯与吸附原子键能的影响	052
2.4.3 温度对吸附键能的影响	055
参考文献	056
3 非简谐效应理论及其在晶体热学性质上的应用	057
3.1 非简谐效应理论的有关概念和基本方法	057
3.1.1 简谐近似与非简谐效应的概念	057
3.1.2 描述非简谐效应的特征量	058
3.1.3 非简谐效应理论的基本观点和基本方程	061
3.1.4 非简谐效应理论研究问题的方法	062
3.2 三维晶体的物理模型和声子谱	062
3.2.1 三维晶体的物理模型	063
3.2.2 三维晶体的声子谱	064

3.2.3	德拜温度和格林乃森参量与简谐系数和非简谐系数的关系	066
3.3	三维晶体热力学性质的非简谐效应	067
3.3.1	简谐近似下三维晶体的热力学性质	068
3.3.2	三维晶体的热膨胀、热压强、压缩系数随温度的变化	069
3.3.3	三维晶体的定容热容量随温度的变化	071
3.3.4	三维晶体的热导率随温度的变化	073
3.4	非简谐振动对二维系统的临界点与玻意耳线的影响	075
3.4.1	Collins 模型	075
3.4.2	二维系统的吉布斯函数	076
3.4.3	二维系统的状态方程和临界点	078
3.4.4	非简谐振动对玻意耳温度和玻意耳线的影响	079
3.5	二维晶体热力学性质的非简谐效应	082
3.5.1	简谐近似下二维晶体的热力学函数	082
3.5.2	简谐近似下二维晶格热容理论	083
3.5.3	非简谐振动对二维二元系统溶解限曲线的影响	085
3.5.4	二维晶体的定压热膨胀系数和等温压缩系数	087
3.6	纳米晶热力学性质的非简谐效应	088
3.6.1	纳米晶的物理模型以及简谐系数和非简谐系数	088
3.6.2	直角六面体型纳米晶的德拜温度和格林乃森参量	090
3.6.3	直角六面体型纳米晶的热膨胀系数	091
3.6.4	直角六面体型纳米晶的定容热容量以及热导率	092
3.6.5	直角六面体型纳米晶的表面能	095
3.6.6	非简谐振动对球状纳米晶表面能的影响	096
3.7	非简谐效应理论的其他应用	098
3.7.1	激光辐照金属板材的物理模型	098
3.7.2	激光辐照下金属板材的温度分布和升温率	100
3.7.3	激光辐照金属板材非简谐效应	101
3.7.4	温度对光学微腔光子激子系统玻色凝聚的影响	104
	参考文献	110

4	石墨烯热力学性质的非简谐效应	113
4.1	石墨烯声子的性质	113
4.1.1	几种低维晶格模型的声子谱	113
4.1.2	石墨烯的声子谱	115
4.1.3	石墨烯的声子频率随温度的变化	115
4.1.4	石墨烯声子的弛豫时间	118
4.2	石墨烯的格林乃森参量和德拜温度随温度的变化	122
4.2.1	石墨烯的原子相互作用和简谐系数、非简谐系数	122
4.2.2	石墨烯的德拜温度随温度的变化	123
4.2.3	石墨烯的格林乃森参量随温度的变化	124
4.3	石墨烯的热容量和热导率随温度的变化	126
4.3.1	石墨烯热容量的物理模型	126
4.3.2	石墨烯的热容量随温度的变化	127
4.3.3	石墨烯的热导率随温度的变化	128
4.4	石墨烯的负热膨胀现象	130
4.4.1	石墨烯负热膨胀现象的发现	131
4.4.2	非低温石墨烯热膨胀系数随温度的变化	131
4.4.3	石墨烯低温热膨胀系数随温度的变化	132
4.5	石墨烯力学性质的非简谐效应	137
4.5.1	Keating 形变势下的弹性模量	137
4.5.2	Davydov 模型下单层石墨烯的弹性	139
4.5.3	Davydov 石墨烯形变势模型下的弹性	141
4.5.4	点缺陷型下石墨烯的弹性模型	146
	参考文献	150
5	石墨烯电学性质的非简谐效应	153
5.1	三维晶体的电导率随温度的变化	153
5.1.1	三维导体的电子电导率随温度的变化	153
5.1.2	三维半导体的电导率随温度的变化	157

5.1.3	原子非简谐振动对晶体电导率的影响	161
5.2	导体和半导体的态密度以及能带结构	162
5.2.1	三维导体电子的态密度和能带结构	163
5.2.2	三维半导体带电粒子的态密度和能带结构	165
5.2.3	二维晶体带电粒子的态密度和能带结构	166
5.3	石墨烯的能带结构和能态密度	168
5.3.1	无缺陷单层石墨烯电子的能带结构	168
5.3.2	缺陷型石墨烯的电子能带结构	170
5.3.3	单层石墨烯电子的能态密度	171
5.3.4	石墨烯吸附原子的局域态密度	172
5.3.5	吸附对石墨烯态密度的影响	175
5.4	石墨烯吸附系统的电荷分布	176
5.4.1	吸附原子的键能	177
5.4.2	吸附原子的电荷分布	178
5.4.3	吸附原子的性质对电荷分布的影响	181
5.5	原子非简谐振动对石墨烯吸附系统电荷分布的影响	183
5.5.1	石墨烯吸附系统电荷分布随吸附原子位置的变化	183
5.5.2	原子非简谐振动对吸附原子电荷分布的影响	185
5.6	石墨烯的费米速度和电导率	188
5.6.1	石墨烯电子的费米速度和费米能	188
5.6.2	石墨烯的电子电导率	189
5.6.3	电子-声子相互作用对石墨烯电导率的影响	192
5.6.4	空位缺陷对石墨烯电导率的影响	193
5.7	石墨烯电极材料比电容的量子极限	194
5.7.1	石墨烯电极材料比电容的影响因素	195
5.7.2	材料性质和温度对石墨烯电极材料比电容的影响	196
5.7.3	量子效应对石墨烯电极材料比电容的贡献	197
	参考文献	201

6 外延石墨烯的热学和电学性质	203
6.1 外延石墨烯的制备与分类	203
6.1.1 外延石墨烯的概念和分类	203
6.1.2 外延石墨烯的制备	204
6.2 外延石墨烯电子能态密度	209
6.2.1 基底的态密度	209
6.2.2 含缺陷的金属基外延石墨烯的态密度	210
6.2.3 含缺陷的半导体基外延石墨烯的态密度	215
6.2.4 半导体膜外延石墨烯的态密度	217
6.3 外延石墨烯的费米速度	218
6.3.1 零温情况外延石墨烯的电子费米速度	218
6.3.2 金属基外延石墨烯的费米速度随温度和费米能的变化	220
6.3.3 半导体基外延石墨烯的费米速度	222
6.3.4 空位缺陷对金属基外延石墨烯的费米速度的影响	223
6.4 外延石墨烯的电导率	224
6.4.1 金属基外延石墨烯的电导率	224
6.4.2 半导体基外延石墨烯的电导率随温度的变化	229
6.4.3 吸附对半导体基外延石墨烯电导率的影响	231
6.4.4 空位缺陷对金属基外延石墨烯电导率的影响	232
6.5 外延石墨烯热力学性质的非简谐效应	233
6.5.1 外延石墨烯原子振动的简谐系数和非简谐系数	233
6.5.2 外延石墨烯的格林乃森参量和德拜温度	237
6.5.3 外延石墨烯的热膨胀系数和弹性模量随温度的变化	238
参考文献	239
7 类石墨烯热学和电学性质的非简谐效应	241
7.1 类石墨烯的原子相互作用能和内聚能	241
7.1.1 类石墨烯的概念和分类	241
7.1.2 类石墨烯的原子相互作用能	242

7.1.3	类石墨烯的内聚能	245
7.2	类石墨烯电子能态密度	247
7.2.1	单层化合物 A_N-B_{8-N} 型类石墨烯的态密度	247
7.2.2	金属基外延类石墨烯态密度	251
7.2.3	金属基外延类石墨烯吸附系统的态密度	253
7.2.4	金属基外延类石墨烯的电荷分布	253
7.3	类石墨烯热力学性质的非简谐效应	254
7.3.1	类石墨烯的简谐系数与非简谐系数	254
7.3.2	类石墨烯的热膨胀系数和格林乃森参量随温度的变化	257
7.3.3	类石墨烯的德拜温度和热容量随温度的变化	260
7.3.4	短程作用对类石墨烯热力学性质的影响	262
7.4	类石墨烯的弹性与形变以及有效电荷	265
7.4.1	类石墨烯的弹性模量	265
7.4.2	类石墨烯的形变	267
7.4.3	形变对类石墨烯极性的影响	268
7.4.4	形变对类石墨烯有效电荷的影响	270
7.5	类石墨烯的介电性质	274
7.5.1	类石墨烯的极化率	274
7.5.2	类石墨烯的介电常数随化合物的变化	277
7.5.3	类石墨烯的介电常数随温度的变化	278
	参考文献	280
8	石墨烯热电效应及其应用	281
8.1	热电效应分类及其热电现象的热力学理论	281
8.1.1	热电效应的有关概念和分类	281
8.1.2	热电现象的热力学理论	283
8.1.3	热电系数的计算公式	287
8.2	石墨烯热电效应	288
8.2.1	石墨烯热电性能概述	288

8.2.2	石墨烯热电效应的研究进展	289
8.2.3	进一步提高石墨烯热电性能的途径	291
8.3	半导体基外延石墨烯热电效应的奇异现象	292
8.3.1	石墨烯热电效应奇异性的发现	293
8.3.2	外延石墨烯的热电系数	294
8.3.3	半导体基外延石墨烯的热电势	296
8.3.4	杂化势随温度的变化和非简谐振动对热电势的影响	299
8.3.5	半导体薄膜基外延石墨烯的热电势	301
8.4	金属基外延石墨烯热电效应的奇异现象	303
8.4.1	金属块体基外延石墨烯的热电势	303
8.4.2	金属薄膜基外延石墨烯的热电势	304
8.4.3	声子拖拽对外延石墨烯热电势的贡献	306
8.5	石墨烯热电性能的应用	308
8.5.1	石墨烯热电性能在新型环境响应材料上的应用	308
8.5.2	石墨烯热电性能在热电器件上的应用	313
8.5.3	石墨烯热电性能在光电探测器上的应用	315
	参考文献	317
	附 录	320

1 石墨烯材料简介

2004 年,英国曼彻斯特大学物理学家安德烈·盖姆教授 (Andre Geim) 和康斯坦丁·诺沃肖洛夫教授 (Konstantin Novoselov) 采用机械剥离法,从定向热解石墨中成功分离出了只有原子级厚度的二维薄层碳材料——石墨烯 (Graphene),证实了石墨烯可以单独存在这一事实。研究表明单层石墨烯在电学、光学、热学等方面具有许多普通碳材料所不具有的优异性能:是最薄的纳米材料(单原子厚度)、最坚硬的纳米材料(抗拉强度 125 GPa,弹性模量 1.1 TPa,比金刚石更坚硬)、几乎完全透明(光吸收率仅为 2.3%)、超高导热系数 ($5\,300\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)、超高常温电子迁移率 ($15\,000\text{ cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$)、超高电导率 ($10^6\text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$,比铜或银更高)。在实际应用中,石墨烯材料具有良好的发展前景:石墨烯的电阻率极低,电子运输速度极快,被期待用于发展出更薄、导电速度更快的新一代电子组件或晶体管;石墨烯的透明性及良好的导体性,使其适合于制造透明触控屏、光板,甚至是太阳能电池。因此,石墨烯这一“神奇”材料开始了飞速发展,并被誉为 21 世纪“新材料之王”^[1-3]。

2010 年,安德烈·盖姆教授和康斯坦丁·诺沃肖洛夫教授因“在二维石墨烯材料的开创性实验”,共同获得了诺贝尔物理学奖。

1.1 石墨烯材料的起源及分类

本节将从石墨烯材料的理论研究、首次成功制备、石墨烯的定义及分类等多个方面为大家介绍石墨烯的起源及其发展。并从不同的角度介绍不同种类的石墨烯及其基本特征。

1.1.1 石墨烯材料的起源

其实,石墨烯并不是一个新兴事物,早在 1947 年,菲利普·华莱士 (Philip Wallace) 就开始研究二维碳材料的电子结构^[4];1956 年,麦克鲁 (J. W. McClure)

就推导出了二维碳材料的波函数方程^[5]。

但传统理论认为，二维碳材料只能是一个理论上的结构，不会实际存在。1934年，朗道（L. D. Landau）和佩尔斯（R. E. Peieds）就指出“严格和独立的二维晶体材料由于其自身的热力学不稳定性，在常温常压下会迅速分解”^[6]。1966年，大卫·莫明（David Mermin）和赫伯特·瓦格纳（Herbert Wagner）提出了Mermin-Wagner理论，指出表面起伏会破坏二维晶体的长程有序^[7]。因此，虽然理论物理学家对二维碳材料并不陌生，但都认为在实际中，二维碳材料不会存在，关于二维碳材料的研究只是停留在理论上。

直到2004年，安德烈·盖姆教授和弟子康斯坦丁·诺沃肖洛夫采用“机械剥离法”，最终获得了石墨烯：选取最普通的胶带在高定向热解石墨上反复剥离，并将胶带上的石墨碎片转移到硅片基底上，经光学显微镜下反复观察，最终寻找到了石墨烯材料，如图1.1.1所示。这一实验证实了二维碳材料——石墨烯可以单独存在这一事实^[1]，因此从理论上对二维碳材料特性的预言到实验上石墨烯的成功制备，经历了近60年的时间。

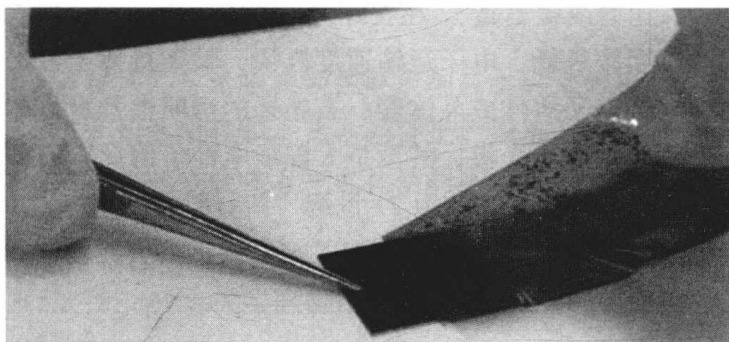


图 1.1.1 石墨烯的机械剥离

关于石墨烯（Graphene）这一概念的形成和被人们广泛接收，也经历近10年的时间：1986年，H. P. Boeh等首先使用“Graphene”这个名称来指代单层石墨片：“The term Graphene layer should be used for such a single carbon layer”^[8-10]。1997年，A. D. Mcnaught等才给“Graphene”下了更为明确的定义：“The term Graphene should be used only when the reactions, structural relations or other properties of individual layers are discussed”^[11]。

需要注意的是，在热力学上二维原子晶体是不稳定，且平整无起伏的。而在透射电子显微镜下观察，可以发现石墨烯片上存在大量波纹结构（或称之为褶皱），说明石墨烯并不是一个百分之百平整的完美平面（如图1.1.2所示）。实际上，石墨烯就是通过调整其内部的碳-碳键长在表面形成褶皱，或吸附其