

# اولین همایش ملی نانو تکنولوژی مزایا و کاربردها



محل برگزاری: همدان دانشکده شهید مفتح

۱۵ اسفند ۱۳۹۲



ارژمان محلاتی، اواروکل حفاظت محلاتی، آستان همدان

## بررسی خواص الکترونی نانو کامپوزیت Graphene/polyethylene با استفاده از نظریه تابع چگالی

ثابت وند، روزبه<sup>۱</sup>؛ مزینانی، سعیده<sup>۲</sup>؛ کمانی، داود<sup>۳</sup>؛ آقا جاری، سیما<sup>۴</sup>

<sup>۱</sup> دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده ی مهندسی انرژی و فیزیک. roozbehsabetvand@aut.ac.ir

<sup>۲</sup> پژوهشکده ی نانو فناوری دانشگاه صنعتی امیرکبیر. s.mazinani@aut.ac.ir

<sup>۳</sup> دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده ی مهندسی انرژی و فیزیک. kamani@aut.ac.ir

<sup>۴</sup> دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات سیرجان. s.aghajari@gmail.com

### چکیده

در این مقاله به بررسی تغییرات ایجاد شده در ساختار نواری و چگالی حالات توده ی پلی اتیلن به ازای افزوده شدن نانو صفحات گرافین به ساختار آن پرداخته ایم. محاسبات با استفاده از بسته ی محاسباتی CASTEP که بر پایه ی نظریه ی تابعی چگالی و تکنیک شبه پتانسیل است، انجام پذیرفته است. در این کار ما نانو صفحات گرافین را به میزان ۰.۳ و ۰.۹ درصد از حجم کل ماتریس به درون ساختار پلیمری اضافه کرده ایم که نتایج نشانگر کاهش گاف انرژی و ایجاد حالات انرژی جدید در ساختار حاصله و در نتیجه بهبود خواص الکتریکی نانو کامپوزیت های تولیدی در مقایسه با ماتریس پلی اتیلن می باشد.

واژه های کلیدی: پلی اتیلن، گرافین، ساختار نواری، چگالی حالات، ترابرد الکتریکی، نانو کامپوزیت های پلیمری.