



روش چندمقیاسی مکعبی به منظور مدلسازی نانوکامپوزیت حاوی نانوذرات گرافن

هادی مشرف زاده ثانی^{1*}، حسن محمدخانی²

1- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشکده شهید مهاجر، دانشگاه فنی و حرفه‌ای استان اصفهان، اصفهان

2- استادیار، مهندسی هوافضا، دانشگاه جامع امام حسین (ع)، تهران

* اصفهان، صندوق پستی، 81645-315، hadimoshref@gmail.com

اطلاعات مقاله	چکیده
دریافت: 98/05/08	در این مقاله روش چند مقیاسی جدیدی به منظور محاسبه سفتی نانوکامپوزیت حاوی نانو ذرات گرافن ارائه می‌شود. در این روش نانوکامپوزیت حاوی نانوذرات با توزیع تصادفی در مقیاس ماکرو، توسط حجم معرف مکعبی شکلی مدل می‌شود که خود متشکل از تعداد زیادی مکعب کوچکتر در مقیاس میکرو است. هر مکعب کوچک حاوی نانوذرات همسویی است که جهت گیری آنها به صورت سه بعدی و توسط الگوریتمی تصادفی تعیین شده است. تانسور سفتی هریک از مکعب‌های کوچک توسط روش موری-تاناکا به دست آمده و نهایتاً با استفاده از روشی تحلیلی مدول الاستیک حجم معرف اصلی محاسبه می‌شود. این روش که در واقع توسعه روش کامپوزیت لایه ای معادل به حالت سه بعدی محسوب می‌شود، نسبت به سایر روش‌های تحلیلی تطابق بهتری با فیزیک مسئله داشته و نسبت به روش‌های عددی از سرعت محاسباتی بیشتری برخوردار است. مقایسه نتایج حاصل از این روش با تعدادی از نتایج تجربی موجود در مقالات، حکایت از دقت قابل قبول آن در محاسبه مدول الاستیک نانوکامپوزیت دارد.
پذیرش: 99/02/13	
کلیدواژگان:	
گرافن	
روش چندمقیاسی	
نانوکامپوزیت	

A multi-scale cubic model to calculate the elastic modules of the graphene/polymer nano composites

Hadi Moshrefzadeh-Sani^{1,*}, Hasan Mohammadkhani²

1- Department of mechanical engineering, Faculty of Shahid Mohajer, Technical and Vocational University (TVU), Esfahan, Iran

2- Department of Aerospace Engineering, Imam Hossein University, Tehran, Iran

* P.O.B. 81645-315, Esfahan, Iran, hadimoshref@gmail.com

Keywords

Nano composite,
 Multiscale method,
 Graphene

Abstract

In this paper a new multi-scale method was presented to calculate the elastic modulus of graphene/polymer nano composites. Macro, micro and nano scales were considered within this hierarchical multi-scale method. In macro scale, a nanocomposite was modeled with a cubic representative volume element (RVE) which was constructed by several small cubic elements in micro scale. Each element in micro or nano scale, is made of aligned graphenes which were oriented in three dimensional space via a random algorithm. The stiffness tensor of each element was obtained by Mori-Tanaka micromechanical method and the elastic modulus of the RVE was calculated using a new analytical approach. In fact this method is a development of the laminated analogy, in to a three dimensional version which is in better accordance with the physics of real nanocomposites. It has been shown that the results of the present approach are in good agreement with several experimental works in the literatures.

Please cite this article using:

Moshrefzadeh-Sani, H., Mohammadkhani, H., "A multi-scale cubic model to calculate the elastic modules of the graphene/polymer nano composites", In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, Vol. 7, No. 1, pp. 740-746, 2020.

برای ارجاع به این مقاله از عبارت زیر استفاده نمایید:

1- مقدمه

نانوذرات گرافن به دلیل داشتن خواص مکانیکی شیمیایی و الکتریکی منحصر به فرد، امروزه توجه بسیاری از دانشمندان را به خود معطوف کرده‌اند. استحکام و سفتی بسیار بالای گرافن این ایده را مطرح کرده است که می‌توان از این نانوذرات به عنوان تقویت کننده مواد پلیمری استفاده نمود. در این خصوص مطالعات تجربی زیادی صورت گرفته که همگی با صرف هزینه و زمان زیادی انجام پذیرفته‌اند [1-3]. لذا بسیاری از محققین روش‌های محاسباتی و تحلیلی را به منظور مطالعه رفتار این دست از مواد برگزیده‌اند. روش‌های محاسباتی می‌توانند با کمترین هزینه و کوتاهترین زمان، عوامل موثر بر خواص نانوکامپوزیت‌ها را شناسایی کرده و راهکارهایی جهت بهبود عملکرد آنها پیشنهاد دهند [4].

یکی از روش‌های مرسوم جهت مطالعه خواص نانوکامپوزیت‌ها روش چندمقیاسی سلسله مراتبی نام دارد [5, 6]. در این روش خواص نانوکامپوزیت در هر مقیاس با مدل مناسب همان مقیاس محاسبه می‌شود. به این ترتیب می‌توان از خواص نانوذره و ماتریس به خواص نانوکامپوزیت در مقیاس ماکرو رسید.

در این میان روش‌های معروف به میکرومکانیک به عنوان متداولترین روشهای محاسبه خواص در مقیاس نانو و میکرو شناخته می‌شوند. روش موری-تاناکا روشیست که کارایی آن در محاسبه خواص نانوکامپوزیت‌ها بارها آزموده شده است. شکرپه و مشرف زاده [7] با ترکیب تعدادی از روش‌های میکرومکانیک و روش کامپوزیت لایه‌ای معادل، موفق به توسعه روشی شدند که می‌توانست خواص کامپوزیت حاوی الیاف کوتاه با توزیع دو بعدی را محاسبه کند. با تعمیم این روش به حالت سه بعدی و استفاده از روش موری-تاناکا روش چند مقیاسی دیگری موسوم به امتلا¹ توسعه پیدا کرد که می‌توانست مدول پانگ نانوکامپوزیت‌های حاوی نانو ذرات گرافن و نانولوله را محاسبه نماید [8]. همچنین نشان داده شد که با قرار دادن این روش در یک الگوریتم خرابی پیش رونده می‌توان استحکام نانوکامپوزیت را به خوبی تخمین زد [9].

در روش امتلا، کامپوزیت حاوی تقویت کننده‌های کوتاه که به صورت تصادفی در زمینه پخش شده‌اند توسط یک کامپوزیت لایه‌ای معادل سازی می‌شود. این کامپوزیت لایه‌ای متشکل از تعداد زیادی لایه است که تقویت کننده‌ها در هر لایه به صورت همسو و با زاویه‌ای متفاوت نسبت به سایر لایه‌ها قرار دارند. نقطه ضعف این معادلسازی آن است که کامپوزیت لایه‌ای در نظر گرفته شده در آن همسانگرد نبوده و سفتی آن در راستای عمود بر لایه‌ها با سفتی در جهات دیگر قدری متفاوت است. در حالی که از یک کامپوزیت با توزیع تصادفی تقویت کننده‌ها انتظار می‌رود در تمام جهات خواص کاملاً یکسانی داشته باشد. به منظور برطرف کردن این مشکل در این مقاله مدل جدیدی تعریف می‌شود که در آن نانوکامپوزیت مورد نظر در مقیاس ماکرو و در طی الگوریتمی تصادفی به تعداد زیادی المان مکعبی در مقیاس میکرو تقسیم شده است. با انجام محاسبات روی حجم معرف تشکیل شده از این المان‌ها، مدول الاستیک نانوکامپوزیت در مقیاس ماکرو محاسبه می‌شود. به منظور صحت سنجی، به کمک این روش خواص چند نمونه نانوکامپوزیت حاوی نانوذرات گرافن محاسبه و با نتایج تجربی مقایسه شد. این مقایسه نشان داد که روش پیشنهادی در این مقاله می‌تواند با دقت خوبی سفتی نانوکامپوزیت را محاسبه کند.

2- روش چند مقیاسی مکعبی

در اینجا نوعی از روش چند مقیاسی سلسله مراتبی معرفی می‌شود که به کمک آن می‌توان مدول الاستیک نانوکامپوزیت حاوی نانوذرات گرافن را محاسبه نمود.

از آنجایی که در اینجا از پدیده‌هایی نظیر کلوخه شدن صرف نظر شده و فرض شده است که نانوذرات به طور یکنواخت و کاملاً تصادفی درون زمینه پخش شده باشند، می‌توان مقیاس مسو را با مقیاس ماکرو یکسان در نظر گرفت. از همین روی در اینجا در مقیاس نانو از روش تقویت کننده معادل، در مقیاس میکرو روش موری-تاناکا و در مقیاس ماکرو روش المان مکعبی معادل مورد استفاده واقع می‌شوند.

در واقع در این روش کامپوزیت حاوی تقویت کننده‌های با توزیع تصادفی توسط حجم معرفی مکعبی شکل در مقیاس ماکرو جایگزین می‌شود که خود متشکل از تعداد زیادی مکعب بسیار کوچک در مقیاس میکرو است. در اینجا فرض می‌شود که هر یک از این مکعب‌های کوچک حاوی نانوذراتی همسو باشند که جهت آنها در فضای سه بعدی به طور تصادفی تعیین شده است. در مدلسازی حاضر، این مکعب‌های کوچک در مقیاس میکرو با ماده‌ای اورتوتروپیک جایگزین می‌شوند که تانسور سفتی آنها با استفاده از روش موری-تاناکا و با توجه به کسر حجمی و ابعاد تقویت کننده‌ها محاسبه شده است.

2-1- مقیاس نانو

در مقیاس نانو لازم است خواص موثر نانوذرات گرافن که به عنوان تقویت کننده پلیمر شناخته می‌شوند معلوم باشد. از همین روی در اینجا از خواص تقویت کننده معادل گرافن محصور که قبلاً به کمک روش دینامیک مولکولی به دست آمده است استفاده می‌شود. رحیمیان و همکاران نشان دادند که سفتی گرافن محصور (E_g^L) با افزایش قطر گرافن (L_g) (با فرض داشتن شکل دایروی) به صورت خطی تا قطر 150 نانومتری افزایش یافته و بعد از آن ثابت می‌شود [10]:

$$\begin{cases} E_g^L = 5.7L_g - 5.18 \text{ (GPa)} & L_g < 150\text{nm} \\ E_g^L = 855 \text{ (GPa)} & L_g > 150\text{nm} \end{cases} \quad (1)$$

همچنین این محققین در ادامه سفتی گرافن محصور را در راستای عمود به صفحه گرافن برابر $E_g^N = 119.6 \text{ (GPa)}$ بدست آوردند.

اطلاعات فوق به عنوان خواص مقیاس نانو در روش موری-تاناکا قرار داده می‌شوند تا بتوان به کمک آن‌ها خواص کامپوزیت در مقیاس میکرو را محاسبه نمود.

2-2- مقیاس میکرو

روشهای زیادی به منظور محاسبه سفتی کامپوزیت حاوی تقویت کننده‌های کوتاه قابل استفاده است. که مشهورترین آنها روش موری-تاناکا نام دارد. توانایی این روش جهت مدلسازی نانوکامپوزیت‌ها بارها توسط محققین به اثبات رسیده است. در روش موری-تاناکا تانسور سفتی کامپوزیت تقویت شده توسط تقویت کننده‌های بیضی گون که همسو قرار گرفته‌اند به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$C = C_m + V_f (C_r - C_m) : A \quad (2)$$

¹ Mori-Tanaka Laminated Analogy

در اینجا گرافن به صورت ماده ای اورتوتروپیک در نظر گرفته شده و ماتریس سفتی (Cr) آن در حالت سه بعدی به صورت زیر بیان می شود [14].

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{xz} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{Bmatrix} \quad (7)$$

درایه های ماتریس سفتی در آن را می توان به صورت زیر محاسبه نمود.

$$\begin{aligned} C_{11} &= E_{xx}(1-\nu_{yz}\nu_{zy})/\Delta \\ C_{22} &= E_{yy}(1-\nu_{xz}\nu_{zx})/\Delta \\ C_{33} &= E_{zz}(1-\nu_{xy}\nu_{yx})/\Delta \\ C_{44} &= G_{yz} \\ C_{55} &= G_{xz} \\ C_{66} &= G_{xy} \\ C_{12} &= E_{xx}(\nu_{yx}+\nu_{yz}\nu_{zx})/\Delta \\ C_{13} &= E_{xx}(\nu_{zx}+\nu_{yx}\nu_{zy})/\Delta \\ C_{23} &= E_{yy}(\nu_{zy}+\nu_{xy}\nu_{zx})/\Delta \\ \Delta &= 1-\nu_{xy}\nu_{yx}-\nu_{yz}\nu_{zy}-\nu_{xz}\nu_{zx}-2\nu_{xz}\nu_{yx}\nu_{zy} \end{aligned} \quad (8)$$

2-3- مقیاس ماکرو

در روش المان مکعبی که در این مقاله توسعه داده شده است، کامپوزیت حاوی تقویت کننده های با توزیع تصادفی توسط حجم معرفی مکعبی شکل، مدلسازی می شود. این حجم معرف خود از تعداد زیادی مکعب بسیار کوچک و هم اندازه که خاصیت اورتوتروپیک دارند تشکیل شده است. همانطور که توضیح داده شد خاصیت اورتوتروپیک این مکعب های کوچک توسط روش موری تاناکا و با توجه به هندسه و کسر حجمی تقویت کننده ها بدست می آید. جهت تقویت کننده ها در هر مکعب کوچک به صورت تصادفی لحاظ می شود و برای این کار کافیت تانسور سفتی مربوط به هر مکعب کوچک $[C]$ به طور تصادفی دو بار حول محورهای x و z و به اندازه α و β و در بازه 0 تا 90 درجه دوران کند. به این ترتیب ماتریس سفتی دوران یافته بسته به زوایای دوران به صورت $[C^{**}]_{\alpha\beta}$ در خواهد آمد:

$$\begin{aligned} [C^{*}]_{\beta} &= [T_{\sigma}]_{\beta}^{-1} [C] [T_{\varepsilon}]_{\beta} \\ [C^{**}]_{\alpha\beta} &= [T_{\sigma}]_{\alpha}^{-1} [C^{*}]_{\beta} [T_{\varepsilon}]_{\alpha} \end{aligned} \quad (9)$$

که در آن T_{σ} و T_{ε} به ترتیب معرف ماتریس های دوران تنش و کشش می باشند [14].

به این ترتیب حجم معرف به صورت مکعبی خواهد بود که روی هر ضلع آن n مکعب قرار گرفته است. به منظور یافتن روشی تحلیلی جهت محاسبه مدول یانگ این حجم معرف، از دو فرض ساده کننده استفاده می شود. در فرض اول تنش در مکعب های کوچکی که به صورت سری و در امتداد جهت مورد نظر قرار گرفته اند مساوی فرض می شود و در فرض دوم کرنش برای مکعب های کوچکی که به صورت موازی در کنار هم قرار گرفته اند یکسان در نظر گرفته می شود. به این ترتیب مدول یانگ (E_C) برای حجم معرفی که از تعداد n^3 مکعب کوچک مطابق شکل 2 تشکیل شده است به صورت زیر قابل محاسبه خواهد بود.

که در آن C_m و C_r معرف تانسور سفتی ماتریس و تقویت کننده بوده و V_f کسر حجمی تقویت کننده ها است. تانسور A به تانسور تمرکز کرنش مشهور بوده و با استفاده از رابطه زیر قابل محاسبه است:

$$A = [(1-V_f)(I+S) : (C_m)^{-1} : C_r - I] + V_f I^{-1} \quad (3)$$

که در آن S تانسوری مرتبه 4 بوده و تانسور اشلیبی نام گرفته است. این تانسور علاوه بر آنکه به هندسه تقویت کننده وابسته است به ضریب پواسون زمینه نیز بستگی دارد. برای یک بیضی گون (0) تانسور اشلیبی دارای حل تحلیلی است [11]. اثبات می شود که در تانسور اشلیبی رابطه زیر برقرار است [12]:

$$S_{ijkl} = S_{jikl} = S_{ijlk} \quad (4)$$

بنابراین می توان این تانسور را به صورت ماتریسی 6 در 6 نوشت [13]:

$$S = \begin{bmatrix} S_{1111} & S_{1122} & S_{1133} & S_{1123} & S_{1113} & S_{1112} \\ S_{2211} & S_{2222} & S_{2233} & S_{2223} & S_{2213} & S_{2212} \\ S_{3311} & S_{3322} & S_{3333} & S_{3323} & S_{3313} & S_{3312} \\ 2S_{2311} & 2S_{2322} & 2S_{2333} & 2S_{2323} & 2S_{2313} & 2S_{2312} \\ 2S_{1311} & 2S_{1322} & 2S_{1333} & 2S_{1323} & 2S_{1313} & 2S_{1312} \\ 2S_{1211} & 2S_{1222} & 2S_{1233} & 2S_{1223} & 2S_{1213} & 2S_{1212} \end{bmatrix} \quad (5)$$

تانسور اشلیبی در حالت کلی متقارن نمی باشد،

$$S_{ijkl} \neq S_{klij}$$

با فرض $a_1 = a_2 \gg a_3$ بیضی گون شکل 1، به فرم سکه ای 1 تبدیل می شود. این فرم بیشترین تشابه را به نانوذرات صفحه ای داشته و مناسب ترین گزینه برای مدل کردن گرافن به حساب می آید. درایه های غیر صفر تانسور اشلیبی به صورت زیر محاسبه می شوند [12]:

$$\begin{aligned} S_{1111} &= S_{2222} = \frac{13-8\nu_m}{32(1-\nu_m)} \pi \frac{a_3}{a_1} \\ S_{3333} &= 1 - \frac{1-2\nu_m}{1-\nu_m} \pi \frac{a_3}{4a_1} \\ S_{1122} &= S_{2211} = \frac{8\nu_m-1}{32(1-\nu_m)} \pi \frac{a_3}{a_1} \\ S_{2233} &= \frac{2\nu_m-1}{8(1-\nu_m)} \pi \frac{a_3}{a_1} \\ S_{3311} &= S_{3322} = \frac{\nu_m}{1-\nu_m} \left(1 - \frac{4\nu_m+1}{8\nu_m} \pi \frac{a_3}{a_1} \right) \\ S_{1212} &= \frac{7-8\nu_m}{32(1-\nu_m)} \pi \frac{a_3}{a_1} \\ S_{1313} &= S_{2323} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\nu_m-2}{1-\nu_m} \pi \frac{a_3}{4a_1} \right) \end{aligned} \quad (6)$$

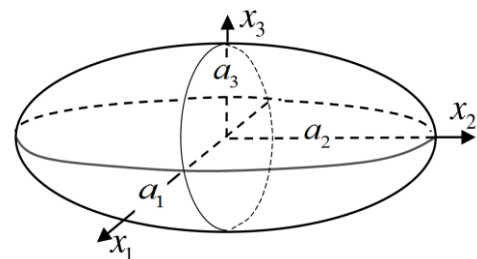


Fig. 1 Elliptical reinforcement

شکل 1 تقویت کننده بیضی گون

¹ Penny shape

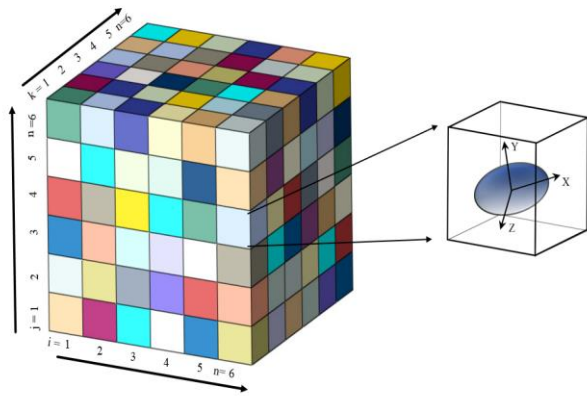


Fig. 2 A schematic RVE with cubic elements

شکل 2 حجم معرف متشکل از المان های مکعبی

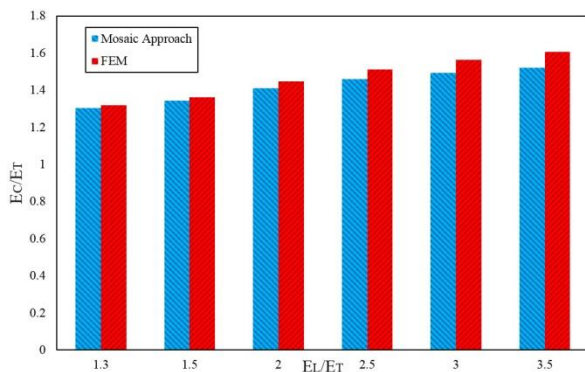


Fig. 3 A comparison between the results of FEM and the analytical approach (Eq. 10)

شکل 3 مقایسه مدول یانگ محاسبه شده برای یک کامپوزیت با استفاده از روش اجزای محدود و روش تحلیلی (معادله 10)

3- نتایج

در بخش قبل دقت روش المان مکعبی در مقایسه با روش اجزای محدود، مورد بررسی قرار گرفت. در این بخش توانایی روش چند مقیاسی مکعبی به منظور محاسبه مدول یانگ نانو کامپوزیت حاوی نانو ذرات گرافن مورد ارزیابی قرار می گیرد. به همین منظور نتایج حاصل از شبیه سازی چندمقیاسی، با نتایج تجربی تعدادی از پژوهشهای گزارش شده در مقالات مقایسه می شود.

3-1- تعیین حجم معرف مطلوب

همانطور که توضیح داده شد حجم معرف در اینجا به صورت مکعبی خواهد بود که خود از المان های مکعبی کوچکتر تشکیل شده است. از آنجایی که در این روش زاویه قرارگیری تقویت کننده ها به صورت تصادفی انتخاب می شود انتظار می رود که خواص هر حجم معرف با حجم معرف دیگر حتی با فرض یکسان بودن درصد تقویت کننده ها و شکل آنها، متفاوت باشد. بالا بردن تعداد المان های فرض شده در حجم معرف می تواند روی کاهش میزان تفاوت خواص این حجم های معرف تاثیر گذار باشد. واضح است که هر چه تعداد این المان ها بیشتر باشد در واقع تعداد حالت های بیشتری از زاویه قرار گیری تقویت کننده ها لحاظ شده است. این موضوع باعث نزدیکی هرچه بیشتر مدل به واقعیت خواهد شد. از طرف دیگر افزایش تعداد این المان ها با محدودیت محاسباتی همراه است. لذا ابتدا باید تعداد بهینه این المان ها در یک حجم معرف بدست آید. به همین منظور شبیه سازی برای یک نانو کامپوزیت حاوی

$$E_C = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \left[\sum_{i=1}^n \frac{1}{E_{ijk}} \right]^{-1} \quad (10)$$

که در آن E_{ijk} مدول الاستیک المان مکعبی شماره i, j, k (مطابق شکل 2) در جهت مشخص است و مقدار آن به کمک ماتریس نرمی انتقال یافته $a_{nm} = [C_{nm}^{**}]^{-1}$ به دست می آید.

$$E_{ijk} = \frac{1}{a_{11}} \quad (11)$$

3-2- اعتبار سنجی مدل تحلیلی به کمک روش اجزای محدود

همانطور که توضیح داده شد در این روش از فرض های ساده کننده ای به منظور محاسبه سفتی حجم معرف که خود از تعداد زیادی مکعب کوچک تشکیل شده است استفاده گردید. واضح است که این فرضیات باعث کاهش دقت روش خواهد شد، لذا برای تعیین محدودیت های این مدل نتایج حاصل از آن با نتایج بدست آمده از روش اجزای محدود مقایسه می شود. به همین منظور در نرم افزار اجزای محدود آباکوس، مکعبی مدل شد که خود از 64 مکعب کوچکتر تشکیل ($n = 4$) و جهت مواد قرار گرفته درون مکعب های کوچک (با خاصیت ارتوتروپیک) به طور تصادفی تعیین شده است. شرایط مرزی این مدل به این صورت است که روی تمامی صفحات، قیدی قرار داده می شود که صفحات فقط بتوانند به موازات حالت اول خود حرکت کرده و از هرگونه اعوجاج مصون باشند. سپس به یکی از صفحات جابجایی δ اعمال شده و نیروی عکس العمل تکیه گاه (R) در صفحه مقابل که در راستای اعمال جابجایی مقید شده است حساب می شود. به این ترتیب سفتی حجم معرف به صورت زیر به دست می آید:

$$E_C = \frac{R / (nL)^2}{\delta / (nL)} \quad (12)$$

که در آن n تعداد مکعب های کوچک قرار گرفته در یک ضلع حجم معرف و L طول هر یک از مکعب های کوچک است.

نسبت مدول الاستیک طولی (E_L) به مدول عرضی (E_T) نانو کامپوزیت را می توان به عنوان مهمترین شاخصی که فرضیات در نظر گرفته شده در روش تحلیلی را با چالش مواجه می کند قلمداد کرد. واضح است وقتی $E_L/E_T = 1$ باشد مکعب خاصیت همسانگرد پیدا کرده و انتظار می رود جواب بدست آمده از دو روش کمترین اختلاف را داشته باشند. در نمودار شکل 3 مدول یانگ محاسبه شده برای مکعب با استفاده از روش اجزای محدود و روش موزائیکی (رابطه 10) برای نسبت های مختلف E_L/E_T با هم مقایسه شده اند.

بررسی این نمودار حکایت از آن دارد که اختلاف روش تحلیلی و اجزای محدود با افزایش نسبت E_L/E_T بیشتر می شود. همچنین مطابق انتظار کمترین اختلاف نیز در حالت $E_L/E_T = 1$ قابل مشاهده است. همانطور که در این نمودار مشاهده می شود به طور کلی روش تحلیلی توانسته است با دقت خوبی در مقایسه با روش اجزای محدود سفتی مکعب را محاسبه کند. به طوری که دقت این روش برای نسبت های $E_L/E_T < 2.5$ کمتر از 3٪ است. این در حالیست که برای نانو کامپوزیتها که اغلب کسر حجمی بسیار کمی دارند (کمتر از 1 درصد) مقدار نسبت E_L/E_T به ندرت فراتر از 2 می رود.

3-2- اعتبار سنجی روش چندمقیاسی مکعبی

در این بخش، شبیه سازی برای نانوکامپوزیت هایی که مدول یانگ آنها به صورت تجربی محاسبه شده است انجام می پذیرد. در شبیه سازی، مدول یانگ نانوکامپوزیت با توجه به ابعاد و درصد نانوذرات و همچنین خواص ماده زمینه مورد محاسبه قرار می گیرد. در نمودار شکل 6، تغییرات مدول یانگ نانوکامپوزیت گرافن/ پلی پروپیلن بر حسب افزایش درصد نانوذرات گرافن، با توجه به یک مطالعه تجربی [15]، ترسیم شده است. در این نمودار مدول یانگ بدست آمده به صورت تجربی با مدول محاسبه شده توسط این شبیه سازی با هم مقایسه شده اند. همانطور که مشاهده می شود مدول یانگ تجربی به ازای مقادیر گرافن کمتر از 1 درصد، تطابق خوبی با مدول محاسبه شده از روش شبیه سازی دارد. به طور کلی با افزایش درصد نانوذرات انتظار می رود که مدول یانگ کامپوزیت بیشتر شود. ولی در واقعیت با افزایش درصد نانوذرات همیشه این روند صعودی ادامه پیدا نکرده و از جایی به بعد افزایش نانوذرات باعث کمتر شدن مدول یانگ خواهد شد. مهمترین عامل این موضوع به پدیده کلوخه شدن بر می گردد که معمولاً با افت خواص همراه است. از آنجایی که در روش حاضر، اثر پدیده کلوخه شدن لحاظ نشده، می توان انتظار داشت که تطابق نتایج تجربی و تئوری به ازای درصد های بالای نانوذره از بین برود.

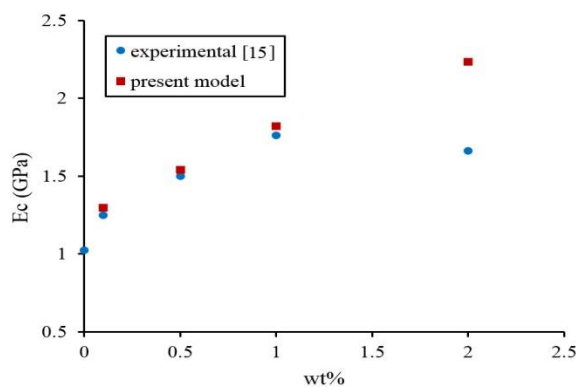


Fig. 6 nanocomposite modules versus the graphene weight fraction, comparison of an experimental [15] and analytical approaches

شکل 6 تغییرات مدول یانگ کامپوزیت با افزایش درصد نانوذرات گرافن، مقایسه نتایج تجربی [15] و تئوری

مدول یانگ برای موارد دیگری از مطالعات تجربی به کمک روش چند مقیاسی مکعبی مورد محاسبه قرار گرفت که نتایج آن در جدول 1 با هم مقایسه شده اند. در اینجا برای هر حالت از نانوکامپوزیت تعداد 30 حجم معرف ساخته و مدول هر یک جدا گانه محاسبه شد. در پایان میانگین این مدول ها به عنوان جواب نهایی گزارش شده است. همانطور که در این جدول مشاهده می شود این روش توانسته است مدول یانگ نانوکامپوزیت حاوی نانوذرات گرافن را با دقت خوبی محاسبه کند.

4- نتیجه گیری

در این پژوهش روش چند مقیاسی جدیدی پیشنهاد می شود که به کمک آن می توان مدول یانگ نانوکامپوزیت را در مقیاس ماکرو محاسبه نمود. در این روش محاسبات مربوط به مقیاس میکرو توسط روش موری-تاناکا و محاسبات

نانوذرات گرافن با ابعاد و درصد حجمی مشخص (در جدول 1) به عنوان نمونه انجام پذیرفت. در این شبیه سازی از حجم های معرفی با تعداد n^3 (مانند 14، 27، 64، 125، 216، 343، 512، 729، 1000، 1331، 1728، 2197، 2744، 3375، 4096، 4913، 5832، 6859، 8000، 9261، 10648، 12167، 13824، 15625، 17576، 19683، 21944، 24361، 26936، 29671، 32568، 35627، 38849، 42236، 45789، 49508، 53393، 57444، 61661، 66044، 70693، 75608، 80789، 86136، 91749، 97628، 103773، 110184، 116851، 123776، 130959، 138392، 146075، 154008، 162191، 170624، 179307، 188240، 197423، 206856، 216539، 226472، 236665، 247118، 257831، 268804، 279937، 291230، 302783، 314596، 326669، 338992، 351565، 364388، 377461، 390784، 404357، 418180، 432253، 446576، 461149، 475972، 491045، 506368، 521941، 537764، 553837، 570160، 586733، 603556، 620629، 637952، 655525، 673348، 691421، 709744، 728317، 747140، 766213، 785536، 805109، 824932، 845005، 865328، 885891، 906704، 927767، 949080، 970643، 992456، 1014519، 1036832، 1059395، 1082208، 1105271، 1128584، 1152147، 1175960، 1199923، 1224136، 1248599، 1273312، 1298275، 1323488، 1348951، 1374664، 1400627، 1426840، 1453303، 1479916، 1506679، 1533592، 1560755، 1588168، 1615831، 1643744، 1671907، 1699920، 1728183، 1756696، 1785459، 1814472، 1843735، 1873248، 1902911، 1932724، 1962687، 1992800، 2023063، 2053476، 2084039، 2114752، 2145615، 2176628، 2207791، 2239104، 2270567، 2302180، 2333943، 2365856، 2397919، 2429932، 2462095، 2494308، 2526571، 2558984، 2591547، 2624260، 2657123، 2690136، 2723299، 2756612، 2790075، 2823688، 2857451، 2891364، 2925427، 2959640، 2993903، 3028316، 3062879، 3097592، 3132455، 3167468، 3202631، 3237944، 3273407، 3308920، 3344583، 3380396، 3416359، 3452472، 3488735، 3525148، 3561711، 3598424، 3635287، 3672200، 3709263، 3746476، 3783839، 3821352، 3859015، 3896828، 3934791، 3972904، 4011167، 4049580، 4088143، 4126856، 4165719، 4204732، 4243895، 4283208، 4322671، 4362284، 4402047، 4441960، 4482023، 4522236، 4562599، 4603112، 4643775، 4684588، 4725551، 4766664، 4807927، 4849340، 4890903، 4932616، 4974479، 5016492، 5058655، 5100968، 5143431، 5186044، 5228807، 5271720، 5314783، 5357996، 5401359، 5444872، 5488535، 5532348، 5576311، 5620424، 5664687، 5709000، 5753463، 5798076، 5842839، 5887752، 5932815، 5977928، 6023191، 6068604، 6114167، 6159880، 6205743، 6251756، 6297919، 6344232، 6390695، 6437308، 6484071، 6530984، 6578047، 6625260، 6672623، 6720136، 6767799، 6815612، 6863575، 6911688، 6959951، 7008364، 7056927، 7105640، 7154503، 7203516، 7252679، 7301992، 7351455، 7401068، 7450831، 7500744، 7550807، 7600920، 7651183، 7701596، 7752159، 7802872، 7853735، 7904748، 7955911، 8007224، 8058687، 8110200، 8161863، 8213676، 8265639، 8317752، 8369915، 8422228، 8474691، 8527304، 8579967، 8632780، 8685743، 8738856، 8792119، 8845532، 8899095، 8952808، 9006671، 9060684، 9114847، 9169160، 9223623، 9278236، 9332999، 9387912، 9442975، 9498188، 9553551، 9609064، 9664727، 9720540، 9776503، 9832616، 9888879، 9945292، 10001855، 10058568، 10115431، 10172444، 10229607، 10286920، 10344383، 10401996، 10459759، 10517672، 10575735، 10633948، 10692311، 10750824، 10809487، 10868300، 10927263، 10986376، 11045639، 11105052، 11164615، 11224328، 11284191، 11344204، 11404367، 11464680، 11525143، 11585756، 11646519، 11707432، 11768495، 11829708، 11891071، 11952584، 12014247، 12076060، 12138023، 12199936، 12261999، 12324212، 12386575، 12449088، 12511751، 12574564، 12637527، 12699640، 12761903، 12824316، 12886879، 12949592، 13012455، 13075468، 13138631، 13201944، 13265407، 13328920، 13392583، 13456396، 13520359، 13584472، 13648735، 13713148، 13777711، 13842424، 13907287، 13972300، 14037463، 14102776، 14168239، 14233852، 14299615، 14365528، 14431591، 14497804، 14564167، 14630680، 14697343، 14764156، 14831119، 14898232، 14965495، 15032908، 15100471، 15168184، 15236047، 15304060، 15372223، 15440536، 15508999، 15577612، 15646375، 15715288، 15784351، 15853564، 15922927، 15992440، 16062103، 16131916، 16201879، 16271992، 16342255، 16412668، 16483231، 16553944، 16624807، 16695820، 16766983، 16838296، 16909759، 16981372، 17053135، 17125048، 17197111، 17269324، 17341687، 17414200، 17486863، 17559676، 17632639، 17705752، 17778915، 17852228، 17925691، 18000304، 18075067، 18149980، 18225043، 18300256، 18375619، 18451132، 18526795، 18602608، 18678571، 18754684، 18830947، 18907360، 18983923، 19060636، 19137499، 19214512، 19291675، 19368988، 19446451، 19524064، 19601827، 19679740، 19757803، 19835916، 19914179، 19992592، 20071155، 20149868، 20228731، 20307744، 20386907، 20466220، 20545683، 20625296، 20705059، 20784972، 20865035، 20945248، 21025611، 21106124، 21186787، 21267500، 21348363، 21429376، 21510539، 21591852، 21673315، 21754928، 21836691، 21918604، 22000667، 22082880، 22165243، 22247756، 22330419، 22413232، 22496195، 22579308، 22662571، 22745984، 22829547، 22913260، 23000123، 23087136، 23174299، 23261612، 23349075، 23436688، 23524451، 23612364، 23700427، 23788640، 23877003، 23965516، 24054179، 24142992، 24231955، 24321068، 24410331، 24499744، 24589307، 24678920، 24768683، 24858596، 24948659، 25038872، 25129135، 25219548، 25310111، 25400824، 25491687، 25582600، 25673663، 25764876، 25856139، 25947552، 26039115، 26130828، 26222691، 26314704، 26406867، 26499180، 26591643، 26684256، 26776919، 26869732، 26962695، 27055808، 27149071، 27242484، 27336047، 27429760، 27523623، 27617636، 27711799، 27806112، 27899575، 27993188، 28086951، 28180864، 28274927، 28369140، 28463503، 28557916، 28652479، 28747192، 28842055، 28937068، 29032231، 29127544، 29223007، 29318620، 29414383، 29510296، 29606359، 29702572، 29798935، 29895448، 29992111، 30088924، 30185887، 30282900، 30379963، 30477176، 30574539، 30672052، 30769715، 30867528، 30965491، 31063604، 31161867، 31260280، 31358843، 31457556، 31556419، 31655432، 31754595، 31853908، 31953371، 32052984، 32152747، 32252660، 32352723، 32452936، 32553299، 32653812، 32754475، 32855288، 32956251، 33057364، 33158627، 33259940، 33361403، 33462916، 33564579، 33666392، 33768355، 33870468، 33972731، 34075144، 34177707، 34280420، 34383283، 34486296، 34589459، 34692772، 34796235، 34899848، 35003611، 35107524، 35211587، 35315700، 35419963، 35524376، 35628939، 35733652، 35838515، 35943528، 36048691، 36153904، 36259267، 36364780، 36470443، 36576256، 36682219، 36788332، 36894595، 36999908، 37106371، 37212984، 37319747، 37426660، 37533723، 37640936، 37748299، 37855812، 37963475، 38071288، 38179251، 38287364، 38395627، 38504040، 38612603، 38721316، 38830179، 38939192، 39048355، 39157668، 39267131، 39376744، 39486507، 39596420، 39706483، 39816696، 39927059، 40037572، 40148235، 40259048، 40369911، 40480924، 40592087، 40703300، 40814663، 40926176، 41037839، 41149652، 41261615، 41373728، 41485991، 41598404، 41710967، 41823680، 41936543، 42049556، 42162719، 42276032، 42389495، 42503108، 42616871، 42730784، 42844847، 42959060، 43073423، 43187936، 43302599، 43417412، 43532375، 43647488، 43762751، 43878164، 43993727، 44109440، 44225303، 44341316، 44457479، 44573792، 44690255، 44806868، 44923631، 45040544، 45157607، 45274820، 45392183، 45509696، 45627359، 45745172، 45863135، 45981248، 46099511، 46217924، 46336487، 46455100، 46573863، 46692776، 46811839، 46931052، 47050415، 47169928، 47289591، 47409404، 47529367، 47649480، 47769743، 47890156، 48010719، 48131432، 48252295، 48373308، 48494471، 48615784، 48737247، 48858860، 48980623، 49102536، 49224599، 49346812، 49469175، 49591688، 49714351، 49837164، 49960127، 50083240، 50206503، 50329916، 50453479، 50577192، 50701055، 50825068، 50949231، 51073544، 51197907، 51322420، 51447083، 51571896، 51696859، 51821972، 51947235، 52072648، 52198211، 52323924، 52449787، 52575700، 52701763، 52827976، 52954339، 53080852، 53207515، 53334328، 53461291، 53588404، 53715667، 53843080، 53970643، 54098356، 54226219، 54354232، 54482395، 54610708، 54739171، 54867784، 54996547، 55125460، 55254523، 55383736، 55513099، 55642612، 55772275، 55902088، 56032051، 56162164، 56292427، 56422840، 56553403، 56684116، 56814979، 56945992، 57077155، 57208468، 57339931، 57471544، 57603307، 57735220، 57867283، 57999496، 58131859، 58264372، 58396935، 58529648، 58662511، 58795524، 58928687، 59061900، 59195263، 59328776، 59462439، 59596252، 59730215، 59864328، 59998591، 60132904، 60267367، 60401980، 60536743، 60671656، 60806719، 60941932، 61077295، 61212808، 61348471، 61484284، 61620247، 61756360، 61892623، 62029036، 62165599، 62302312، 62439175، 62576188، 62713351، 62850664، 62988127، 63125740، 63263503، 63401416، 63539479، 63677692، 63816055، 63954568، 64093231، 64232044، 64371007، 64510120، 64649383، 64788796، 64928359، 65068072، 65207935، 65347948، 65488111، 65628424، 65768887، 65909400، 66049963، 66190676، 66331539، 66472552، 66613715، 66754928، 66896291، 67037804، 67179467، 67321280، 67463243، 67605356، 67747619، 67890032، 68032595، 68175308، 68318171، 68461184، 68604347، 68747660، 68891123، 69034736، 69178499， 69322412، 69466475، 69610688، 69755051، 69899564، 70044227، 70189040، 70334003، 70479116، 70624379، 70769792، 70915355، 71061068، 71206931، 71352944، 71499107، 71645420، 71791883، 71938496، 72085259، 72232172، 72379235، 72526448، 72673811، 72821324، 72968987، 73116700، 73264563， 73412576، 73560739، 73709052، 73857515، 74006128， 74154891، 74303804， 74452867， 74602080， 74751443， 74900956， 75050619， 75200432， 75350395， 75500508， 75650771， 75801184， 75951747， 76102460， 76253323， 76404336， 76555499， 76706812， 76858275， 77009888， 77161651， 77313564， 77465627， 77617840， 77770203， 77922716， 78075379， 78228192， 78381155， 78534268， 78687431， 78840744， 78994207， 79147820， 79301583， 79455496， 79609559， 79763772， 79918135， 80072648， 80227311， 80382124， 80537087， 80692100， 80847263， 81002576， 81158039， 81313652， 81469415， 81625328， 81781391， 81937604， 82093967， 82250480， 82407143， 82563956， 82720919， 82878032， 83035295， 83192708， 83350271， 83507984， 83665847， 83823860， 83982023， 84140336， 84298799， 84457412， 84616175， 84775088， 84934151， 85093364， 85252727， 85412240， 85571903， 85731716， 85891679， 86051792， 86212055， 86372468， 86532931， 86693544， 86854307， 87015220， 87176283， 87337496， 87498859， 87660372， 87821935， 87983648， 88145511， 88307524， 88469687， 88631900， 88794263， 88956776， 89119439， 89282252， 89445215， 89608328， 89771591， 89935004， 90098567， 90262280， 90426143， 90590156， 90754319， 90918632， 91083095， 91247708， 91412471， 91577384， 91742447， 91907660， 92073023， 92238536， 92404199， 92569912， 92735775， 92901788， 93067951， 93234264， 93400727， 93567340， 93734103， 93901016， 94068079， 94235292， 94402655， 94570168， 94737831， 94905644， 95073607， 95241720， 95410083， 95578596， 95747259， 95916072， 96085035， 96254148， 96423411， 96592824， 96762387， 96932100， 97101963， 97271976， 97442139， 97612452， 97782915， 97953528， 98124291， 98295204， 98466267， 98637480， 98808843， 98980356， 99151919， 99323632， 99495495， 99667508， 99839671， 100011984， 100184547， 100357260， 100530123， 100703136， 100876299， 101049612， 101223075， 101396688， 101570451， 101744364， 101918427， 102092640， 102267003， 102441516， 102616179， 102790992， 102965955， 103141068， 103316331， 103491744， 103667307， 103842920， 104018683， 104194596， 104370659， 104546872， 104723235， 104899748， 105076411， 105253224， 105430187， 105607200， 105784363， 105961576， 106138939， 106316452， 106494115， 106671928， 106850891， 107029904， 10720

α	زاویه دوران حول محور x
β	زاویه دوران حول محور z
σ	تنش
ε	کرنش
δ	جابجایی

6- مراجع

- [1] S. N. Hosseini Abbandanak, M. H. Siadati, and R. Eslami-farsani, "Effects of functionalized graphene nanoplatelets on the flexural behaviors of basalt fibers/epoxy composites," In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, vol. 5, no. 3, pp. 315–324, 2018.
- [2] F. A. Ghasemi, M. H. Saberian, I. Ghasemi, and S. Daneshpayeh, "Experimental investigation on mechanical properties of hybrid nano-composite based on epoxy/graphene nano-platelets/ carboxylated acrylonitrile butadiene rubber," In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, vol. 5, no. 3, pp. 395–402, 2018.
- [3] E. Kazemi Khasrag, H. Siadati, and R. Eslami-Farsani, "Effect of Surface Modification of Graphene Nanoplatelets on the High Velocity Impact Behavior of Basalt Fibers Reinforced Polymer-Based Composites," In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, vol. 5, no. 1, pp. 109–116, 2018.
- [4] M. M. Shokrieh and A. Zeinedini, "Analytical prediction of mode I strain energy release rate at crack growth initiation of polymeric nanocomposites," In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, vol. 3, no. 1, pp. 1–10, 2016.
- [5] A. J. Rodriguez, M. E. Guzman, C.-S. Lim, and B. Minaie, "Mechanical properties of carbon nanofiber/fiber-reinforced hierarchical polymer composites manufactured with multiscale-reinforcement fabrics," Carbon, Vol. 49, No. 3, pp. 937–948, Mar. 2011.
- [6] M. M. Shokrieh and R. Rafiee, "Development of a full range multi-scale model to obtain elastic properties of CNT/polymer composites," Iranian Polymer Journal, vol. 21, no. 6, pp. 397–402, Jun. 2012.
- [7] M. M. Shokrieh and H. Moshrefzadeh-Sani, "A novel laminate analogy to calculate the strength of two-dimensional randomly oriented short-fiber composites," Composites Science and Technology, vol. 147, pp. 22–29, Jul. 2017.
- [8] M. M. Shokrieh and H. Moshrefzadeh-Sani, "On the constant parameters of Halpin-Tsai equation," Polymer, vol. 106, pp. 14–20, Dec. 2016.
- [9] H. Moshrefzadeh-Sani and M. M. Shokrieh, "Strength calculation of graphene/polymer nanocomposites using the combined laminate analogy and progressive damage model," Mechanics of Materials, Vol. 127, pp. 48–54, Dec. 2018.
- [10] S. M. Rahimian-Koloor, H. Moshrefzadeh-Sani, S. M. Hashemianzadeh, and M. M. Shokrieh, "The effective stiffness of an embedded graphene in a polymeric matrix," Current Applied Physics, 2018.
- [11] J. D. Eshelby, "The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems," Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, vol. 241, pp. 376–396, 1957.
- [12] J. Qu and M. Cherkaoui, Fundamentals of micromechanics of solids. John Wiley & Sons, Inc., 2006.
- [13] W. P. Kuykendall, W. D. Cash, D. M. Barnett, and W. Cai, "On the Existence of Eshelby's Equivalent Ellipsoidal Inclusion Solution," Mathematics and Mechanics of Solids, 2011.
- [14] T.-W. Chou, Microstructural design of fiber composites. Cambridge University Press, 1992.
- [15] P. Song, Z. Cao, Y. Cai, L. Zhao, Z. Fang, and S. Fu, "Fabrication of exfoliated graphene-based polypropylene nanocomposites with enhanced mechanical and thermal properties," Polymer, vol. 52, no. November 2016, pp. 4001–4010, 2011.

مقیاس ماکرو توسط روشی تحلیلی تحت عنوان روش المان مکعبی انجام می‌پذیرد. با استفاده از روش اجزای محدود دقت روش المان مکعبی ارزیابی و مشخص می‌شود که این روش برای کامپوزیت‌های دارای تقویت کننده‌های ناپیوسته که نسبت سفتی طولی به عرضی آنها کمتر از 2/5 است خطایی کمتر از 3٪ دارد. به این ترتیب می‌توان این روش را برای نانوکامپوزیت‌های با کسر حجمی کمتر از 1٪ مورد استفاده قرار داد. در ادامه چندین مورد از نتایج تجربی موجود در مقالات توسط روش چند مقیاسی مکعبی مورد شبیه سازی واقع شد. مقایسه نتایج حکایت از آن دارد که این روش قادر است مدول یانگ نانوکامپوزیت حاوی نانوذرات گرافن را با دقت قابل قبولی محاسبه کند.

جدول 1 مقایسه مدول یانگ تجربی و تحلیلی برای نانوکامپوزیت حاوی نانوذرات گرافن

Table 1 a comparison between the analytical and experimental results

محققین	سفتی زمینه (Gpa)	کسر وزنی wt%	نتایج تجربی - سفتی کامپوزیت (Gpa)	نتایج مدلسازی - سفتی کامپوزیت (Gpa)	خطا %
سونگ و همکاران [15]	1.02	0.1 0.5 1	1.25 1.5 1.76	1.3 1.54 1.82	4 2.7 3.4
فانگ و همکاران [16]	1.45	0.5	2.1	1.98	5.7
لیانگ و همکاران [17]	2.13	0.9 0.3	2.28 2.41	2.3 2.53	0.9 5
شکرپه و همکاران [18]	2.5	0.5 0.05 0.1 0.25	2.84 2.52 2.62 2.7	2.75 2.57 2.63 2.82	3.2 2 0.4 4.4
پاتز [19]	3.43	0.5 0.25	4.19 3.65	4.16 3.82	13.5 4.6
		1	4.39	4.75	0.7 8.2

5- فهرست علائم

E_g^L	مدول یانگ گرافن در راستای درون صفحه‌ای (GPa)
E_g^N	مدول یانگ گرافن در راستای عمود به صفحه (GPa)
L_g	قطر گرافن (nm)
C	تانسور سفتی کامپوزیت
C_m	تانسور سفتی زمینه
C_r	تانسور سفتی تقویت کننده
A	تانسور تمرکز تنش
S	تانسور اشیلی
I	تانسور همانی
V_f	کسر حجمی
ν	ضریب پواسون
a	شعاع بیضی گون
E	مدول یانگ
G	مدول برشی
T	تانسور دوران
R	نیروی عکس العمل تکیه گاه
n	تعداد المان در هر ضلع مکعب

علایم یونانی

- [16] M. Fang, K. G. Wang, H. B. Lu, Y. L. Yang, and S. Nutt, "Covalent polymer functionalization of graphene nanosheets and mechanical properties of composites," *Journal of Materials Chemistry*, vol. 19, pp. 7098–7105, 2009.
- [17] J. Liang, Y. Huang, L. Zhang, Y. Wang, Y. Ma, T. Cuo, and Y. Chen, "Molecular-level dispersion of graphene into poly(vinyl alcohol) and effective reinforcement of their nanocomposites," *Advanced Functional Materials*, vol. 19, pp. 2297–2302, 2009.
- [18] M. M. Shokrieh, M. Esmkhani, Z. Shokrieh, and Z. Zhao, "Stiffness prediction of graphene nanoplatelet/epoxy nanocomposites by a combined molecular dynamics-micromechanics method," *Computational Materials Science*, vol. 92, pp. 444–450, 2014.
- [19] J. R. Potts, S. H. Lee, T. M. Alam, J. An, M. D. Stoller, R. D. Piner, and R. S. Ruoff, "Thermomechanical properties of chemically modified graphene/poly(methyl methacrylate) composites made by in situ polymerization," *Carbon*, vol. 49, no. 8, pp. 2615–2623, Jul. 2011.