



Three-dimensional micromechanical modelling of effective elastic properties of graphene nanoplatelet-reinforced polymer nanocomposite using a HFGMC-based homogenization approach

H. Mehdipour, A. Rohani Bastami*, M. H. Soorjee

Faculty of Mechanical and Energy Engineering, Shahid Beheshti University, Tehran, Iran.

ABSTRACT: A three-dimensional analytical micromechanical model based on the unit cell is extended to extract the elastic properties of graphene-nanoplatelet reinforced polymer nanocomposites. Graphene-nanoplatelet /epoxy interphase region changing gradually is considered elastic with isotropic behavior. To simulate the random distribution of graphene, the geometry of the representative volume element of the nanocomposite is divided into a three-dimensional cubic with $N_\alpha \times N_\beta \times N_\gamma$ subcells. The obtained results are compared with the available research studies. Moreover, the effect of parameters such as the volume of graphene-nanoplatelet in the epoxy resin, the graphene-nanoplatelet aggregation, and the interphase region are investigated on the response of the nanocomposite. It is shown that the aggregation of graphene-nanoplatelet depends on its volume fraction. The results show that the elastic properties obtained from the present micromechanical model taking into account the random distribution, the agglomeration of nanoparticles, and also interphase are close to the experimental data.

Review History:

Received: Dec. 27, 2022

Revised: Mar. 24, 2023

Accepted: Apr. 30, 2023

Available Online: May, 13, 2023

Keywords:

Nanocomposite

Graphene nanoplatelet

Graphene size effect

Interphase region

Graphene aggregation

1- Introduction

In recent years, graphene nanoplatelets (GNPs) reinforced polymer nanocomposites have gained significant importance due to their exceptional mechanical properties and multifunctional capabilities. Several micromechanical methods have been presented to determine the properties of polymer nanocomposites reinforced with GNPs. However, some of these methods, such as Mori-Tanaka and Halpin-Tsai, lack the ability to accurately estimate the properties of nanocomposites for low and high-weight fractions of GNP [1, 2]. Moreover, they do not consider a complete set of parameters that affect the properties of nanocomposites. Consequently, the current micromechanical methods cannot accurately estimate the properties of GNP/polymer nanocomposites under different laboratory conditions. The purpose of this article is to introduce a new micromechanical method based on HFGMC¹ approach, which increases the accuracy of estimating the properties of nanocomposites. The article covers the most important factors introduced by the experimental studies, influencing the properties of nanocomposites including the GNP content, aggregation and orientation of GNPs, interphase region between GNPs and resin, and GNP size. It will be shown that increasing the content of graphene leads to an increase in aggregation

inside the nanocomposite, which reduces the properties of the nanocomposite.

2- Theory basics

To model and predict the effective properties of the nanocomposite, the HFGMC micromechanical method is used. In this method, a repeating unit cell (RUC) is considered to represent the periodic microstructure of the material, as shown in Fig. 1.

A representative volume element (RVE) is defined as the smallest repeating unit, consisting of three types of cells containing GNP, interphase, and epoxy resin, providing comprehensive information of nanocomposite. In the HFGMC formulation, two coordinate systems are used. The first is a global coordinate system (X_1, X_2, X_3) that governs the periodic composite, representing the periodic heterogeneous material. In addition, a local coordinate system $(\bar{y}_1^{(\alpha)}, \bar{y}_2^{(\beta)}, \bar{y}_3^{(\gamma)})$ is defined at the center of each $\alpha\beta\gamma$ subcell, as illustrated in Fig. 1b. The quadratic displacement expansion of the subcell in the local coordinate system is expressed as equation (1) [4].

$$u_i^{(\alpha\beta\gamma)} = \bar{\epsilon}_{ij} x_j + w_{i(000)}^{(\alpha\beta\gamma)} + \bar{y}_1^{(\alpha)} w_{i(100)}^{(\alpha\beta\gamma)} + \bar{y}_2^{(\beta)} w_{i(010)}^{(\alpha\beta\gamma)} + \bar{y}_3^{(\gamma)} w_{i(001)}^{(\alpha\beta\gamma)} + \frac{1}{2} \left\{ \frac{\alpha^2}{3\bar{y}_1} \frac{d^2}{4} \right\} w_{i(200)}^{(\alpha\beta\gamma)} + \frac{1}{2} \left\{ \frac{\beta^2}{3\bar{y}_2} \frac{d^2}{4} \right\} w_{i(020)}^{(\alpha\beta\gamma)} + \frac{1}{2} \left\{ \frac{\gamma^2}{3\bar{y}_3} \frac{d^2}{4} \right\} w_{i(002)}^{(\alpha\beta\gamma)} \quad (1)$$

High-Fidelity Generalized Method of Cells 1

*Corresponding author's email: A_rohani@sbu.ac.ir



Copyrights for this article are retained by the author(s) with publishing rights granted to Amirkabir University Press. The content of this article is subject to the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY-NC 4.0) License. For more information, please visit <https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode>.

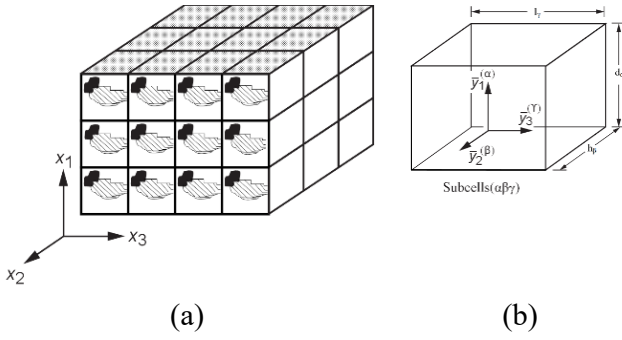


Fig.1. Schematic representation of multiphase composite with three-dimensional periodic microstructures[3]

Where $\bar{\epsilon}_{ij}$ represents the global average strain components, and $d_\alpha h_\beta l_\gamma$ represent the size of the $\alpha\beta\gamma$ subcell. By defining the three-dimensional equilibrium equation in a $\alpha\beta\gamma$ subcell, applying periodic boundary conditions of RVE displacement and traction in three directions, and determining continuity conditions of surface displacement and surface traction between neighboring subcells assuming the existence of a complete connection between subcells, a system of $21N_\alpha N_\beta N_\gamma$ independent equations can be obtained, which can be shown symbolically according to equation (2).

$$\bar{K}_{P \times P} U_{P \times 1} = \bar{F}_{P \times 1}, \quad P = 21\bar{N}_\alpha \bar{N}_\beta \bar{N}_\gamma \quad (2)$$

Finally, the effective elastic stiffness matrix RVE is derived as equation (3) [3].

$$C^* = \frac{1}{DHL} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \sum_{\beta=1}^{N_\beta} \sum_{\gamma=1}^{N_\gamma} d_\alpha h_\beta l_\gamma C^{(\alpha\beta\gamma)} A^{(\alpha\beta\gamma)} \quad (3)$$

3- Modeling of parameters affecting the properties of nanocomposite

Various studies have shown that the stiffness of the interphase is in the range between the stiffness of the matrix and the stiffness of nano reinforcement. Therefore, the properties of the interphase gradually change in the range between the matrix and nano reinforcement [5] and can be computed by equation (4).

$$E^{Int} = \frac{1}{1-\alpha} \int_a^1 \left[E^{GNP} - (E^{GNP} - E^m) \left| \frac{r-\alpha}{1-\alpha} \right|^e \right] dr, \quad \alpha = \frac{R_{GNP}}{R_{GNP} + t_{Int}} \quad (4)$$

E^m , E^{GNP} , and E^{Int} , R_{GNP} , t_{Int} , and e respectively express the stiffness of epoxy resin, GNP stiffness, interphase stiffness, the distance of the larger face from the center of GNP, thickness, and adhesion coefficient [6].

To model the state of GNP agglomeration, first RVE is filled with N_{GNP} of GNP nanoparticles with random orientation, N_{GNP} is calculated in terms of volume fraction as equation (5).

$$N_{GNP} \times W_{GNP} \times L_{GNP} \times H_{GNP} = V_{GNP} \times D \times L \times H \quad (5)$$

In relation (5), W_{GNP} , L_{GNP} , and H_{GNP} are respectively the width, length, and thickness of GNP. It is worth mentioning that according to the state of GNP aggregation, a certain number of GNPs are agglomerated (which is expressed by N_{ag}) and the value of N_{ag} can be determined as equation (6).

$$N_{ag} = (\xi_{ag} \times V_{GNP}) N_{GNP} \quad (6)$$

The volume of the interphase around GNP can be calculated using equation (7).

$$V_{Int} = V_{GNP} (DLH) \left[\frac{8t_{Int}^3}{W_{GNP} L_{GNP} H_{GNP}} + 4t_{Int}^2 \left(\frac{1}{W_{GNP} L_{GNP}} + \frac{1}{W_{GNP} H_{GNP}} + \frac{1}{L_{GNP} H_{GNP}} \right) + 2t_{Int} \left(\frac{1}{W_{GNP}} + \frac{1}{H_{GNP}} + \frac{1}{L_{GNP}} \right) \right] \quad (7)$$

The direction of randomly oriented nanoparticles can be described by two Euler angles ϕ and ψ . If the probability distribution of the direction of GNP follows a continuous function $p(\phi, \psi)$, the effective stiffness tensor of nanocomposite C^{random} can be expressed according to the stiffness matrix of unidirectional nanocomposite $C^{aligned}$ in the form of equation (8) [6].

$$\begin{aligned} [C^{random}] &= \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} [C^{aligned}] (\phi, \psi) p(\phi, \psi) \sin(\psi) d\psi d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} p(\phi, \psi) \sin(\psi) d\psi d\phi} \\ p(\phi, \psi) &= 1/2\pi \\ K^{random} &= \frac{1}{9} [4k + 2(l+l') + n'] \\ G^{random} &= \frac{1}{15} [k - (l+l') + n' + 6(m+p')] \\ E^{random} &= \frac{9K^{random} G^{random}}{3K^{random} + G^{random}} \\ \nu^{random} &= \frac{3K^{random} - 2G^{random}}{6K^{random} + 2G^{random}} \end{aligned} \quad (8)$$

n', k, l, l', m, p' are Hill's constants, which correspond to the stiffness matrix of the nanocomposite reinforced with oriented GNP.

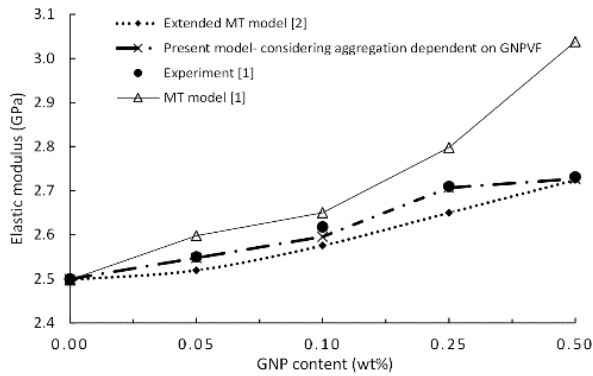


Fig. 2. The variation of elastic modulus of GNP-reinforced nanocomposite at GNP contents

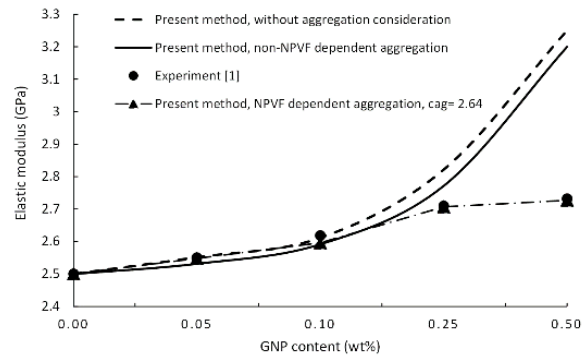


Fig. 3. The variation of the effective properties of nano-composites at GNP contents versus aggregation factor

4- Results and discussion

First, the effects of the weight fraction of reinforcement on the effective properties of GNP/EPON 828 epoxy nanocomposite are investigated. The present model is validated and compared with the experimental results presented in the references [11]. The properties of GNP are $E_1 = 3.251$ GPa, $E_2 = 294.3$ GPa, $\nu_{21} = 0.455$, $\nu_{23} = 0.0159$, $G_{12} = 1$ MPa. Also, the properties of EPON 862 epoxy resin are $E = 2.7$ GPa and $\nu = 0.3$. As can be seen in Fig. 2, the predictions of the present model considering the aggregation of GNP are in much better agreement with the experimental data [1] compared to the estimates of the Mori-Tanaka model developed in both studies [1, 2]. This difference in the prediction accuracy of the present model is much more obvious compared to the models [1, 2] in higher GNP contents. Up to 0.1 wt%, the prediction difference between the present model and the two models [1, 2] is acceptable, and this value can be attributed to the good dispersion of GNP inside the epoxy. With the increase of GNP contents and cluster formation, the current model is able to estimate the elastic modulus with better accuracy than the other two methods, taking into account the aggregation of nanoparticles.

In order to investigate the effect of GNP aggregation depending on the volume fraction of GNP, the response curve in Fig. 3 shows that up to 0.1% GNP content, due to the low weight fraction, we will see a good dispersion of GNP nanoparticles inside the resin.

However, as the content of GNP nanoparticles increases more and more, the aggregation of nanoparticles increases, which gradually leads to the destruction of the composite properties and the decrease in the rate of increase of its elastic modulus. In Fig. 6, the elastic modulus of the graphene-reinforced polymer composite is calculated for different weight fractions of GNP, considering the interphase region and without it.

5- Conclusion

Contrary to the Mori-Tanaka and Halpin-Tsai methods, the HFGMC method is capable of estimating nanocomposite properties in low-volume and high-volume fractions of

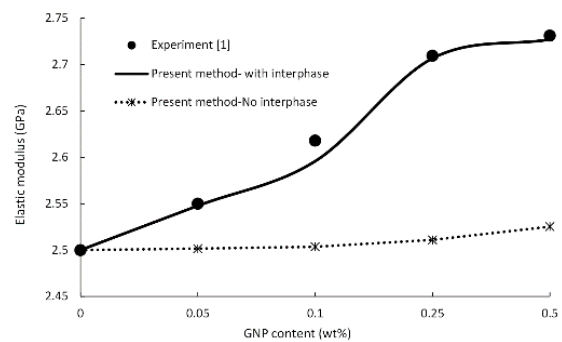


Fig. 4. The variation of the effective properties of nano-composites at GNP contents versus interphase

graphene with acceptable accuracy. The result indicates that the existence of an interphase between graphene and the matrix significantly strengthens the nanocomposite's properties. It is crucial to consider this factor in the micromechanical model. Additionally, by increasing the content of graphene, the aggregation of nanoparticles within the matrix increases. Beyond a certain amount of graphene, the effective properties of the nanocomposite are decreased. Therefore, it is necessary to take into account a threshold value for the graphene content in the construction of nanocomposites to prevent decreasing the effective properties of the nanocomposite.

References

- [1] M.M. Shokrieh, M. Esmkhani, Z. Shokrieh, Z. Zhao, Stiffness prediction of graphene nanoplatelet/epoxy nanocomposites by a combined molecular dynamics–micromechanics method, *Computational materials science*, 92 (2014) 444-450.
- [2] M. Hassanzadeh-Aghdam, Evaluating the effective creep properties of graphene-reinforced polymer nanocomposites by a homogenization approach, *Composites Science and Technology*, 209 (2021) 108791.
- [3] J. Aboudi, S.M. Arnold, B.A. Bednarczyk, *Micromechanics of composite materials: a generalized multiscale analysis approach*, Butterworth-Heinemann, 2012.

- [4] T.M. Ricks, T.E. Lacy Jr, E.J. Pineda, B.A. Bednarczyk, S.M. Arnold, Computationally efficient High-Fidelity Generalized Method of Cells micromechanics via order-reduction techniques, *Composite Structures*, 156 (2016) 2-9.
- [5] K.A. Zarasvand, H. Golestanian, Investigating the effects of number and distribution of GNP layers on graphene reinforced polymer properties: Physical, numerical and micromechanical methods, *Composites Science and Technology*, 139 (2017) 117-126.
- [6] Y.-N. Rao, H.-L. Dai, Micromechanics-based thermo-viscoelastic properties prediction of fiber reinforced polymers with graded interphases and slightly weakened interfaces, *Composite Structures*, 168 (2017) 440-455.

HOW TO CITE THIS ARTICLE

H. Mehdipour, A. Rohani Bastami, M. H. Soorgee , Three-dimensional micromechanical modelling of effective elastic properties of graphene nanoplatelet-reinforced polymer nanocomposite using a HFGMC-based homogenization approach , Amirkabir J. Mech Eng., 55(4) (2023) 101-104.

DOI: [10.22060/mej.2023.22059.7560](https://doi.org/10.22060/mej.2023.22059.7560)





مدل سازی میکرومکانیکی سه بعدی به منظور پیش بینی خواص موثر الاستیک نانوکامپوزیت پلیمری تقویت شده با گرافن نانوپلیتلت

هادی مهدی پور، عباس روحانی بسطامی*، محمد حسین سورگی

دانشکده مهندسی مکانیک و انرژی، دانشگاه شهید بهشتی، تهران، ایران.

تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۴۰۱/۱۰/۰۶
بازنگری: ۱۴۰۲/۰۱/۰۴
پذیرش: ۱۴۰۲/۰۲/۱۰
ارائه آنلاین: ۱۴۰۲/۰۲/۲۳

کلمات کلیدی:

نانوکامپوزیت
گرافن نانوپلیتلت
خواص موثر الاستیک
اثر اندازه گرافن
فاز میانی

خلاصه: در این پژوهش، یک روش میکرومکانیکی تحلیلی سه بعدی بر پایه سلول واحد جهت استخراج خواص الاستیک نانوکامپوزیت های پلیمری تقویت شده با گرافن نانوپلیتلت ارائه می شود. برای این مدل، یک المان حجمی نماینده نانوکامپوزیت که دربرگیرنده تمامی خصوصیات نانوکامپوزیت است و شامل سه فاز تقویت کننده گرافن نانوپلیتلت، زمینه پلیمری و ناحیه فازمیانی که خواص آن به تدریج تغییر می کند، در نظر گرفته می شود. به منظور شبیه سازی جهت گیری تصادفی ذرات گرافن نانوپلیتلت، هندسه المان حجمی نماینده نانوکامپوزیت به سلول مکعبی در سه بعد درون المان حجمی نماینده تقسیم می شود. اندازه گرافن نانوپلیتلت و تجمع وابسته به کسر حجمی گرافن نانوپلیتلت ها به عنوان دو فاکتور مهم تاثیرگذار بر روی خواص نانوکامپوزیت، از طریق دو ایده جدید مدل سازی می شوند. به منظور اعتبارسنجی مدل ارائه شده، ابتدا نتایج بدست آمده، با داده های تجربی و مدل های میکرومکانیکی پیشین در دسترس مقایسه می شوند. سپس، اثر پارامترهایی مانند درصد کسر حجمی، اندازه نانوذره، اثر تجمع و همچنین جهت گیری تصادفی گرافن نانوپلیتلت ها درون رزین اپوکسی، و ضخامت فازمیانی بر پاسخ نانوکامپوزیت بررسی می شود. نتایج نشان می دهد که تجمع گرافن نانوپلیتلت وابسته به کسر حجمی آن است و خواص الاستیک بدست آمده از مدل میکرومکانیکی حاضر با جهت گیری تصادفی ذرات گرافن نانوپلیتلت با در نظر گرفتن اندازه و تجمع نانوذرات و همچنین توجه به فازمیانی، توافق بسیار خوبی با داده های تجربی دارد.

۱- مقدمه

بین دو فاز نانوکامپوزیت ایفا کنند [۲]. علاوه بر این، گرافن نانوپلیتلت ها هزینه تولید پایین تری دارند [۲]. تحقیقات زیادی بر روی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری تقویت شده با گرافن در چند سال گذشته انجام شده است. نتایج نشان داد که استحکام ماتریس پلیمر می تواند از طریق افزودن مقدار کم گرافن نانوپلیتلت (به طور کلی کم تر از ۲ درصد کسر وزنی^۴)، بدلیل اثر تقویت کنندگی عالی گرافن با پراکندگی یکنواخت، افزایش یابد. به عنوان نمونه، در پژوهش صورت گرفته در سال ۲۰۱۳، کینگ و همکارانش [۳] موفق شدند گرافن نانوپلیتلت ها را با اپوکسی^۵ ترکیب کنند و مدول الاستیک^۶ اپوکسی خالص را از ۲/۷۲ به ۳/۳۶ گیگاپاسکال افزایش دهند. همچنین، رفیعی و همکاران [۴] دریافتند که مدول الاستیک، استحکام کششی و چقرمگی شکست نانوکامپوزیت ۰/۱±۰/۰۰۲ درصد کسر وزنی اپوکسی / گرافن نانوپلیتلت به ترتیب ۰/۳۱٪، ۰/۴۰٪ و ۰/۵۳٪ بیشتر از اپوکسی خالص است. در پژوهشی دیگر [۵]، نویسندگان گزارش کردند که

نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری با تقویت کننده های نانوساختار^۱ که در سال های اخیر اهمیت فزاینده ای پیدا کرده اند، بدلیل خواص مکانیکی عالی و ویژگی های چند عملکردی، می توانند به طور گسترده در سازه های مهندسی از جمله اجزای پیشرفته در صنعت هوافضا استفاده شوند [۱]. نانولوله های کربنی^۲ و نانوذرات گرافن دارای استحکام و سفتی استثنایی هستند و برای افزایش عملکرد مکانیکی نانوکامپوزیت های پلیمری مناسب می باشند. در مقایسه با نانوتقویت کننده های سنتی، مانند نانوذرات سرامیکی یا نانولوله های کربنی، گرافن نانوپلیتلت ها^۳ که از چندین لایه به گرافن تشکیل شده اند، می توانند اثر تقویتی بهتری را نسبت به نانولوله های کربنی ارائه دهند. زیرا دارای سطح ویژه بسیار بزرگتری هستند که می تواند نقش کلیدی را در انتقال بار برشی

- 1 Nanostructure
- 2 Carbon nanotubes (CNTs)
- 3 Graphene nanoplatelets (GNPs)

*نویسنده عهده دار مکاتبات: a_rohani@sbu.ac.ir



تصاویر میکروسکوپی روبشی در آن، می‌توان دریافت که وضعیت کمی تجمع نانوذرات به کسرحمی نانوذرات وابسته است و این بدین معنی است که هرچه کسرحمی نانوذرات افزایش یابد، وضعیت تجمع درون نانوکامپوزیت بیشتر می‌شود. شکل ۱ تصاویر میکروسکوپی روبشی گرفته شده از مرجع [۲۰] را نشان می‌دهد. شکل ۱-الف تجمع توده‌ای گرافن نانوپلیتلت‌ها را نشان می‌دهد که برای وضوح بیشتر این ناحیه تجمع با محدوده‌ای به رنگ قرمز نشان داده شده‌است. همچنین گرافن نانوپلیتلت‌های پراکنده نیز مشاهده می‌شود. وسعت تجمع را می‌توان در بزرگنمایی بالاتر در شکل ۱-ب در خوشه‌بندی قابل توجهی از گرافن نانوپلیتلت‌ها مشاهده نمود.

علاوه بر آزمایش‌های تجربی، رویکردهای نظری ابزارهای مفیدی برای ارزیابی خواص موثر کامپوزیت‌ها هستند. تاکنون روش‌های مختلفی جهت پیش‌بینی خواص موثر نانوکامپوزیت پلیمری تقویت شده با گرافن ارائه شده است که هر یک از این روش‌ها به بررسی اثر تعدادی از فاکتورهای ذکر شده، بر روی خواص نانوکامپوزیت پلیمری تقویت شده با گرافن نانوپلیتلت‌ها پرداخته‌اند. مدل‌های موری-تاناکا و هالپین-تسای [۲، ۸] برای پیش‌بینی خواص الاستیک نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با گرافن نانوپلیتلت‌ها مورد استفاده قرار گرفته‌اند. به‌منظور بررسی فاکتورهای تاثیرگذار بر روی خواص نانوکامپوزیت تقویت شده با گرافن نانوپلیتلت، در پژوهش انجام شده در مرجع [۱۸]، پارامترهای مختلفی شامل تعداد لایه‌های گرافن نانوپلیتلت‌ها، جهت‌گیری گرافن نانوپلیتلت‌ها، توزیع گرافن نانوپلیتلت‌ها و فاز میانی درجه‌بندی شده نانوکامپوزیت پلیمری تقویت شده با گرافن نانوپلیتلت مورد بررسی قرار گرفته است. جهت بررسی اثر تعداد لایه‌های گرافن نانوپلیتلت بر روی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت، نویسندگان سه مدل مختلف شامل یک، دو و سه لایه گرافن نانوپلیتلت را مورد بررسی قرار دادند. آنها گزارش کردند که مدول طولی نانوکامپوزیت با افزایش تعداد لایه‌های گرافن کاهش می‌یابد [۱۸].

لایه‌ای شدن گرافن نانوپلیتلت‌ها پدیده‌ای است که در زمان ساخت نانوکامپوزیت مشاهده می‌شود و خواص موثر نانوکامپوزیت را کاهش می‌دهد [۲۱]. با این وجود، علاوه بر لایه‌ای شدن گرافن نانوپلیتلت‌ها درون نانوکامپوزیت، نتایج آزمایشگاهی نشان می‌دهد که گرافن نانوپلیتلت‌های درون نانوکامپوزیت دارای ابعاد مختلفی در مقیاس نانو هستند که تغییر اندازه این نانوذرات می‌تواند بر روی خواص کامپوزیت اثرگذار باشد. به این ترتیب که با افزایش نسبت منظر (نسبت طول به ضخامت) نانوذره، بدلیل افزایش نسبت سطح به حجم گرافن نانوپلیتلت‌ها درون نانوکامپوزیت، خواص

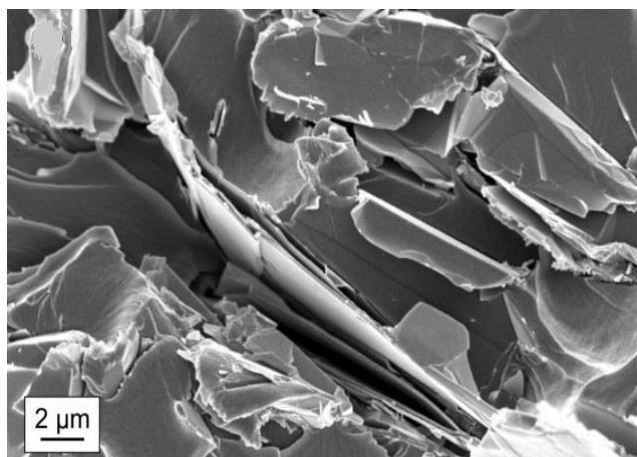
استحکام تسلیم نانوکامپوزیت پلی‌تترافلورواتیلن^۱ پر شده با ۳٪ کسروزی گرافن نانوپلیتلت، در مقایسه با پلی‌تترافلورواتیلن خالص، ۶۰٪ نانوکامپوزیت را بهبود می‌دهد. اثر اندازه و مقدار محتوای تقویت‌کننده گرافن بر خواص کششی کامپوزیت‌های پلی‌پروپیلن^۲ با استفاده از آزمایش کشش با نرخ کرنش ۳۰۰ مورد بررسی قرار گرفت [۶]. نتایج نشان داد که ارتباط معناداری در استحکام تسلیم و استحکام شکست نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده توسط گرافن با اندازه‌های مختلف وجود دارد. بنابراین، بررسی اثرات اندازه گرافن بر خواص موثر نانوکامپوزیت‌ها از اهمیت بالایی برخوردار است. با وجود تست‌های پرهزینه و شبیه‌سازی‌های مولکولی، وابستگی به اندازه نانوذره گرافن نیز در تحقیق حاضر با یک ایده جدید انجام می‌شود.

بر طبق آزمایشات تجربی انجام شده برای بررسی خواص ماتریس پلیمری تقویت شده با گرافن نانوپلیتلت‌ها، فاکتورهای مختلفی مانند کسر حجمی گرافن نانوپلیتلت‌ها [۷-۱۰]، ناحیه فاز میانی [۲، ۹، ۱۱، ۱۲]، تجمع گرافن نانوپلیتلت‌ها [۲، ۱۳] و جهت‌گیری گرافن نانوپلیتلت‌ها درون نانوکامپوزیت [۲، ۷، ۸]، تاثیر مستقیمی بر روی خواص موثر نانوکامپوزیت‌ها دارد. بنابراین، به‌منظور پیش‌بینی دقیق خواص موثر نانوکامپوزیت پلیمری تقویت‌شده با گرافن، توجه به تمامی پارامترهای ذکر شده در مدل‌سازی ضروری می‌باشد. سطح مشترک ماتریس-تقویت‌کننده نقطه مورد علاقه محققین در تحقیقات بر روی نانوکامپوزیت می‌باشد. [۱۴] وضعیت پیچیده‌ای از فعل و انفعالات فیزیکی و شیمیایی موجود در سطح مشترک در نتیجه ناپیوستگی‌های هندسی و مواد بین تقویت‌کننده و ماتریس و اجزای پلیمری واکنش‌ن داده در نانوکامپوزیت‌های پلیمری باعث شده است تا محققان یک فاز متمایز جدید به نام فاز میانی در مجاورت سطح مشترک در نظر بگیرند [۱۵]. پژوهش‌های مختلفی نشان داده‌اند که سفتی فاز میانی در محدوده بین سفتی ماتریس و سفتی نانوتقویت می‌باشد. بنابراین خواص فاز میانی به تدریج در محدوده بین ماتریس و نانوتقویت تغییر می‌کند [۱۶-۱۸].

علیرغم ویژگی‌های برجسته نانوذرات، یکی از مشکلات اصلی در فرایند تولید نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانوذرات که مانع افزایش خواص نانوکامپوزیت می‌شود، وضعیت پراکندگی ضعیف نانوذرات است که در نهایت منجر به تجمع نانوذرات درون نانوکامپوزیت و در نتیجه کاهش ناحیه فازمیانی می‌شود. بنابراین بدلیل کاهش برهمکنش سطحی پلیمر-نانوذرات، خواص موثر نانوکامپوزیت کاهش می‌یابد [۱۹]. بر اساس تحقیقات تجربی بر روی نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده توسط نانوذرات تجمیع‌شده [۲۰] و مطالعه

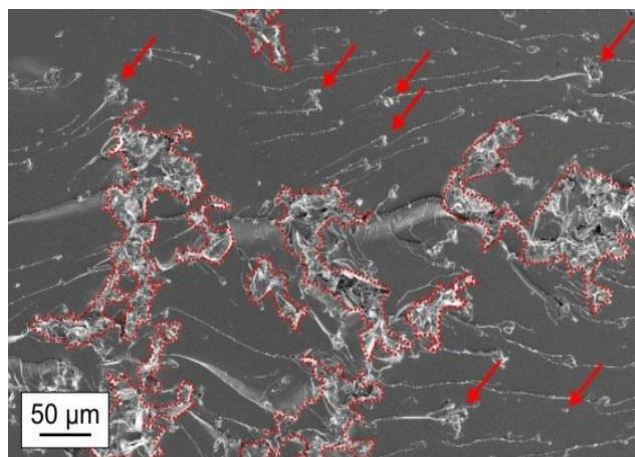
1 Polytetrafluoroethylene (PTFE)

2 Polypropylene (PP)



ب- بزرگنمایی تصویر میکروسکوپی از تجمع گرافن نانوپلیتلتها

b) Magnification of the microscopic image of the aggregation of graphene nanoplatelets



الف- تجمع گرافن نانوپلیتلتها در خوشه‌هایی با اندازه‌های متفاوت

a) Aggregation of graphene nanoplatelets in clusters with different sizes

شکل ۱. اپوکسی اصلاح شده با ۱.۰ wt% XG-H-THF. نواحی محصور قرمز رنگ، خوشه‌های بزرگ و خوشه‌های کوچک‌تر از گرافن نانوپلیتلتها هستند که با فلش‌های قرمز مشخص شده‌اند [۲۰].

Fig. 1. Epoxy modified with XG-H-THF 1.0 wt%. The red enclosed areas are large clusters and smaller clusters of GNPs, marked with red arrows [20].

بزرگ باشد، نتایج قابل قبولی را می‌دهد [۲۲].
شکرپه و همکاران [۸] با استفاده از ترکیبی از روش میکرومکانیکی و روش دینامیک مولکولی سعی در تخمین سفتی نانوکامپوزیت‌های اپوکسی تقویت شده با گرافن نانوپلیتلتها داشته‌اند. آن‌ها، از هر دو روش موری-تاناکا و هالپین-تسای جهت پیش‌بینی سفتی نانوکامپوزیت استفاده کرده‌اند. بر طبق نتایج گزارش شده از این پژوهش، مدل موری-تاناکا در مقایسه با مدل هالپین-تسای با نتایج آزمایش‌ها در کسر وزنی کم نانوذرات (کم‌تر از ۰.۲۵٪) سازگارتر است. درحالی‌که، مدل میکرومکانیکی هالپین-تسای در کسر وزنی بالای نانوذرات (بیشتر از ۰.۲۵٪) قابل اعتمادتر است. بنابراین برطبق گزارش بدست‌آمده، هیچ یک از مدل‌های میکرومکانیکی موری-تاناکا و هالپین-تسای به تنهایی قادر به تخمین دقیق خواص الاستیک در تمامی کسرهای وزنی نانوذرات نیستند. در برخی از پژوهش‌ها، روش تعمیم‌یافته سلول‌ها^۱ به منظور پیش‌بینی خواص موثر نانوکامپوزیت‌ها بکاربرده شده است [۹، ۱۱]. در این پژوهش‌ها بسته نرم‌افزاری MAC-GMC به منظور پیش‌بینی خواص موثر نانوکامپوزیت‌ها استفاده شده‌است. با این حال در هر دو پژوهش، اثر پارامتر مهمی مانند اثر اندازه نانوذره گرافن، مورد توجه قرار نگرفته است.

موثر نانوکامپوزیت بهبود می‌یابد که پژوهش [۱۸] اثر اندازه نانوذره گرافن را مورد بررسی قرار نداده است. همچنین فاکتور مهم دیگر در بررسی خواص نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با نانوذره گرافن، تجمع گرافن نانوپلیتلتها می‌باشد که در پژوهش [۱۸] مورد توجه قرار نگرفته است.
در پژوهشی دیگر [۲۱]، اثر فاکتورهای تجمع نانوتقویت‌های گرافن و لایه‌ای شدن این نانوذرات درون نانوکامپوزیت، بر روی خواص مکانیکی مورد توجه قرار گرفته است. در این پژوهش از روش میکرومکانیکی موری-تاناکا به منظور پیش‌بینی مدول الاستیک نانوکامپوزیت استفاده شده است. آنها نشان داده‌اند که لایه‌ای شدن نانوذرات گرافن و تجمع آن‌ها هر دو منجر به کاهش خواص موثر نانوکامپوزیت می‌شود. این درحالی است که سایر فاکتورهای اثرگذار مانند فاز میانی، جهت‌گیری نانوذره گرافن و اندازه آن‌ها بررسی نشده است. در پژوهش انجام شده توسط حسن‌زاده اقدام [۲]، از روش میکرومکانیکی موری-تاناکا جهت پیش‌بینی مدول الاستیک نانوکامپوزیت استفاده شده است. روش ارائه شده در این پژوهش با توجه داشتن به تجمع گرافن نانوپلیتلتها درون نانوکامپوزیت، جهت‌گیری و فاز میانی، قادر است مدول الاستیک را با دقت قابل قبولی تقریب بزند. البته این مدل در مواقعی که حجم ماتریس در نظر گرفته شده نسبت به حجم تقویت‌کننده بسیار

1 Generalized method of cells (GMC)

شده، جهت‌گیری تصادفی نانوذره گرافن و تجمع وابسته به کسر حجمی در مقایسه با مطالعات پیشین، مدل‌سازی شده است. برای مدل‌سازی و پیش‌بینی خواص موثر نانوکامپوزیت، از روش میکرومکانیکی تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا استفاده می‌شود که بر خلاف روش موری-تاناکا و هالپین-تسای به ازای تمامی کسرهای حجمی نانوذره گرافن درون ماتریس پلیمری، دارای دقت قابل قبولی است.

اندازه گرافن نانوپلیتلت‌ها درون ماتریس پلیمری و محاسبه فاز میانی درون نانوکامپوزیت با یک ایده جدید فرمول‌بندی شده است. مطابق با نتایج تجربی با افزایش نسبت منظر نانوذرات گرافن درون نانوکامپوزیت، بدلیل افزایش نسبت سطح به حجم، فازمیانی درون نانوکامپوزیت افزایش می‌یابد [۱۷].

تجمع نانوذره گرافن وابسته به کسر حجمی مدل‌سازی شده است. با افزایش کسر حجمی نانوذره، تجمع گرافن نانوپلیتلت‌های درون نانوکامپوزیت افزایش یافته که منجر به کاهش فاز میانی می‌شود. در بخش ۴، فرمول‌بندی تجمع گرافن نانوپلیتلت‌ها وابسته به کسر حجمی آورده شده است که متفاوت از پژوهش‌های انجام گرفته برای سایر نانوذرات است و همچنین تاکنون پژوهش‌های مرتبط با نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با نانوذره گرافن به این مورد مهم نپرداخته‌اند.

۲- مبانی تئوری

روش میکرومکانیکی تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا برای ارائه پیش‌بینی‌های محیط پیوسته استفاده شده است [۲۳، ۲۴]. در این روش یک سلول واحد تکرارشونده^۲ که نشان‌دهنده ریزساختار تناوبی مواد است، در نظر گرفته می‌شود. سلول واحد تکرارشونده ممکن است حاوی هر تعداد فاز تشکیل‌دهنده باشد که برای نمایش دقیق مواد کامپوزیت لازم است. سلول واحد به تعدادی زیرسلول تقسیم می‌شود که هر کدام توسط یک فاز از کامپوزیت اشغال شده است. پیوستگی جابه‌جایی و پیوستگی ترکشن در هر یک از سطح مشترک‌های زیرسلول، همراه با شرایط مرزی تناوبی، بصورت میانگین به‌منظور رسیدن به یک ماتریس تمرکز کرنش مکانیکی است. هنگامی که ماتریس تمرکز کرنش مکانیکی بدست آمد، تنش‌ها و کرنش‌های زیرسلول موضعی و تانسور سفتی سلول واحد همگن شده را می‌توان به آسانی بدست آورد. روش میکرومکانیکی تحلیلی تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا از نظر محاسباتی بسیار کارآمد است [۲۵].

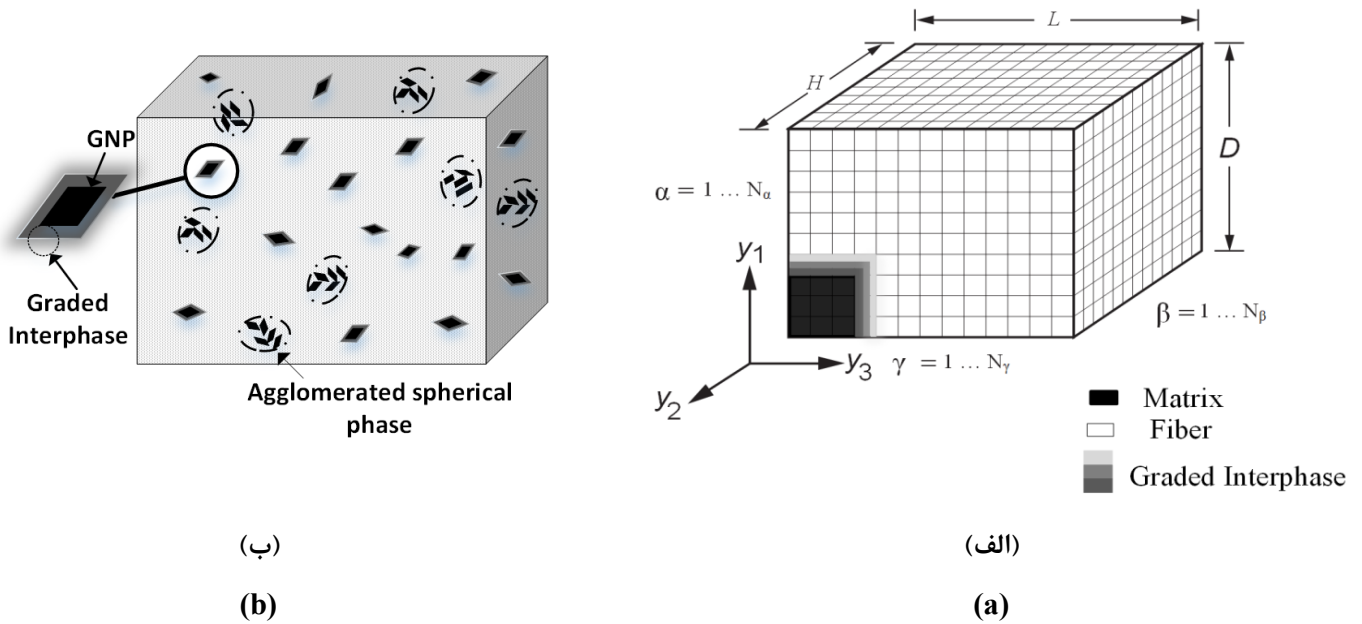
در مقاله حاضر، خواص موثر الاستیک نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با گرافن نانوپلیتلت‌ها با استفاده از یک رویکرد همگن‌سازی جدید تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا^۱ مدل‌سازی و مورد مطالعه قرار می‌گیرد و دقت پیش‌بینی مدل حاضر با روش‌های میکرومکانیکی موجود مقایسه می‌شود. اثر تجمع نانوذرات به عنوان یک فاکتور وابسته به کسر حجمی نانوذرات مورد توجه قرار می‌گیرد و همچنین اثر اندازه ذرات گرافن با ارائه یک ایده مبتنی بر شهود، بر روی خواص الاستیک نانوکامپوزیت تحلیل و بررسی خواهد شد.

بر طبق مطالعه پژوهش‌های انجام گرفته تاکنون، بررسی اثر ابعاد (طول، عرض و ضخامت) گرافن نانوپلیتلت‌ها بر روی خواص موثر نانوکامپوزیت مورد توجه قرار نگرفته است. همچنین، با مطالعه پژوهش‌های انجام گرفته در زمینه نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با نانوذره گرافن، مشاهده می‌شود که تعداد کمی از پژوهش‌ها به فاز میانی درجه بندی شده در نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با گرافن نانوپلیتلت‌ها پرداخته‌اند که در روش المان محدود این مدل‌سازی انجام شده است [۱۸]. همچنین تاکنون پژوهش‌های اندکی در زمینه بررسی اثر تجمع وابسته به کسر حجمی سایر نانوذرات بر روی نانوکامپوزیت‌های پلیمری انجام گرفته است. به عنوان مثال، محمودی و همکاران [۱۶]، برای پیش‌بینی خواص موثر نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله کربن، از روش میکرومکانیکی تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا استفاده کردند و با مدل‌سازی تجمع ذرات نانولوله کربن وابسته به کسر حجمی، خواص موثر نانوکامپوزیت را با دقت قابل قبولی تخمین زدند. همچنین در پژوهشی دیگر، وکیلی‌فرد و همکارانش [۱۷]، با فرض وابسته بودن تجمع نانوذرات سیلیکا به کسر حجمی، سعی در تخمین خواص موثر نانوکامپوزیت پلیمری تقویت شده با سیلیکا کردند. بر اساس دانش نویسندگان در پژوهش حاضر، تاکنون مطالعه‌ای در زمینه اثر تجمع وابسته به کسر حجمی گرافن نانوپلیتلت‌ها بر روی خواص نانوکامپوزیت‌های پلیمری صورت نگرفته است. بنابراین، با توجه به مطالعه پژوهش‌های انجام گرفته در زمینه بررسی خواص نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با نانوذره گرافن و همچنین بر اساس فاکتورهای تاثیرگذار در خواص نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با گرافن نانوپلیتلت گزارش شده توسط مطالعات آزمایشگاهی، دستاوردهای پژوهش حاضر را میتوان به صورت زیر بیان نمود:

مجموعه کامل‌تری از فاکتورهای تاثیرگذار بر روی خواص نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با گرافن شامل بررسی اثر کسر حجمی گرافن نانوپلیتلت‌ها، اندازه گرافن نانوپلیتلت‌ها، فازمیانی درجه‌بندی

2 Repeated unit cell (RUC)

1 High-fidelity generalized method of cells (HFGMC)



شکل ۲. الف- المان حجمی نماینده نانوکامپوزیت سه بعدی با در نظر گرفتن فاز میانی درجه بندی شده، ب- جهت گیری تصادفی گرافن نانوپلیتلت ها و تجمع نانوذرات درون کامپوزیت

Fig. 2. a- RVE of 3D nanocomposite considering graded interphase, b- random orientation of GNPs and aggregation of nanoparticles inside the composite

مشاهده می شود که فاز میانی اطراف گرافن نانوپلیتلت ها، خواصی بین نانوذره و ماتریس دارد، به این معنی که خواص آن به تدریج تغییر می کند. بنابراین، خواص فاز میانی به صورت درجه بندی شده مدل سازی شده است. همچنین، شکل ۲-ب المان حجمی نماینده کامپوزیت را با جهت گیری تصادفی ذرات درون زمینه پلیمری نشان می دهد که پدیده ی تجمع ذرات نیز مورد توجه قرار گرفته است. مطابق با پژوهش هایی که تاکنون انجام گرفته است [۹، ۱۱، ۲۶]، فاز تقویت گرافن نانوپلیتلت، فاز میانی اپوکسی/گرافن نانوپلیتلت و همچنین رزین اپوکسی، به طور کامل درون المان حجمی نماینده سه بعدی قرار گرفته اند.

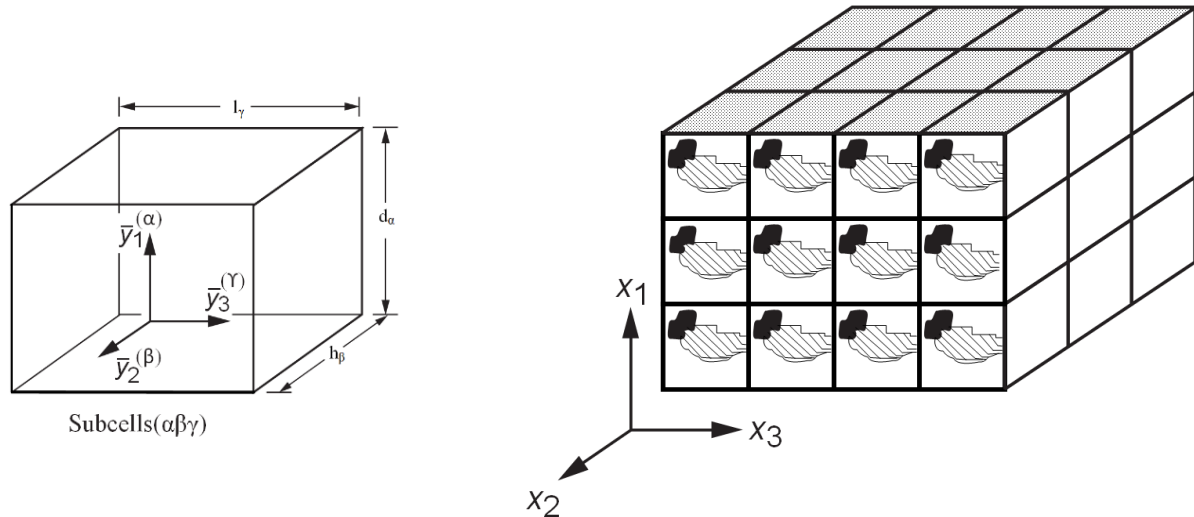
رفتار گرافن نانوپلیتلت الاستیک خطی و ایزوتروپ عرضی و همچنین رزین اپوکسی و فاز میانی دارای رفتار الاستیک خطی و ایزوتروپ می باشند [۷]. یک دستگاه مختصات راستگرد (y_1, y_2, y_3) همانطور که در شکل ۲-الف نشان داده شده است، بکار گرفته می شود. ابعاد المان حجمی نماینده، H, D و L به ترتیب در جهت محوره های ۱، ۲ و ۳ به N_α, N_β و N_γ زیرسلول تقسیم می شوند. هر زیرسلول به صورت $\alpha\beta\gamma$ برچسب گذاری می شود که α, β و γ به عنوان شمارنده زیرسلول به ترتیب در جهت های ۱، ۲ و ۳ مورد توجه قرار می گیرند.

۲-۱- مدل سازی میکرومکانیکی

به منظور کاهش محاسبات ریاضی و پیچیدگی های زمانی، یک المان حجمی نماینده متشکل از سه نوع سلول حاوی گرافن نانوپلیتلت، فاز میانی و رزین اپوکسی، بصورت کوچکترین بخش تکرار شونده و در عین حال جامع اطلاعات در نظر گرفته می شود. شایان ذکر است که تمام خواص موثر ماده کامپوزیتی و المان حجمی نماینده همانند فرض می شود. در این مطالعه، مدل تعمیم یافته سلول ها با قابلیت اطمینان بالا از طریق یک رابطه مبتنی بر فیزیک، تمام خواص موثر ماده کامپوزیتی را محاسبه می کند. در اکثر مطالعات تحلیلی و عددی [۹، ۱۱]، فرض می شود که فاز تقویت در نانوکامپوزیت دارای یک چیدمان با آرایش تناوبی^۲ می باشد.

روش ارائه شده خصوصیات موثر یک ماده همگن تناوبی را از طریق المان حجمی نماینده استخراج می کند. در این پژوهش، کامپوزیت اپوکسی تقویت شده با گرافن نانوپلیتلت، با روش تعمیم یافته سلول ها با قابلیت اطمینان بالا مدل سازی می شود و از طریق یک المان حجمی نماینده مناسب مطابق با شکل ۲-الف مدل سازی می شود. بواسطه المان حجمی نماینده می توان شرایط تناوبی متناظر با هندسه و مواد را مورد توجه قرار داد. در شکل ۲-الف

1 Representative volume element (RVE)
2 Periodic



- الف- کامپوزیت تناوبی سه بعدی حاوی ماده ناهمگن تناوبی متشکل از چندین سلول واحد تکرار شونده در دستگاه مختصات سراسری (X_1, X_2, X_3)
- ب- زیرسلول واحد $\alpha\beta\gamma$ در المان حجمی نماینده با دستگاه مختصات موضعی $(\bar{y}_1^{(\alpha)}, \bar{y}_2^{(\beta)}, \bar{y}_3^{(\gamma)})$
- a) The 3D periodic composite containing periodic heterogeneous material consisting of several RUCs in the global coordinate system (X_1, X_2, X_3)
- b) The unit sub-cell $\alpha\beta\gamma$ in RVE with local coordinate system $(\bar{y}_1^{(\alpha)}, \bar{y}_2^{(\beta)}, \bar{y}_3^{(\gamma)})$.

شکل ۳. نمایش شماتیک کامپوزیت چند فازی با ریزساختارهای تناوبی سه بعدی [۲۴].

Fig. 3. Schematic representation of multiphase composite with three-dimensional periodic microstructures [24].

این رابطه بر اساس یک بسط مرتبه دوم جابجایی که بر حسب فواصل از مرکز زیر سلول $(\bar{y}_1^{(\alpha)}, \bar{y}_2^{(\beta)}, \bar{y}_3^{(\gamma)})$ نوشته شده است، می باشد. لازم به ذکر است که جملات شامل حاصلضرب های \bar{y} ها به عنوان مثال $\bar{y}_1^{(\alpha)}\bar{y}_2^{(\beta)}$ ، به دلیل تعامد زیرسلولها، مشارکتی در روابط ندارند. این بسط جابجایی برای روش تعمیم یافته سلولها از مرتبه اول و برای روش تعمیم یافته سلولها با قابلیت اطمینان بالا از مرتبه دوم در نظر گرفته شده است [۲۴].

در رابطه (۱)، $\bar{\varepsilon}_{ij}$ بیانگر مولفه های کرنش متوسط سراسری و $d_\alpha, h_\beta, l_\gamma$ بیانگر اندازه زیرسلول $\alpha\beta\gamma$ است. جابجایی های متوسط حجمی $W_{i(000)}^{(\alpha\beta\gamma)}$ و ترم های مرتبه بالاتر $W_{i(lmn)}^{(\alpha\beta\gamma)}$ باید با در نظر گرفتن معادله تعادل در زیرسلولها، اعمال شرایط بین سطحی بین زیرسلولها و تحمیل شرایط مرزی تناوبی بر المان حجمی نماینده تعیین شوند. بنابراین معادله مستقل به منظور تعیین کامل میدان جابجایی در تمامی زیرسلولها مورد نیاز است. معادله تعادل سه بعدی در یک زیرسلول $\alpha\beta\gamma$ را می توان بصورت رابطه (۲) بیان نمود.

۲-۲ فرمول بندی میکرومکانیکی تعمیم یافته

در فرمول بندی تعمیم یافته سلولها با قابلیت اطمینان بالا، دو دستگاه مختصات وجود دارد. اول، یک دستگاه مختصات سراسری (X_1, X_2, X_3) حاکم بر کامپوزیت تناوبی که بیانگر ماده ناهمگن تناوبی می باشد. دوم، یک دستگاه موضعی $(\bar{y}_1^{(\alpha)}, \bar{y}_2^{(\beta)}, \bar{y}_3^{(\gamma)})$ در مرکز هر زیرسلول $\alpha\beta\gamma$ که به ترتیب در شکل های ۳-الف و ۳-ب نمایش داده شده اند. بسط جابجایی درجه دوم زیرسلول در سیستم مختصات موضعی بصورت رابطه (۱) بیان می شود [۲۷].

$$\begin{aligned}
 u_i^{(\alpha\beta\gamma)} = & \bar{\varepsilon}_{ij} x_j + W_{i(000)}^{(\alpha\beta\gamma)} + \bar{y}_1^{(\alpha)} W_{i(100)}^{(\alpha\beta\gamma)} \\
 & + \bar{y}_2^{(\beta)} W_{i(010)}^{(\alpha\beta\gamma)} + \bar{y}_3^{(\gamma)} W_{i(001)}^{(\alpha\beta\gamma)} \\
 & + \frac{1}{2} \left(3\bar{y}_1^{(\alpha)^2} - \frac{d_\alpha^2}{4} \right) W_{i(200)}^{(\alpha\beta\gamma)} \\
 & + \frac{1}{2} \left(3\bar{y}_2^{(\beta)^2} - \frac{d_\beta^2}{4} \right) W_{i(020)}^{(\alpha\beta\gamma)} \\
 & + \frac{1}{2} \left(3\bar{y}_3^{(\gamma)^2} - \frac{d_\gamma^2}{4} \right) W_{i(002)}^{(\alpha\beta\gamma)}, \quad i = 1, 2, 3
 \end{aligned} \tag{1}$$

$$u_i^{(\alpha\beta\gamma)} \left(\bar{y}_1^{(\alpha)} = \frac{d_\alpha}{2} \right) = u_i^{(\alpha+1\beta\gamma)} \left(\bar{y}_1^{(\alpha+1)} = -\frac{d_{\alpha+1}}{2} \right),$$

$$\alpha = 1, \dots, N_\alpha - 1, \beta = 1, \dots, N_\beta, \gamma = 1, \dots, N_\gamma.$$

$$u_i^{(\alpha\beta\gamma)} \left(\bar{y}_2^{(\beta)} = \frac{h_\beta}{2} \right) = u_i^{(\alpha\beta+1\gamma)} \left(\bar{y}_2^{(\beta+1)} = -\frac{h_{\beta+1}}{2} \right), \quad (5)$$

$$\alpha = 1, \dots, N_\alpha, \beta = 1, \dots, N_\beta - 1, \gamma = 1, \dots, N_\gamma.$$

$$u_i^{(\alpha\beta\gamma)} \left(\bar{y}_3^{(\gamma)} = \frac{l_\gamma}{2} \right) = u_i^{(\alpha\beta\gamma+1)} \left(\bar{y}_3^{(\gamma+1)} = -\frac{l_{\gamma+1}}{2} \right),$$

$$\alpha = 1, \dots, N_\alpha, \beta = 1, \dots, N_\beta, \gamma = 1, \dots, N_\gamma - 1.$$

به‌همین ترتیب، شرایط پیوستگی ترکشن سطحی بین زیرسلول‌های مجاور را می‌توان از طریق رابطه (۶) تعریف نمود.

$$\sigma_{1i}^{(\alpha\beta\gamma)} \left(\bar{y}_1^{(\alpha)} = \frac{d_\alpha}{2} \right) = \sigma_{1i}^{(\alpha+1\beta\gamma)} \left(\bar{y}_1^{(\alpha+1)} = -\frac{d_{\alpha+1}}{2} \right),$$

$$\alpha = 1, \dots, N_\alpha - 1, \beta = 1, \dots, N_\beta, \gamma = 1, \dots, N_\gamma.$$

$$\sigma_{2i}^{(\alpha\beta\gamma)} \left(\bar{y}_2^{(\beta)} = \frac{h_\beta}{2} \right) = \sigma_{2i}^{(\alpha\beta+1\gamma)} \left(\bar{y}_2^{(\beta+1)} = -\frac{h_{\beta+1}}{2} \right), \quad (6)$$

$$\alpha = 1, \dots, N_\alpha, \beta = 1, \dots, N_\beta - 1, \gamma = 1, \dots, N_\gamma.$$

$$\sigma_{3i}^{(\alpha\beta\gamma)} \left(\bar{y}_3^{(\gamma)} = \frac{l_\gamma}{2} \right) = \sigma_{3i}^{(\alpha\beta\gamma+1)} \left(\bar{y}_3^{(\gamma+1)} = -\frac{l_{\gamma+1}}{2} \right),$$

$$\alpha = 1, \dots, N_\alpha, \beta = 1, \dots, N_\beta, \gamma = 1, \dots, N_\gamma - 1.$$

در نهایت، با در نظر گرفتن معادلات ۲ تا ۶، $21 \times N_\alpha N_\beta N_\gamma$ معادله مستقل حاصل می‌شود. این دستگاه معادلات را می‌توان بصورت نمادین مطابق رابطه (۷) نشان داد. $21 \times N_\alpha N_\beta N_\gamma$ معادله مستقل را می‌توان درون سه گروه طبقه‌بندی نمود. در اولین گروه، $3 \times N_\alpha N_\beta N_\gamma$ معادله برای توصیف حالت تعادل قرار دارد، گروه دوم از طریق $6 \times (N_\alpha N_\beta + N_\alpha N_\gamma + N_\beta N_\gamma)$ معادله، شرایط تناوبی المان حجمی نماینده را تعیین می‌کند و گروه سوم از طریق $6 \times (N_\alpha N_\beta (N_\gamma - 1) + N_\alpha N_\gamma (N_\beta - 1) + N_\beta N_\gamma (N_\alpha - 1))$ معادله، میدان جابه‌جایی زیر سلول‌ها را محاسبه می‌کند که اشاره به پیوستگی بین سطحی دارد.

$$K_{P \times P} U_{P \times 1} = F_{P \times 1}, \quad P = 21 N_\alpha N_\beta N_\gamma \quad (7)$$

$$\frac{\partial \sigma_{1i}^{(\alpha\beta\gamma)}}{\partial \bar{y}_1^{(\alpha)}} + \frac{\partial \sigma_{2i}^{(\alpha\beta\gamma)}}{\partial \bar{y}_2^{(\beta)}} + \frac{\partial \sigma_{3i}^{(\alpha\beta\gamma)}}{\partial \bar{y}_3^{(\gamma)}} = 0, \quad (2)$$

$$\alpha = 1, \dots, N_\alpha, \beta = 1, \dots, N_\beta, \gamma = 1, \dots, N_\gamma$$

شرایط مرزی تناوبی جابه‌جایی المان حجمی نماینده در سه جهت را می‌توان به صورت روابط (۳) بیان نمود [۲۵].

$$\bar{y}_1^{(1)} = -\frac{d_1}{2} = u_i^{(N_\alpha\beta\gamma)} \left(\bar{y}_1^{(N_\alpha)} = \frac{d_{N_\alpha}}{2} \right),$$

$$\dots, N_\beta, \gamma = 1, \dots, N_\gamma.$$

$$\bar{y}_2^{(1)} = -\frac{h_1}{2} = u_i^{(\alpha N_\beta\gamma)} \left(\bar{y}_2^{(N_\beta)} = \frac{h_{N_\beta}}{2} \right), \quad (3)$$

$$\dots, N_\alpha, \gamma = 1, \dots, N_\gamma.$$

$$\bar{y}_3^{(1)} = -\frac{l_1}{2} = u_i^{(\alpha\beta N_\gamma)} \left(\bar{y}_3^{(N_\gamma)} = \frac{l_{N_\gamma}}{2} \right),$$

$$\dots, N_\alpha, \beta = 1, \dots, N_\beta.$$

شرایط مرزی تناوبی ترکشن المان حجمی نماینده در سه جهت بصورت رابطه (۴) تعریف می‌شود [۲۵].

$$\bar{y}_1^{(1)} = -\frac{d_1}{2} = \sigma_{1i}^{(N_\alpha\beta\gamma)} \left(\bar{y}_1^{(N_\alpha)} = \frac{d_{N_\alpha}}{2} \right),$$

$$\dots, N_\beta, \gamma = 1, \dots, N_\gamma.$$

$$\bar{y}_2^{(1)} = -\frac{h_1}{2} = \sigma_{2i}^{(\alpha N_\beta\gamma)} \left(\bar{y}_2^{(N_\beta)} = \frac{h_{N_\beta}}{2} \right), \quad (4)$$

$$\dots, N_\alpha, \gamma = 1, \dots, N_\gamma.$$

$$\bar{y}_3^{(1)} = -\frac{l_1}{2} = \sigma_{3i}^{(\alpha\beta N_\gamma)} \left(\bar{y}_3^{(N_\gamma)} = \frac{l_{N_\gamma}}{2} \right),$$

$$\dots, N_\alpha, \beta = 1, \dots, N_\beta.$$

شرایط پیوستگی جابه‌جایی سطحی بین زیرسلول‌های همسایه که با فرض وجود پیوند کامل بین زیرسلول‌ها نوشته شده‌است [۲۸]، در رابطه (۵) آورده شده است.

فازمییانی را به صورت رابطه (۱۰) محاسبه نمود.

$$E^{Int} = \frac{1}{1-\alpha} \int_{\alpha}^1 \left[E^{GNP} - (E^{GNP} - E^m) \left| \frac{r-\alpha}{1-\alpha} \right|^e \right] dr, \quad (10)$$

$$\alpha = \frac{R_{GNP}}{R_{GNP} + t_{Int}}$$

E^{Int} ، E^{GNP} ، E^m و به ترتیب بیانگر سفتی رزین اپوکسی، سفتی گرافن نانوپلیتلت و سفتی فازمییانی می‌باشد. R_{GNP} و t_{Int} به ترتیب بیانگر فاصله وجه بزرگتر از مرکز گرافن نانوپلیتلت و ضخامت فازمییانی می‌باشد. علاوه بر این، پارامتر e ضریب چسبندگی است که به ویژگی‌های بین سطحی بین گرافن نانوپلیتلت و ماتریس پلیمر بستگی دارد [۳۱].

۴- مدل‌سازی تجمع نانوذرات گرافن نانوپلیتلت

وضعیت پراکندگی نانوذرات گرافن نانوپلیتلت در ماتریس پلیمر، نقش مهمی در خواص موثر نانوکامپوزیت دارد. بنابراین در زمان تحلیل، تجمع نانوذرات گرافن نانوپلیتلت در نظر گرفته می‌شود. برای این منظور، وضعیت تجمع گرافن نانوپلیتلت را از طریق نسبت تعداد گرافن نانوپلیتلت تجمع شده به کل گرافن نانوپلیتلت‌ها می‌توان محاسبه نمود. در کار فعلی، میزان تجمع به عنوان یک تابع خطی از کسر حجمی است که دلالت بر $\xi_{ag} \times V_{GNP}$ دارد که V_{GNP} نشان‌دهنده کسر حجمی و ξ_{ag} فاکتور تجمع است و بیان می‌کند که حالت پراکندگی نانوذره با افزایش کسر حجمی بدتر می‌شود. همانطور که در شکل ۲-ب نشان داده شده است، حالت تجمع گرافن نانوپلیتلت از طریق نزدیک شدن نانوذرات گرافن نانوپلیتلت به یکدیگر، مدل شده است.

به منظور مدل‌سازی حالت تجمع گرافن نانوپلیتلت، ابتدا المان حجمی نماینده به تعداد N_{GNP} نانوذره گرافن نانوپلیتلت با آرایش تصادفی پر می‌شوند، برحسب کسر حجمی به صورت رابطه (۱۱) محاسبه می‌شود.

$$N_{GNP} \times W_{GNP} \times L_{GNP} \times H_{GNP} = V_{GNP} \times D \times L \times H \quad (11)$$

در رابطه (۷)، ماتریس $[K]$ شامل هندسه و خواص مکانیکی مواد در داخل هر زیرسلول است. همچنین بردار $\{F\}$ کرنش متوسط خارجی اعمال شده را نشان می‌دهد. بردار جابجایی $\{U\}$ نیز شامل ریزمتغیرهای سمت راست معادله جابجایی مرتبه دوم هر زیرسلول می‌باشد. با حل دستگاه خطی رابطه (۷)، می‌توان میدان‌های تنش و کرنش درون هر زیرسلول را محاسبه نمود. شایان ذکر است، حل معادله (۷) برقراری رابطه موضعی سازی (۸) را امکانپذیر می‌سازد که بیانگر ارتباط کرنش متوسط $\bar{\epsilon}_{ij}^{(\alpha\beta\gamma)}$ درون زیرسلول $\alpha\beta\gamma$ با کرنش سراسری $\bar{\epsilon}_{ij}$ است. این ارتباط را ماتریس $A^{(\alpha\beta\gamma)}$ برقرار می‌کند که به آن ماتریس تمرکز کرنش مکانیکی گفته می‌شود.

$$\bar{\epsilon}^{(\alpha\beta\gamma)} = A^{(\alpha\beta\gamma)} \bar{\epsilon} \quad (8)$$

در نهایت، ماتریس سفتی الاستیک موثر المان حجمی نماینده بصورت رابطه (۹) استخراج می‌شود [۲۴].

$$C^* = \frac{1}{DHL} \sum_{\alpha=1}^{N_x} \sum_{\beta=1}^{N_y} \sum_{\gamma=1}^{N_z} d_{(\alpha)} h_{(\beta)} l_{(\gamma)} C^{(\alpha\beta\gamma)} A^{(\alpha\beta\gamma)} \quad (9)$$

در رابطه (۹)، $C^{(\alpha\beta\gamma)}$ بیانگر ماتریس سفتی زیرسلول $\alpha\beta\gamma$ است. جزئیات معادلات حاکم تعمیم یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا به طور کامل در مرجع [۲۴] آورده شده است.

۳- مدل‌سازی فازمییانی

به طور کلی فازمییانی، به صورت یک مکعب مستطیل توخالی که گرافن نانوپلیتلت را احاطه کرده است، مدل‌سازی شده است و خواص آن از نظر عملکردی بصورت حد واسط بین ویژگی‌های گرافن نانوپلیتلت و ماتریس، درجه بندی می‌شود [۱۹، ۲۹]. شایان ذکر است که فازمییانی درجه بندی شده در نانوکامپوزیت، نماینده مناطق ماتریس اطراف نانوذره گرافن نانوپلیتلت در یک نانوکامپوزیت واقعی است.

همانطور که در مرجع [۳۰] نشان داده شده است، یک توزیع توانی برای خواص فازمییانی، بهتر از توزیع خطی است. با تبعیت از توزیع توانی استفاده شده در [۳۱] و با متوسط گیری از ضخامت فازمییانی، می‌توان سفتی

$$V_{Int} = V_{GNP} (DLH) \left[\begin{array}{l} \frac{8t_{Int}^3}{W_{GNP}L_{GNP}H_{GNP}} + \\ 4t_{Int}^2 \left(\frac{1}{W_{GNP}L_{GNP}} + \frac{1}{W_{GNP}H_{GNP}} + \frac{1}{L_{GNP}H_{GNP}} \right) \\ + 2t_{Int} \left(\frac{1}{W_{GNP}} + \frac{1}{H_{GNP}} + \frac{1}{L_{GNP}} \right) \end{array} \right] \quad (14)$$

رابطه (۱۴) نشان می‌دهد که در صورت ثابت نگه‌داشتن مقدار کسر حجمی گرافن نانوپلیتلت، کاهش و یا افزایش ابعاد گرافن نانوپلیتلت منجر به افزایش و یا کاهش حجم فازمیانی می‌شود و از اینرو منجر به بهبود و یا بدتر شدن خواص کلی نانوکامپوزیت می‌شود. علاوه بر این، رابطه (۱۴) بیان می‌کند که ضخامت فازمیانی و اندازه گرافن نانوپلیتلت با یکدیگر رابطه عکس دارند. به این معنی که کاهش و یا افزایش ابعاد گرافن نانوپلیتلت، به ترتیب منجر به افزایش و کاهش ضخامت فازمیانی می‌شود. این ایده جدید قادر است به صورت دقیق اثر اندازه گرافن نانوپلیتلت را بر روی خصوصیات کلی نانوکامپوزیت بدون انجام محاسبات هزینه‌بر مدل‌سازی کند.

۶- مدل‌سازی جهت‌گیری تصادفی گرافن نانوپلیتلت

شواهد تجربی نشان می‌دهد که نانوتقویت‌ها به‌طور تصادفی درون ماتریس جهت‌گیری می‌کنند. بنابراین فرض توزیع همراستا نانوذرات منجر به بدست آوردن خواصی می‌شود که با نتایج تجربی کامپوزیت اختلاف دارد [۳۲]. بنابراین توجه به جهت‌گیری تصادفی گرافن نانوپلیتلت، نسبت به فرض جهت‌گیری منظم آن‌ها به واقعیت نزدیک‌تر است. شایان ذکر است که جهت‌گیری تصادفی گرافن نانوپلیتلت منجر به رفتار ایزوتروپ نانوکامپوزیت می‌شود که نحوه جهت‌گیری تصادفی آن‌ها را می‌توان در شکل ۲-ب مشاهده نمود. جهت نانوذرات با جهت‌گیری تصادفی را می‌توان با دو زاویه ϕ و ψ اوپلر توصیف نمود. اگر توزیع احتمال جهت گرافن نانوپلیتلت از یک تابع پیوسته $p(\phi, \psi)$ تبعیت کند، تانسور سفتی موثر نانوکامپوزیت $[C^{random}]$ می‌تواند مطابق با ماتریس سفتی نانوکامپوزیت تک‌جهته $[C^{aligned}]$ به صورت رابطه (۱۵) [۳۱] بیان شود.

$$[C^{random}] = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} [C^{aligned}](\phi, \psi) p(\phi, \psi) \sin(\psi) d\psi d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} p(\phi, \psi) \sin(\psi) d\psi d\phi} \quad (15)$$

در رابطه (۱۱) $H_{GNP}, L_{GNP}, W_{GNP}$ به ترتیب عرض، طول و ضخامت گرافن نانوپلیتلت می‌باشد. شایان ذکر است که با توجه به حالت تجمع گرافن نانوپلیتلت، تعداد مشخصی از نانوذرات گرافن نانوپلیتلت خوشه‌ای می‌شوند (که با N_{ag} بیان می‌شود) و می‌توان مقدار N_{ag} را بصورت رابطه (۱۲) تعیین نمود.

$$N_{ag} = (\xi_{ag} \times V_{GNP}) N_{GNP} \quad (12)$$

بنابراین المان حجمی نماینده مدل‌سازی شده با $N_{GNP} - N_{ag}$ نانوذره گرافن نانوپلیتلت پراکنده و N_{ag} نانوذره گرافن نانوپلیتلت تجمع‌شده پر می‌شود.

۵- مدل‌سازی اثر اندازه گرافن نانوپلیتلت

در این بخش، اثر اندازه گرافن نانوپلیتلت بر روی خواص موثر الاستیک نانوکامپوزیت مورد بررسی و تحلیل قرار می‌گیرد. به‌طور کلی، روش میکرومکانیکی تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا توضیح داده شده در بخش ۲-۲ قادر به توصیف تغییرات اندازه اجزای کامپوزیت نمی‌باشد. همانطور که در مقدمه بیان شد، فازمیانی عمدتاً مسئول تقویت نانوکامپوزیت است. بنابراین، به منظور پیش‌بینی رفتار نانوکامپوزیت، می‌بایست فازمیانی را در نظر گرفت. از آنجایی که فازمیانی در اطراف نانوذرات ایجاد می‌شود، اثر اندازه نانوذرات می‌تواند بر روی حجم فازمیانی تاثیر بگذارد که با توجه به ابعاد نانوذره $(H_{GNP}, L_{GNP}, W_{GNP})$ متغیر خواهد بود. بنابراین، تاثیر اندازه گرافن نانوپلیتلت بر روی حجم فازمیانی ایجادشده درون نانوکامپوزیت مورد بررسی قرار می‌گیرد. حجم فازمیانی اطراف گرافن نانوپلیتلت را می‌توان با استفاده از رابطه (۱۳) محاسبه نمود.

$$V_{Int} = N_{GNP} \left[\begin{array}{l} (W_{GNP} + t_{Int}) \times \\ (L_{GNP} + t_{Int}) \times (H_{GNP} + t_{Int}) \\ - W_{GNP} L_{GNP} H_{GNP} \end{array} \right] \quad (13)$$

با جایگذاری رابطه (۱۱) درون رابطه (۱۳)، رابطه (۱۴) حاصل می‌شود.

جدول ۱. خواص ایزوتروپ عرضی گرافن نانوپلیتلت [۸]

Table 1. Properties of GNP nanoparticles [8].

E_1	$E_2 = E_3$	ν_{21}	ν_{23}	G_{12}	طول=عرض	ضخامت	نسبت منظر
۴۰۰ گیگاپاسکال	۶۹۰ گیگاپاسکال	۰/۸۱	۰/۰۳	۱ مگاپاسکال	۸۰ نانومتر	۳ نانومتر	۸۰/۳

جدول ۲. خواص ایزوتروپ برای EPON 828 [۸].

Table 2. Properties of EPON 828 resin [8].

E	ν
۲/۵ گیگاپاسکال	۰/۳

۷- نتایج و بحث

۷-۱- اعتبارسنجی مدل

به منظور اعتبارسنجی، مدل حاضر، با نتایج آزمایشگاهی [۸، ۹] و همچنین مدل‌های میکرومکانیکی ارائه شده در [۲، ۸، ۹، ۱۱، ۱۳] مقایسه می‌شود. در اولین اعتبارسنجی، سیستم نانوکامپوزیت حاوی یک ماده اپوکسی EPON ۸۲۸ با رفتار ایزوتروپ و خواص الاستیک که با گرافن نانوپلیتلت تقویت شده است، می‌باشد. خواص الاستیک گرافن نانوپلیتلت با رفتار ایزوتروپ عرضی، ابعاد و نسبت منظر در جدول ۱ آورده شده است [۸]. خواص رزین اپوکسی مطابق با مرجع [۸] نیز در جدول ۲ مشاهده می‌شود.

شایان ذکر است که چگالی گرافن نانوپلیتلت و اپوکسی EPON ۸۲۸ به ترتیب ۲/۲۵ و ۱/۱۸۵ گرم بر سانتیمتر مکعب می‌باشد [۸]. نحوه ساخت نانوذره گرافن نانوپلیتلت در مرجع [۸] شرح داده شده است. در بخش‌های بعدی، مدل پیشنهادی، ابتدا با آزمایش‌های تجربی اعتبارسنجی می‌شود، سپس، اثرات کسر حجمی و نسبت منظر، اثر تجمع، اثر اندازه، جهت‌گیری تصادفی نانوذره گرافن نانوپلیتلت و همچنین ضخامت فاز میانی و پارامترهای مربوط به آن بررسی می‌شود.

برای جهت‌گیری تصادفی یکنواخت سه‌بعدی، $\rho(\phi, \psi) = \frac{1}{2\pi}$ ، [۳۳] در نظر گرفته می‌شود. بنابراین مدول‌های حجمی و برشی نانوکامپوزیت با جهت تصادفی گرافن نانوپلیتلت به صورت رابطه (۱۶) بدست می‌آید.

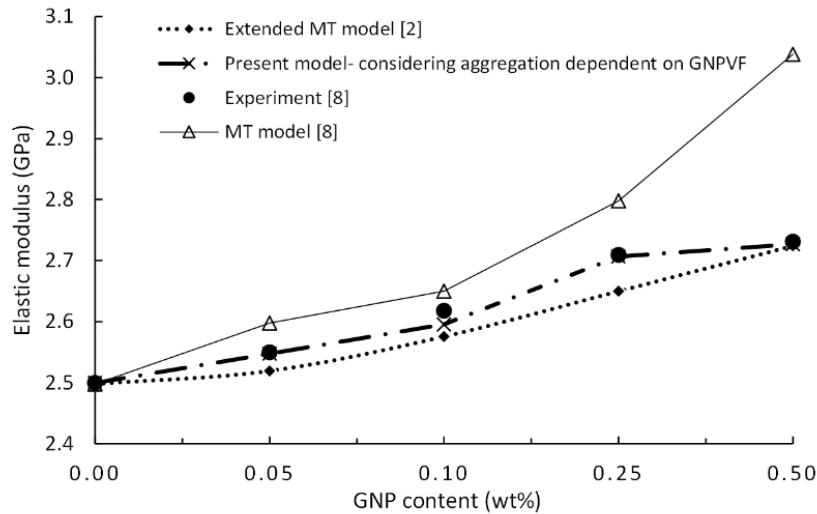
$$K^{random} = \frac{1}{9} [4k + 2(l + l') + n'] \quad (16)$$

$$G^{random} = \frac{1}{15} [k - (l + l') + n' + 6(m + p')]$$

ثوابت هیل هستند که متناظر با ماتریس سختی n', k, l, l', m, p' نانوکامپوزیت تقویت شده با گرافن نانوپلیتلت جهت‌دار است. در نهایت، مدول کلی الاستیک و نسبت پواسون را می‌توان مطابق با رابطه (۱۷) تعیین نمود [۳۴].

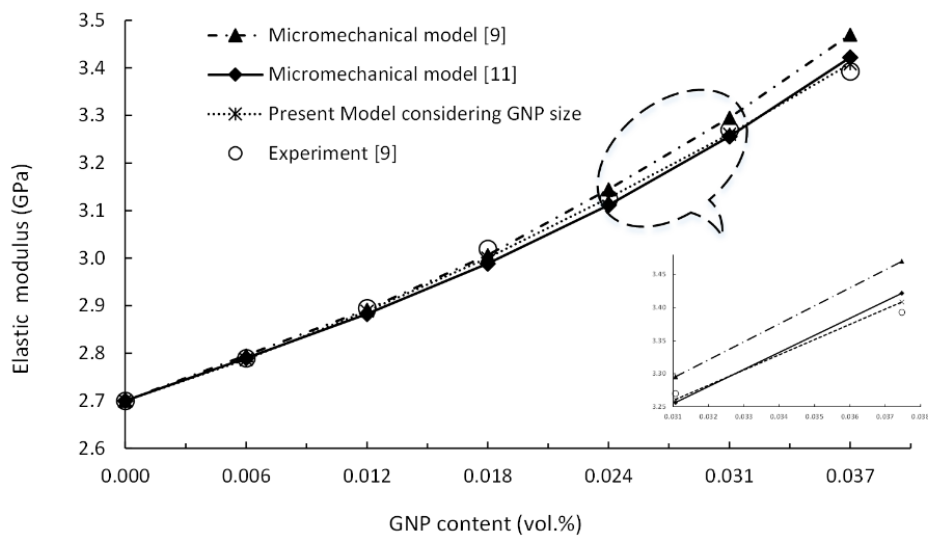
$$E^{random} = \frac{9K^{random} G^{random}}{3K^{random} + G^{random}} \quad (17)$$

$$\nu^{random} = \frac{3K^{random} - 2G^{random}}{6K^{random} + 2G^{random}}$$



الف) نانوکامپوزیت زمینه‌ی EPON 828 با فاز تقویت گرافن نانوپلیتلت

a) EPON 828 matrix nanocomposite with graphene nanoplatelet reinforcement phase



شکل ۴. مقایسه تغییرات مدول الاستیک نانوکامپوزیت پلیمری تقویت‌شده با گرافن نانوپلیتلت به ازای مقادیر مختلف (الف) کسر وزنی و (ب) کسر حجمی

Fig. 4. The variation of elastic modulus of GNP-reinforced nanocomposite at GNP contents

۷-۲ اثرات درصد حجمی گرافن نانوپلیتلت در ابتدا، اثرات کسر وزنی تقویت‌کننده بر خواص موثر نانوکامپوزیت اپوکسی EPON/828 گرافن نانوپلیتلت مورد بررسی قرار می‌گیرد. در اینجا، مدل حاضر با نتایج تجربی ارائه‌شده در مراجع [۸، ۹] اعتبارسنجی و مقایسه می‌شود. شکل ۴-الف، تغییرات مدول الاستیک EPON/828 گرافن نانوپلیتلت بر حسب کسر وزنی را نشان می‌دهد [۸]. بر اساس تحلیل نتایج تجربی [۸]، پارامتر مدل‌سازی $\xi_{agg} = 2/64$ بدست می‌آید.

۷-۲ اثرات درصد حجمی گرافن نانوپلیتلت

ضخامت فاز میانی برای داده‌های تجربی شکل ۴-الف برابر با ۲۵ نانومتر تعریف شده است. مقایسه‌ای بین برآوردهای رویکرد همگن‌سازی فعلی، با خروجی‌های مدل موری-تاناکا [۸]، مدل موری-تاناکا توسعه داده‌شده [۲] و داده‌های تجربی [۸] انجام می‌شود. همانطور که در شکل ۴-الف مشاهده می‌شود، پیش‌بینی‌های مدل حاضر با در نظر گرفتن تجمع گرافن نانوپلیتلت در تطابق بسیار بهتری با داده‌های تجربی [۸] در مقایسه با تخمین‌های مدل موری-تاناکا توسعه داده‌شده در هر دو پژوهش [۲، ۸] می‌باشد. این

جدول ۳. خواص ایزوتروپ عرضی برای گرافن نانوپلیتلت [۹].

Table 3. Properties of GNPs reported in [9].

E_1	$E_2 = E_3$	ν_{21}	ν_{23}	G_{12}
۳/۲۵۱ گیگاپاسکال	۲۹۴/۳ گیگاپاسکال	۰/۴۵۵	۰/۱۵۹	۱ مگاپاسکال

جدول ۴. خواص ایزوتروپ برای EPON 862 [۹].

Table 4. Properties of EPON 862 resin reported in [9].

E	ν
۲/۷ گیگاپاسکال	۰/۳

مدول الاستیک کامپوزیت پیش‌بینی شده و با نتایج گزارش شده در [۹] و [۱۱] مقایسه شده است. شکل ۴-ب تغییرات مدول الاستیک کامپوزیت EPON/۸۶۲ گرافن نانوپلیتلت را به عنوان تابعی از کسر حجمی گرافن نشان می‌دهد. توجه به این نکته ضروری است که چون در هنگام تولید نانو کامپوزیت‌ها جهت‌گیری نانوذرات به صورت تصادفی است، در نظر گرفتن آرایش منظم در مدل‌سازی ممکن است از نتایج واقعی دور باشد. بنابراین، به منظور نزدیک شدن نتایج حاصل از پیش‌بینی مدول الاستیک کامپوزیت با داده‌های تجربی، در مدل حاضر، آرایش گرافن نانوپلیتلت درون رزین EPON ۸۶۲ در فضای سه‌بعدی بصورت تصادفی مدل‌سازی شده است. بنابراین، رفتار کامپوزیت ایزوتروپ می‌باشد. دو نکته متمایز را می‌توان به وضوح در شکل ۴-ب مشاهده نمود. اول، پیش‌بینی مدول الاستیک در مدل حاضر با در نظر گرفتن جهت‌گیری تصادفی نانوذرات گرافن دقیق‌تر از پیش‌بینی‌های انجام شده در پژوهش‌های [۹] و [۱۱] است. دوم، با افزودن محتوای کمی از گرافن نانوپلیتلت (کم‌تر از ۰/۰۴ کسر حجمی)، مدول الاستیک کامپوزیت ۲۷٪ افزایش می‌یابد. این نشان‌دهنده افزایش قابل توجهی در سفتی مواد با وجود مقدار کمی از محتوای گرافن است.

۷-۳- اثر تجمع گرافن نانوپلیتلت

یکی از مشکلات اصلی که مانع افزایش خواص نانو کامپوزیت می‌شود، وضعیت پراکندگی ضعیف نانوذرات است که در نهایت منجر به تجمع می‌شود. از طرفی، تجمع نانوذرات، منجر به کاهش ناحیه فاز میانی می‌شود.

اختلاف در دقت پیش‌بینی مدل حاضر در مقایسه با مدل‌های [۲، ۸] کسروزی بالاتر گرافن نانوپلیتلت بسیار آشکارتر است. تا ۰/۱٪ کسروزی، اختلاف پیش‌بینی مدل حاضر با دو مدل [۲، ۸] قابل قبول است که این مقدار را می‌توان به پراکندگی خوب گرافن نانوپلیتلت درون اپوکسی نسبت داد. با افزایش کسروزی نانوذره گرافن و تشکیل خوشه، مدل حاضر با در نظر گرفتن تجمع نانوذرات، قادر به تخمین مدول الاستیک با دقت بهتری نسبت به دو روش دیگر است.

در پژوهش دیگر انجام شده در مرجع [۹] نمونه‌ای از کامپوزیت پلیمری ساخته شد و از طریق آزمایشات تجربی خواص الاستیک کامپوزیت استخراج شد. آن‌ها از EPON ۸۶۲ به عنوان رزین و از گرافن نانوپلیتلت به عنوان فاز تقویت استفاده کردند. همانطور که در شکل ۲-الف مشاهده می‌شود، در مدل حاضر، صفحه ایزوتروپی ۳-۲ تعریف شده و محور ۱ عمود بر صفحه ایزوتروپ است. با توجه به محورهای تعریف شده در شکل ۲-الف، خواص ایزوتروپ عرضی گزارش شده از نتایج تجربی در پژوهش [۹] برای گرافن نانوپلیتلت و EPON ۸۶۲ به ترتیب مطابق با جدول ۳ و جدول ۴ می‌باشد.

شایان ذکر است که چگالی گرافن نانوپلیتلت، ۲ گرم بر میلی‌لیتر، طول و عرض آن ۲ میکرومتر و ضخامت آن ۲ نانومتر است. همچنین در پژوهش [۹] و پژوهش انجام گرفته در [۱۱] سعی شده است با استفاده از روش میکرومکانیکی تعمیم یافته سلول‌ها، ارائه شده در بسته نرم افزاری MAC_GMC، مدول الاستیک نانو کامپوزیت را پیش‌بینی کنند. در مدل حاضر،

افزایش می‌یابد. علاوه بر این، نشان داده شده است که در نظر گرفتن مقدار جزئی $\xi_{ag} = 2$ ، مانع روند صعودی نادرست برای مدول الاستیک کامپوزیت می‌شود که تاثیر قابل توجه وابسته بودن تجمع نانوذره گرافن به کسر حجمی آن و تاثیر آن بر روی مدول الاستیک و ضریب پواسون کامپوزیت را نشان می‌دهد.

۷-۴- اثرات فاز میانی

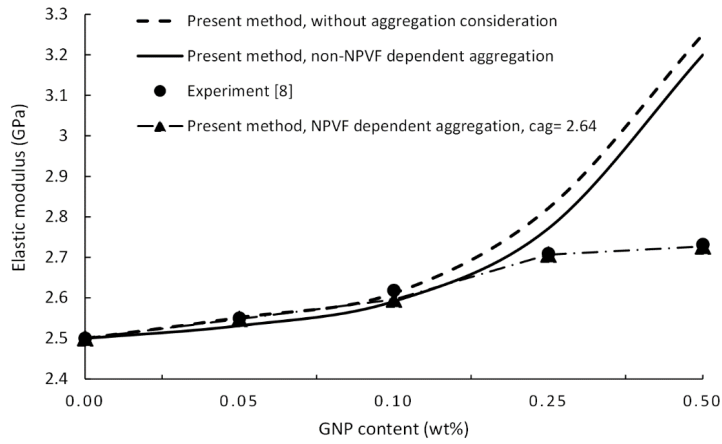
در شکل ۶-الف، مدول الاستیک کامپوزیت پلیمری تقویت شده با گرافن به ازای کسرهای وزنی مختلف گرافن نانوپلیتلت با در نظر گرفتن ناحیه فازمیانی محاسبه شده است. مدل حاضر همراه با فازمیانی توافق بسیار خوبی با داده‌های تجربی [۸] دارد. حال آنکه، در صورت عدم توجه به فازمیانی، نمی‌توان بدرستی خواص الاستیک را پیش‌بینی نمود. در شکل ۶-الف مشاهده می‌شود که همواره با افزایش کسروزی گرافن نانوپلیتلت، مدول الاستیک بدلیل افزایش حجم فازمیانی درون کامپوزیت، افزایش می‌یابد. مشاهده می‌شود که با افزایش تنها مقدار بسیار اندکی نانوذره گرافن (۵٪) کسر وزنی، بدلیل وجود فازمیانی، مدول الاستیک کامپوزیت به میزان ۹٪ افزایش می‌یابد. بنابراین، به وضوح مشهود است که مدول الاستیک نانوکامپوزیت پلیمری به ناحیه فازمیانی اپوکسی-گرافن حساس است. با توجه به سفتی بیشتر فازمیانی در مقایسه با ماتریس پلیمری، مدول الاستیک برای نانوکامپوزیت پلیمری با فازمیانی بیشتر از نانوکامپوزیت پلیمری بدون فازمیانی است.

علاوه بر بررسی اثر فازمیانی در این بخش، به بررسی پارامتری اثرات خواص فازمیانی، یعنی ضریب چسبندگی (e) و ضخامت فازمیانی t_{int} پرداخته می‌شود. شکل ۶-ب و ۶-ج، به ترتیب اثر مقدار چسبندگی را بر روی مدول الاستیک نشان می‌دهد. بر طبق پژوهش انجام گرفته در [۳۱] به منظور تعیین دقیق مدول الاستیک در نانوکامپوزیت‌های پلیمری، لازم است مقدار e، مقداری بزرگتر از ۱ داشته باشد. مشاهده می‌شود که مدول کامپوزیت با افزایش e افزایش می‌یابد. برای e‌های بزرگتر از ۱، مقدار افزایش مدول الاستیک تقریباً یکسان است و تفاوت منحنی‌ها بسیار ناچیز می‌باشد. بنابراین در این پژوهش، مقدار e برابر با ۲ در نظر گرفته شده است. به طور مشابه، در شکل ۶-ج تغییرات منحنی ضریب پواسون برای محتوای گرافن نانوپلیتلت در حضور مقادیر مختلف e بررسی شده است. بیشترین کاهش در ضریب پواسون زمانی اتفاق می‌افتد که ضریب چسبندگی مقداری برابر با ۲ و یا بالاتر داشته باشد و به ازای مقادیر بیشتر و مساوی با ۲، روند کاهش یکسان و تقریباً منحنی‌ها منطبق بر یکدیگر هستند.

بنابراین، بدلیل کاهش برهمکنش سطحی پلیمر-نانوذرات، خواص موثر نانوکامپوزیت تخریب می‌شود [۱۹، ۲۶، ۳۵]. بر اساس تحقیقات تجربی بر روی کامپوزیت‌های تقویت شده توسط نانوذرات [۸، ۹] و مطالعه تصاویر میکروسکوپی روشی^۱ در آن‌ها، می‌توان دریافت که وضعیت کمی تجمع نانوذرات به کسر حجمی نانوذرات وابسته است. به این معنی که، با افزایش کسر حجمی نانوذره، وضعیت تجمع نانوذرات درون رزین تشدید می‌شود.

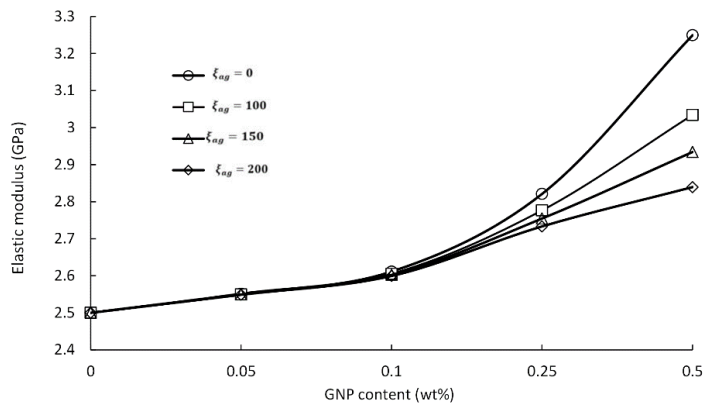
به منظور بررسی اثر تجمع گرافن نانوپلیتلت وابسته به کسر حجمی، نتایج پیش‌بینی مدول الاستیک وابسته به کسر حجمی، در حالتی که تجمع وابسته به کسر حجمی است با دو حالت دیگر، یعنی عدم توجه به تجمع و همچنین مستقل بودن تجمع به کسر حجمی مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج حاصل از این بررسی و مقایسه با نتایج تجربی [۸] در شکل ۵-الف مشاهده می‌شود و نشان می‌دهد که تا کسروزی ۱/۰٪، بدلیل کسر وزنی پایین، شاهد پراکندگی خوب نانوذرات درون رزین خواهیم بود. به همین دلیل، هر سه روش در کسر وزنی ۱/۰٪ به خوبی قادر به پیش‌بینی مدول الاستیک کامپوزیت هستند و به داده‌های تجربی نزدیک می‌باشند. حال آنکه، با افزایش هرچه بیشتر محتوای نانوذرات گرافن، تجمع نانوذرات افزایش می‌یابد که به تدریج منجر به تخریب خواص کامپوزیت و کاهش سرعت در افزایش مدول الاستیک آن می‌شود. بنابراین، از آنجایی که مدل حاضر به تجمع گرافن نانوپلیتلت وابسته به کسر حجمی توجه کرده است، نتایج پیش‌بینی آن نزدیک به داده‌های تجربی می‌باشد.

به منظور بررسی پارامتر ξ_{ag} ، بر روی خواص کامپوزیت، شکل‌های ۵-ب و ۵-ج تاثیر مقادیر مختلف ξ_{ag} را بر روی خواص کامپوزیت نشان می‌دهد. از شکل ۵-ب مشخص است که با افزایش محتوای گرافن نانوپلیتلت، مدول الاستیک افزایش می‌یابد. با این حال، با توجه به تجمع وابسته به محتوای گرافن نانوپلیتلت درون ماتریس، پس از ۱/۰٪ کسروزی، سرعت افزایش مدول الاستیک به تدریج روبه کاهش است و برعکس با افزایش محتوای گرافن نانوپلیتلت، ضریب پواسون کاهش می‌یابد. با بدتر شدن حالت پراکندگی نانوذره گرافن نانوپلیتلت ($\xi_{ag} = 2$) مدول الاستیک کامپوزیت کاهش می‌یابد. در شکل ۵-ج، ضریب پواسون نانوکامپوزیت رفتاری نزولی با افزایش محتوای کسروزی نانوذره و حالت تجمع از خود نشان می‌دهد. به نحوی که، با کاهش ξ_{ag} از مقدار ۲ به ۰، وقتی کسروزی گرافن نانوپلیتلت از ۰ به ۲۵٪ می‌رسد، ضریب پواسون به میزان ۲/۳٪ کاهش می‌یابد. این مقدار برای مدول الاستیک به ازای تغییرات ξ_{ag} از ۲ به ۰ به میزان ۱۴/۵٪



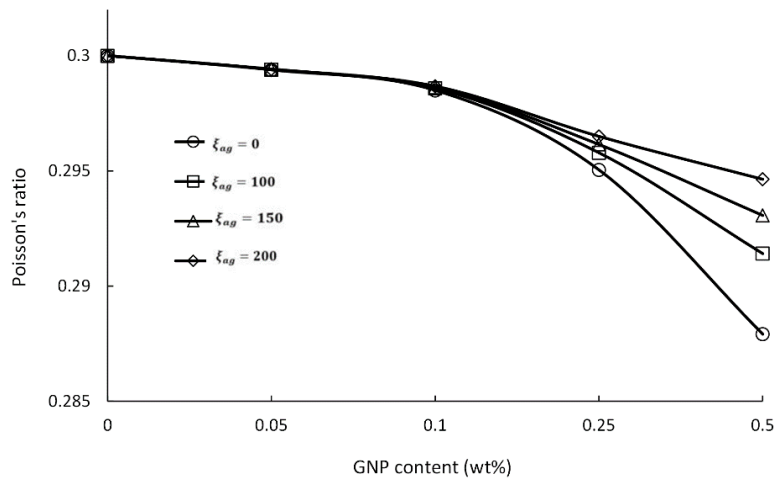
الف- تجمع گرافن وابسته به کسر حجمی بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت گرافن/اپوکسی

a) The effect of graphene aggregation dependent on volume fraction on the elastic modulus of graphene/epoxy nanocomposite



ب- تاثیر پارامتر تجمع گرافن نانوپلیتلت بر روی مقادیر مدول الاستیک نانوکامپوزیت

b) Effect of graphene nanoplatelet aggregation parameter on the elastic modulus of nanocomposite

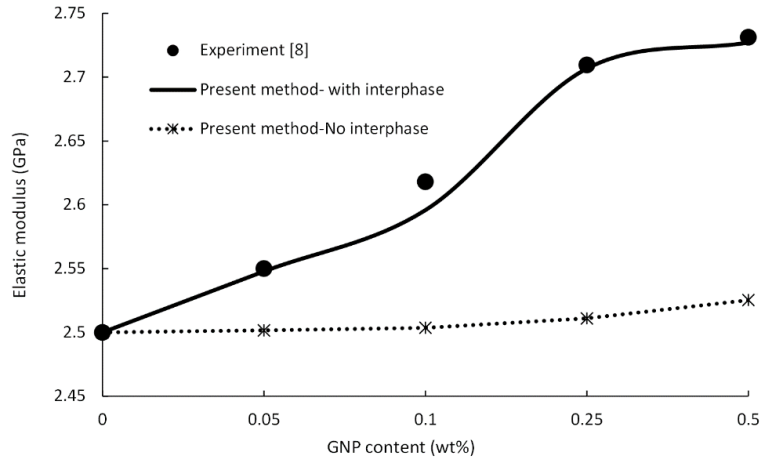


ج- تاثیر پارامتر تجمع گرافن نانوپلیتلت بر روی مقادیر ضریب پواسون نانوکامپوزیت

c) Effect of graphene nanoplatelet aggregation parameter on Poisson's ratio values of nanocomposite

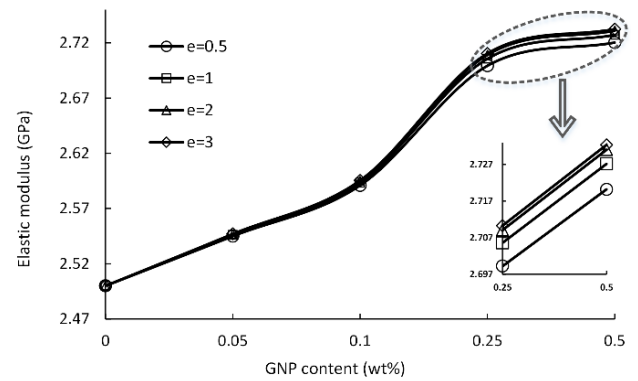
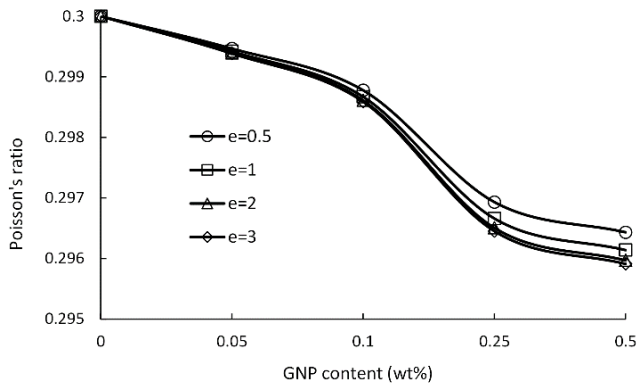
شکل ۵. تغییرات خواص نانوکامپوزیت با تجمع گرافن نانوپلیتلت به ازای کسروزی مختلف نانوذره

Fig. 5. The variation of the effective properties of nanocomposites at GNP contents versus aggregation factor containing 0, 100, 150, and 200



الف- اثر فازیایی بر روی دقت روش میکرومکانیکی برای پیش‌بینی مدول الاستیک نانوکامپوزیت

a) The effect of the interphase on the accuracy of the micromechanical method for predicting the elastic modulus of nanocomposite

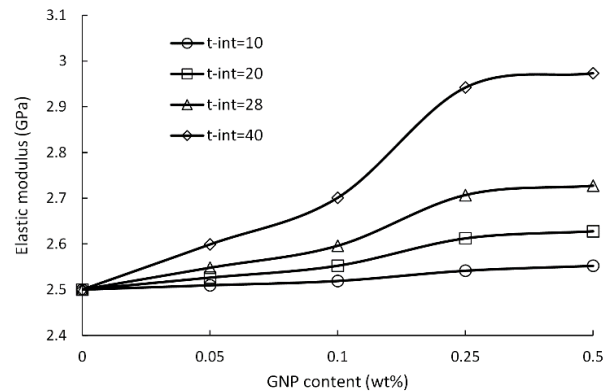
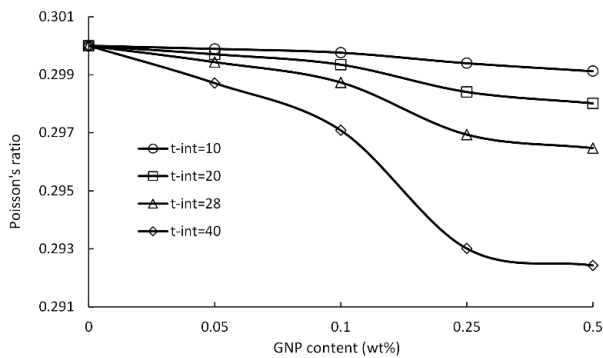


ج- بررسی اثر ضریب چسبندگی بر روی ضریب پواسون نانوکامپوزیت

ب- بررسی اثر ضریب چسبندگی بر روی مدول الاستیک نانوکامپوزیت

c) Investigating the effect of adhesion coefficient on Poisson's ratio of nanocomposite

b) Investigating the effect of adhesion coefficient on the elastic modulus of nanocomposite



د- بررسی ضخامت فازیایی بر روی ضریب پواسون نانوکامپوزیت

د - بررسی اثر ضخامت فازیایی بر روی مدول الاستیک نانوکامپوزیت

e) Investigation of interphase thickness on Poisson's ratio of nanocomposite

d) Investigating the effect of interphase thickness on the elastic modulus of nanocomposite

شکل ۶. بررسی اثر وجود فازیایی و اثر هر یک از پارامترهای فازیایی بر روی مدول الاستیک و ضریب پواسون نانوکامپوزیت به ازای کسر وزنی مختلف گرافن نانوپلیتلت با در نظر گرفتن حالت تجمع و جهت‌گیری تصادفی نانوذرات

Fig. 6. The variation of the effective properties of nanocomposites at GNP contents versus (a) interphase (b,c) adhesion coefficient, (d,e) interphase thickness

می‌شود، تغییر آهسته مدول الاستیک و ضریب پواسون در نسبت‌های منظر ۶۰ به بالاتر است.

۸- نتیجه‌گیری

خصوصیات موثر کامپوزیت زمینه اپوکسی با تقویت‌کننده گرافن نانوپلیتلت با استفاده از یک مدل میکرومکانیکی جدید تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا به منظور استخراج خواص موثر کامپوزیت مورد بررسی قرار گرفت. پس از آن، یک فازمیان درجه‌بندی شده به عنوان فاز سوم به منظور توصیف ناحیه تعامل اپوکسی/گرافن نانوپلیتلت تعریف و مورد بررسی قرار گرفت. همچنین، حالت تجمع گرافن نانوپلیتلت توسط یک نرخ تجمع که به کسر حجمی نانوذره وابسته است، تعریف شده است که بیانگر میزان گرافن نانوپلیتلت تجمع‌شده به کل گرافن نانوپلیتلت‌ها بکاررفته درون کامپوزیت می‌باشد. مرحله بعد، اثر اندازه گرافن نانوپلیتلت با یک ایده جدید مورد مطالعه قرار گرفت. اشاره به این نکته حائز اهمیت است که حالت تجمع وابسته به کسر حجمی گرافن نانوپلیتلت و ایده اثراندازه مطرح‌شده، پارامترهای اثرگذاری هستند که مطالعات بسیار اندکی به این موضوع توجه داشته‌اند. سپس، جهت‌گیری تصادفی گرافن نانوپلیتلت درون اپوکسی با میانگین‌گیری زاویه‌های اویلر در فضای سه‌بعدی مورد توجه قرار گرفت. با توجه به جهت‌گیری تصادفی یکنواخت توزیع‌شده گرافن نانوپلیتلت، نانوکامپوزیت حاصل ایزوتروپ در نظر گرفته شد. تجزیه و تحلیل ارائه‌شده، توسط داده‌های تجربی تایید شد. علاوه‌براین، مطالعات پارامتری، شامل اثر محتوای گرافن نانوپلیتلت و حالت تجمع، اثر ویژگی‌های فازمیان بر روی مدول الاستیک کامپوزیت و اثر نسبت‌منظر نانوذره گرافن مورد بررسی قرار گرفت. با توجه به نتایج و بحث ارائه‌شده، می‌توان به نتایج زیر اشاره کرد. وابستگی تجمع گرافن نانوپلیتلت به کسر حجمی گرافن نانوپلیتلت، از طریق نتایج تجربی تایید شد.

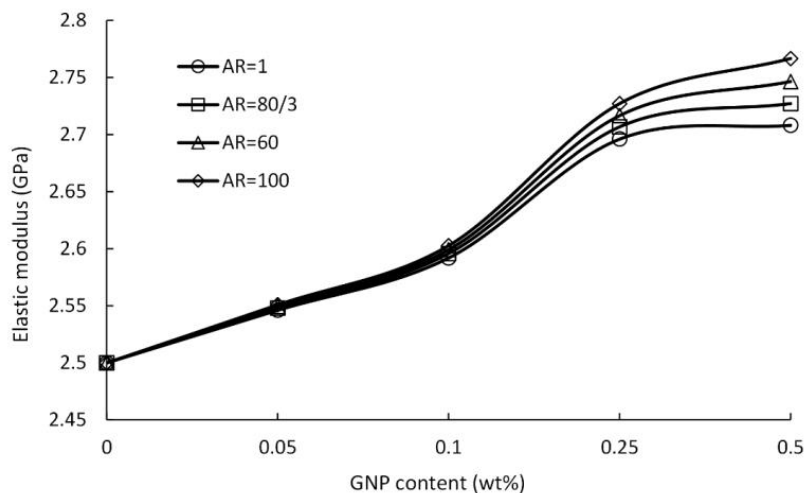
بدلیل رخ‌دادن حالت تجمع در محتوای بالای گرافن نانوپلیتلت، خواص الاستیک در محتوای بالاتر از یک حدآستانه مشخص برای کسر حجمی گرافن نانوپلیتلت، تخریب می‌شود.

نسبت‌منظر گرافن نانوپلیتلت می‌تواند بر روی مدول الاستیک کامپوزیت اثرگذار باشد. حال آنکه در نسبت‌منظر بالاتر از یک مقدار مشخص، مدول الاستیک کامپوزیت افزایش نخواهد داشت.

از جمله پارامتر دیگری که در بررسی فاز میانی مورد تحلیل قرار گرفته است، بررسی ضخامت فازمیان بر روی خواص کامپوزیت می‌باشد. همانطور که در رابطه (۱۳) مشاهده می‌شود، حجم فاز میانی ارتباط مستقیمی با ضخامت فازمیان دارد. به این معنی که با افزایش ضخامت فازمیان، حجم فازمیان بیشتر می‌شود. در نتیجه افزایش حجم فازمیان درون کامپوزیت، بدلیل بالاتر بودن سفتی فازمیان در مقایسه با سفتی ماتریس، منجر به بهبود خواص موثر کامپوزیت می‌شود. این اثر را به وضوح می‌توان در شکل ۶-۶ مشاهده نمود که با اضافه کردن کسر وزنی جزئی از گرافن نانوپلیتلت (۰/۵٪)، در صورتی که ضخامت فازمیان ۱۰ نانومتر باشد، شاهد افزایش به میزان ۲٪ در مدول الاستیک کامپوزیت خواهیم بود. حال آنکه، وجود فازمیان اطراف گرافن نانوپلیتلت، با ضخامت ۴۰ نانومتر در کسر وزنی ۰/۵٪، مدول الاستیک کامپوزیت را به میزان ۲۰٪ افزایش خواهد داد. شکل ۶-۶ اثر ضخامت فازمیان را بر روی ضریب پواسون کامپوزیت نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که به ازای کسر وزنی ۰/۲۵٪، افزایش ضخامت فازمیان از ۱۰ نانومتر به ۴۰ نانومتر، ضریب پواسون کامپوزیت را به میزان ۲۱٪ کاهش خواهد داد که نشان‌دهنده تاثیر زیاد ضخامت فازمیان بر روی ضریب پواسون کامپوزیت می‌باشد.

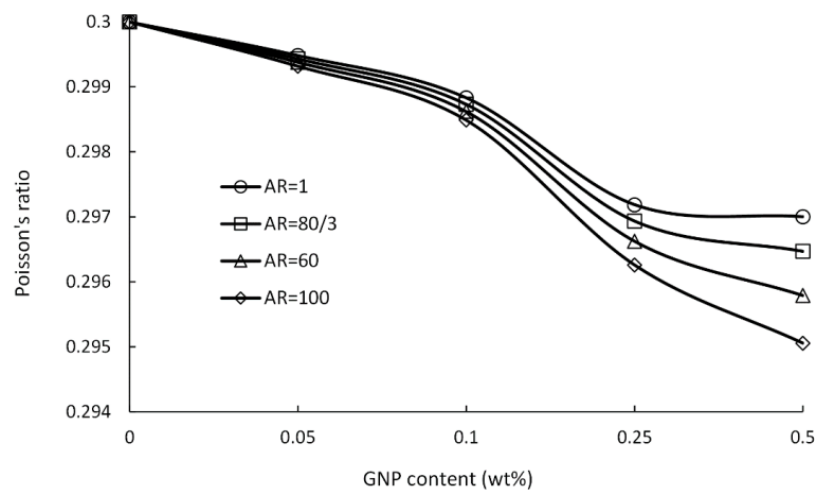
۷-۵ اثرات نسبت منظر گرافن نانوپلیتلت

نانوذرات تقویت‌کننده گرافن نانوپلیتلت، در زمان ساخت ممکن است در ابعاد و اندازه‌های مختلف بدست آیند. هندسه نانوذره تقویت‌کننده و همچنین ابعاد آن بر روی خواص موثر کامپوزیت اثرگذار است. در این بخش به بررسی اثر پارامتر نسبت‌منظر $AR=w/h$ بر روی خواص کامپوزیت پرداخته می‌شود. در شکل ۷-۷ الف مشاهده می‌شود که با افزایش نسبت منظر، مدول الاستیک کامپوزیت نیز افزایش می‌یابد. در زمانی که کسر وزنی گرافن درون کامپوزیت ۰/۱٪ است، بدلیل وجود میزان بسیار کم گرافن نانوپلیتلت درون کامپوزیت، تفاوت مدول الاستیک به‌ازای نسبت‌منظرهای مختلف، کم است. در حالی که با افزایش محتوای گرافن نانوپلیتلت درون ماتریس از ۰/۱٪ به ۰/۵٪ کسر وزنی، مدول الاستیک کامپوزیت به ازای نسبت‌منظر بالاتر، افزایش بیشتری خواهد داشت. همچنین، مشاهده می‌شود که به ازای کسر وزنی گرافن ۰/۵٪ و نسبت‌منظر برابر با ۱، مدول الاستیک به میزان ۸٪ افزایش و ضریب پواسون کامپوزیت ۱٪ کاهش می‌یابد. حال آنکه، در صورت افزایش نسبت‌منظر به مقداری برابر با ۱۰۰، افزایش مدول الاستیک به ۱۰/۵٪ خواهد رسید. نکته‌ای که به وضوح در تغییر نسبت‌منظر مشاهده



الف- بررسی اثر اندازه گرافن نانوپلیتلت بر روی مدول الاستیک کامپوزیت

a) Investigating the effect of graphene nanoplatelet size on the composite elastic modulus



ب- بررسی اثر اندازه گرافن نانوپلیتلت بر روی ضریب پواسون کامپوزیت

b) Investigating the effect of graphene nanoplatelet size on Poisson's ratio of composite

شکل ۷. بررسی اثر اندازه گرافن نانوپلیتلت بر روی خواص نانوکامپوزیت به ازای مقادیر مختلف کسروزی

Fig. 7. The variation of effective properties of nanocomposite at GNP contents versus aspect ratios (AR) including 1, 80/3, 60, and 100

۹- فهرست علائم

علائم یونانی

مولفه‌های کرنش متوسط سراسری	$\bar{\epsilon}_{ij}$
کرنش متوسط درون زیرسلول $\alpha\beta\gamma$	$\bar{\epsilon}_{ij}^{(\alpha\beta\gamma)}$

علائم انگلیسی

اندازه زیرسلول $\alpha\beta\gamma$	$d_\alpha, h_\beta, l_\gamma$
جابه‌جایی‌های متوسط حجمی	$W_{i(000)}^{(\alpha\beta\gamma)}$
ماتریس دربرگیرنده هندسه و خواص مکانیکی مواد در داخل هر زیرسلول	$[K]$
بردار کرنش متوسط خارجی اعمال شده	$\{F\}$
بردار جابجایی	$\{U\}$
ماتریس تمرکز کرنش مکانیکی	$A^{(\alpha\beta\gamma)}$
ماتریس سفتی الاستیک موثر المان حجمی نماینده	C^*
ماتریس سفتی زیرسلول $\alpha\beta\gamma$	$C^{(\alpha\beta\gamma)}$
سفتی رزین اپوکسی	E^m
سفتی گرافن نانوپلیتلت	E^{GNP}
سفتی فازمیان	E^{Int}
فاصله وجه بزرگتر از مرکز گرافن نانوپلیتلت	R_{GNP}
ضخامت فازمیان	t_{Int}
ضریب چسبندگی	e
کسر حجمی گرافن نانوپلیتلت	V_{GNP}
فاکتور تجمع	C_{ag}
تعداد ذرات گرافن نانوپلیتلت درون المان حجمی نماینده	N_{GNP}
عرض، طول و ضخامت گرافن نانوپلیتلت	$H_{GNP}, L_{GNP}, W_{GNP}$
تعداد گرافن نانوپلیتلت‌های تجمع شده	N_{ag}
حجم فازمیان اطراف گرافن نانوپلیتلت	V_{Int}
تعداد سلول‌های مکعبی درون المان حجمی نماینده در سه بعد	$N_\alpha \times N_\beta \times N_\gamma$
دستگاه مختصات سراسری کامپوزیت تناوبی سه‌بعدی حاوی ماده ناهمگن تناوبی	(X_1, X_2, X_3)
یک دستگاه موضعی در مرکز هر زیرسلول $\alpha\beta\gamma$	$(\bar{y}_1^{(\alpha)}, \bar{y}_2^{(\beta)}, \bar{y}_3^{(\gamma)})$

منابع

- [1] K. Hu, D.D. Kulkarni, I. Choi, V.V. Tsukruk, Graphene-polymer nanocomposites for structural and functional applications, *Progress in polymer science*, 39(11) (2014) 1934-1972.
- [2] M. Hassanzadeh-Aghdam, Evaluating the effective creep properties of graphene-reinforced polymer nanocomposites by a homogenization approach, *Composites Science and Technology*, 209 (2021) 108791.
- [3] J.A. King, D.R. Klimek, I. Miskioglu, G.M. Odegard, Mechanical properties of graphene nanoplatelet/epoxy composites, *Journal of applied polymer science*, 128(6) (2013) 4217-4223.
- [4] M.A. Rafiee, J. Rafiee, Z. Wang, H. Song, Z.-Z. Yu, N. Koratkar, Enhanced mechanical properties of nanocomposites at low graphene content, *ACS nano*, 3(12) (2009) 3884-3890.
- [5] J. Suh, D. Bae, Mechanical properties of polytetrafluoroethylene composites reinforced with graphene nanoplatelets by solid-state processing, *Composites Part B: Engineering*, 95 (2016) 317-323.
- [6] J.-Z. Liang, Effects of graphene nano-platelets size and content on tensile properties of polypropylene composites at higher tension rate, *Journal of Composite Materials*, 52(18) (2018) 2443-2450.
- [7] Z. Shokrieh, M. Shokrieh, Z. Zhao, A modified micromechanical model to predict the creep modulus of polymeric nanocomposites, *Polymer Testing*, 65 (2018) 414-419.
- [8] M.M. Shokrieh, M. Esmkhani, Z. Shokrieh, Z. Zhao, Stiffness prediction of graphene nanoplatelet/epoxy nanocomposites by a combined molecular dynamics-micromechanics method, *Computational materials science*, 92 (2014) 444-450.

- nanoparticle-on the nanoparticle size and volume fraction dependent aggregation, *Composites Part B: Engineering*, 167 (2019) 277-301.
- [18] K.A. Zarasvand, H. Golestanian, Investigating the effects of number and distribution of GNP layers on graphene reinforced polymer properties: Physical, numerical and micromechanical methods, *Composites Science and Technology*, 139 (2017) 117-126.
- [19] S. Boutaleb, F. Zaïri, A. Mesbah, M. Nait-Abdelaziz, J.-M. Gloaguen, T. Boukharouba, J.-M. Lefebvre, Micromechanics-based modelling of stiffness and yield stress for silica/polymer nanocomposites, *International Journal of Solids and Structures*, 46(7-8) (2009) 1716-1726.
- [20] H. Chong, S. Hinder, A. Taylor, Graphene nanoplatelet-modified epoxy: effect of aspect ratio and surface functionality on mechanical properties and toughening mechanisms, *Journal of materials science*, 51(19) (2016) 8764-8790.
- [21] X.-Y. Ji, Y.-P. Cao, X.-Q. Feng, Micromechanics prediction of the effective elastic moduli of graphene sheet-reinforced polymer nanocomposites, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(4) (2010) 045005.
- [22] M. Vakilifard, M. Mahmoodi, Three dimensional micromechanical modeling of damping capacity of nano fiber reinforced polymer nanocomposites, *Modares Mechanical Engineering*, 16(9) (2016) 257-266.
- [23] M. Paley, J. Aboudi, Micromechanical analysis of composites by the generalized cells model, *Mechanics of materials*, 14(2) (1992) 127-139.
- [24] J. Aboudi, S.M. Arnold, B.A. Bednarczyk, *Micromechanics of composite materials: a generalized multiscale analysis approach*, Butterworth-Heinemann, 2012.
- [25] J. Aboudi, R. Haj-Ali, A fully coupled thermal–electrical–mechanical micromodel for multi-phase periodic thermoelectrical composite materials and devices, *International Journal of Solids and Structures*, 80 (2016) 84-95.
- [9] C.M. Hadden, D.R. Klimek-McDonald, E.J. Pineda, J.A. King, A.M. Reichanadter, I. Miskioglu, S. Gowtham, G.M. Odegard, Mechanical properties of graphene nanoplatelet/carbon fiber/epoxy hybrid composites: Multiscale modeling and experiments, *Carbon*, 95 (2015) 100-112.
- [10] R. Rafiee, A. Eskandariyun, Predicting Young’s modulus of agglomerated graphene/polymer using multi-scale modeling, *Composite Structures*, 245 (2020) 112324.
- [11] H. Al Mahmud, M.S. Radue, S. Chinkanjanarot, G.M. Odegard, Multiscale modeling of epoxy-based nanocomposites reinforced with functionalized and non-functionalized graphene nanoplatelets, *Polymers*, 13(12) (2021) 1958.
- [12] H. Al Mahmud, M.S. Radue, S. Chinkanjanarot, W.A. Pisani, S. Gowtham, G.M. Odegard, Multiscale modeling of carbon fiber-graphene nanoplatelet-epoxy hybrid composites using a reactive force field, *Composites Part B: Engineering*, 172 (2019) 628-635.
- [13] H. Wan, L. Fan, J. Jia, Q. Han, M.Y.A. Jamalabadi, Micromechanical modeling over two length-scales for elastic properties of graphene nanoplatelet/graphite fiber/polyimide composites, *Materials Chemistry and Physics*, 262 (2021) 124255.
- [14] Y. Pan, G. Weng, S. Meguid, W. Bao, Z. Zhu, A. Hamouda, Interface effects on the viscoelastic characteristics of carbon nanotube polymer matrix composites, *Mechanics of Materials*, 58 (2013) 1-11.
- [15] D. Ciprari, K. Jacob, R. Tannenbaum, Characterization of polymer nanocomposite interphase and its impact on mechanical properties, *Macromolecules*, 39(19) (2006) 6565-6573.
- [16] M. Mahmoodi, M. Vakilifard, CNT-volume-fraction-dependent aggregation and waviness considerations in viscoelasticity-induced damping characterization of percolated-CNT reinforced nanocomposites, *Composites Part B: Engineering*, 172 (2019) 416-435.
- [17] M. Vakilifard, M. Mahmoodi, Dynamic moduli and creep damping analysis of short carbon fiber reinforced polymer hybrid nanocomposite containing silica

- 188-199.
- [31] Y.-N. Rao, H.-L. Dai, Micromechanics-based thermo-viscoelastic properties prediction of fiber reinforced polymers with graded interphases and slightly weakened interfaces, *Composite Structures*, 168 (2017) 440-455.
- [32] A. Melro, P. Camanho, S. Pinho, Generation of random distribution of fibres in long-fibre reinforced composites, *Composites Science and Technology*, 68(9) (2008) 2092-2102.
- [33] M. Yas, M. Heshmati, Dynamic analysis of functionally graded nanocomposite beams reinforced by randomly oriented carbon nanotube under the action of moving load, *Applied Mathematical Modelling*, 36(4) (2012) 1371-1394.
- [34] L. Walpole, On the overall elastic moduli of composite materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 17(4) (1969) 235-251.
- [35] M. Hassanzadeh-Aghdam, R. Ansari, M. Mahmoodi, A. Darvizeh, Effect of nanoparticle aggregation on the creep behavior of polymer nanocomposites, *Composites Science and Technology*, 162 (2018) 93-100.
- [26] Y. Zare, K.Y. Rhee, D. Hui, Influences of nanoparticles aggregation/agglomeration on the interfacial/interphase and tensile properties of nanocomposites, *Composites Part B: Engineering*, 122 (2017) 41-46.
- [27] T.M. Ricks, T.E. Lacy Jr, E.J. Pineda, B.A. Bednarzyk, S.M. Arnold, Computationally efficient High-Fidelity Generalized Method of Cells micromechanics via order-reduction techniques, *Composite Structures*, 156 (2016) 2-9.
- [28] M. Mahmoodi, M. Vakilifard, Interfacial effects on the damping properties of general carbon nanofiber reinforced nanocomposites—a multi-stage micromechanical analysis, *Composite Structures*, 192 (2018) 397-421.
- [29] S. Ben, J. Zhao, T. Rabczuk, A theoretical analysis of interface debonding for coated sphere with functionally graded interphase, *Composite Structures*, 117 (2014) 288-297.
- [30] T. Sabiston, M. Mohammadi, M. Cherkaoui, J. Lévesque, K. Inal, Micromechanics for a long fibre reinforced composite model with a functionally graded interphase, *Composites Part B: Engineering*, 84 (2016)

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم

H. Mehdipour, A. Rohani Bastami, M. H. Soorgee, *Three-dimensional micromechanical modelling of effective elastic properties of graphene nanoplatelet-reinforced polymer nanocomposite using a HFGMC-based homogenization approach*, *Amirkabir J. Mech Eng.*, 55(4) (2023) 495-514.

DOI: 10.22060/mej.2023.22059.7560

