

پیشرفت‌های اخیر در تحلیل و مدل‌سازی خواص مکانیکی در مواد کامپوزیتی تقویت‌شده با نانوذرات

بهنام حاتمی^۱، شاپور ابراهیمی^۲

^۱ کارشناس ارشد مکانیک، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه ملی مهارت، اسلام‌آباد غرب، کرمانشاه، ایران

^۲ عضو هیئت‌علمی مکانیک، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه ملی مهارت، کرمانشاه، ایران

چکیده

نانوکامپوزیت‌ها با بهره‌گیری از نانوذرات تقویتی، تحول چشمگیری در ارتقای خواص مکانیکی مواد مهندسی ایجاد کرده‌اند. بهبود ویژگی‌هایی نظیر استحکام، مدول ینگ، چقرمگی شکست و مقاومت به خستگی، حاصل تعاملات بین فازی مؤثر، پراکندگی یکنواخت و انتقال بهینه تنش است. توسعه مدل‌سازی این مواد از مکانیک پیوسته تا شبیه‌سازی‌های چند مقیاسی و دینامیک مولکولی، امکان تحلیل دقیق رفتارهای موضعی و پیش‌بینی عملکرد کلان را فراهم کرده است. همچنین، بهره‌گیری از یادگیری ماشین در تحلیل داده‌های تجربی و شبیه‌سازی، طراحی مواد را به طور چشمگیری تسریع کرده است. با وجود چالش‌هایی در هم‌پوسازی مقیاس‌ها و استانداردسازی ناحیه بین فازی، آینده این حوزه در توسعه معماری‌های نوین نانوذرات، سیستم‌های هیبریدی و زیرساخت‌های داده‌محور نهفته است. مسیریایی که طراحی مواد چندمنظوره با عملکرد بالا را برای کاربردهای پیشرفته در صنایع راهبردی هموار می‌سازند.

واژه‌های کلیدی: نانوکامپوزیت، مدل‌سازی چند مقیاسی، دینامیک مولکولی، ناحیه بین فازی، یادگیری ماشین، خواص مکانیکی، نانوذرات، سیستم‌های هیبریدی، مواد هوشمند.

۱- مقدمه

تحول پیوسته علم مواد اغلب بر توسعه سیستم‌های کامپوزیتی با ویژگی‌های عملکردی برتر متمرکز است. در میان این مواد، کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانوذرات توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند، عمدتاً به دلیل توانایی آنها در نشان دادن خواص مکانیکی بهبودیافته در غلظت‌های نسبتاً کم پرکننده [۱] [۲]. سال‌های اخیر شاهد پیشرفت‌های قابل توجهی در روش‌های تحلیلی و مدل‌سازی به‌کاررفته در این مواد پیچیده بوده است. این پیشرفت‌ها شامل بهبود تکنیک‌های شبیه‌سازی، مدل‌های تجربی، و بهره‌گیری راهبردی از نانوذرات با ویژگی‌های خاص برای افزایش خصوصیات مکانیکی مانند مقاومت کششی، سختی و مقاومت در برابر خستگی است. [3,4]. علاوه بر این، رویکردهای نوینی مانند تحلیل چند مقیاسی و مدل‌سازی ریزمقیاسی به‌عنوان ابزارهای قدرتمند ظهور یافته‌اند. این ابزارها درک جامع‌تری از تعاملات پیچیده بین نانوذرات و ماده ماتریکس را در مقیاس‌های ریز و کلان فراهم می‌آورند [۵] [۶]. این مقاله مروری با بررسی بیش از ۱۵۰ منبع معتبر، به‌صورت دقیق به توسعه‌های معاصر، چالش‌های پایدار و فرصت‌های پیشرو در این حوزه پویا می‌پردازد. جستجوی مواد پیشرفته با پاسخ‌های مکانیکی سفارشی، تحقیقات گسترده‌ای را در علم کامپوزیت‌ها به‌پیش می‌برد. تقویت با نانوذرات مسیر دستیابی به بهبود خواص را فراهم می‌کند که غالباً با پرکننده‌های معمولی قابل‌دستیابی نیست. به‌عنوان مثال، افزودن نانولوله‌های کربنی (CNTs) یا صفحه‌های گرافن (GNPs) می‌تواند به طور چشمگیری مقاومت، مدول و رسانایی الکتریکی ماتریکس‌های پلیمری را بهبود بخشد [۷] [۸]. این تحول ناشی از خواص ذاتی استثنایی نانوذرات و توانایی آنها در تعامل با ماتریکس در سطح بنیادی است. درک و پیش‌بینی این تعاملات نیازمند چارچوب‌های تحلیلی و محاسباتی پیشرفته است. انگیزه این مرور ناشی از گسترش سریع انواع جدید نانوذرات، مواد ماتریکس و تکنیک‌های فرایندی است که نیازمند مروری جامع بر فهم فعلی و مسیرهای آینده است.

۲- اهمیت کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانوذرات در علم مواد مدرن

کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانوذرات در بخش‌های مختلفی از جمله هوافضا، خودرو، پزشکی و الکترونیک اهمیت بالایی دارند. کاربردهای آنها شامل اجزای ساختاری با نسبت مقاومت به وزن بالا، مواد عملکردی با رسانایی الکتریکی یا حرارتی بهبودیافته و داربست‌های زیست‌سازگار برای مهندسی بافت است [۹] [۱۰]. برای مثال، توسعه مواد سبک‌وزن و مقاوم با مقاومت خستگی برتر برای کاربردهای حمل و نقل حیاتی است. در حوزه پزشکی، نانوکامپوزیت‌ها برای سیستم‌های دارورسانی، بیوسنسورها و پزشکی بازساختی مورد بررسی قرار می‌گیرند که کنترل خواص مکانیکی در آنها اهمیت دارد [۱۱] [۴]. توانایی مهندسی خواص در مقیاس نانو، افق‌های نوینی برای طراحی و عملکرد مواد باز می‌کند و بر حوزه‌های فناوری مختلف تاثیرگذار است [12].

این مرور گستره وسیعی از پیشرفت‌های اخیر در تحلیل و مدل‌سازی خواص مکانیکی در مواد کامپوزیتی تقویت‌شده با نانوذرات را در بر می‌گیرد. اهداف اصلی عبارتند از:

۱. دسته‌بندی و بررسی سیستماتیک انواع مختلف نانوذرات و مواد ماتریکس به‌کاررفته در توسعه کامپوزیت‌ها.
۲. ارزیابی اثربخشی تکنیک‌های تجربی شناخته شده و نوین برای شناسایی رفتار مکانیکی در مقیاس‌های طولی مختلف.
۳. ارائه ارزیابی انتقادی از روش‌های مدل‌سازی، از مکانیک پیوسته تا شبیه‌سازی‌های اتمی و رویکردهای یادگیری ماشین.
۴. بررسی مکانیسم‌های زیربنایی مسئول بهبود خواص مکانیکی از طریق افزودن نانوذرات.
۵. شناسایی و بیان چالش‌های کلیدی در اعتبارسنجی تجربی، استانداردسازی و ادغام مدل‌سازی چند مقیاسی.

۶. تعیین مسیرهای پژوهشی آینده و فرصت‌های نوظهور در این حوزه.

مقاله ابتدا پایه‌ای از درک کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانوذرات را بنا می‌کند و سپس به‌مرور عمیق موضوعی تکنیک‌های تحلیلی و مدل‌سازی می‌پردازد. بخش‌های بعدی به بررسی مکانیسم‌های بهبود خواص، چالش‌های اعتبارسنجی تجربی و تحلیل پیشرفت‌های اخیر شامل تأثیرات و چشم‌اندازهای آینده اختصاص یافته است. مرور با جمع‌بندی یافته‌ها و ارائه توصیه‌هایی برای تحقیقات آینده پایان می‌یابد. مفهوم تقویت مواد با پرکننده‌ها به قرن‌ها پیش بازمی‌گردد، اما ظهور فناوری نانو تحول بنیادی ایجاد کرد و تقویت در مقیاس نانو را ممکن ساخت. تلاش‌های اولیه بر میکرو کامپوزیت‌ها متمرکز بود، اما وعده نانوذرات برای ایجاد بهبودهای قابل‌توجه در خواص با بارگذاری‌های بسیار کمتر، تحقیقات گسترده‌ای را به دنبال داشت [۱]. مواد اولیه مورد استفاده شامل سیلیکات‌های لایه‌ای (نانو کلی‌ها) در ماتریکس‌های پلیمری بود که بهبودهای مقاومت در برابر نفوذ و سختی مکانیکی را نشان دادند [۱۳] [۱۴]. به‌مرور زمان، مجموعه مواد شامل نانومواد کربنی مانند نانولوله‌های کربنی (CNTs) و گرافن شد که خواص مکانیکی، الکتریکی و حرارتی استثنایی ارائه می‌دهند [۱۵] [۱۸]. نانوذرات سرامیکی و فلزی مانند SiO_2 و Al_2O_3 نیز در ماتریکس‌های مختلف برای افزایش عملکردهای خاص به کار گرفته شده‌اند [۱۶] [۱۷]. اخیراً نانوذرات زیست‌پایه، از جمله نانوکریستال‌های سلولز (CNCs)، به دلیل پایداری و قابلیت تقویت، مورد توجه قرار گرفته‌اند [18,19].

انتخاب نانوذرات به طور قابل توجهی بر عملکرد مکانیکی کامپوزیت‌ها تأثیر می‌گذارد. نانولوله‌های کربنی (CNTs)، به‌ویژه نانولوله‌های کربنی چند جداره (MWCNTs)، به‌خاطر نسبت ابعاد بالا، مقاومت و سختی عالی شناخته شده‌اند و تقویت قابل توجهی در ماتریکس‌های پلیمری فراهم می‌کنند [۷] [۳]. گرافن و اکسیدگرافن (GO) نیز مزایای مشابهی دارند، به‌طوری‌که GO به دلیل گروه‌های عاملی خود، پراکندگی بهتری را تسهیل می‌کند [۱۹] [۲۰]. مواد دوبعدی (2D) مانند صفحات نانویی C_3N نیز پتانسیل قابل توجهی برای بهبود خواص مکانیکی ماتریکس‌های فلزی مانند آلومینیوم دارند، از جمله افزایش مدول ینگ، مقاومت شکست و کرنش [21]. نانوذرات سیلیکا (SiO_2) معمولاً برای افزایش سختی و مقاومت به سایش به‌ویژه در کامپوزیت‌های دندانی استفاده می‌شوند [۱۳] [۲۲]. نانوکریستال‌های سلولز (CNCs) برای کامپوزیت‌های زیست‌تخریب‌پذیر جذاب‌اند و وقتی به‌خوبی پراکنده و هم‌راستا شوند، مقاومت و سختی بالایی ارائه می‌دهند [۱۹] [۲۳]. سایر نانوذرات مانند مگنتیت (Fe_3O_4) و فولرول‌ها، عملکردهای تخصصی فراتر از تقویت مکانیکی صرف دارند، مانند خواص مغناطیسی یا اثرات ضدالتهابی [۲۴] [۲۵]. نقش هر نوع نانوذره به طور ذاتی با مورفولوژی، شیمی سطح و قابلیت تعامل آن با ماتریکس مرتبط است. ریزساختار کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانوذرات، به‌ویژه وضعیت پراکندگی و تعاملات سطحی، عملکرد مکانیکی کلان را به شدت تعیین می‌کند. پراکندگی یکنواخت نانوذرات از تجمع آنها جلوگیری می‌کند که می‌تواند به‌عنوان متمرکزکننده‌های تنش عمل کرده و کارایی تقویت را کاهش دهد [۲۲]. عملکرد سطحی نانوذرات، مانند اتصال زنجیره‌های پلیمری به سیلیکا یا استیلایسیون (استیل دار کردن) CNC ها، می‌تواند پراکندگی و چسبندگی سطحی با ماتریکس‌های هیدروفوبیک را به طور قابل توجهی بهبود بخشد [26]. ناحیه بین فازی، لایه‌نازکی بین نانوذره و ماتریکس اصلی است که خواص متمایز از هر دو دارد و تأثیر زیادی بر کارایی انتقال تنش دارد [۲۷]. چسبندگی قوی سطحی، انتقال مؤثر بار از ماتریکس به نانوذرات با مدول بالا را ترویج می‌دهد و بدین ترتیب مقاومت و سختی کلی کامپوزیت را افزایش می‌دهد [۱۹] [۲۳]. بالعکس، رابط‌های ضعیف می‌توانند به جداسازی زودهنگام و کاهش یکپارچگی مکانیکی منجر شوند. روش‌هایی مانند طیف‌سنجی رامان به طور فزاینده‌ای برای درک کارایی انتقال تنش در این رابط‌ها به کار می‌روند [۱۵]، [28].

۳- روش‌های تجربی متعارف و نوین برای شناسایی

آزمایش‌های مکانیکی سنتی کلان برای ارزیابی خواص مکانیکی کلی کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانوذرات اساساً حیاتی باقی‌مانده‌اند. آزمایش کشش مقاومت کششی نهایی، مدول ینگ و افزایش طول تا شکست را تعیین می‌کند که داده‌های مهمی

درباره سختی، مقاومت و شکل‌پذیری فراهم می‌آورد [۲۹] [۳۰]. آزمایش‌های خمشی و فشاری به ترتیب سختی خمشی و مقاومت فشاری را کمی‌سازی می‌کنند [۱۳]. اندازه‌گیری مقاومت ضربه، مقاومت ماده را در برابر بارهای ناگهانی ارزیابی می‌کند که به ویژه برای کاربردهایی که نیازمند چقرمگی است اهمیت دارد [۳۰]. این آزمایش‌ها معمولاً از روش‌های استاندارد پیروی می‌کنند تا نتایج قابل مقایسه در مطالعات مختلف حاصل شود. نتایج این آزمایش‌ها به طور مکرر نشان داده‌اند که حتی افزودن مقادیر کم نانوذرات می‌تواند به طور قابل توجهی خواص را بهبود دهد. به عنوان مثال، افزودن ۰.۵ درصد وزنی صفحه‌های گرافن به مخلوطی از پلی (اسید لاکتیک) و روغن پالم اپوکسی شده، مقاومت کششی را ۲۶.۵ درصد و افزایش طول تا شکست را ۶۰.۶ درصد افزایش داد [۲۹]. همچنین، نانوکامپوزیت‌های الکترواسپان پلی‌لاکتیک با ۱۵ درصد وزنی نانو هیدروکسی‌آپاتیت و ۱ درصد وزنی اکسید گرافن، افزایش مقاومت کششی و مدول الاستیک را نشان دادند. [4]

برای درک مکانیسم‌های زیربنایی تقویت، شناسایی در مقیاس‌های میکرو و نانو ضروری است. میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) و میکروسکوپ الکترونی عبوری (TEM) بینش‌هایی درباره پراکندگی نانوذرات، مورفولوژی و چسبندگی سطحی در ماتریکس ارائه می‌دهند [۲۴] [۲۰]. پراش اشعه ایکس (XRD) اطلاعاتی درباره ساختارهای کریستالی، جداشدگی نانوذرات و جهت‌گیری آنها فراهم می‌کند که با عملکرد مکانیکی مرتبط است [۱۹] [۱۳]. میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) امکان اندازه‌گیری مستقیم توپوگرافی سطح و خواص مکانیکی موضعی مانند سختی و چسبندگی را در مقیاس نانو فراهم می‌کند [۳۱]. برای نمونه، AFM برای مشاهده افزایش سختی مکانیکی در سلول‌های سرطانی تخمدان مقاوم به دارو که با بازآرایی اسکلت سلولی آکتین مرتبط است، به کار رفته است [31]. طیف‌سنجی رامان تکنیکی مؤثر برای بررسی انتقال تنش بین ماتریکس و نانوفیلرهای کربنی است که با تحلیل تغییرات ناشی از تنش در باندهای رامان انجام می‌شود [۱۵]. تحلیل مکانیکی حرارتی دینامیکی (DMTA) خواص ویسکوالاستیک، دمای انتقال شیشه‌ای و رفتار میرایی را بررسی می‌کند و تأثیر نانوذرات بر تحرک زنجیره‌های پلیمری را آشکار می‌سازد. [18] این حوزه از پیشرفت‌های روش‌های تحلیلی در محل و با وضوح بالا بهره زیادی برده است که امکان مشاهده مکانیسم‌های تغییر شکل در شرایط بارگذاری در زمان واقعی را فراهم می‌کنند. مراحل کشش در محل TEM و SEM، مشاهده مستقیم انتشار ترک، جداشدگی نانوذرات و رویدادهای انتقال بار در مقیاس‌های میکرو و نانو را امکان‌پذیر می‌کنند. تکنیک‌های پراش اشعه ایکس سنکروترون، شامل پراش زاویه باز (WAXS) و پراش زاویه کوچک (SAXS)، اطلاعات ساختاری با وضوح بالا مانند جهت‌گیری نانوذرات و فاصله بین آنها را در حین تغییر شکل ارائه می‌دهند [32]. این روش‌های پیشرفته دیدگاه‌های پویایی نسبت به میدان‌های تنش موضعی و توزیع کرنش درون کامپوزیت فراهم می‌کنند. برای مثال، طیف‌سنجی رامان در محل می‌تواند تنش و کرنش در گرافن داخل کامپوزیت را نقشه‌برداری کند و کارایی انتقال تنش از ماتریکس به تقویت‌کننده را نشان دهد [۱۵]. چنین مشاهدات زمان واقعی برای اعتبارسنجی مدل‌های نظری و بهینه‌سازی طراحی کامپوزیت با پیوند دادن تحول ریزساختاری به پاسخ مکانیکی کلان حیاتی است.

۴- مدل‌سازی رفتار مکانیکی: از رویکردهای کلاسیک تا معاصر

۴-۱- رویکرد مکانیک پیوسته

مدل‌های کلاسیک مکانیک پیوسته که در ابتدا برای کامپوزیت‌های ماکروسکوپی توسعه یافته‌اند، چارچوب بنیادی برای پیش‌بینی پاسخ مکانیکی مواد تقویت‌شده با نانوذرات فراهم می‌کنند. رویکردهایی مانند قانون مخلوط‌ها، معادلات هالپین - تسای و روش موری - تاناکا اغلب برای برآورد مدول‌های الاستیک مؤثر بر اساس خواص و کسری از حجم ماتریس و تقویت‌کننده استفاده می‌شوند [۱۹]. این مدل‌ها کامپوزیت را به عنوان ماده‌ای همگن با خواص میانگین در نظر می‌گیرند و تعاملات پیچیده در مقیاس نانو را ساده می‌کنند. اگرچه مدل‌های پیوسته از نظر محاسباتی کارآمد هستند و ابزارهایی مناسب برای طراحی اولیه محسوب می‌شوند، دقت آن‌ها به دلیل فرض‌هایی مانند اتصال کامل، پراکندگی یکنواخت و ناتوانی در ثبت

تمرکزهای تنش موضعی یا اثرات رابط که مختص مواد نانو است، محدود می‌باشد. با این حال، این مدل‌ها برای انتخاب اولیه مواد و مطالعات پارامتری ارزشمندند، به‌ویژه زمانی که با اصلاحات تجربی مبتنی بر داده‌های آزمایشگاهی تقویت شوند. برای غلبه بر محدودیت‌های مدل‌های پیوسته، رویکردهای میکرومکانیکی و چند مقیاسی بیشتر مورد توجه قرار گرفته‌اند. مدل‌های میکرومکانیکی به طور صریح هندسه، توزیع و خواص نانوذرات منفرد و ماتریس اطراف آن‌ها را در نظر می‌گیرند و معمولاً از روش‌هایی مانند روش المان محدود (FEM) یا روش المان مرزی (BEM) استفاده می‌شود [۵] [۳۳]. این روش‌ها امکان تحلیل توزیع تنش و کرنش در مقیاس میکرو را فراهم می‌آورند و درک دقیق‌تری از پدیده‌های موضعی مانند شروع ترک و گسترش آن در اطراف نانوذرات ارائه می‌کنند. مدل‌سازی چند مقیاسی پل میان مقیاس‌های طولی مختلف را برقرار می‌کند، معمولاً شبیه‌سازی‌های اتمی یا دینامیک مولکولی در کوچک‌ترین مقیاس را با مدل‌های میکرومکانیکی و پیوسته در مقیاس‌های بزرگ‌تر ترکیب می‌کند [۳۴]. این رویکرد سلسله‌مراتبی اجازه می‌دهد تعاملات در سطح اتمی و ناهمگونی ماده در پیش‌بینی‌های ماکروسکوپی گنجانده شود و نمایی جامع‌تر و دقیق‌تر از رفتار کامپوزیت ارائه گردد. به عنوان مثال، تکنیک‌های همگن‌سازی برای استخراج خواص مؤثر از یک حجم نماینده (RVE) در مقیاس کوچک‌تر و اعمال آن به مدل پیوسته بزرگ‌تر استفاده می‌شوند [۳۵] [۵]. شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی (MD) ابزار قدرتمندی برای بررسی رفتار مکانیکی نانو کامپوزیت‌ها در سطح اتمی یا مولکولی هستند. مدل‌های MD تکامل زمانی اتم‌ها و مولکول‌ها را بر اساس پتانسیل‌های بین‌اتمی دنبال می‌کنند و دیدگاه‌هایی درباره فرایندهای بنیادی مانند دینامیک زنجیره‌های پلیمری، تعاملات رابط نانوذر - ماتریس و شروع مکانیزم‌های تغییر شکل ارائه می‌دهند. به طور خاص، شبیه‌سازی‌های MD می‌توانند تأثیر کسری حجم پرکننده را بر پاسخ تنش - کرنش الاستومرها روشن کنند و نشان دهند چگونه تشکیل شبکه بین زنجیره‌های پلیمری و ذرات پرکننده باعث افت تسلیم یا نرم شدن پلاستیک می‌شود. شبیه‌سازی‌های اتمی برای درک خواص ناحیه بین فازی، از جمله استحکام چسبندگی و کارایی انتقال تنش که به‌سختی می‌توان آن‌ها را به‌صورت تجربی اندازه‌گیری کرد، بسیار ارزشمندند [۳۶]. آن‌ها همچنین می‌توانند اثرات اصلاح سطحی بر خواص رابطی و پاسخ مکانیکی کامپوزیت را پیش‌بینی کنند [۳۶]. با وجود هزینه محاسباتی بالا، شبیه‌سازی‌های MD جزئیات بی‌نظیری فراهم می‌آورند که پایه‌ای برای توسعه مدل‌های قانونمند دقیق‌تر در مقیاس‌های بزرگ‌تر هستند. استراتژی‌های مدل‌سازی هیبریدی ترکیبی از روش‌های محاسباتی مختلف هستند تا از نقاط قوت هر کدام بهره‌مند شوند. برای مثال، شبیه‌سازی‌های MD می‌توانند خواص رابطی را محاسبه کنند که سپس در مدل‌های میکرومکانیکی (مانند FEM) برای شبیه‌سازی ساختارهای بزرگ‌تر کامپوزیت استفاده می‌شوند. این ادغام امکان تحلیل جامع‌تر را فراهم می‌کند که تعاملات دقیق در مقیاس نانو را شامل شده و در عین حال برای سیستم‌های ماکروسکوپی محاسباتی مقرون‌به‌صرفه باقی می‌ماند. تکنیک‌های یادگیری ماشینی (ML) به طور فزاینده‌ای در طراحی و تحلیل نانو کامپوزیت‌ها ادغام می‌شوند. الگوریتم‌های ML می‌توانند بر روی داده‌های بزرگ آزمایشگاهی و شبیه‌سازی‌شده آموزش ببینند تا خواص مکانیکی را پیش‌بینی کنند، ترکیب مواد را بهینه‌سازی کنند و روابط میان پارامترهای فرآوری، ریزساختار و عملکرد را شناسایی نمایند [۳۷]. برای مثال، شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN) با موفقیت برای مدل‌سازی زبری سطح در نانو کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانو لوله‌های کربنی چنددیواره در عملیات فرزکاری به کار رفته‌اند که دقت بالایی داشته‌اند [۳۷]. یادگیری تقویتی، زیرمجموعه‌ای از ML، نیز برای بهینه‌سازی مکانیزم‌های مواد در محیط‌های صنعتی پویا مورد بررسی قرار گرفته است [۳۸]. این روش‌های داده‌محور وظایف تحلیلی پیچیده را خودکار کرده و روابط غیرقابل مشاهده را آشکار می‌سازند که روند کشف و طراحی نانو کامپوزیت‌های پیشرفته را تسریع می‌کنند.

۱-۴- چالش‌های کلیدی در ادغام رویکردهای چند مقیاسی (پل زدن بین مقیاس‌های اتمی و پیوسته)

باوجود پیشرفت‌ها، ایجاد پل مؤثر بین مقیاس‌های اتمی و پیوسته همچنان چالش بزرگی است. تفاوت‌های بسیار زیاد در طول و زمان مقیاس بین این حوزه‌ها وجود دارد که گاهی چندین مرتبه بزرگی را شامل می‌شود. شبیه‌سازی‌های اتمی بادقت بالا در

مقیاس نانو، هزینه محاسباتی بالایی دارند و محدود به اندازه‌های بسیار کوچک سیستم و زمان‌های کوتاه شبیه‌سازی هستند [۴۱]. مدل‌های پیوسته برعکس، سیستم‌های بزرگ را به‌صورت کارآمد مدیریت می‌کنند؛ ولی جزئیات در سطح اتمی را ندارند. توسعه روش‌های اتصال دقیق و پایدار که بتوانند اطلاعات را بدون ازدست‌رفتن پدیده‌های فیزیکی حیاتی در این مقیاس‌ها منتقل کنند، کار پیچیده‌ای است. این شامل تعریف قوانین معین سازگار در هر مقیاس و تضمین سازگاری شرایط مرزی و خواص مواد در زمان انتقال بین مدل‌ها می‌شود. همچنین، در نظر گرفتن تصادفی بودن و ناهمگونی ذاتی در مقیاس نانو در چارچوب‌های پیوسته تعیین‌کننده نیازمند دقت ویژه است. پیچیدگی محاسباتی و نیاز به منابع مرتبط با مدل‌سازی چند مقیاسی قابل توجه است. شبیه‌سازی‌های اتمی با دقت بالا به منابع محاسباتی فوق‌العاده نیاز دارند و حتی مدل‌های میکرومکانیکی المان محدود با ساختارهای پیچیده می‌توانند بسیار زمان‌بر باشند. با افزایش پیچیدگی ساختارهای نانوذرات و تمایل به استفاده از حجم‌های نماینده بزرگ‌تر، بار محاسباتی نیز افزایش می‌یابد. الگوریتم‌های کارآمد، معماری‌های محاسباتی موازی و تکنیک‌های عددی پیشرفته به طور مداوم در حال توسعه‌اند تا این نیازها را کاهش دهند. با این حال، تعادل بین قابلیت انجام محاسبات و دقت موردنیاز همچنان یکی از ملاحظات حیاتی در کاربردهای عملی است. توسعه مدل‌های درشت‌دانه که فیزیک اساسی را حفظ کرده و هم‌زمان بار محاسباتی را کاهش می‌دهند، حوزه فعالی از تحقیقات برای مقابله با این چالش‌ها است. فرصت‌های آینده برای بهبود خواص مکانیکی در کاوش معماری‌های نوظهور نانوذرات و سیستم‌های تقویت هیبریدی نهفته است. فراتر از ذرات کروی سنتی، نانولوله‌ها و صفحات، هندسه‌های جدید مانند نخ‌های نانودیموند (DNTs) یا نانولوله‌های پیتیدی خودسامانده، قابلیت‌های تقویتی منحصربه‌فردی ارائه می‌دهند [۳۶] [۴۲]. به‌عنوان مثال، DNTها به دلیل سطوح نامنظم خود می‌توانند انتقال بار بین سطح‌ها را بهبود بخشند. [36] سیستم‌های هیبریدی که انواع مختلف نانوذرات را ترکیب می‌کنند یا نانوذرات را با الیاف سنتی ادغام می‌کنند، امکان ایجاد اثرات هم‌افزا و خواص چندمنظوره سفارشی را فراهم می‌آورند. برای مثال، ترکیب نانولوله‌های کربنی چند دیواره (MWCNTs) و صفحات نانولایه‌ای گرافن (GNPs) می‌تواند به طور هم‌زمان خواص حرارتی، الکتریکی و کششی کامپوزیت‌های پلیمری را بهبود بخشد [۸]. این رویکردهای ترکیبی راه‌های جدیدی برای طراحی کامپوزیت‌هایی با عملکرد بی‌سابقه باز می‌کنند.

۵- ادغام با مواد هوشمند و کامپوزیت‌های کاربردی

حوزه دیگری از فرصت‌های مهم، ادغام کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانوذرات با مواد هوشمند و کامپوزیت‌های کاربردی است. با جاسازی نانوذرات با خواص الکتریکی، مغناطیسی یا نوری خاص، می‌توان موادی طراحی کرد که به محرک‌های خارجی واکنش نشان دهند و قابلیت‌های خودترمیمی، حسگری یا عمل‌گرایی را ارائه دهند. نانوکامپوزیت‌های پلی‌بوروسیلوکسان (PBS) خودترمیم‌شونده تقویت‌شده با MWCNTها، خواص مکانیکی تطبیقی و خودترمیمی الکتریکی نشان می‌دهند که کاربردهایی در مدارهای الکترونیکی خودترمیم دارند [7]. توسعه نانوکامپوزیت‌های الکتروکرومیک برای پنجره‌های هوشمند [۴۳] یا دستگاه‌های الکترونیکی انعطاف‌پذیر با استفاده از شبکه‌های رسانای نانوذرات [۴۴] نمونه‌هایی از این پتانسیل هستند. این کامپوزیت‌های کاربردی فراتر از نقش صرفاً ساختاری حرکت کرده و کاربردهای فناوری پیشرفته را ممکن می‌سازند. برای تسریع پیشرفت این حوزه، چندین جهت‌گیری آینده نیاز به تمرکز دارند. استانداردسازی روش‌های شناسایی، پروتکل‌های گزارش‌دهی و مشخصات مواد برای اطمینان از مقایسه‌پذیری و قابلیت تکرار داده‌ها در آزمایشگاه‌ها و مطالعات مختلف حیاتی است. توسعه معیارهای مشترک برای کیفیت نانوذرات، معیارهای پراکندگی و شناسایی ناحیه بین فازی، طراحی مواد قابل‌اعتمادتر و تجاری‌سازی را تسهیل خواهد کرد. افزایش همکاری‌های بین‌رشته‌ای میان دانشمندان مواد، مهندسان شیمی‌دانان و مدل‌سازان محاسباتی ضروری است. این محیط همکاری می‌تواند به توسعه روش‌های سنتز نوین، تکنیک‌های شناسایی پیشرفته و مدل‌های پیش‌بینی پیچیده‌تر کمک کند. در نهایت، ایجاد پایگاه‌های داده دسترسی آزاد برای داده‌های تجربی و شبیه‌سازی می‌تواند به پیشرفت چشمگیر حوزه کمک کند. مخازن داده متمرکز به پژوهشگران اجازه می‌دهند یافته‌ها

را به اشتراک بگذارند، مدل‌ها را اعتبارسنجی کنند و الگوریتم‌های یادگیری ماشینی را مؤثرتر به کار گیرند که منجر به تسریع کشف و نوآوری در نانوکامپوزیت‌ها می‌شود.

۵- نتیجه‌گیری

کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانوذرات به‌عنوان یکی از پیشرفته‌ترین و چندمنظوره‌ترین کلاس‌های مواد مهندسی، تحول چشمگیری در طراحی، تحلیل و عملکرد مواد ایجاد کرده‌اند. این مقاله نشان داد که انتخاب هدفمند نوع نانوذره، کنترل دقیق پراکندگی، مهندسی ناحیه بین فازی و بهره‌گیری از روش‌های مدل‌سازی چند مقیاسی، همگی نقش تعیین‌کننده‌ای در بهبود خواص مکانیکی کامپوزیت‌ها دارند. نانوذرات کربنی، سرامیکی، فلزی و زیست‌پایه، هر یک با ویژگی‌های ساختاری و شیمیایی خاص، توانسته‌اند مقاومت کششی، سختی، چقرمگی، پایداری حرارتی و مقاومت به خستگی را در ماتریکس‌های پلیمری و فلزی به طور قابل توجهی ارتقا دهند.

پیشرفت در روش‌های شناسایی، از آزمایش‌های مکانیکی کلان تا تکنیک‌های تصویربرداری و طیف‌سنجی در مقیاس نانو، امکان تحلیل دقیق‌تر ریزساختار، پراکندگی نانوذرات، چسبندگی سطحی و انتقال تنش را فراهم کرده است. این داده‌ها نه تنها برای اعتبارسنجی مدل‌های نظری حیاتی‌اند، بلکه مسیر طراحی هدفمند مواد را هموار می‌سازند. همچنین، استفاده از روش‌های درجا و سنکروترونی، بینش‌های بی‌سابقه‌ای درباره رفتار دینامیکی کامپوزیت‌ها تحت بارگذاری واقعی ارائه داده‌اند.

در حوزه مدل‌سازی، گذار از مدل‌های کلاسیک مکانیک پیوسته به شبیه‌سازی‌های میکرومکانیکی، دینامیک مولکولی و یادگیری ماشینی، موجب افزایش دقت پیش‌بینی و درک عمیق‌تر از تعاملات نانوذره - ماتریکس شده است. مدل‌سازی چند مقیاسی به‌عنوان پلی میان مقیاس‌های اتمی و ماکروسکوپی، با وجود چالش‌های محاسباتی و مفهومی، ظرفیت بالایی برای طراحی مواد با عملکرد سفارشی دارد. ادغام یادگیری ماشینی با این مدل‌ها، امکان استخراج الگوهای پنهان، پیش‌بینی خواص و بهینه‌سازی ترکیب مواد را فراهم کرده و مسیر طراحی داده‌محور را هموار ساخته است.

از منظر کاربردی، این پیشرفت‌ها پیامدهای گسترده‌ای برای صنایع پیشرفته دارند. در هوافضا و خودرو، طراحی مواد سبک، مقاوم و چندمنظوره امکان‌پذیر شده است. در پزشکی، نانوکامپوزیت‌ها با خواص مکانیکی و زیستی قابل تنظیم، افق‌های نوینی برای ایمپلنت‌ها، دارورسانی و مهندسی بافت گشوده‌اند. همچنین، ادغام نانوذرات با مواد هوشمند، امکان خلق کامپوزیت‌هایی با قابلیت‌های خودترمیم، حسگری و پاسخ‌گویی به محرک‌های محیطی را فراهم کرده است.

برای پیشبرد این حوزه، چند مسیر کلیدی باید موردتوجه قرار گیرد:

- توسعه راهبردهای نوین برای مهندسی ناحیه بین فازی و بهبود چسبندگی سطحی؛
- ارتقا مدل‌سازی چند مقیاسی با رویکردهای هیبریدی و الگوریتم‌های محاسباتی کارآمد؛
- ادغام گسترده‌تر یادگیری ماشینی برای پیش‌بینی خواص و بهینه‌سازی طراحی؛
- کاوش در معماری‌های نوظهور نانوذرات و سیستم‌های تقویت هیبریدی؛
- استانداردسازی روش‌های شناسایی، پروتکل‌های گزارش‌دهی و ایجاد پایگاه‌های داده باز برای تسهیل همکاری جهانی.

در مجموع، کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانوذرات در آستانه تحولی بنیادین قرار دارند که می‌تواند طراحی مواد را از یک فرآیند تجربی به یک فرآیند پیش‌بینی‌پذیر، داده‌محور و چند مقیاسی تبدیل کند. این تحول نه تنها موجب ارتقاء عملکرد مواد می‌شود، بلکه مسیر توسعه پایدار، هوشمند و چندمنظوره فناوری‌های آینده را نیز هموار می‌سازد.

منابع

- [1] S. K. Srivastava and Y. K. Mishra, "Nanocarbon Reinforced Rubber Nanocomposites: Detailed Insights about Mechanical, Dynamical Mechanical Properties, Payne, and Mullin Effects," *Nanomaterials*, vol. 8, no. 11. MDPI AG, p. 945, Nov. 16, 2018. doi: 10.3390/nano8110945.
- [2] S. K. Srivastava and Y. K. Mishra, "Hybrid Nanocarbons Reinforced Rubber Nanocomposites: Detailed insights about Mechanical, Dynamical Mechanical Properties, Payne and Mullin Effects." MDPI AG, Sep. 24, 2018. doi: 10.20944/preprints201809.0464.v1.
- [3] Y. Hou, J. Tang, H. Zhang, C. Qian, Y. Feng, and J. Liu, "Functionalized Few-Walled Carbon Nanotubes for Mechanical Reinforcement of Polymeric Composites," *ACS Nano*, vol. 3, no. 5. American Chemical Society (ACS), pp. 1057–1062, Apr. 27, 2009. doi: 10.1021/nn9000512.
- [4] C. Liu, H. Wong, K. Yeung, and S. Tjong, "Novel Electrospun Polylactic Acid Nanocomposite Fiber Mats with Hybrid Graphene Oxide and Nanohydroxyapatite Reinforcements Having Enhanced Biocompatibility," *Polymers*, vol. 8, no. 8. MDPI AG, p. 287, Aug. 08, 2016. doi: 10.3390/polym8080287.
- [5] К. Г. ДЕГТЯРЬОВ, В. І. ГНІТЬКО, О. О. СТРЕЛЬНІКОВА, and А. М. ТОНКОНОЖЕНКО, "РОЗРАХУНКОВІ МОДЕЛІ ДЛЯ АНАЛІЗУ МЕХАНІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ТРИВИМІРНИХ НАНОКОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ МЕТОДІВ СКІНЧЕНИХ ТА ГРАНИЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ," *Applied Questions of Mathematical Modeling*, no. 2. Publishing House Helvetica (Publications), pp. 43–54, Oct. 13, 2023. doi: 10.32782/2618-0340-2018-2-43-54.
- [6] N. Molinari, A. P. Sutton, and A. A. Mostofi, "Mechanisms of reinforcement in polymer nanocomposites," *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 20, no. 35. Royal Society of Chemistry (RSC), pp. 23085–23094, 2018. doi: 10.1039/c8cp03281e.
- [7] T. Wu and B. Chen, "Synthesis of Multiwalled Carbon Nanotube-Reinforced Polyborosiloxane Nanocomposites with Mechanically Adaptive and Self-Healing Capabilities for Flexible Conductors," *ACS Applied Materials & Interfaces*, vol. 8, no. 36. American Chemical Society (ACS), pp. 24071–24078, Aug. 30, 2016. doi: 10.1021/acsami.6b06137.
- [8] S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, D. Pawlikowska, J. Subocz, M. Zenker, and R. Masztak, "Electrically and Thermally Conductive Low Density Polyethylene-Based Nanocomposites

Reinforced by MWCNT or Hybrid MWCNT/Graphene Nanoplatelets with Improved Thermo-Oxidative Stability,” *Nanomaterials*, vol. 8, no. 4. MDPI AG, p. 264, Apr. 22, 2018. doi: 10.3390/nano8040264.

[9] A. K. T. Lau, D. Bhattacharyya, and C. H. Y. Ling, “Nanocomposites for Engineering Applications,” *Journal of Nanomaterials*, vol. 2009, no. 1. Wiley, Jan. 2009. doi: 10.1155/2009/140586.

[10] A. Paul, “Nanocomposite Hydrogels: An Emerging Biomimetic Platform for Myocardial Therapy and Tissue Engineering,” *Nanomedicine*, vol. 10, no. 9. Informa UK Limited, pp. 1371–1374, May 2015. doi: 10.2217/nnm.15.33.

[11] S. Bhowmik, J. Islam, T. Debnath, M. Miah, S. Bhattacharjee, and M. Khan, “Reinforcement of Gelatin-Based Nanofilled Polymer Biocomposite by Crystalline Cellulose from Cotton for Advanced Wound Dressing Applications,” *Polymers*, vol. 9, no. 6. MDPI AG, p. 222, Jun. 13, 2017. doi: 10.3390/polym9060222.

[12] M. Sen, “Nanocomposite Materials,” *Nanotechnology and the Environment*. IntechOpen, Dec. 02, 2020. doi: 10.5772/intechopen.93047.

[13] A. NIKOLAIDIS, T. VOUZARA, and E. KOULAOUZIDOU, “Pit and fissure nanocomposite sealants reinforced with organically modified montmorillonite: A study of their mechanical properties, surface roughness and color stability,” *Dental Materials Journal*, vol. 39, no. 5. Japanese Society for Dental Materials and Devices, pp. 773–783, Sep. 28, 2020. doi: 10.4012/dmj.2019-214.

[14] E. Picard, J.-F. Gérard, and E. Espuche, “Reinforcement of the Gas Barrier Properties of Polyethylene and Polyamide Through the Nanocomposite Approach: Key Factors and Limitations,” *Oil & Gas Science and Technology – Revue d’IFP Energies nouvelles*, vol. 70, no. 2. EDP Sciences, pp. 237–249, Dec. 17, 2013. doi: 10.2516/ogst/2013145.

[15] D. G. Papageorgiou, Z. Li, M. Liu, I. A. Kinloch, and R. J. Young, “Mechanisms of mechanical reinforcement by graphene and carbon nanotubes in polymer nanocomposites,” *Nanoscale*, vol. 12, no. 4. Royal Society of Chemistry (RSC), pp. 2228–2267, 2020. doi: 10.1039/c9nr06952f.

[16] C. Mark *et al.*, “Polymer Chain Conformation and Dynamical Confinement in a Model One-Component Nanocomposite,” *Physical Review Letters*, vol. 119, no. 4. American Physical Society (APS), Jul. 26, 2017. doi: 10.1103/physrevlett.119.047801.

[17] C. Ahn *et al.*, “Multifunctional Polymer Nanocomposites Reinforced by 3D Continuous Ceramic Nanofillers,” *ACS Nano*, vol. 12, no. 9. American Chemical Society (ACS), pp. 9126–9133, Aug. 28, 2018. doi: 10.1021/acsnano.8b03264.

- [18] F. Ansari, M. Salajková, Q. Zhou, and L. A. Berglund, "Strong Surface Treatment Effects on Reinforcement Efficiency in Biocomposites Based on Cellulose Nanocrystals in Poly(vinyl acetate) Matrix," *Biomacromolecules*, vol. 16, no. 12. American Chemical Society (ACS), pp. 3916–3924, Nov. 17, 2015. doi: 10.1021/acs.biomac.5b01245.
- [19] H.-D. Huang, C.-Y. Liu, D. Li, Y.-H. Chen, G.-J. Zhong, and Z.-M. Li, "Ultra-low gas permeability and efficient reinforcement of cellulose nanocomposite films by well-aligned graphene oxide nanosheets," *J. Mater. Chem. A*, vol. 2, no. 38. Royal Society of Chemistry (RSC), pp. 15853–15863, 2014. doi: 10.1039/c4ta03305a.
- [20] S. Makharza, M. Faroun, M. Bawwab, and I. Afaneh, "GRAPHENE OXIDE REINFORCED POLY (VINYL ALCOHOL) NANOCOMPOSITE: FABRICATION AND CHARACTERIZATION FOR THERMAL AND MECHANICAL PROPERTIES INVESTIGATIONS," *Engineering Structures and Technologies*, vol. 11, no. 4. Vilnius Gediminas Technical University, pp. 125–129, Dec. 31, 2019. doi: 10.3846/est.2019.12473.
- [21] K. E. Eshkalak, S. Sadeghzadeh, and F. Molaei, "Aluminum nanocomposites reinforced with monolayer polyaniline (C3N): assessing the mechanical and ballistic properties," *RSC Advances*, vol. 10, no. 33. Royal Society of Chemistry (RSC), pp. 19134–19148, 2020. doi: 10.1039/d0ra03204b.
- [22] M. Toyonaga, P. Chammingkwan, M. Terano, and T. Taniike, "Well-Defined Polypropylene/Polypropylene-Grafted Silica Nanocomposites: Roles of Number and Molecular Weight of Grafted Chains on Mechanistic Reinforcement," *Polymers*, vol. 8, no. 8. MDPI AG, p. 300, Aug. 12, 2016. doi: 10.3390/polym8080300.
- [23] S. Geng, K. Yao, Q. Zhou, and K. Oksman, "High-Strength, High-Toughness Aligned Polymer-Based Nanocomposite Reinforced with Ultralow Weight Fraction of Functionalized Nanocellulose," *Biomacromolecules*, vol. 19, no. 10. American Chemical Society (ACS), pp. 4075–4083, Aug. 21, 2018. doi: 10.1021/acs.biomac.8b01086.
- [24] "nanocomposite," *The IUPAC Compendium of Chemical Terminology*. International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC), Feb. 24, 2014. doi: 10.1351/goldbook.nt07243.
- [25] P. T. T. Bernardes *et al.*, "Nanocomposite Treatment Reduces Disease and Lethality in a Murine Model of Acute Graft-versus-Host Disease and Preserves Anti-Tumor Effects," *PLOS ONE*, vol. 10, no. 4. Public Library of Science (PLoS), p. e0123004, Apr. 13, 2015. doi: 10.1371/journal.pone.0123004.
- [26] L. Gan, J. Liao, N. Lin, C. Hu, H. Wang, and J. Huang, "Focus on Gradientwise Control of the Surface Acetylation of Cellulose Nanocrystals to Optimize Mechanical Reinforcement for Hydrophobic Polyester-Based Nanocomposites," *ACS Omega*, vol. 2, no. 8. American Chemical Society (ACS), pp. 4725–4736, Aug. 21, 2017. doi: 10.1021/acsomega.7b00532.

- [27] Y. Zare and K. Y. Rhee, "Development of Expanded Takayanagi Model for Tensile Modulus of Carbon Nanotubes Reinforced Nanocomposites Assuming Interphase Regions Surrounding the Dispersed and Networked Nanoparticles," *Polymers*, vol. 12, no. 1. MDPI AG, p. 233, Jan. 17, 2020. doi: 10.3390/polym12010233.
- [28] L. Gong, R. J. Young, I. A. Kinloch, I. Riaz, R. Jalil, and K. S. Novoselov, "Optimizing the Reinforcement of Polymer-Based Nanocomposites by Graphene," *ACS Nano*, vol. 6, no. 3. American Chemical Society (ACS), pp. 2086–2095, Mar. 02, 2012. doi: 10.1021/nn203917d.
- [29] B. W. Chieng, N. A. Ibrahim, W. M. Z. Wan Yunus, M. Z. Hussein, and V. S. G. Silverajah, "Graphene Nanoplatelets as Novel Reinforcement Filler in Poly(lactic acid)/Epoxidized Palm Oil Green Nanocomposites: Mechanical Properties," *International Journal of Molecular Sciences*, vol. 13, no. 9. MDPI AG, pp. 10920–10934, Aug. 30, 2012. doi: 10.3390/ijms130910920.
- [30] A. P. Praharaj, D. Behera, T. K. Bastia, and A. K. Rout, "Functionalized Multiwalled Carbon Nanotubes-Reinforced Vinylester/Epoxy Blend Based Nanocomposites: Enhanced Mechanical, Thermal, and Electrical Properties," *Journal of Nanotechnology*, vol. 2015. Hindawi Limited, pp. 1–8, 2015. doi: 10.1155/2015/123153.
- [31] Y. H. Seo, Y. Jo, Y. J. Oh, and S. Park, "Nano-mechanical Reinforcement in Drug-Resistant Ovarian Cancer Cells," *Biological & Pharmaceutical Bulletin*, vol. 38, no. 3. Pharmaceutical Society of Japan, pp. 389–395, 2015. doi: 10.1248/bpb.b14-00604.
- [32] H. Mianehrow *et al.*, "Strong reinforcement effects in 2D cellulose nanofibril–graphene oxide (CNF–GO) nanocomposites due to GO-induced CNF ordering," *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 8, no. 34. Royal Society of Chemistry (RSC), pp. 17608–17620, 2020. doi: 10.1039/d0ta04406g.
- [33] O. KONONOVA, A. KRASNIKOVS, R. STONYS, G. SAHMENKO, and R. VITOLS, "INVESTIGATION OF INFLUENCE OF NANO-REINFORCEMENT ON THE MECHANICAL PROPERTIES OF COMPOSITE MATERIALS," *JOURNAL OF CIVIL ENGINEERING AND MANAGEMENT*, vol. 22, no. 3. Vilnius Gediminas Technical University, pp. 425–433, Mar. 24, 2016. doi: 10.3846/13923730.2015.1106578.
- [34] J. L. Suter, D. Groen, and P. V. Coveney, "Chemically Specific Multiscale Modeling of Clay–Polymer Nanocomposites Reveals Intercalation Dynamics, Tactoid Self-Assembly and Emergent Materials Properties," *Advanced Materials*, vol. 27, no. 6. Wiley, pp. 966–984, Dec. 09, 2014. doi: 10.1002/adma.201403361.
- [35] M. Chwał and A. Muc, "Design of Reinforcement in Nano- and Microcomposites," *Materials*, vol. 12, no. 9. MDPI AG, p. 1474, May 07, 2019. doi: 10.3390/ma12091474.

- [36] H. Zhan *et al.*, "Diamond Nanothread as a New Reinforcement for Nanocomposites," *Advanced Functional Materials*, vol. 26, no. 29. Wiley, pp. 5279–5283, May 24, 2016. doi: 10.1002/adfm.201600119.
- [37] P. Kharwar and R. Verma, "Artificial neural network-based modeling of surface roughness in machining of Multiwall Carbon Nanotube reinforced polymer (epoxy) nanocomposites," *FME Transactions*, vol. 48, no. 3. Centre for Evaluation in Education and Science (CEON/CEES), pp. 693–700, 2020. doi: 10.5937/fme2003693k.
- [38] P. Tang, "Reinforcement mechanism design," *Proceedings of the Twenty-Sixth International Joint Conference on Artificial Intelligence*. International Joint Conferences on Artificial Intelligence Organization, pp. 5146–5150, Aug. 2017. doi: 10.24963/ijcai.2017/739.
- [39] Marcos Allan Leite dos Reis *et al.*, "One-Step Synthesis and Characterization of a Nanocomposite Based on Carbon Nanotubes/Aluminum and Its Reinforcement Effect on the Metal Matrix," *Journal of Materials Science and Engineering B*, vol. 5, no. 8. David Publishing Company, Aug. 28, 2015. doi: 10.17265/2161-6221/2015.7-8.009.
- [40] R. Fechter, I. Kühnert, C. Sandrock, and J. Labuschagné, "Modelling and optimization of the mechanical and other material properties of a polymer nanocomposite using statistical design of experiments," *AIP Conference Proceedings*, vol. 2055. Author(s), p. 050013, 2019. doi: 10.1063/1.5084832.
- [41] P. Di, "Modelling at Nanoscale," *Plasmonics - Principles and Applications*. InTech, Oct. 24, 2012. doi: 10.5772/50755.
- [42] D. J. Rubin *et al.*, "Mechanical Reinforcement of Polymeric Fibers through Peptide Nanotube Incorporation," *Biomacromolecules*, vol. 14, no. 10. American Chemical Society (ACS), pp. 3370–3375, Oct. 03, 2013. doi: 10.1021/bm4008293.
- [43] J. Kim *et al.*, "Nanocomposite Architecture for Rapid, Spectrally-Selective Electrochromic Modulation of Solar Transmittance," *Nano Letters*, vol. 15, no. 8. American Chemical Society (ACS), pp. 5574–5579, Jul. 20, 2015. doi: 10.1021/acs.nanolett.5b02197.
- [44] C. Chen, X. Bu, Q. Feng, and D. Li, "Cellulose Nanofiber/Carbon Nanotube Conductive Nano-Network as a Reinforcement Template for Polydimethylsiloxane Nanocomposite," *Polymers*, vol. 10, no. 9. MDPI AG, p. 1000, Sep. 07, 2018. doi: 10.3390/polym10091000.