

Heat transfer in polyethylene nanocomposites: A multiscale approach

Leila Razzaghi¹, Farhad Khoeini^{1*}, Maryam Khalkhali¹, Ali Rajabpour²

¹Department of Physics, University of Zanjan, Zanjan, 45195-313, Iran

²Advanced Simulation and Computing Lab. (ASCL), Mechanical Engineering Department, Imam Khomeini International University, Qazvin, 34148-96818, Iran

Received: 24.01.2021 Revised: 24.02.2022 Accepted: 20.07.2022

Doi: [10.22055/jrmbms.2022.17708](https://doi.org/10.22055/jrmbms.2022.17708)

Abstract

In this paper, using the non-equilibrium molecular dynamics (NEMD) simulation approach, and the effective medium approximation (EMA) method, we investigate the effect of graphene nanoscale filler, as an enhancer, on the effective thermal conductivity of polyethylene-based nanocomposites. Our results suggest that the thermal conductivity of polyethylene at room temperature was estimated to be nearly 0.21 W/m.K, through using the reactive bond order (AIREBO) interatomic potential. This study shows that by increasing the volume fraction of graphene nanofillers, the effective thermal conductivity of the nanocomposite increases. We also observed that by increasing the volume fraction of graphene from 1% to 3%, the normalized thermal conductivity of nanocomposite increases to nearly 55%.

Keywords: Polyethylene nanocomposites, Thermal conductivity, Multiscale modeling, Graphene, Molecular dynamics

* Corresponding Author: khoeini@znu.ac.ir



انتقال گرما در نانوکامپوزیت‌های پلی‌اتیلن: رویکردی چند مقیاسی

لیلا رزاقی^۱، فرهاد خوئینی^{۱*}، مریم خلخالی^۱، علی رجب‌پور^۲^۱گروه فیزیک، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران^۲گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه بین‌المللی امام خمینی (ره)، قزوین، ایران

دریافت: ۱۳۹۹/۱۱/۰۵ ویرایش نهایی: ۱۴۰۰/۱۲/۰۵ پذیرش: ۱۴۰۱/۰۴/۲۹

Doi: [10.22055/jrmbms.2022.17708](https://doi.org/10.22055/jrmbms.2022.17708)

چکیده

در این مقاله، با استفاده از رهیافت شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی و روش تقریب میانگین، تأثیر نانو پرکننده گرافین به‌عنوان تقویت کننده را بر رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت بر پایه پلی‌اتیلن بررسی می‌کنیم. طبق نتایج ما، رسانندگی گرمایی پلی‌اتیلن در دمای اتاق با استفاده از پتانسیل بین اتمی ایربو، تقریباً 0.21 W/m.K به‌دست آمد. این پژوهش نشان می‌دهد با افزایش کسر حجمی نانو پرکننده گرافین، رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت افزایش می‌یابد. همچنین مشاهده کردیم که با افزایش کسر حجمی گرافین از ۱٪ به ۳٪ رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت نزدیک به ۵۵٪ افزایش می‌یابد.

کلیدواژگان: نانوکامپوزیت پلی‌اتیلن، رسانندگی گرمایی، مدل‌سازی چند مقیاسی، گرافین، دینامیک مولکولی

مقدمه

گرمایی، مکانیکی و الکترونیکی [۱۸] منحصر به‌فرد می‌باشد. گرافین دارای یک پیکربندی شش‌گوش با گاف انرژی صفر است [۱۹]. پلیمرها در دستگاه‌های الکترونیکی مانند باتری‌های یون لیتیم به‌دلیل ظرفیت گرمایی بالا در فرآیند تغییر فاز استفاده می‌شود به‌طوری که افزایش دما در باتری به تأخیر می‌افتد و احتمال گرم شدن بیش از حد باتری، کاهش می‌یابد [۲۰]. با این حال، اشکالاتی نیز در رابطه با پلیمرهای رایج وجود دارد، از جمله رسانندگی گرمایی کم (رسانندگی گرمایی پلیمرهای خالص معمولاً در محدوده $\frac{W}{m.K} = 0.1-0.5$ است) [۲۱] که برای کاربردهای گرمایی مطلوب نیست. یکی از جذاب‌ترین روش‌ها برای بهبود ویژگی‌های رسانندگی گرمایی پلیمرها، ترکیب آنها با مواد در ابعاد نانو و با رسانندگی گرمایی

در سال‌های اخیر نانوکامپوزیت‌های پلیمری به‌دلیل کاربردهای بالقوه بالایی که در زمینه‌های مرتبط با انرژی از جمله اپتوالکترونیک [۱،۲]، ترموالکترونیک [۳،۴]، سنسورها [۵،۶] و باتری‌ها [۷،۸] دارند، مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته‌اند. این ماتریس‌های بر پایه پلیمر، نه تنها از ویژگی‌های منحصر به‌فرد ماده میزبان مانند ظرفیت گرمایی بالا، مقاومت شیمیایی مطلوب، وزن سبک، پایداری و غیر سمی بودن بهره‌مند می‌شوند، بلکه افزودن مواد پرکننده به‌عنوان تقویت کننده در اندازه نانو به‌طور معمول منجر به بهبود ویژگی‌های گرمایی، مکانیکی و الکترونیکی ماتریس‌های پلیمری می‌شود [۹-۱۷]. از مواد پرکننده نانومقیاس می‌توان به گرافین اشاره کرد که دارای ویژگی‌های

* نویسنده مسئول: khoeini@znu.ac.ir



بسیار بالا است [۲۴-۲۲]. بر این پایه، مطالعات گسترده‌ای در مورد ویژگی‌های فیزیکی آنها، مانند ویژگی گرمایی نانوکامپوزیت‌های پلیمری انجام شده است [۲۸-۲۵]. به‌عنوان نمونه، واحدی و همکاران [۲۹] با ایجاد یک رهیافت چند مقیاسی، رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت‌های نانولوله‌های کربنی و پارافین را بررسی کردند. نخست، آنها شبیه‌سازی دینامیک مولکولی را برای محاسبه رسانندگی گرمایی مرزی بین پرکننده نانولوله‌های کربنی و پارافین انجام دادند. در مرحله بعدی، رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت‌های نانولوله‌های کربنی/پارافین را به‌روش المان متناهی یا تقریب میانگین بررسی کردند. افزون بر این، آنها تأثیر عوامل هندسی مختلف مانند نسبت ابعاد، کسر حجمی و قطر را بر رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت‌ها ارزیابی کردند. آنها مشاهده کردند که با افزایش تمام عوامل ذکر شده، رسانندگی گرمایی نانوکامپوزیت‌های نانولوله‌های کربنی/پارافین افزایش می‌یابد.

مرتضوی و همکاران [۳۰] برای ارزیابی رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت‌های اپوکسی گرافین، از روش چند مقیاسی مبتنی بر شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و رویکرد المان متناهی استفاده کردند. آنها از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای بررسی مقاومت گرمایی مرزی بین گرافین و اپوکسی استفاده کردند. نتایج نشان داد که رسانندگی گرمایی گرافین، به‌عنوان پرکننده در ماتریس اپوکسی تقریباً ۳۰٪ کاهش می‌یابد. بر پایه نتایج حاصل از دینامیک مولکولی، آنها روش المان متناهی یا تقریب میانگین را به‌کار بردند تا رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت اپوکسی/گرافین را محاسبه کنند. همچنین، آنها تأثیر تشکیل پیوندهای کووالانسی بین پرکننده‌ها و اتم‌های پلیمر را بر رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت‌های

اپوکسی/گرافین ارزیابی کردند. نتایج آنها نشان داد که رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت‌های اپوکسی گرافین با تشکیل پیوندهای کووالانسی بین اتم‌های گرافین و اپوکسی حدود ۵٪ کاهش می‌یابد.

به‌عنوان مثال دیگر، مرتضوی و همکاران [۳۱] با استفاده از یک رهیافت چند مقیاسی شامل مدل المان متناهی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، ویژگی‌های گرمایی باتری‌های یون لیتیوم را بررسی کردند. آنها برای شبیه‌سازی فرایندهای الکتروشیمیایی باتری یون لیتیوم از مدل الکتروشیمیایی شبه‌دوبعدی نیومن استفاده کردند. با این روش، رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت‌های بر پایه پارافین تقویت شده با نانوپرکننده‌های گرافین و بور نیتريد به‌دست آمد. شبیه‌سازی‌های چند مقیاسی نشان می‌دهد که رسانندگی گرمایی و ظرفیت گرمایی نانوکامپوزیت‌های بور-نیتريد/پارافین بالاتر از نانوکامپوزیت‌های گرافین/پارافین با ویژگی هندسی مشابه می‌باشد.

در این مطالعه، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرتعدادی و روش تقریب میانگین، تأثیر نانو پرکننده گرافین به‌عنوان تقویت کننده را بر رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت پلی‌اتیلن بررسی کرده‌ایم.

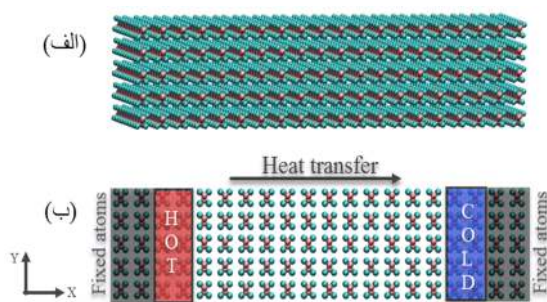
روش و مدل‌سازی

از شاخه‌های علوم محاسباتی می‌توان به دینامیک مولکولی اشاره کرد. در روش دینامیک مولکولی برهم‌کنش میان مولکول‌ها و اتم‌ها توسط رایانه شبیه‌سازی می‌شود. در سال ۱۹۵۷ اولین شبیه‌سازی بر مبنای مدل کره سخت توسط آلدروین رایت انجام شد و اولین کاربرد شبیه‌سازی در سال ۱۹۶۴ توسط رحمان صورت گرفت که در آن مدل کره نرم شبیه‌سازی شد. در سال ۱۹۷۴ اولین شبیه‌سازی واقعی توسط رحمان و استلینگر و بر روی آب مایع انجام شد. شبیه‌سازی

بحث و بررسی نتایج

رسانندگی گرمایی پلی‌اتیلن

در این قسمت به بررسی ویژگی‌های گرمایی گرافین/پلی‌اتیلن می‌پردازیم. برای شبیه‌سازی رسانندگی گرمایی پلی‌اتیلن به روش دینامیک مولکولی غیرتعادلی، بسته شبیه‌سازی لمپس به کار برده شد [۳۴]. ابعاد جعبه شبیه‌سازی $26 \times 21 \times 84$ آنگستروم می‌باشد. شکل ۱ ساختار پلی‌اتیلن را از دو نمای متفاوت نشان می‌دهد. سامانه مورد نظر در دمای 300 کلوین با استفاده از آنسامبل NPT در مدت 0.3 نانو ثانیه به تعادل رسید. سپس سامانه را به 12 ناحیه با پهنای 7 آنگستروم در راستای محور X تقسیم کردیم و دو ناحیه انتهایی را ثابت گرفتیم. نواحی گرم و سرد به ترتیب در دمای $T+\Delta T$ و $T-\Delta T$ قرار دارند که $\Delta T=20$ برابر کلوین است، به این ترتیب گرادیان دما در سامانه اعمال شد. زمان کل شبیه‌سازی در این مرحله 3 نانو ثانیه می‌باشد که میانگین گیری زمانی در $1/6$ نانو ثانیه آخر محاسبه شده است.



شکل ۱. ساختار پلی‌اتیلن از دو نمای متفاوت. الف) مایل (ب) روبه‌رو. اتم‌های به رنگ صورتی اتم کربن و اتم‌های به رنگ فیروزه‌ای اتم هیدروژن را نشان می‌دهد.

شکل ۲ نمودار پروفایل دما و شکل ۳ نمودار انرژی اضافه شده به منبع گرم (کاسته شده از منبع سرد)

دینامیک مولکولی یک رویکرد کلاسیکی دارد، در این رویکرد، نیرو از پتانسیل که تابعی از مکان هسته‌ها یا اتم‌هاست به دست می‌آید. در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با انتگرال‌گیری از معادلات حرکت نیوتن می‌توان موقعیت مکانی و سرعت تک تک ذرات سامانه را بر حسب زمان مشخص کرد. تحول زمانی سامانه توسط معادله حرکت توصیف می‌شود.

در این پژوهش، برای محاسبه رسانندگی گرمایی از رهیافت قانون فوریه استفاده می‌کنیم. قانون فوریه بیان می‌کند زمانی که به یک سامانه گرادیان دما ∇T اعمال می‌کنیم بر اثر این گرادیان دمایی شار گرمایی J در سامانه شارش پیدا می‌کند و ضریب رسانندگی گرمایی κ از رابطه زیر به دست می‌آید

$$J_x = -\kappa \frac{dT}{dx}, \quad (1)$$

J_x شار گرمایی در راستای X و $\frac{dT}{dx}$ گرادیان دما است. زمانی که سامانه مورد بررسی به حالت پایا رسید دمای هر ناحیه از اطلاعات سرعت اتم‌های موجود در آن به دست می‌آید [۳۲].

$$T_i = \frac{1}{3N_i k_B} \sum_{j=1}^{N_i} m_j v_j^2. \quad (2)$$

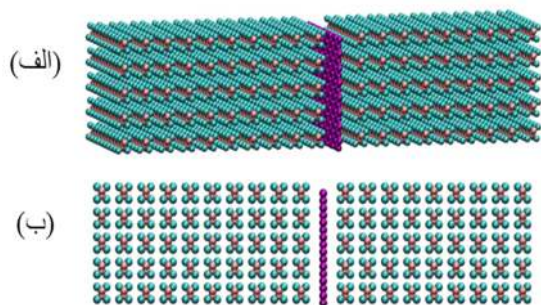
T_i دمای میانگین ناحیه i ام، N_i تعداد اتم‌های موجود در ناحیه i ام، k_B ثابت بولتزمن، m_j و v_j به ترتیب سرعت و جرم اتم j ام از ناحیه مورد نظر را نشان می‌دهند. مقاومت گرمایی مرزی یا مقاومت کاپیتزا به شرح زیر محاسبه می‌شود [۳۳]:

$$R = \frac{A \cdot \Delta T_{int}}{q_x}. \quad (3)$$

در اینجا ΔT_{int} جهش دمایی را نشان می‌دهد و می‌توان آن را از مشخصات دما در طول ساختار به دست آورد.

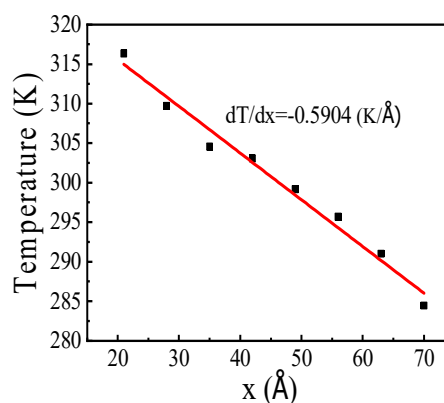
مقاومت گرمایی مرزی گرافین/پلی اتیلن

مقاومت گرمایی مرزی بین گرافین و پلی اتیلن به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی (NEMD) محاسبه شده است. ابعاد جعبه شبیه‌سازی $26 \times 21 \times 84$ آنگستروم می‌باشد (شکل ۴). سامانه مورد نظر در دمای 300 کلوین با استفاده از آنسامبل NPT در مدت 0.3 نانو ثانیه به تعادل رسید. سپس سامانه را به 12 ناحیه با پهنای 7 آنگستروم در امتداد محور X تقسیم کردیم و دو ناحیه انتهایی را ثابت گرفتیم. نواحی گرم و سرد به ترتیب در دمای $T+\Delta T$ و $T-\Delta T$ قرار دارند که $\Delta T=20$ K می‌باشد، به این ترتیب گرادیان دما در سامانه اعمال شد. زمان کل شبیه‌سازی در این مرحله 3 نانو ثانیه می‌باشد که میانگین‌گیری زمانی در $1/6$ نانو ثانیه آخر انجام شده است.

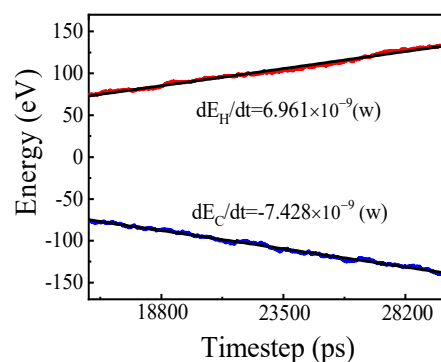


شکل ۴. ساختار پلی‌اتیلن و گرافین از دو نمای مختلف. الف) مایل ب) روبرو. در ساختار پلی‌اتیلن اتم‌های به‌رنگ صورتی اتم کربن و اتم‌های به‌رنگ فیروزه‌ای اتم هیدروژن را نشان می‌دهد. در گرافین اتم‌های کربن با رنگ بنفش مشخص شده است.

برحسب زمان را نشان می‌دهد. رسانندگی گرمایی به‌دست آمده برای این سامانه $\kappa = 0.21 \frac{W}{m.K}$ می‌باشد. رسانندگی گرمایی برای پلی‌اتیلن خالص $\kappa = 0.1-0.5 \frac{W}{m.K}$ گزارش شده است. نتایج ما با نتایج دیگران سازگاری خوبی دارد [۳۵ و ۲۱].



شکل ۵. پروفایل دمای یک بعدی در راستای x ، دمای میانگین مجموعه 300 کلوین و اختلاف دمای دو انتها 20 کلوین است.



شکل ۶. نمودار انرژی اضافه شده به لایه گرم (کاسته شده از لایه سرد) برحسب زمان. دمای میانگین مجموعه 300 کلوین و اختلاف دمای دو انتها 20 کلوین است.

در این قسمت مقاومت گرمایی کاپیتزای گرافین و پلی اتیلن را بر طبق رابطه ۳ محاسبه می‌کنیم:

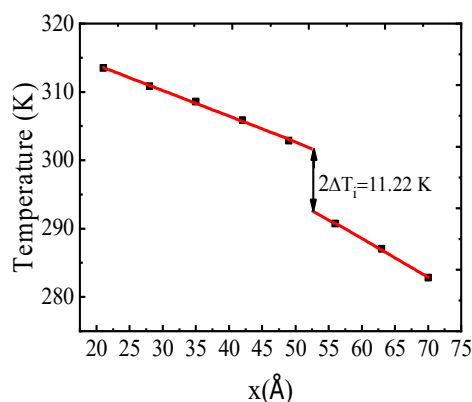
$$R = \frac{A \cdot \Delta T_{int}}{q_x} = 0.62 \times 10^{-8} \frac{Km^2}{W} \quad ۴$$

که در آن A مساحت سطح مقطع و q_x جریان گرما در جهت x را نشان می‌دهد.

رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت گرافین/پلی اتیلن

مدل تقریب میانگین مربوط به مدل‌سازی تحلیلی یا نظری است که خصوصیات میکروسکوپی مواد کامپوزیت را توصیف می‌کند. مدل تقریب میانگین یا مدل المان متناهی از میانگین مقادیر متعدد سازنده‌هایی که مستقیماً مواد کامپوزیت را تشکیل می‌دهند، ساخته می‌شود. در سطح سازنده، مقادیر مواد، متفاوت و ناهمگن هستند. محاسبه دقیق بسیاری از مقادیر تشکیل دهنده تقریباً غیرممکن است. با این حال، نظریه‌هایی ایجاد شده است که می‌تواند تقریب‌های قابل قبولی ایجاد کند که به نوبه خود پارامترها و خصوصیات مفید ماده کامپوزیت را به‌طور کلی توصیف می‌کند [۳۹-۴۰]. در اینجا، ما جزئیات مدل تقریب میانگین و شرایط استفاده از آن را توضیح می‌دهیم. باید توجه داشته باشیم که جهت‌گیری نانو پرکننده‌ها در ماتریس می‌تواند رسانندگی گرمایی آن را تحت تأثیر قرار دهد. دلیل این امر این است که وقتی ورق‌های نانوپرکننده با جهت جریان گرما موازی هستند، به دلیل رسانندگی گرمایی درون صفحه‌ای نانوپرکننده‌ها، به افزایش انتقال گرما کمک می‌کند. از طرف دیگر، وقتی نانو پرکننده‌ها به صورت عمود قرار می‌گیرند، رسانندگی گرمایی نمی‌تواند به‌طور قابل توجهی افزایش یابد.

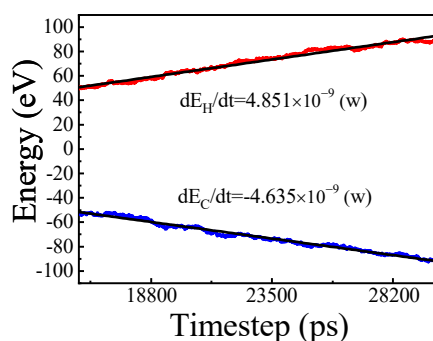
زمانی که نانو پرکننده‌ها به صورت تصادفی در داخل ماتریس پلیمری قرار می‌گیرند از معادله زیر می‌توانیم



شکل ۵. پروفایل دمای یک بعدی در راستای x .

شکل ۵ پروفایل دما را نشان می‌دهد. افت دما به علت مقاومت گرمایی مرزی (کاپیتزا) در سامانه قابل مشاهده است. دمای میانگین مجموعه ۳۰۰ کلون و اختلاف دمای دو انتها ۲۰ کلون است. پروفایل دما مشخص می‌کند که در نواحی دور از ترموستات‌ها گرادیان دما خطی است [۳۶-۳۸].

شکل ۶ نمودار انرژی اضافه شده به لایه گرم (کاسته شده از لایه سرد) برحسب زمان را برای ساختار پلی اتیلن/گرافین نشان می‌دهد. برای این ساختار $\frac{dE}{dt}$ از طریق شیب خط برازش شده بر پروفایل انرژی محاسبه شده است.



شکل ۶. نمودار انرژی اضافه شده به لایه گرم (کاسته شده از لایه سرد) برحسب زمان. دمای میانگین مجموعه ۳۰۰ کلون و اختلاف دمای دو انتها ۲۰ کلون است.

همان‌طور که نتایج نشان می‌دهند با افزایش کسر حجمی نانوپرکننده گرافین، رسانندگی گرمایی مؤثر نیز افزایش پیدا کرده است. نتایج ما با نتایج دیگران سازگار است [۳۱-۲۵].

بحث و نتایج

در این پژوهش با استفاده از مدل تقریب میانگین، تأثیر نانو پرکننده گرافین بر رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت بر پایه پلی‌اتیلن را بررسی کردیم. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرتصادفی برای به‌دست آوردن رسانندگی گرمایی پلی‌اتیلن با پتانسیل ایربو در مقیاس اتمی انجام شد. مقدار رسانندگی گرمایی پلی‌اتیلن $\kappa = 0.21 \frac{W}{m.K}$ به‌دست آمد که با نتایج قبلی سازگار است. در مرحله بعدی با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرتصادفی مقاومت گرمایی مرزی (کاپیتزا) بین گرافین/پلی‌اتیلن را به‌دست آوردیم. سپس با استفاده از نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت پلی‌اتیلن/گرافین با روش مدل تقریب میانگین در کسرهای حجمی مختلف مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهند با افزایش کسر حجمی نانوپرکننده، رسانندگی گرمایی مؤثر نیز افزایش می‌یابد.

مرجع‌ها

- [1] W.U. Huynh, J.J. Dittmer, A.P. Alivisatos, Hybrid Nanorod-Polymer Solar Cells, *Science* **80** (2002) 2425-2427. DOI: 10.1126/science.1069156
- [2] J.Y. Kim, K. Lee, N.E. Coates, D. Moses, T.-Q. Nguyen, M. Dante, A.J. Heeger, Efficient Tandem Polymer Solar Cells Fabricated by All-Solution Processing, *Science* **317** (2007) 222-225. DOI: 10.1126/science.1141711

برای توصیف رسانندگی گرمایی سامانه استفاده کنیم [۴۲-۴۱]:

$$K^* = K_m \frac{3+f[2\beta_{11}(1-L_{11})+\beta_{33}(1-L_{33})]}{3-f[2\beta_{11}L_{11}+\beta_{33}L_{33}]} \quad 5$$

$$\beta_{11} = \frac{K_{11}^c - K_m}{K_m + L_{11}(K_{11}^c - K_m)} \quad 6$$

$$\beta_{33} = \frac{K_{33}^c - K_m}{K_m + L_{33}(K_{33}^c - K_m)} \quad 7$$

$$K_{11}^c = \frac{K_p}{(1+\gamma L_{11} \frac{K_p}{K_m})} \quad 8$$

$$K_{33}^c = \frac{K_p}{(1+\gamma L_{33} \frac{K_p}{K_m})} \quad 9$$

$$L_{11} = \frac{p^2}{2(p^2-1)} + \frac{p}{2(1-p^2)^{\frac{3}{2}}} \cos^{-1} p \quad 10$$

$$L_{33} = 1 - 2L_{11} \quad 11$$

$$\gamma = (1 + 2p)\alpha \quad 12$$

$$p = \frac{a_3}{a_1}, \alpha = \frac{a_k}{a_3}, a_k = \frac{K_m}{G_k} \quad 13$$

که در آن K_p, K_m, K^* به ترتیب رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت، رسانندگی گرمایی پلیمر و نانوپرکننده (گرافین) هستند. همچنین، K_{ii}^c $i = (1,3)$ نشان دهنده رسانندگی گرمایی معادل در محورهای X و Z هستند. f و p و G_k به ترتیب کسر حجمی، نسبت ابعاد نانوپرکننده (گرافین) و رسانش گرمایی مرزی هستند. در جدول ۱ رسانندگی گرمایی مؤثر برای کسرهای حجمی گوناگون گرافین در نانوکامپوزیت پلی‌اتیلن/گرافین محاسبه شده است.

جدول ۱. رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت گرافین/پلی‌اتیلن با استفاده از روش مدل تقریب میانگین در کسر حجمی مختلف نانوپرکننده گرافین.

کسر حجمی نانوپرکننده‌ها	رسانندگی گرمایی مؤثر نانوکامپوزیت گرافین/پلی‌اتیلن
۱٪	۰٫۳۸
۲٪	۰٫۴۷
۳٪	۰٫۵۹

- [9] H. Yazdani, H. Ghasemi, C. Wallace, K. Hatami, Mechanical Properties of Carbon Nanotube-filled Polyethylene Composites: A Molecular Dynamics Simulation Study, *Polymer Composites* **40** (2019) 1850-1861. Doi: [org/10.1002/pc.25175](https://doi.org/10.1002/pc.25175).
- [10] M. Hadipeykani, D. Toghraie, Thermomechanical Properties of the Polymeric Nanocomposite Predicted by Molecular Dynamics, *ADMT Journal* **12** (2019) 25-32. Doi: civilica.com/doc/1008336/.
- [11] I. Bustero, I. Gaztelumendi, I. Obieta, M.A. Mendizabal, A. Zurutuza, A. Ortega, B. Alonso, Free-Standing Graphene Films Embedded in Epoxy Resin with Enhanced Thermal Properties, *Advanced Composites and Hybrid Materials* **3** (2020) 31-40. [10.1007/s42114-020-00136-6](https://doi.org/10.1007/s42114-020-00136-6).
- [12] E.H.C. Ferreira, R.J.E. Andrade, G.J.M. Fechine, The Superlubricity State of Carbonaceous Fillers on Polyethylene-Based Composites in a Molten State, *Macromolecules* **52** (2019) 9620-9631. Doi: [10.1021/acs.macromol.9b01746](https://doi.org/10.1021/acs.macromol.9b01746)
- [13] Z. Zhang, J. Ding, B.M. Ocko, J. Lhermitte, J. Strzalka, C.-H. Choi, F.T. Fisher, K.G. Yager, C.T. Black, Nanoconfinement and Salt Synergistically Suppress Crystallization in Polyethylene Oxide, *Macromolecules* **53** (2020) 1494-1501. Doi: [10.1021/acs.macromol.9b01725](https://doi.org/10.1021/acs.macromol.9b01725)
- [14] M. Wang, D. Galpaya, Z.B. Lai, Y. Xu, C. Yan, Surface Functionalization on the Thermal Conductivity of Graphene-Polymer Nanocomposites, *International Journal of Smart and Nano Materials* **5** (2014) 123-132. Doi: [10.1080/19475411.2014.904828](https://doi.org/10.1080/19475411.2014.904828)
- [15] Y. Xiong, H. Wu, J. Gao, W. Chen, J. Zhang, Y. Yue, Toward Improved Thermal Conductance of Graphene-Polyethylene Composites via Surface Defect Engineering: A Molecular Dynamics Study, *Acta Physico-Chimica Sinica* **35** (2019) 1150. Doi: [10.3866/PKU.WHXB201901002](https://doi.org/10.3866/PKU.WHXB201901002)
- [3] D. Zhang, K. Zhang, Y. Wang, Y. Wang, Y. Yang, Thermoelectric Effect Induced Electricity in Stretchable Graphene-Polymer Nanocomposites for Ultrasensitive Self-Powered Strain Sensor System, *Nano Energy* **56** (2019) 25-32. <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2018.11.026>
- [4] S.N. Patel, A.M. Glauddell, K.A. Peterson, E.M. Thomas, K.A. O'Hara, E. Lim, M.L. Chabinye, Morphology Controls the Thermoelectric Power Factor of a Doped Semiconducting Polymer, *Science* **3** (2017) 1700434. DOI: [10.1126/sciadv.1700434](https://doi.org/10.1126/sciadv.1700434)
- [5] J. Yan, A. Downey, A. Chen, S. Laflamme, S. Hassan, Capacitance-Based Sensor with Layered Carbon-Fiber Reinforced Polymer and Titania-Filled Epoxy, *Composite Structures* **227** (2019) 111247. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2019.111247>
- [6] C. Tuloup, W. Harizi, Z. Aboura, Y. Meyer, K. Khellil, R. Lachat, On the Use of In-Situ Piezoelectric Sensors for the Manufacturing and Structural Health Monitoring of Polymer-Matrix Composites, A Literature Review, *Composite Structures* **215** (2019) 127-149. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2019.02.046>
- [7] A.B. Puthirath, A. Baburaj, K. Kato, D. Salpekar, N. Chakingal, Y. Cao, G. Babu, P.M. Ajayan, High Sulfur Content Multifunctional Conducting Polymer Composite Electrodes for Stable Li-S Battery, *Electrochimica Acta* **306** (2019) 489-497. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2019.03.136>
- [8] T. Janoschka, N. Martin, U. Martin, C. Friebe, S. Morgenstern, H. Hiller, M.D. Hager, U.S. Schubert, An Aqueous, Polymer-Based Redox-Flow Battery Using Non-Corrosive, Safe, and Low-Cost Materials, *Nature* **527** (2015) 78-81. Doi: [10.1038/nature18909](https://doi.org/10.1038/nature18909).

- the Interface between Graphene and Epoxy in Nanocomposites, *ACS Applied Materials Interfaces* **8** (2016) 8272-8279. [Doi: 10.1021/acsami.6b00325](https://doi.org/10.1021/acsami.6b00325)
- [24] Z. Rao, Q. Wang, and C. Huang, Investigation of the Thermal Performance of Phase Change Material/Mini-Channel Coupled Battery Thermal Management System, *Applied Energy* **164** (2016) 659-669. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2015.12.021>
- [25] C. Mahoney, C.M. Hui, S. Majumdar, Z. Wang, J.A. Malen, M.N. Tchoul, K. Matyjaszewski, M.R. Bockstaller, Enhancing Thermal Transport in Nanocomposites by Polymer-Graft Modification of Particle Fillers, *Polymer* **93** (2016) 72-77. [Doi:10.1016/j.polymer.2016.04.014](https://doi.org/10.1016/j.polymer.2016.04.014)
- [26] A. Kutvonen, G. Rossi, T. Ala-Nissila, Correlations between Mechanical, Structural, and Dynamical Properties of Polymer Nanocomposites, *Physical Review E* **85** (2012) 041803. [Doi:10.1103/PhysRevE.85.041803](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.85.041803)
- [27] N. Burger, A. Laachachi, M. Ferriol, M. Lutz, V. Toniazzo, D. Ruch, Review of Thermal Conductivity in Composites: Mechanisms, Parameters and Theory, *Progress in Polymer Science* **61** (2016) 1-28. [Doi:org/10.1016/j.progpolymsci.2016.05.001](https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2016.05.001)
- [28] S. Pfaller, G. Possart, P. Steinmann, M. Rahimi, F. Müller-Plathe, M.C. Böhm, Investigation of Interphase Effects in Silica-Polystyrene Nanocomposites Based on a Hybrid Molecular-Dynamics-Finite-Element Simulation Framework, *Physical Review E* **93** (2016) 052505. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.93.052505>
- [29] A. Vahedi, M.H. Sadr Lahidjani, S. Shakhessi, Multiscale Modelling of Thermal Conductivity of Carbon Nanotube Paraffin Nanocomposites, *Materials Research Express* **5** (2018) 115026.
- [16] M. Wang, N. Hu, L. Zhou, C. Yan, Enhanced Interfacial Thermal Transport across Graphene-Polymer Interfaces by Grafting Polymer Chains, *Carbon* **85** (2015) 414-421. [Doi:org/10.1016/j.carbon.2015.01.009](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2015.01.009)
- [17] H. Tafrishi, S. Sadeghzadeh, R. Ahmadi, F. Molaei, F. Yousefi, H. Hassanloo, Investigation of Tetracosane Thermal Transport in Presence of Graphene and Carbon Nanotube Fillers—A Molecular Dynamics Study, *Journal of Energy Storage* **29** (2020) 101321. [Doi: 10.1016/j.est.2020.101321](https://doi.org/10.1016/j.est.2020.101321)
- [18] S. Mohammadi, M. Esmailpour, F. Khoeini, Investigation of Graphene and Silicene-DNA nanostructures: DNA Sensing, *Journal of research on many-body system* **10** (2020) 1-12. [Doi: 10.22055/JRMBS.2020.15567](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2020.15567)
- [19] F. Khoeini, L. Esmaeili, Effects of electric and magnetic fields on electronic properties of stanene nanoribbons, *Journal of research on many-body system* **2** (2019) 61-69. [Doi: 10.22055/JRMBS.2019.14835](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2019.14835)
- [20] Q. Wang, B. Jiang, B. Li, Y. Yan, A Critical Review of Thermal Management Models and Solutions of Lithium-Ion Batteries for the Development of Pure Electric Vehicles, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **64** (2016) 106. [Doi.org/10.1016/j.rser.2016.05.033](https://doi.org/10.1016/j.rser.2016.05.033)
- [21] T. Lu, K. Kim, X. Li, J. Zhou, G. Chen, J. Liu, Thermal Transport in Semicrystalline Polyethylene by Molecular Dynamics Simulation, *Journal of Applied Physics* **123** (2018) 015107. [Doi: org/10.1063/1.5006889](https://doi.org/10.1063/1.5006889)
- [22] J.S. Lewis, Z. Barani, A.S. Magana, F. Kargar, A.A. Balandin, Thermal and Electrical Conductivity Control in Hybrid Composites with Graphene and Boron Nitride Fillers, *Materials Research Express* **6** (2019) 085325. <https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab2215>
- [23] Y. Wang, C. Yang, Q.-X. Pei, Y. Zhang, Some Aspects of Thermal Transport across

Journal of Heat and Mass Transfer **177**
(2021) 121561.

<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121561>

[37] M. Khalkhali, A. Rajabpour, F. Khoeini, Thermal Transport across Grain Boundaries in Polycrystalline Silicene: A Multiscale Modeling, *Scientific Reports* **9** (2019) 5684.
<https://doi.org/10.1038/s41598-019-42187-w>

[38] F. Yousefi, F. Khoeini, A. Rajabpour, Thermal Rectification and Interfacial Thermal Resistance in Hybrid Pillared-Graphene and Graphene: A Molecular Dynamics and Continuum Approach, *Nanotechnology* **31** (2020) 285707.
[Doi:https://doi.org/10.1088/1361-6528/ab8420](https://doi.org/10.1088/1361-6528/ab8420)

[39] W. Cain V.M. Shalaev, Optical metamaterials, Springer, (2010). [Doi: https://www.springer.com/gp/book/9781441911506](https://www.springer.com/gp/book/9781441911506)

[40] M. Wang, N. Pan, Predictions of effective physical properties of complex multiphase materials, *Materials Science and Engineering: R: Reports* **63** (2008) 1-30.
[Doi: https://doi.org/10.1016/j.mser.2008.07.001](https://doi.org/10.1016/j.mser.2008.07.001)

[41] K. Bui, H.M. Duong, A. Striolo, D.V. Papavassiliou, Effective heat transfer properties of graphene sheet nanocomposites and comparison to carbon nanotube nanocomposites, *The Journal of Physical Chemistry C* **115** (2011) 3872-3880. [Doi:10.1021/jp109978x](https://doi.org/10.1021/jp109978x)

[42] M. Wang, D. Galpaya, Z.B. Lai, Y. Xu, C. Yan, Surface functionalization on the thermal conductivity of graphene-polymer nanocomposites, *International Journal of Smart and Nano Materials* **5** (2014) 123-132.
[Doi:doi.org/10.1080/19475411.2014.904828](https://doi.org/10.1080/19475411.2014.904828)

[Doi:10.1016/j.physb.2018.09.017](https://doi.org/10.1016/j.physb.2018.09.017)

[30] B. Mortazavi, O. Benzerara, H. Meyer, J. Bardon, S. Ahzi, Combined Molecular Dynamics-Finite Element Multiscale Modeling of Thermal Conduction in Graphene Epoxy Nanocomposites, *Carbon* **60** (2013) 356-365.
[Doi:10.1016/j.carbon.2013.04.048](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2013.04.048).

[31] B. Mortazavi, H. Yang, F. Mohebbi, G. Cuniberti, and T. Rabczuk, Graphene or H-BN Paraffin Composite Structures for the Thermal Management of Li-Ion Batteries: A Multiscale Investigation, *Applied Energy* **202** (2017) 323-334.
[Doi:https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2017.05.175](https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2017.05.175)

[32] S. Melchionna, G. Ciccotti, B. Lee Holian, Hoover NPT dynamics for systems varying in shape and size, *Molecular Physics* **78** (1993) 533-544. [Doi: 10.1080/00268979300100371](https://doi.org/10.1080/00268979300100371)

[33] P. Kapitza, Heat transfer and superfluidity of helium, *Physical Review* **60** (1941) 354.
[Doi:https://doi.org/10.1103/PhysRev.60.354](https://doi.org/10.1103/PhysRev.60.354)

[34] S. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, *Journal of computational physics*, **117** (1995) 1-19.
[Doi: doi.org/10.1006/jcph.1995.1039](https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039)

[35] L. Razzaghi, M. Khalkhali, A. Rajabpour, F. Khoeini, Effect of graphene and carbon-nitride nanofillers on the thermal transport properties of polymer nanocomposites: A combined molecular dynamics and finite element study, *Physical Review E* **103** (2021) 013310.
[Doi:https://doi.org/10.1103/PhysRevE.103.013310](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.103.013310)

[36] L. Razzaghi, F. Khoeini, A. Rajabpour, M. Khalkhali, Thermal transport in two-dimensional C₃N/C₂N superlattices: A molecular dynamics approach, *International*