

# Modelling strategies for carbon polymer nanocomposites

## Estrategias de modelizado de nanocomposites de carbono

**J M Muñoz-Guijosa<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Universidad Politécnica de Madrid. Madrid, España

E-mail: [jmguijosa@etsii.upm.es](mailto:jmguijosa@etsii.upm.es)

**Abstract.** Given the excellent mechanical, thermal, electrical and electronic properties of graphene and carbon nanotubes, carbon nanocomposites have potentially, for some very small fill percentages, macro-scale excellent properties. However, and especially as far as mechanical properties are concerned, the characteristics that have been obtained to date are far from those theoretically obtainable. In addition to the aspect ratio, dispersion and misalignment, there is a very important parameter to explain this difference: the transfer of stresses between the nanoparticle and the matrix at its interface. This paper will describe the modeling of such interfacial transfer of efforts, which allows quantifying the influence of this on the macro scale, as well as the integration of the parameters at nano and macro-scale.

**Resumen.** Dadas las excelentes propiedades mecánicas, térmicas, eléctricas y electrónicas del grafeno y los nanotubos de carbono, los nanocomposites de carbono deberían tener potencialmente, para unos porcentajes de relleno muy pequeños, unas propiedades excelentes a escala macro. Sin embargo, y especialmente en lo que a propiedades mecánicas se refiere, las características que se han obtenido hasta la actualidad distan de las teóricamente obtenibles. Además de la relación de aspecto, la dispersión y la desalineación, existe un parámetro muy importante para explicar esta diferencia: la transferencia de esfuerzos entre la nanopartícula y la matriz en su interfaz. En esta ponencia se describirá la modelización de la transferencia interfacial de esfuerzos, que permite cuantificar la influencia de ésta en la escala macro, así como la integración de los parámetros a escala nano y macro.