



Molecular Dynamics Investigation into the Buckling of Cu-Zr-Based Metallic Glass Nanocomposites Reinforced with Three-Dimensional Graphene Networks

Shahram Ajori^{1*}, Fatemeh Sadeghi², Mahmoud Ebrahimi³

¹Associate Professor, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, University of Maragheh, Maragheh, Iran (Correspondence). Email Address: sajori@maragheh.ac.ir

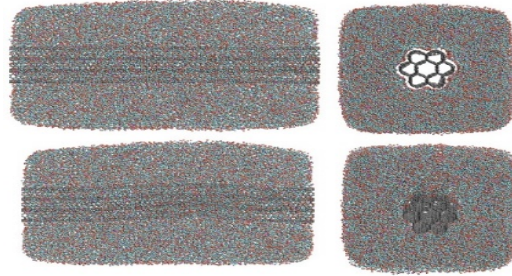
²Associate Professor, Department of Engineering Sciences, Faculty of Advanced Technologies, University of Mohaghegh Ardabili, Namin, Iran. Email Address: f.sadeghi@uma.ac.ir

³Associate Professor, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, University of Maragheh, Maragheh, Iran Email Address: ebrahimi@maragheh.ac.ir

HIGHLIGHTS

- Buckling properties of metallic glass nanocomposites are improved by 3D graphene reinforcements.
- The highest rate of increase in critical force is associated with the HGN reinforcement.
- The highest rate of increase in critical strain is associated with the QGN reinforcement.

GRAPHICAL ABSTRACT



ARTICLE INFO

Article history:

Article Type: Research paper

Received: 24 April 2025

Received in revised form: 02 June 2025

Accepted: 11 June 2025

Available online: 08 July 2025

Keywords:

Molecular Dynamics Simulations

Metallic Glass Nanocomposites

Buckling

Three-Dimensional Graphene Network

ABSTRACT

In order to investigate the buckling properties of metallic glass nanocomposites (MGNCs) with different compositions, the present study employs the recently introduced three-dimensional graphene networks, namely Hexagonal Graphene Network (HGN), Quadrilateral Graphene Network (QGN), and Triangular Graphene Network (TGN), as reinforcements. To do this, molecular dynamics (MD) simulations are used to find the critical forces and strains of reinforced MGNCs with up to five elements, such as Cu, Zr, Ag, Al, Ni, and Ti, with different amounts of each element. Moreover, the results of reinforced MGNCs are compared with those of pure metallic glasses (MGs). The numerical results show that two-element MGs with a higher Cu percentage have a higher critical force than other monolithic MGs. Two-element MGs with an equal percentage of Cu and Zr also have a higher critical strain. Moreover, as the number of elements in MG composition increases to more than two, the buckling properties marginally diminish. The obtained results reveal that all types of reinforcements significantly enhance the buckling characteristics of MGNCs. It is further observed that almost for the majority of MGNCs, the enhancement in the critical force and strain is more pronounced for HGN and QGN reinforcements, respectively.

Cite this article: Ajori Sh, Sadeghi F, Ebrahimi M. Molecular Dynamics Investigation into the Buckling of Cu-Zr-Based Metallic Glass Nanocomposites Reinforced with Three-Dimensional Graphene Networks. Aerospace Mechanics. 2025; 21(2):99-109. DOI: <https://doi.org/10.47176/MAJ.2025.1506>

© Author(s) retain the copyright and full publishing rights

Publisher: Imam Hossein University.



OPEN ACCESS

مطالعه دینامیک مولکولی بر روی کمانش نانوکامپوزیت‌های شیشه فلزی مبتنی بر مس-زیر کونیوم و تقویت شده با شبکه‌های گرافن سه‌بعدی

شهرام آجری^{۱*}، فاطمه صادقی^۲، محمود ابراهیمی^۳

^۱ دانشجویار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی مهندسی، دانشگاه مراغه، مراغه، ایران (نویسنده مسئول). رایانامه: sajori@maragheh.ac.ir
^۲ دانشجویار، گروه علوم مهندسی، دانشکده فناوری‌های نوین، دانشگاه محقق اردبیلی، نمین، ایران. رایانامه: f.sadeghi@uma.ac.ir
^۳ دانشجویار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی مهندسی، دانشگاه مراغه، مراغه، ایران. رایانامه: ebrahimi@maragheh.ac.ir

برجسته‌ها

- خواص کمانش نانوکامپوزیت‌های شیشه فلزی توسط تقویت‌کننده‌های سه‌بعدی بهبود می‌یابند.
- بیشترین نرخ افزایش در نیروی بحرانی مربوط به تقویت‌کننده HGN است.
- بیشترین نرخ افزایش در کرنش بحرانی مربوط به تقویت‌کننده QGN است.

مشخصات مقاله

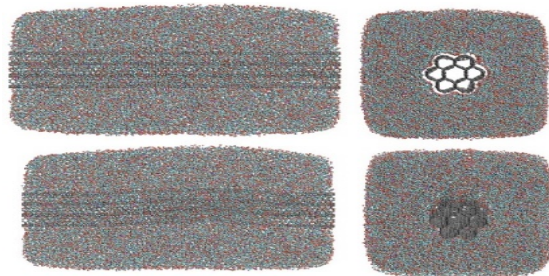
تاریخچه مقاله:

نوع مقاله: علمی پژوهشی
دریافت: ۱۴۰۴/۰۱/۲۰
بازنگری: ۱۴۰۴/۰۳/۰۶
پذیرش: ۱۴۰۴/۰۳/۲۹
ارائه آنلاین: ۱۴۰۴/۰۴/۱۷

کلیدواژه‌ها:

شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی
نانوکامپوزیت‌های شیشه فلزی
کمانش
شبکه گرافن سه‌بعدی

چکیده گرافیکی



چکیده

به‌منظور بررسی خواص کمانش نانوکامپوزیت‌های شیشه فلزی با ترکیب‌های مختلف، مطالعه حاضر از شبکه‌های گرافن سه‌بعدی که اخیراً معرفی شده‌اند، یعنی شبکه گرافن شش‌ضلعی، شبکه گرافن چهارضلعی و شبکه گرافن مثلثی، به‌عنوان تقویت‌کننده‌ها استفاده می‌کند. بدین منظور، شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی برای یافتن نیروها و کرنش‌های بحرانی نانوکامپوزیت‌های شیشه فلزی تقویت‌شده با حداکثر پنج عنصر، مانند مس، زیرکونیوم، نقره، آلومینیوم، نیکل و تیتانیوم با مقادیر مختلف از هر عنصر استفاده می‌شود. همچنین، نتایج نانوکامپوزیت‌های شیشه فلزی تقویت‌شده با نتایج شیشه‌های فلزی یکپارچه مقایسه می‌شوند. نتایج عددی نشان می‌دهند که شیشه‌های فلزی دو عنصری با درصد بالاتر مس، نیروی بحرانی بیشتری نسبت به سایر شیشه‌های فلزی یکپارچه دارند. آلیاژهای دو عنصری با درصد مساوی مس و زیرکونیوم نیز دارای کرنش بحرانی بالاتری هستند. علاوه بر این، با افزایش تعداد عناصر در ترکیب شیشه‌های فلزی به بیش از دو، خواص کمانش به‌طور جزئی کاهش می‌یابد. نتایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهند که تمام انواع تقویت‌کننده‌ها به‌طور قابل‌توجهی ویژگی‌های کمانش نانوکامپوزیت‌های شیشه فلزی را بهبود می‌بخشند. همچنین مشاهده شده است که تقریباً برای اکثر نانوکامپوزیت‌های شیشه فلزی، بهبود در نیروی بحرانی و کرنش به ترتیب برای تقویت‌کننده‌های شبکه گرافن شش‌ضلعی و شبکه گرافن چهارضلعی بیشتر مشهود است.

استناد: آجری شهرام، صادقی فاطمه، ابراهیمی محمود. مطالعه دینامیک مولکولی بر روی کمانش نانوکامپوزیت‌های شیشه فلزی مبتنی بر مس-زیرکونیوم و تقویت‌شده با شبکه‌های گرافن سه‌بعدی. هوا فضا. (۱۴۰۴); ۲۱(۲): ۹۹-۱۰۹. DOI: <https://doi.org/10.47176/MAJ.2025.1506>

نویسنده(گان) حق نشر و حقوق کامل انتشار را برای خود محفوظ می‌دارند. ©



ناشر: دانشگاه جام امام حسین(ع). OPEN ACCESS

۱- مقدمه

شبکه‌های گرافن سه‌بعدی با استفاده از روش‌های تنگ بندی^۷ و محاسبات اصول اولیه^۸ پیشنهاد کرده‌اند [۲۸]. ساختارهای اتمی و الکترونیکی این نانو ساختارهای سه‌بعدی بسیار خوب هستند و سطح فرمی^۹ را پوشش می‌دهند. این ویژگی‌ها آن‌ها را برای سیستم‌های الکترونیکی همبسته، ذخیره‌سازی انرژی، غربالگرهای مولکولی و کاتالیز مناسب می‌سازد. شیشه‌سازی‌ها همچنین نشان می‌دهند که شبکه‌های گرافن سه‌بعدی در برابر تنش مقاوم هستند که این ویژگی آن‌ها را برای نانو کامپوزیت‌ها مطلوب است.

شیشه‌های فلزی آمورف^{۱۰} مواد مهندسی جدیدی هستند که تحت نیروی فشاری و فرسایش، به‌ویژه در دماهای بالا، به‌خوبی عمل می‌کنند. اگرچه شیشه‌های فلزی ذاتاً شکننده هستند، اما قابلیت شکل‌پذیری استثنائی آن‌ها می‌تواند با تنظیم ویسکوزیته‌شان کنترل شود [۲۹]. علاوه بر این، شیشه‌های فلزی به دلیل عدم وجود نقص‌های بلوری ناشی از ساختار آمورف، دارای خواص مکانیکی بهتر، استحکام بیشتر، سختی کمتر، مقاومت به خوردگی قوی‌تر و سختی بیشتری نسبت به همتایان بلوری خود هستند. بنابراین، شیشه‌های فلزی برای ماتریس‌های کامپوزیتی مناسب هستند که به سرد کردن آلیاژهای ذوب‌شده بستگی دارند [۳۰]. در نتیجه، کاربردهای مختلف از این خواص شیشه‌های فلزی استفاده می‌کنند تا عملکرد سیستم‌ها و تجهیزات نوری، پزشکی، ورزشی و الکترونیکی را بهبود بخشند [۳۱]. نزدیک به دو دهه، تحقیقات محدودی برای غلبه بر شکنندگی قابل توجه و بهبود پلاستیسیته ماتریس‌های کامپوزیتی شیشه فلزی انجام شده است [۳۲-۳۵]. این مطالعات خواص مکانیکی ماتریس‌های کامپوزیتی شیشه فلزی توده‌ای^{۱۱} را بررسی کرده‌اند، به‌ویژه آن‌هایی که از شیشه فلزی و زیرکونیوم تشکیل شده‌اند. تقویت این ماتریس‌ها با نانولوله‌های کربنی و گرافن^{۱۲} منجر به بهبود الاستیسیته، سختی و مقاومت فشاری شده است [۳۶-۴۰]. همچنین، کارهای زیادی در زمینه ساخت سیستم‌های شیشه‌ای نانو فاز و آزمایش خواص حرارتی، نوری و الکترونیکی کامپوزیت‌های شیشه‌ای و سرامیکی مختلف با استفاده از XRD، FE-SEM، HR-TEM، FT-IR و LCR با دقت بالا انجام شده است [۴۱-۴۳]. بیان و همکاران [۴۴]، رفتار مکانیکی کامپوزیت‌های شیشه فلزی توده‌ای تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی را بررسی کردند. یافته‌های این کار نشان داد که افزودن نانولوله‌های کربنی به ماتریس شیشه‌ای به‌طور قابل توجهی مدول‌های الاستیک، سختی ویکرز^{۱۳}، چگالی و دمای دمای^۱ ماده

از آغاز هزاره جدید، کشف نانو ساختارهایی با خواص بی‌نظیر و منحصربه‌فرد، دیدگاه‌های تازه‌ای در پیشرفت مرزهای علمی و فناوری ارائه داده است. به‌ویژه، نانو ساختارهای یک‌بعدی مانند نانولوله‌های کربنی^۱ و نانوسیم‌ها^۲ به دلیل خواص الکترونیکی، حرارتی، مکانیکی، فیزیکی و شیمیایی منحصربه‌فردشان، بیشترین تأثیر را در ایجاد و طراحی سیستم‌های نانو الکترومکانیکی جدید و بهتر دارند [۴-۱].

نانو کامپوزیت‌ها^۳ یکی از رایج‌ترین کاربردها برای نانوپرکننده‌ها^۴ هستند تا رفتارهای مکانیکی و استحکام آن‌ها را بهبود بخشند [۵-۷]. علاوه بر این، نانوسیم‌های فلزی مانند مس به‌عنوان نانو پرکننده‌های استثنائی در نانولوله‌های کربنی و نانو کامپوزیت‌ها عمل می‌کنند [۸-۱۲]. خواص الکترومکانیکی، حرارتی و نوری منحصربه‌فرد نانوسیم‌های مسی، آن‌ها را برای انواع مختلفی از کاربردها از جمله مواد رابط حرارتی، فتوولتائیک و غیره مناسب می‌سازد [۱۳-۱۷]. به‌طور کلی، نانو کامپوزیت‌ها قابلیت استفاده از خواص مطلوب نانو ساختارها در سطح میکروسکوپی را به حداکثر می‌رسانند [۱۸]. خواص مکانیکی منحصربه‌فرد نانولوله‌های کربنی در مقیاس نانو باعث شده است تا آن‌ها انتخاب بسیار مناسبی برای استفاده در نانو کامپوزیت‌ها در مقیاس ماکرو باشند. از این‌رو، محققان مطالعات زیادی در خصوص کاربرد نانولوله‌های کربنی به‌منظور تقویت مواد مختلف انجام داده‌اند.

با وجود اینکه همیشه امکان انتقال کامل خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی به کامپوزیت‌های مقیاس بزرگ وجود ندارد، نانو کامپوزیت‌های تقویت‌شده^۵ با نانولوله‌های کربنی به پیشرفت‌های بسیار مهم و اساسی منجر شده‌اند [۱۹-۲۱]. تا به امروز، پیشنهاد ساختارهای سه‌بعدی مبتنی بر کربن با ویژگی‌های فلزی مشخص که به لحاظ انرژی مطلوب می‌باشند، مورد توجه زیادی از محققان قرار گرفته است. علاوه بر نانولوله‌های کربنی، این ساختارهای کربنی سه‌بعدی غیرمعمول به دلیل ویژگی‌های منحصربه‌فرد و کاربردهای عملی خود، توجه بسیاری از پژوهشگران را جلب کرده‌اند [۲۲-۲۷]. در نتیجه، زمانی که نانولوله‌های کربنی عملکرد خوبی ندارند، محققان باید امکان استفاده از ساختارهای سه‌بعدی مبتنی بر کربن را به‌عنوان یک جایگزین مناسب برای سیستم‌های نانو الکترومکانیکی در نظر بگیرند. تحقیقات اخیر سه نوع نیمه فلز سطح ویلی^۶ در

⁷Tight-binding

⁸First-principle

⁹Fermi level

¹⁰Amorphous metallic glasses (MGs)

¹¹Bulk MG composite matrices

¹²Graphene

¹³Vickers hardness

¹Carbon nanotubes

²Nanowires

³Nanocomposites

⁴Nanofillers

⁵Reinforced nanocomposites

⁶Weyl-surface

گرفته می‌شوند. سپس، سه نوع شبکه گرافن سه‌بعدی برای تقویت این شیشه‌های فلزی استفاده می‌شود که عبارت‌اند از: شبکه گرافن شش‌ضلعی^۴، شبکه گرافن چهارضلعی^۵ و شبکه گرافن مثلثی^۶. اثر این تقویت‌کننده‌ها بر رفتار کماتش نانوکامپوزیت‌های شیشه فلزی مورد بررسی قرار گرفته و خواص کماتش آن‌ها با خواص شیشه‌های فلزی یکپارچه مقایسه می‌شود.

۲- روش‌شناسی

۲-۱- جزئیات شبیه‌سازی

برای شبیه‌سازی انرژی‌ها و تعاملات بین تمام اتم‌ها در مدل‌های شبیه‌سازی، شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با استفاده از بسته نرم‌افزاری لمپس^۷ انجام می‌شود [۴۵]. بنابراین، پتانسیل روش مستغرق اتمی^۸ [۴۶] برای محاسبه تعاملات بین اتم‌های فلزی در ماتریس شیشه فلزی استفاده می‌شود، در حالی که تابع انرژی پتانسیل ایربو^۹ [۴۷-۴۸] به همراه پتانسیل لنارد-جونز^{۱۰} و اندروالس ۶-۱۲ [۴۹] به ترتیب برای شبیه‌سازی پیوند کووالانسی کربن-کربن و تعاملات واندروالس بین اتم‌های شبکه گرافن سه‌بعدی و ماتریس شیشه فلزی به کار می‌رود. در ابتدا، شیشه‌های فلزی تحت فرآیندهای گرم کردن و سرد کردن قرار می‌گیرند تا به پیکربندی متعادل خود دست یابند. برای انجام این کار، یک جعبه متناوب با ابعاد $150 \times 150 \times 75 \text{ \AA}$ در نظر گرفته می‌شود.

شیشه‌های فلزی تا دمای ۲۰۰۰ کلوین گرم می‌شوند و سپس به مدت ۱ نانوثانیه با استفاده از مجموعه هنگرد فشار ثابت-دما ثابت و فشار صفر آرام می‌شوند [۵۰]. سپس، فرآیند سرد کردن در سه مرحله با نرخ‌های خنک‌کنندگی متفاوت انجام می‌شود تا دما به ۱۰ کلوین نزدیک شود. مرحله اول شامل کاهش دمای شیشه‌های فلزی به ۹۰۰ کلوین با نرخ ۵٫۵ کلوین بر پیکو ثانیه است. سپس، در مرحله دوم، با توجه به دمای انتقال شیشه، فرآیند خنک‌سازی تا ۷۰۰ کلوین با نرخ ۰٫۶۶۷ کلوین بر پیکو ثانیه ادامه می‌یابد [۵۱] و در مرحله سوم، شیشه‌های فلزی با نرخ ۱٫۷۲۵ کلوین بر پیکو ثانیه تا ۱۰ کلوین سرد می‌شوند. برای ساخت جزء حجمی نماینده^{۱۱}، بخش مرکزی بلوک نهایی برداشته می‌شود و با نانو ساختارهای شبکه گرافن

کامپوزیت را تغییر می‌دهد. در مطالعه دیگری، بیان و همکاران [۳۷] نشان دادند که افزایش درصد حجمی نانولوله‌های کربنی منجر به بهبود ثابت الاستیک و سختی کامپوزیت‌های گرافنی بور-فلزی بر پایه زیرکونیوم می‌شود. علاوه بر این، ژائو و همکارانش [۳۹]، استحکام کماتش و کرنش پلاستیک کامپوزیت‌های آمورف مبتنی بر منیزیم را که با ۳ درصد حجمی نانولوله کربنی تقویت‌شده بودند، اندازه‌گیری کردند. نتایج نشان داد که استحکام کماتش ۱۰۰۷ مگا پاسکال و کرنش پلاستیک ۰٫۴۲٪ است. این مقادیر نشان‌دهنده افزایش ۲۴٪ و ۲۵۰٪ نسبت به شیشه‌های فلزی توده‌ای یکپارچه^۲ هستند. رضایی و همکاران [۳۶]، از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی^۳ برای مطالعه خواص مکانیکی شیشه‌های فلزی توده‌ای تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی کوتاه و بلند استفاده کردند. محققان کشف کردند که نانولوله‌های بلند به‌طور قابل توجهی سختی، کرنش تسلیم، ناحیه الاستیک تغییر شکل و جذب انرژی در مواد شیشه فلزی توده‌ای را بهبود می‌بخشند، در حالی که نانولوله‌های کوتاه تقریباً هیچ تأثیری بر این خواص ندارند. با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی، شارما و همکاران [۴۰]، تأثیر نانولوله‌های کربنی و گرافن را بر روی خواص مکانیکی مواد شیشه فلزی توده‌ای بررسی کردند. محققان نشان دادند که نانولوله‌های کربنی و نیز گرافن مدول الاستیسیته را در مواد شیشه فلزی توده‌ای افزایش می‌دهند. با این حال، گرافن در مقایسه با نانولوله کربنی برای تقویت کامپوزیت‌های شیشه فلزی توده‌ای بهتر عمل می‌کند.

تعیین تعامل بین ساختارهای آمورف و نانو پرکننده‌ها که مسئول بهبود ویژگی‌های مکانیکی هستند، مسئله‌ای چالش‌برانگیز است. همچنین، مطالعات در خصوص مواد غیر کریستالی بیشتر به رفتار کششی محدود بوده و فاز کماتش آن‌ها مورد مطالعه قرار نگرفته‌اند. در این میان، مطالعه بر روی رفتار کماتشی شبکه‌های سه‌بعدی گرافنی به‌عنوان یک نانو ساختار مهم سه‌بعدی نیز صورت نگرفته است. لذا با توجه به اهمیت رفتار مکانیکی نانو ساختارها و نانو کامپوزیت‌ها تحت بارگذاری‌های مختلف به‌منظور استفاده بالقوه در طراحی سیستم‌های نانو الکترومکانیکی، بر این اساس، این تحقیق از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی برای انجام یک بررسی جامع از رفتار کماتش مجموعه‌ای متنوع از نانوکامپوزیت‌های شیشه فلزی مبتنی بر مس-زیرکونیوم استفاده می‌کند. بدین منظور، شیشه‌های فلزی با حداکثر پنج عنصر که شامل ترکیباتی از مس، زیرکونیوم، نقره، آلومینیوم، نیکل و تیتانیوم با نسبت‌های مختلف هستند، در نظر

⁴Hexagonal Graphene Network (HGN)

⁵Quadrilateral Graphene Network (QGN)

⁶Triangular Graphene Network (TGN)

⁷LAMMPS package

⁸Embedded atom method

⁹AIREBO

¹⁰Lennard-Jones

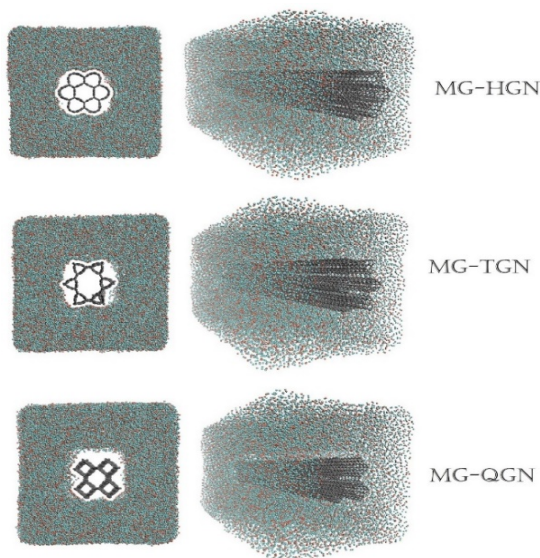
¹¹Representative volume element

¹Debye temperature

²Monolithic

³Molecular dynamics simulations

دو عنصری شیشه فلزی (MG1 تا MG3) نسبت‌های متفاوتی از مس و زیرکونیوم را به‌عنوان عناصر پایه‌دارند؛ آلیاژهای سه عنصری شیشه فلزی (MG4 تا MG6) از ترکیب‌های مس زیرکونیوم با آلومینیوم، نیکل و تیتانیوم تشکیل شده‌اند؛ ماتریس‌های چهارعنصری شیشه فلزی (MG7 تا MG9) از ترکیب‌های مس-زیرکونیوم با آلومینیوم-نقره، آلومینیوم-نیکل و تیتانیوم-نیکل تشکیل می‌شوند؛ و درنهایت، آلیاژ پنج عنصری شیشه فلزی (MG10) شامل مس-زیرکونیوم به همراه آلومینیوم، نیکل و نقره در ساختار خود است. سه نوع شبکه گرافنی سه‌بعدی، به نام‌های شبکه گرافن شش‌ضلعی (HGN)، شبکه گرافن چهارضلعی (QGN) و شبکه گرافن مثلثی (TGN)، به‌عنوان تقویت‌کننده‌ها استفاده می‌شوند. شکل ۱ تقویت‌کننده‌ها با ساختار سوپر سلول شبکه گرافن شش‌ضلعی (۲و۲)، شبکه گرافن چهارضلعی (۲و۲) و شبکه گرافن مثلثی (۲و۲) را نشان می‌دهد [۲۸].



شکل ۱: ساختار سوپر سلول شبکه گرافن شش‌ضلعی (۲و۲)، شبکه گرافن چهارضلعی (۲و۲) و شبکه گرافن مثلثی (۲و۲)

۳- تحلیل نتایج

۳-۱- شیشه‌های فلزی یکپارچه

در ابتدا، پس از فرآیند سرد کاری، بلوک‌های شیشه‌های فلزی یکپارچه تحت آزمایش فشاری قرار گرفتند. شکل ۲ (الف) و شکل ۲ (ب) که به ترتیب نیروی وارده و انرژی را برحسب کرنش ترسیم می‌کنند، نمونه‌ای از پاسخ کماتش مدل یکپارچه MG2 را نشان می‌دهند. این شکل بیانگر این است که نیروی بحرانی یا انرژی و کرنش بحرانی برای MG2 درجایی یافت می‌شوند که

سه‌بعدی مناسب پر می‌شود، به طوری که فاصله مناسبی بین نانو پرکننده و ماتریس شیشه فلزی وجود داشته باشد. سپس، کل سیستم یک دوره استراحت ۰٫۵ نانوثانیه‌ای را طی می‌کند تا به یک پیکربندی پایدار تحت شرایط محیطی دست یابد. این کار با استفاده از الگوریتم انتگرالی سرعت-ورلت^۱ به همراه روش ترموستات نوز-هوور^۲ برای جلوگیری از نوسانات حرارتی با گام زمانی ۱ فمتو ثانیه انجام می‌شود [۵۲-۵۳]. لازم به ذکر است شرایط مرزی در نظر گرفته شده در تحلیل کار حاضر به صورت متناوب^۳ است. لذا کلیه‌ی عناصر تشکیل‌دهنده‌ی جزء حجمی نماینده آزادانه و بدون هیچ قیدی بر اساس حل معادلات حرکتی در هنگام تعیین شده در سیستم ترمودینامیکی انتخابی، امکان حرکت در مرز رادارند. با جابجایی لبه‌های جزء حجمی نماینده به میزان ۰٫۰۱ Å، یک‌بار فشاری محوری اعمال می‌شود. پس‌ازاین، به ساختار اجازه می‌دهیم به مدت ۳۰۰ پیکو ثانیه استراحت کند. پس از استراحت، نیروی فشاری ناشی از جابجایی را از مرزها به دست می‌آوریم و پس از کماتش، نیروها و کرنش‌های بحرانی را محاسبه می‌کنیم.

۲-۲- مدل‌های شبیه‌سازی

جدول ۱ انواع مختلفی از ماتریس‌های شیشه فلزی شبیه‌سازی شده بر پایه مس-زیرکونیوم با مقادیر مختلف نقره، آلومینیوم، نیکل و تیتانیوم را نشان می‌دهد [۵۴-۶۱].

جدول ۱: نماد و ترکیبات شیمیایی ماتریس‌های شیشه فلزی

نماد	ترکیب شیمیایی
MG1	Cu ₇₅ Zr ₂₅ [54]
MG2	Cu ₅₀ Zr ₅₀ [54]
MG3	Cu ₂₅ Zr ₇₅ [54]
MG4	Cu ₃₀ Zr ₆₀ Al ₁₀ [55]
MG5	Cu ₄₀ Zr ₅₀ Ni ₁₀ [56]
MG6	Cu ₅₀ Zr ₄₀ Ti ₁₀ [57]
MG7	Cu ₄₂ Zr ₄₂ Al ₈ Ag ₈ [58]
MG8	Cu ₃₀ Zr ₅₅ Al ₁₀ Ni ₅ [59]
MG9	Cu ₃₃ Zr ₄₉ Ti ₁₀ Ni ₈ [60]
MG10	Cu _{12.5} Zr ₆₅ Al _{7.5} Ni ₁₀ Ag ₅ [61]

تمام ماتریس‌های شیشه فلزی به چهار نوع تقسیم‌بندی می‌شوند: ماتریس‌های آلیاژی دو عنصری، سه عنصری، چهارعنصری و پنج عنصری، که به‌عنوان MG1 تا MG10 شناخته می‌شوند. آلیاژهای

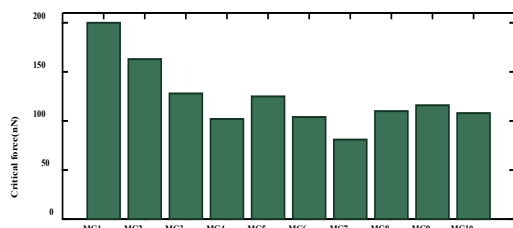
¹Velocity-Verlet

²Nose-Hoover

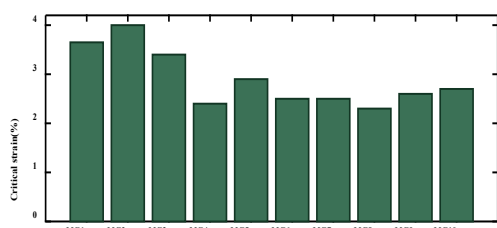
³Periodic Boundary Condition

که آن‌هایی که درصد مس بالاتری دارند، در برابر فشارقوی‌تر از آن‌هایی هستند که درصد مس کمتری دارند.

(الف)



(ب)



شکل ۳: تغییرات (الف) نیروی بحرانی و (ب) کرنش بحرانی برای مدل‌های شیشه فلزی یکپارچه

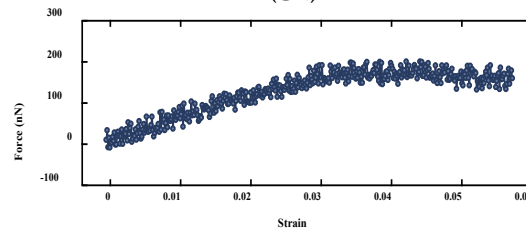
۲-۲- تقویت نانو کامپوزیت‌های شیشه فلزی

در این بخش، به منظور بررسی تأثیر نانو پرکننده‌ها بر روی خواص مکانیکی شیشه‌های فلزی، شبیه‌سازی آزمایش فشار بر روی نانو کامپوزیت‌های تقویت‌شده با شبکه‌های گرافن شش‌ضلعی، چهارضلعی و مثلثی انجام می‌شود. علاوه بر این، مقایسه‌ای بین نیروها و کرنش‌های بحرانی این ساختارها با مدل‌های شیشه فلزی یکپارچه انجام می‌شود.

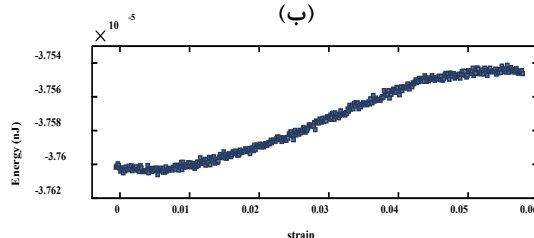
در شکل ۴، رفتار کمانشی ماتریس‌های شیشه فلزی تقویت‌شده با ماتریس‌های شیشه فلزی یکپارچه برای مدل‌های MG1، MG2 و MG3 مقایسه شده‌اند. همان‌طور که برای شیشه‌های فلزی یکپارچه نشان داده شده است، کمترین نیروی بحرانی و کرنش بحرانی با مقادیر ۱۲۸ نانو نیوتن و ۳٫۴٪ به MG1 تعلق دارد، در حالی که بیشترین نیروی بحرانی و کرنش با مقادیر ۲۰۰ نانو نیوتن و ۴٪ به ترتیب به MG2 و MG3 تعلق دارد. مقایسه تأثیر نانو پرکننده‌ها بر خواص مکانیکی شیشه‌های فلزی نشان می‌دهد که رفتار کمانش شیشه‌های فلزی یکپارچه به دلیل نانو پرکننده‌ها به‌طور قابل‌توجهی بهبود یافته است. به‌عنوان مثال، با در نظر گرفتن MG3، نیروهای بحرانی MG-HGN، MG-QGN و MG-TGN به ترتیب ۲٫۰۶، ۱٫۸۸ و ۲٫۱۶ برابر نیروی شیشه‌های فلزی یکپارچه هستند؛ این مقادیر برای کرنش بحرانی به ۱٫۲۳، ۱٫۴۲ و ۱٫۵۹ تغییر می‌کنند. همچنین، بیشترین نیروی بحرانی برای مدل‌های MG-HGN، MG-QGN

منحنی نیرو-کرنش تقریباً به مقدار ثابتی همگرا می‌شود یا منحنی انرژی-کرنش کاهش می‌یابد. طبق شکل ۲، نیروی بحرانی و کرنش بحرانی مربوطه به ترتیب برابر با ۱۶۳٫۶ نانو نیوتن و ۳٫۷٪ به دست آمده‌اند که با نتایج ارائه‌شده در مرجع [۳۸] همخوانی دارند.

(الف)

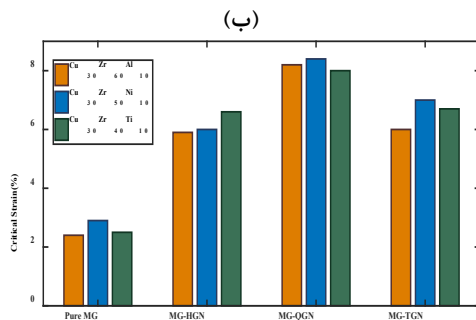
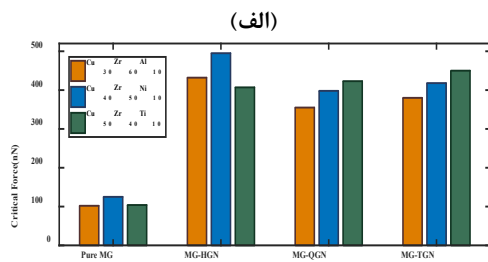


(ب)



شکل ۲: تغییرات (الف) نیرو و (ب) انرژی بر حسب کرنش مربوط به MG2

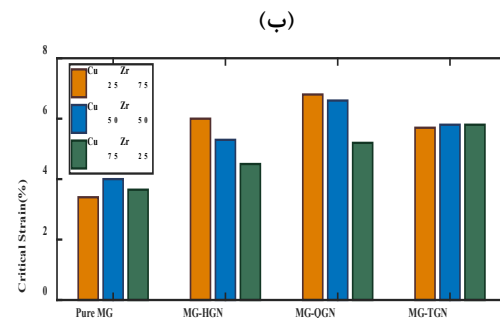
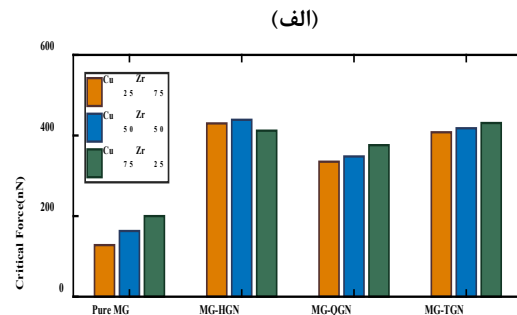
شکل ۳ نیروی بحرانی و کرنش بحرانی برای مدل‌های مختلف شیشه‌های فلزی یکپارچه را نشان می‌دهد که می‌تواند برای مقایسه نحوه کمانش انواع مختلف آلیاژهای شیشه فلزی استفاده شوند. همان‌طور که نشان داده شده است، بالاترین مقدار نیروی بحرانی مربوط به MG1 است، در حالی که بالاترین مقدار کرنش بحرانی مربوط به MG2 است. علاوه بر این، آلیاژهای MG7 و MG8 به ترتیب دارای کمترین نیروی بحرانی (۸۱ نانو نیوتن) و کمترین کرنش بحرانی (۲٫۳٪) هستند. این مقادیر به ترتیب ۵۹٫۵٪ و ۴۲٫۵٪ کمتر از حداکثر نیروی بحرانی و کرنش بحرانی هستند. این نشان می‌دهد که ترکیب آلیاژهای شیشه فلزی تأثیر زیادی بر رفتار کمانش مکانیکی آن‌ها دارد. با بررسی بیشتر این شکل، مشخص می‌شود که هر دو مدل MG6 و MG7 مقادیر کرنش بحرانی یکسانی را نشان می‌دهند. علاوه بر این، مشاهده می‌کنیم که تغییر در پیکربندی آلیاژ، تأثیر قابل‌توجهی بر نیروی بحرانی در مقایسه با کرنش بحرانی دارد. همچنین مشاهده می‌کنیم که آلیاژهای شیشه فلزی حاوی دو عنصر مس و زیرکونیوم بهترین پایداری مکانیکی را تحت فشار محوری نشان می‌دهند. نیروی بحرانی این آلیاژهای شیشه فلزی نشان می‌دهد



شکل ۵: مقایسه رفتار کماتشی ماتریس‌های شیشه فلزی تقویت‌شده با ماتریس‌های شیشه فلزی یکپارچه؛ (الف) نیروی بحرانی و (ب) کرنش بحرانی برای مدل‌های MG4، MG5 و MG6

در شکل ۶، نیرو و کرنش‌های بحرانی برای ماتریس‌های شیشه فلزی که توسط آلیاژهای چهارعنصری ایجاد شده‌اند نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود همه انواع تقویت‌کننده‌ها ویژگی‌های کماتش کامپوزیت‌های MG7 تا MG9 را بهبود می‌بخشند. به‌عنوان مثال، در مورد MG8، بیشترین افزایش در نیروی کماتش مربوط به MG-HGN است که پس‌از آن، به ترتیب MG-TGN و MG-QGN قرار دارند. بر طبق نتایج عددی، نیروی بحرانی این ساختارها به ترتیب ۴،۱، ۳،۶۸ و ۳،۳۳ برابر نیروی بحرانی شیشه‌های فلزی یکپارچه است. علاوه بر این، بیشترین نسبت کرنش بحرانی نانو کامپوزیت‌های شیشه فلزی به کرنش بحرانی شیشه‌های فلزی یکپارچه برای MG-QGN یافت می‌شود که برابر با ۳،۲۶ است و به دنبال آن، MG-TGN با مقدار ۲،۷۰ و MG-HGN با مقدار ۲،۳۵ است. با در نظر گرفتن ساختار MG-TGN، حداکثر افزایش در نیروی بحرانی مربوط به MG7 است که پس‌از آن، به ترتیب MG8 و MG9 قرار دارند. طبق نتایج عددی، نسبت نیروی بحرانی این ساختارها به نیروی بحرانی شیشه‌های فلزی یکپارچه متناظر به ترتیب ۵،۰۱، ۳،۶۸ و ۳،۲۱ است. علاوه بر این، مقایسه کرنش‌های بحرانی MG7 تا MG9 تقویت‌شده با TGN با کرنش‌های بحرانی شیشه‌های فلزی یکپارچه مربوطه نشان می‌دهد که بالاترین افزایش در کرنش بحرانی مربوط به MG8 است که به دنبال آن، MG7 و MG9 قرار دارند. با توجه به نتایج عددی، کرنش

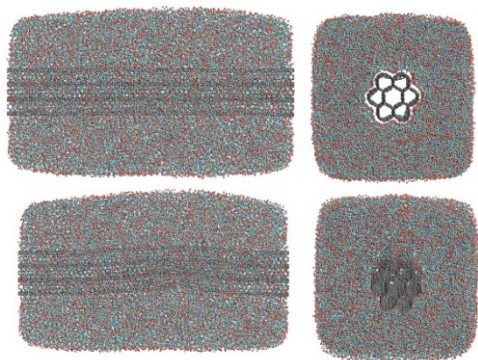
و MG-TGN به ترتیب با MG2، MG3 و MG3 مرتبط است. در صورتی که، بیشترین کرنش‌های بحرانی آن‌ها به ترتیب به MG1، MG2 و MG3 تعلق دارند. علاوه بر این، کمترین نیروهای بحرانی برای مدل‌های MG-HGN، MG-QGN و MG-TGN به ترتیب با MG3، MG1 و MG1 مرتبط هستند، در حالی که کمترین کرنش‌های بحرانی این ساختارها به ترتیب به MG3، MG1 و MG3 تعلق دارند.



شکل ۴: مقایسه رفتار کماتشی ماتریس‌های شیشه فلزی تقویت‌شده با ماتریس‌های شیشه فلزی یکپارچه؛ (الف) نیروی بحرانی و (ب) کرنش بحرانی برای مدل‌های MG1، MG2، MG3

شکل ۵ نیروها و کرنش‌های بحرانی محاسبه شده برای آلیاژهای شیشه فلزی یکپارچه و تقویت‌شده را نشان می‌دهد که شامل سه عنصر هستند. همان‌طور که نشان داده شده است، رفتارهای کماتش آلیاژهای MG4 تا MG7 با تقویت آن‌ها توسط شبکه‌های گرافن شش‌ضلعی، چهارضلعی و مثلثی بهبود یافته است. به‌عنوان مثال، نیروهای بحرانی MG-HGN، MG-QGN و MG-TGN به ترتیب ۴،۲۴، ۳،۴۸ و ۳،۷۳ برابر نیروی MG4 یکپارچه هستند. علاوه بر این، کرنش‌های بحرانی این ساختارها به ترتیب ۲،۴۶، ۳،۴۲ و ۲،۵ برابر کرنش بحرانی MG4 هستند. نتایج محاسبات نشان می‌دهند که برای ساختار MG-QGN، MG6 بالاترین نیروی بحرانی (۴۲۳ نانو نیوتن) را دارد که ۱۹،۱۵٪ بیشتر از MG4 و ۶،۲۸٪ بیشتر از MG5 است. علاوه بر این، MG5 بالاترین کرنش بحرانی را با مقدار ۸،۴٪ فراهم می‌کند که به ترتیب ۲،۴۴٪ و ۵٪ بیشتر از MG4 و MG6 است.

با بررسی نتایج ارائه شده مشاهده می‌گردد در حالت کلی با افزایش تعداد عناصر سازنده‌ی مواد شیشه فلزی مقدار تحمل بار کاهش می‌یابد. با بررسی دقیق‌تر ساختار غیر کریستالی مواد شیشه فلزی مشاهده می‌گردد با افزایش تعداد عناصر سازنده با توجه به اندازه‌ها و ویژگی‌های اختصاصی عناصر ساخته شده، یکپارچگی ساختار دستخوش تغییرات محسوس می‌شود که منجر به ایجاد نقص‌های ساختاری از قبیل فضاهای خالی و غیر همگنی ساختار می‌گردد. لذا این موارد در کنار تفاوت در سطح مقطع نانو پرکننده‌های استفاده شده‌ی گرافن سه بعدی که نقش بسیار مهمی در تحمل بار فشاری دارند اختلاف بین نتایج را رقم می‌زند. همچنین، مقایسه نتایج شکل ۴ تا شکل ۷ نشان می‌دهد که برای اکثر نانو کامپوزیت‌های شیشه فلزی، بهبود در نیروی بحرانی زمانی که از تقویت کننده HGN استفاده می‌شود، بیشتر مشهود است، در حالی که بهبود در کرنش بحرانی زمانی که از تقویت کننده QGN استفاده می‌شود، بیشتر قابل توجه است. استثنائاً، بالاترین نیروهای بحرانی آلیاژهای MG3 و MG6 به تقویت کننده TGN تعلق دارند و بالاترین کرنش بحرانی آلیاژهای MG3 و MG10 به تقویت کننده TGN مربوط می‌شود. با توجه به شباهت مودهای کمانشی، نمونه‌ای از شکل مد کمانش برای MG10-HGN تقویت شده به صورت گرافیکی در شکل ۸ نشان داده شده است.

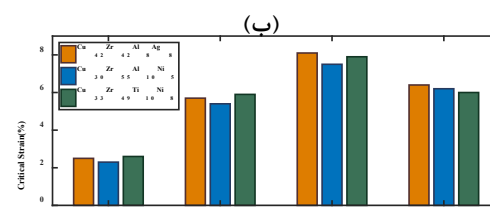
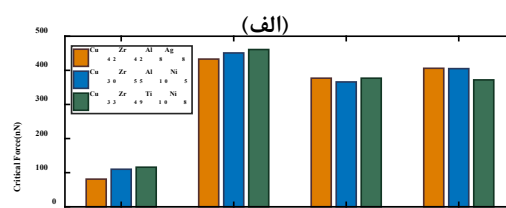


شکل ۸: نمونه‌هایی از حالت‌های اولیه و اشکال مد کمانش برای MG10-HGN تقویت شده

۴- نتیجه‌گیری

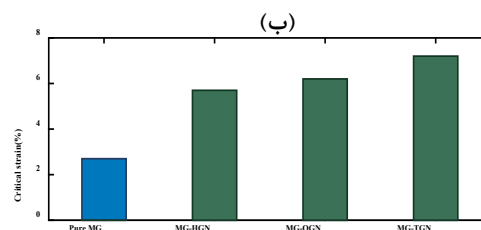
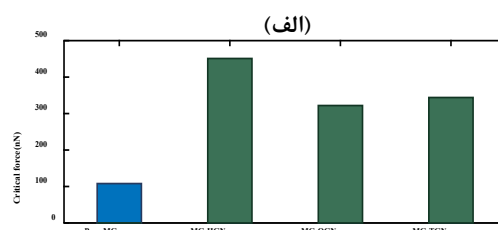
در این مطالعه، رفتار کمانش نانوکامپوزیت‌های شیشه فلزی که با سه نوع مختلف شبکه گرافن سه بعدی یعنی HGN، QGN و TGN تقویت شده بودند، با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. بدین منظور، ده مدل از شیشه‌های فلزی که حداکثر از پنج عنصر تشکیل شده بودند، در نظر گرفته شد. این عناصر شامل مس، زیرکونیوم، نقره، آلومینیوم، نیکل و تیتانیوم بودند که هر کدام در مقادیر متفاوتی

بحرانی این ساختارها به ترتیب ۲،۷، ۲،۵۶ و ۲،۳۱ برابر کرنش بحرانی مدل‌های یکپارچه است.



شکل ۶: مقایسه رفتار کمانشی ماتریس‌های شیشه فلزی تقویت شده با ماتریس‌های شیشه فلزی یکپارچه؛ (الف) نیروی بحرانی و (ب) کرنش بحرانی برای مدل‌های MG7، MG8، و MG9

شکل ۷ نیروها و کرنش‌های بحرانی مربوط به ماتریس‌های MG10-HGN، MG10-QGN و MG10-TGN را با نیرو و کرنش بحرانی MG10 یکپارچه مقایسه می‌کند. همان‌طور که مشاهده می‌شود بیشترین افزایش در نیرو و کرنش بحرانی به ترتیب برای MG-HGN و MG-TGN اتفاق می‌افتد. بر اساس نتایج، نیروهای بحرانی MG-HGN، MG-QGN و MG-TGN به ترتیب ۴،۱۸، ۲،۹۸ و ۳،۱۹ برابر نیروی بحرانی MG10 یکپارچه هستند. علاوه بر این، نسبت کرنش‌های بحرانی این ساختارها به کرنش بحرانی MG10 یکپارچه به ترتیب ۲،۱۱، ۲،۳۰ و ۲،۶۷ محاسبه شده است.



شکل ۷: مقایسه رفتار کمانشی ماتریس‌های MG10 تقویت شده با MG10 یکپارچه؛ (الف) نیروی بحرانی و (ب) کرنش بحرانی

[9] Kim DH, Yu KC, Kim Y, Kim JW. Highly stretchable and mechanically stable transparent electrode based on composite of silver nanowires and polyurethane-urea. *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2015; 7(28): 15214-15222. DOI: [10.1021/acsami.5b04693](https://doi.org/10.1021/acsami.5b04693)

[10] Parsapour H, Ajori S, Ansari R, Haghghi S. Tensile characteristics of single-walled carbon nanotubes endohedrally decorated with gold nanowires: a molecular dynamics study. *Diamond and Related Materials*. 2019;92:117-129. DOI: [10.1016/j.diamond.2018.12.014](https://doi.org/10.1016/j.diamond.2018.12.014)

[11] Sun Y, Zhang JM, Xu KW. First-principles study on the relaxed structures and electronic properties of Cu [110] nanowires. *Journal of the Korean Physical Society*. 2012;61:1015-1020. DOI: [10.3938/jkps.61.1015](https://doi.org/10.3938/jkps.61.1015)

[12] Wang N, Zhao W, Shen Z, Sun S, Dai H, Ma H, Lin M. Sensitive and selective detection of Pb (II) and Cu (II) using a metal-organic framework/polypyrrole nanocomposite functionalized electrode. *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2020;304:127286. DOI: [10.1016/j.snb.2019.127286](https://doi.org/10.1016/j.snb.2019.127286)

[13] Xing Y, Cao W, Li W, Chen H, Miao W, Wei H, Hu D, Chen M, Li Q. Carbon nanotube/Cu nanowires/epoxy composite mats with improved thermal and electrical conductivity. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*. 2015;15(4):3265-3270. DOI: [10.1166/jnn.2015.9677](https://doi.org/10.1166/jnn.2015.9677)

[14] Zhu D, Yu W, Du H, Chen L, Li Y, Xie H. Thermal conductivity of composite materials containing copper nanowires. *Journal of Nanomaterials*. 2016;2016(1):1-6. DOI: [10.1155/2016/3089716](https://doi.org/10.1155/2016/3089716)

[15] Dobrzański LA, Czaja I. Effect of nanowires and nanoparticles of copper on the structure and properties of the nanocomposite polymeric materials. *Archives of Materials Science and Engineering*. 2015;75(1):18-29.

[16] Won Y, Kim A, Lee D, Yang W, Woo K, Jeong S, Moon J. Annealing-free fabrication of highly oxidation-resistant copper nanowire composite conductors for photovoltaics. *NPG Asia Materials*. 2014;6(6):e105-e105. DOI: [10.1038/am.2014.36](https://doi.org/10.1038/am.2014.36)

[17] Wang S, Cheng Y, Wang R, Sun J, Gao L. Highly thermal conductive copper nanowire composites with ultralow loading: toward applications as thermal interface materials. *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2014;6(9):6481-6486. DOI: [10.1021/am500009p](https://doi.org/10.1021/am500009p)

[18] Egami, T., Iwashita, T. and Dmowski, W., Mechanical properties of metallic glasses. *Metals*, 2013;3(1):77-113. DOI: <https://doi.org/10.3390/met3010077>

[19] Zapata-Solvas E, Gómez-García D, Domínguez-Rodríguez A. Towards physical properties tailoring of carbon nanotubes-reinforced ceramic matrix composites. *Journal of the European Ceramic Society*. 2012;32(12):3001-3020. DOI: [10.1016/j.jeurceramsoc.2012.04.018](https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2012.04.018)

[20] Iacobellis V, Radhi A, Behdinin K. A bridging cell multiscale modeling of carbon nanotube-reinforced aluminum nanocomposites. *Composite Structures*. 2018;202:406-412. DOI: [10.1016/j.compstruct.2018.02.044](https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2018.02.044)

استفاده شدند. سپس، نیروها و کرنش‌های بحرانی نانو کامپوزیت‌های شیشه فلزی تقویت‌شده با شیشه‌های فلزی یکپارچه مقایسه شدند. بر اساس یافته‌ها، آلیاژهای شیشه فلزی با تنها دو عنصر مس و زیرکونیوم و درصد بالاتر مس، بهترین پایداری مکانیکی را تحت فشار محوری دارند. علاوه بر این، زمانی که در ترکیب یک آلیاژ شیشه فلزی بیش از دو عنصر وجود داشته باشد، خواص کماتش کمی کمتر از آلیاژهای دو عنصری شیشه فلزی است. بر اساس نتایج به‌دست‌آمده مشاهده شد که تقویت‌کننده‌ها تأثیر قابل‌توجهی در بهبود خواص کماتش نانو کامپوزیت‌های شیشه فلزی دارند. برای بیشتر نانو کامپوزیت‌های شیشه فلزی، افزایش نیروی بحرانی زمانی که از تقویت‌کننده‌های HGN استفاده می‌شود، بیشتر قابل توجه است، درحالی‌که افزایش کرنش زمانی که از تقویت‌کننده‌های QGN استفاده می‌شود، بیشتر قابل‌ملاحظه است.

۵- مراجع

[1] Yu MF, Lourie O, Dyer MJ, Moloni K, Kelly TF, Ruoff RS. Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load. *Science*. 2000;287(5453):637-640. DOI: [10.1126/science.287.5453.637](https://doi.org/10.1126/science.287.5453.637)

[2] Ajori S, Sadeghi F. Design of high-frequency carbon nanotube-carbon nanotorus oscillators for energy harvesting: A molecular dynamics study. *Langmuir*. 2024;40:4811-4823. DOI: [10.1021/acs.langmuir.3c03702](https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.3c03702)

[3] Ganji BA, Teymurnejad R. Efficiency improving of NEMS solar cell using piezoelectric nanowires. *Microsystem Technologies*. 2021;27(3):649-657. DOI: [10.1007/s00542-020-04967-7](https://doi.org/10.1007/s00542-020-04967-7)

[4] Balavalad KB. A Review on silicon nanowires and their use in the development of nano piezoresistive pressure sensors. *Nanoscience & Nanotechnology-Asia*. 2023;13(5):14-22. DOI: [10.2174/2210681213666230619153413](https://doi.org/10.2174/2210681213666230619153413)

[5] Curtin WA, Sheldon BW. CNT-reinforced ceramics and metals. *Materials Today*. 2004;7(11):44-49. DOI: [10.1016/S1369-7021\(04\)00508-5](https://doi.org/10.1016/S1369-7021(04)00508-5)

[6] Haghghi S, Ansari R, Ajori S. Interfacial properties of 3D metallic carbon nanostructures (T6 and T14)-reinforced polymer nanocomposites: a molecular dynamics study. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*. 2019;92:341-356. DOI: [10.1016/j.jmgm.2019.08.010](https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2019.08.010)

[7] Bakshi SR, Lahiri D, Agarwal A. Carbon nanotube reinforced metal matrix composites-a review. *International Materials Reviews*. 2010; 55(1): 41-64. DOI: [10.1179/095066009X12572530170543](https://doi.org/10.1179/095066009X12572530170543)

[8] Jiang H, Robertson S, Liang S, Zhou Z, Zhao L, Liu C. Microstructural and mechanical characteristics of Cu-Sn intermetallic compound interconnects formed by TLPB with Cu-Sn nanocomposite. *Materials Today Communications*. 2022;33:104623. DOI: [10.1016/j.mtcomm.2022.104623](https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.104623)

- Physics Letters. 2003;83(14):2793-2795. DOI: [10.1063/1.1616192](https://doi.org/10.1063/1.1616192)
- [35] Albe K, Ritter Y, Şopu D. Enhancing the plasticity of metallic glasses: Shear band formation, nanocomposites and nanoglasses investigated by molecular dynamics simulations. *Mechanics of Materials*. 2013;67:94-103. DOI: [10.1016/j.mechmat.2013.06.004](https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2013.06.004)
- [36] Rezaei R, Shariati M, Tavakoli-Anbaran H, Deng C. Mechanical characteristics of CNT-reinforced metallic glass nanocomposites by molecular dynamics simulations. *Computational Materials Science*. 2016; 119:19-26. DOI: [10.1016/j.commatsci.2016.03.036](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.03.036)
- [37] Bian Z, Wang RJ, Wang WH, Zhang T, Inoue A. Carbon-nanotube-reinforced Zr-based bulk metallic glass composites and their properties. *Advanced Functional Materials*. 2004; 14(1):55-63. DOI: [10.1002/adfm.200304422](https://doi.org/10.1002/adfm.200304422)
- [38] Ajori S, Parsapour H, Ansari R, Ameri A. Buckling behavior of various metallic glass nanocomposites reinforced by carbon nanotube and Cu nanowire: a molecular dynamics simulation study. *Materials Research Express*. 2019; 6(9):095070. DOI: [10.1088/2053-1591/ab2cfd](https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab2cfd)
- [39] Zhao P, Li S, Gao G, Bai B, Misra RDK. Mechanical behavior of carbon nanotube-reinforced Mg–Cu–Gd–Ag bulk metallic glasses. *Materials Science and Engineering: A*. 2015;641:116-122. DOI: [10.1016/j.msea.2015.06.014](https://doi.org/10.1016/j.msea.2015.06.014)
- [40] Sharma S, Kumar P, Chandra R. Graphene/carbon nanotube reinforced metallic glass composites: a molecular dynamics study. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*. 2016; 14(6): 1-31. DOI: [10.1615/IntJMultCompEng.2016018635](https://doi.org/10.1615/IntJMultCompEng.2016018635)
- [41] Kumari P, Tripathi P, Parkash O, Kumar D. Low temperature sintering and characterization of MgO-B₂O₃-SiO₂ glass-ceramics for LTCC substrate applications. *Transactions of the Indian Ceramic Society*. 2016; 75(4):229-233. DOI: [10.1080/0371750X.2016.1210025](https://doi.org/10.1080/0371750X.2016.1210025)
- [42] Das AS, Roy M, Roy D, Kar T, Rath S, Bhattacharya S. Investigations of Microstructure and Dc Conductivity of V₂O₅-Nd₂O₃ Glass Nanocomposites. *ChemistrySelect*. 2017;2(34): 11273-11280. DOI: [10.1002/slct.201701590](https://doi.org/10.1002/slct.201701590)
- [43] Bhattacharya S, Das AS, Roy M, Roy D. Formation of nano-phases and study of transition metal oxide doped glassy systems. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2017;460:29-35. DOI: [10.1016/j.jnoncrsol.2017.01.020](https://doi.org/10.1016/j.jnoncrsol.2017.01.020)
- [44] Bian Z, Pan MX, Zhang Y, Wang WH. Carbon-nanotube-reinforced Zr_{52.5} Cu_{17.9} Ni_{14.6} Al₁₀ Ti₅ bulk metallic glass composites. *Applied Physics Letters*. 2002; 81(25):4739-4741. DOI: [10.1063/1.1530371](https://doi.org/10.1063/1.1530371)
- [45] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*. 1995; 117(1):1-19. DOI: [10.1006/jcph.1995.1039](https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039)
- [46] Foiles SM, Baskes MI, Daw MS. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Physical Review B*. 1988; 37: 10378. DOI: [10.1103/PhysRevB.33.7983](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.33.7983)
- [21] Liu Y, Kumar S. Polymer/carbon nanotube nano composite fibers—a review. *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2014;6(9):6069-6087. DOI: [10.1021/am405136s](https://doi.org/10.1021/am405136s)
- [22] Yang L, He HY, Pan BC. Theoretical prediction of new carbon allotropes. *The Journal of Chemical Physics*. 2013;138(2):024502. DOI: [10.1063/1.4773448](https://doi.org/10.1063/1.4773448)
- [23] Babicheva RI, Dmitriev SV, Korznikova EA, Zhou K. Mechanical properties of two-dimensional sp²-carbon nanomaterials. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2019;129(1):66–71. DOI: [10.1134/S1063776119070021](https://doi.org/10.1134/S1063776119070021)
- [24] Martinez-Canales M, Pickard CJ, Needs RJ. Thermodynamically stable phases of carbon at multiterapascal pressures. *Physical Review Letters*. 2012;108(4):045704. DOI: [10.1103/PhysRevLett.108.045704](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.045704)
- [25] Niu H, Chen XQ, Wang S, Li D, Mao WL, Li Y. Families of superhard crystalline carbon allotropes constructed via cold compression of graphite and nanotubes. *Physical Review Letters*. 2012;108(13):135501. DOI: [10.1103/PhysRevLett.108.135501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.135501)
- [26] Liu B, Zhou K. Recent progress on graphene-analogous 2D nanomaterials: Properties, modeling and applications. *Progress in Materials Science*. 2019; 100:99-169. DOI: [10.1016/j.pmatsci.2018.09.004](https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2018.09.004)
- [27] Srinivasu K, Ghosh SK. Electronic structure, optical properties, and hydrogen adsorption characteristics of supercubane-based three-dimensional porous carbon. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2012; 116(47):25015–25021. DOI: [10.1021/jp3104479](https://doi.org/10.1021/jp3104479)
- [28] Zhong C, Chen Y, Xie Y, Yang SA, Cohen ML, Zhang SB. Towards three-dimensional Weyl-surface semimetals in graphene networks. *Nanoscale*. 2016; 8(13):7232-7239. DOI: [10.1039/C6NR00882H](https://doi.org/10.1039/C6NR00882H)
- [29] Papageorgiou, D.G., Li, Z., Liu, M., Kinloch, I.A. and Young, R.J., Mechanisms of mechanical reinforcement by graphene and carbon nanotubes in polymer nanocomposites. *Nanoscale*, 2020; 12(4): 2228-2267. DOI: <https://doi.org/10.1039/C9NR06952F>
- [30] Inoue A. Stabilization of metallic supercooled liquid and bulk amorphous alloys. *Acta Materialia*. 2000;48(1):279-306. DOI: [10.1016/S1359-6454\(99\)00300-6](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(99)00300-6)
- [31] Suryanarayana C, Inoue A. Bulk metallic glasses. CRC press.
- [32] Hofmann DC. Bulk metallic glasses and their composites: a brief history of diverging fields. *Journal of Materials*. 2013;2013(1):517904. DOI: [10.1155/2013/517904](https://doi.org/10.1155/2013/517904)
- [33] Wu FF, Chan KC, Jiang SS, Chen SH, Wang G. Bulk metallic glass composite with good tensile ductility, high strength and large elastic strain limit. *Scientific Reports*. 2014;4(1):5302. DOI: [10.1038/srep05302](https://doi.org/10.1038/srep05302)
- [34] Ma H, Xu J, Ma E. Mg-based bulk metallic glass composites with plasticity and high strength. *Applied*

- [55] Inoue A. Stabilization of metallic supercooled liquid and bulk amorphous alloys. *Acta Materialia*. 2000;48(1):279-306. **DOI:** [10.1016/S1359-6454\(99\)00300-6](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(99)00300-6)
- [56] Zhang T, Inoue A, Masumoto T. Amorphous (Ti, Zr, Hf)-Ni-Cu ternary alloys with a wide supercooled liquid region. *Materials Science and Engineering: A*. 1994;181:1423-1426. **DOI:** [10.1016/0921-5093\(94\)90877-X](https://doi.org/10.1016/0921-5093(94)90877-X)
- [57] Cai AH, Ding DW, Xiong X, Liu Y, An WK, Zhou GJ, Luo Y, Li TL, Wang H, Wu Y. Effect of mechanical tension on corrosive and thermal properties of Cu₅₀Zr₄₀Ti₁₀ metallic glass. *Materials Science and Engineering: A*. 2013;588:49-58. **DOI:** [10.1016/j.msea.2013.09.042](https://doi.org/10.1016/j.msea.2013.09.042)
- [58] Umetsu RY, Tu R, Goto T. Thermal and electrical transport properties of Zr-based bulk metallic glassy alloys with high glass-forming ability. *Materials Transactions*. 2012;53(10):1721-1725. **DOI:** [10.2320/matertrans.M2012163](https://doi.org/10.2320/matertrans.M2012163)
- [59] Sun YJ, Qu DD, Huang YJ, Liss KD, Wei XS, Xing DW, Shen J. Zr-Cu-Ni-Al bulk metallic glasses with superhigh glass-forming ability. *Acta Materialia*. 2009;57(4):1290-1299. **DOI:** [10.1016/j.actamat.2008.11.007](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2008.11.007)
- [60] Lin XH, Johnson WL. Formation of Ti-Zr-Cu-Ni bulk metallic glasses. *Journal of Applied Physics*. 1995;78(11):6514-6519. **DOI:** [10.1063/1.360537](https://doi.org/10.1063/1.360537)
- [61] Yan Z, Li J, He S, Wang H, Zhou Y. Microstructure of Zr-Al-Cu-Ni-Ag ingot and the thermal stability of corresponding glass. *Materials Transactions*. 2003;44(5):907-910. **DOI:** [10.2320/matertrans.44.907](https://doi.org/10.2320/matertrans.44.907)
- [47] Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems. *Physical Review B*. 1988; 37(12):6991. **DOI:** [10.1103/PhysRevB.37.6991](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.6991)
- [48] Tersoff JJPRB. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems. *Physical Review B*. 1989; 39(8): 5566. **DOI:** [10.1103/PhysRevB.39.5566](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.39.5566)
- [49] Lennard-Jones JE, Hall GG. Je lennard-jones proc. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, containing papers of a mathematical and physical character. 1924; 106(738):441-462. **DOI:** [10.1098/rspa.1924.0081](https://doi.org/10.1098/rspa.1924.0081)
- [50] Ma C, Suslov S, Ye C, Dong Y. Improving plasticity of metallic glass by electropulsing-assisted surface severe plastic deformation. *Materials & Design*. 2019; 165:107581. **DOI:** [10.1016/j.matdes.2019.107581](https://doi.org/10.1016/j.matdes.2019.107581)
- [51] Xu D, Lohwongwatana B, Duan G, Johnson WL, Garland C. Bulk metallic glass formation in binary Cu-rich alloy series-Cu_{100-x}Zr_x (x= 34, 36, 38.2, 40 at.%) and mechanical properties of bulk Cu₆₄Zr₃₆ glass. *Acta Materialia*. 2004;52(9):2621-2624. **DOI:** [10.1016/j.actamat.2004.02.009](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2004.02.009)
- [52] Allen MP, Tildesley DJ. Computer simulation of liquids. Oxford university press. 2017.
- [53] Hoover WG. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Physical Review A*. 1985; 31(3):1695. **DOI:** [10.1103/PhysRevA.31.1695](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.31.1695)
- [54] Lagogianni AE, Almyras G, Lekka CE, Papageorgiou DG, Evangelakis GA. Structural characteristics of Cu_xZr_{100-x} metallic glasses by Molecular Dynamics Simulations. *Journal of Alloys and Compounds*. 2009;483(1-2):658-661. **DOI:** [10.1016/j.jallcom.2008.07.211](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2008.07.211)