



Kristal Yöneliminin ve Sıcaklığın Cu Nano Telinin Mekanik Özelliklerine Etkisinin Moleküler Dinamik Benzetimi ile İncelenmesi

Investigation of the Effect of Crystal Orientation and Temperature on Mechanical Properties of Cu Nanowire by Molecular Dynamics Simulation

Sefa Kazanç ^{1*}

¹ Fırat Üniversitesi Eğitim Fakültesi Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi Bölümü, Elazığ, TÜRKİYE

Sorumlu Yazar / Corresponding Author *: skazanc@firat.edu.tr

Araştırma Makalesi/Research Article

DOI:10.21205/deufmd.2022247003

Geliş Tarihi / Received: 09.06.2021

Kabul Tarihi / Accepted: 27.08.2021

Atıf şekli/ How to cite: KAZANÇ S.(2022). Kristal Yöneliminin ve Sıcaklığın Cu Nano Telinin Mekanik Özelliklerine Etkisinin Moleküler Dinamik Benzetimi ile İncelenmesi. DEUFMD, 24(70), 19-28.

Öz

Bu çalışmada $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ yüksek simetrik kristalografik yönelimleri boyunca Cu nano teline uygulanan tek eksenli gerilme deformasyonunun mekanik özelliklere etkisi Moleküler Dinamik (MD) benzetim yöntemi ile incelendi. Atomlar üzerine etki eden kuvvetler çok cisim etkileşmelerini içeren Gömülmüş Atom Metodu (GAM) potansiyel fonksiyonunun türevinden elde edildi. Farklı kristal yönelimlerine sahip Cu model nano tellerin farklı sıcaklıklar altında zorlanma eğrileri, elastiklik modülü (E), akma zoru değerleri belirlendi. Elde edilen atomik görüntüler ve genel komşu analiz metodu (Common Neighbor Analysis-CNA) kullanılarak uygulanan gerilme sonucu nano tellerde meydana gelen plastik deformasyonun bütün yönelimler için Shockley kısmi dislokasyonların aktif hale geçmesi ve yığılm kusurları sonucu meydana geldiği tespit edildi. Ayrıca $\langle 100 \rangle$ ve $\langle 110 \rangle$ yönelimleri için akma meydana geldiğinde ikiz yapılarının oluşumu belirlendi. Kristal yönelimlerinin nano telin mekanik özellikleri üzerinde önemli bir etkiye sahip olduğu görüldü.

Anahtar Kelimeler: Kristal yönelimi, nano tel, mekanik özellikler, moleküler dinamik.

Abstract

In this study, the effect of uniaxial tensile strain applied to Cu nanowire along the $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$ highly symmetric crystallographic orientations on the mechanical properties was investigated by Molecular Dynamics (MD) simulation method. The forces acting on atoms were obtained from the derivative of the Embedded Atom Method (EAM) potential function, which includes many-body interactions. The Stress-strain curves, Young's modulus (E), yielding strength, and values of Cu model nanowires with different crystal orientations were determined under different temperatures. By using the obtained atomic images and the Common Neighbor Analysis method (CNA), it was determined that the plastic deformation occurred in the nanowires as a result of the stress applied as a result of the activation of Shockley partial dislocations and stacking faults defects for all orientations. In addition, for the $\langle 100 \rangle$ and $\langle 110 \rangle$ orientations, the formation of twin

structures was determined when yielding occurred. It was seen that the crystal orientations have a significant effect on the mechanical properties of the nanowire.

Keywords: *Crystal orientation, nanowire, mechanical properties, molecular dynamic*

1. Giriş

Nano bilimin ve nano teknolojinin son yıllardaki hızlı gelişimi, metal nano tellerini gün geçtikçe daha önemli hale getirmiştir. Nano ölçekte düşük boyutlu tek kristallerin deformasyon davranışı, onların hacimsel yapıları benzerlerinden farklılık göstermektedir. Büyük yüzey alanı/hacim oranı ve düşük yoğunluklu kusurlara sahip nano yapılar hacimli (bulk) tek kristal yapılardan farklı özellikler sergilemesine neden olur [1, 2]. Sadece 4 atomik düzlemde oluşan en ince metal Au nano tel, çok yüksek vakum elektron mikroskopunda elektron ışın demeti kullanılarak Kondo ve Takayanagi tarafından üretilmiştir [3]. Metal nano tellerin mekanik özelliklerinin belirlenmesi nano-elektromekanik sistemlerin tasarlanması ve üretimi için açısından son derece önemlidir. Değişik metalik nano tellerin elektriksel, mekanik, optik ve termal özelliklerini belirlemek için birçok deneysel çalışma yapılmıştır [4-6]. Nano tellerin gerek termodinamik gerekse mekanik özellikleri sıcaklık, tel yapısı, kristalografik yönelim, uygulanan sıkıştırma-zorlanma oranı, yüzey ve sınır şartlarından önemli derecede etkilenmektedir. α -Fe nano telinin yönelime bağlı deformasyon davranışının incelendiği çalışmada, meydana gelen plastik deformasyonun farklı kristal yönelimlerinde, dislokasyon kayması ve ikizlenme gibi farklı mekanizmalarla oluştuğu belirlenmiştir [7]. Au nano telinin mekanik özelliklerine kristal yöneliminin etkisinin incelendiği bir başka çalışmada elastiklik modülünün, akma zorunun, Schmidt faktörünün yönelime kuvvetli bir şekilde bağlı olduğu ve plastik deformasyonun Shockly kısmi dislokasyonlarının aktivitesiyle meydana geldiği tespit edilmiştir [8]. Değişik metal nano tellerin elastik özellikleri, akma zoru, yüzey-zor etkili faz dönüşümleri Gall ve arkadaşları tarafından detaylıca çalışılmıştır. Nano ölçekteki Au' nun sıkıştırma, germe ve kesme deformasyonunun atomik seviyede görselleştirilmesi yüksek çözünürlüklü geçirmeli elektron mikroskobu ile gerçekleştirilmiştir. [9]. Tschopp ve arkadaşları [10, 11] farklı yönelimli tek kristal Cu

elementindeki sıkıştırma-germe asimetrisini incelediler. Yaptıkları çalışmada sıkıştırmanın germeden daha yüksek bir akma zoru ürettiğini belirlediler.

Deneysel çalışmaların yanı sıra atomik seviyede maddelerin yapı ve özelliklerinin teorik olarak incelendiği bilgisayar benzetim çalışmaları son derece önemli bir hale gelmiştir. Bilgisayar teknolojisinin ve sayısal hesaplama yöntemlerinin hızlı gelişimi, bununla birlikte gerçekçi atomlararası potansiyellerin varlığı, MD benzetim yöntemini nano materyallerin mekanik davranışlarını incelemek için etkili bir araç haline getirmiştir. Metalik nano tellerin mekanik davranışlarını anlamak için değişik GAM fonksiyonlarının kullanıldığı klasik MD benzetimleri ve yoğunluk fonksiyonu teorisi üzerine kurulu ilk prensip (first-principles) metodu gibi farklı yaklaşımlarla birçok teorik çalışma yapılmıştır [12-14]. Bununla birlikte ilk prensip hesaplamaları yüksek işlemci gücüne ihtiyaç duymaktadır. Yapılan benzetim çalışmalarında elde edilen sonuçların deneysel değerlerle uyumluluğu model sistemde atomlar arasındaki etkileşimleri ifade eden potansiyel enerji fonksiyonunun seçimine bağlıdır. Farklı sistemlerin modellenmesi için geliştirilen birçok potansiyel fonksiyonu bulunmaktadır [15-17]. Çok cisim etkileşimlerini içeren GAM, sadece yapısı ve etkili sonuç vermesinden dolayı benzetim çalışmalarında en çok tercih edilen potansiyel fonksiyonlarındandır. [18, 19]. Literatürde nano teller ile ilgili MD benzetim yöntemi kullanılarak yapılan birçok çalışma bulunmaktadır [20-22].

Cu elementi yüksek derecede elastik anizotropiye sahip olduğundan bu çalışma için seçilmiştir. Mekanik özelliklerin kristal yönelimlerinden etkilenmesi bu tür elementlerin özellikle nano teknolojik uygulamalarında son derece önem arz etmektedir [11]. Bu çalışmada farklı kristalografik yönelimlerde oluşturulan Cu nano teline 10K, 100K, 300K, 500K, 700K ve 900K sıcaklık değerlerinde uygulanan tek eksenli germe deformasyonunun elastiklik modülü, akma zoru gibi mekanik davranışlar üzerindeki etkisi MD

benzetim metodu ile incendi. Çalışmada büyük ölçekli atomik/moleküler kitlesel paralel simülator (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator-LAMMPS) açık kaynak kodlu MD benzetim programı kullanıldı [23]. Atomlar arası etkileşimler GAM potansiyel fonksiyonu ile belirlendi. Elastik bölge dışında meydana gelen plastik deformasyon mekanizmasının incelenmesi için CNA analiz yöntemi kullanıldı.

2. Materyal ve Metot

Klasik MD benzetim yönteminde N atomlu bir sistemin hareket denklemleri aşağıda verilen Lagrange fonksiyonundan elde edilir.

$$L_{PR}(\mathbf{r}^N, \dot{\mathbf{r}}^N, \mathbf{h}, \dot{\mathbf{h}}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i (\dot{\mathbf{s}}_i^t G \dot{\mathbf{s}}_i) - \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \phi(|\mathbf{h} \mathbf{s}_{ij}|) + \frac{1}{2} M \text{Tr}(\dot{\mathbf{h}}^t \dot{\mathbf{h}}) - P_{ext} V \quad (1)$$

s_i , \mathbf{h} , G ve P_{ext} parametreleri sırasıyla skalalandırılmış koordinat, hesaplama hücresinin eksenleri, metrik tensör ve dış basıncı tanımlamaktadır.

Germe deformasyonu sürecinde nano telin eksen boyu zor, denklem (2) tarafından hesaplanmaktadır [24, 25].

$$\boldsymbol{\pi} = V^{-1} \left[\sum_{i=1}^N m_i \vartheta_i \vartheta_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{F_{ij}}{r_{ij}} \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_j \right] \quad (2)$$

Bu çalışmada model nano tel sisteminde Cu atomları başlangıç konumları olarak fcc örgü noktalarına yerleştirildi. Periyodik sınır şartları sadece x doğrultusu boyunca uygulanırken y ve z doğrultuları serbest bırakıldı. İlk hızlar Maxwell-Boltzman hız dağılımına uyum olacak şekilde rasgele belirlendi. Parçacık sayısının, hacmin ve sıcaklığın sabit tutulduğu NVT istatistik topluluğu kullanıldı. Hareket denklemlerinin sayısal çözümü Verlet algoritmasının hız formu ile yapıldı. İntegrasyon adım aralığı 5 fs olarak belirlendi. Germe deformasyonu uygulanmadan önce bütün yönelimler için model nano tel sistemi 50000 MD adımı dengeletildi. Tüm çalışma boyunca model nano tel sistemine uygulanan zorlanma oranı $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ olarak seçildi.

Model hesaplama hücresinde Cu atomları arasındaki etkileşimleri hesaplamak için GAM

potansiyel fonksiyonu kullanıldı. Potansiyel ile ilgili detaylar literatürden bulunabilir [26].

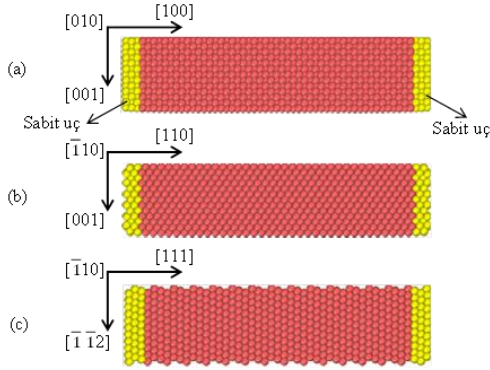
Bu çalışmada Cu nano telinin mekanik özelliklerine kristal yöneliminin etkilerini belirlemek için yüksek simetrikli $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ örgü yönelimi seçildi. Cu nano tel yapısı $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ yönelimleri için sırasıyla 4647, 4857 ve 4903 atomdan meydana gelmektedir. Nano telin x yönündeki uzunluğu 10,8 nm, y ve z yönlerinde 2,17 nm dir. Bütün çalışmalarda farklı yönelimli Cu nano teline germe deformasyonu sadece x eksen boyu zora uygulandı. Model nano tel sisteminin x-doğrultusu boyunca iki uç bölgesindeki birkaç atomik tabaka sabitlendi. Ara bölgede kalan atomların dinamik davranışına izin verildi. Deneysel çekme yöntemine uygun olması açısından sabit uçlardan biri hareketsiz tutulurken diğer uca çekme gerilmesi uygulandı.

MD çalışmalarında fcc, hcp, bcc gibi mikro yapıların belirlenmesi ve onların gelişimlerinin incelenmesi oldukça önemlidir. Bu yapıların belirlenmesi amacıyla birçok sayısal analiz yöntemi geliştirilmiştir. Bu yöntemlerin temel hedefi her bir parçacığa bir yapısal tür atamaktır. Ayrıca bu yöntemler yerel bir yapıyı idealleştirilmiş bir yapıyla eşleştirerek, ne kadar yakın olduklarını belirlemeye çalışır. MD benzetim çalışmalarında yapı karakterizasyon yöntemleri olarak merkez simetri parametre analizi (centrosymmetry parametre analysis), genel yakın komşu analizi (common neighbor analysis-CNA), bağ-yönelim analizi (bond-order analysis), bağ açısı analizi (bond-angle analysis), Honeycutt-Andersen ve Voronoi analizi oldukça sık kullanılmaktadır [27, 28]. Bu çalışmada atomik konumların görselleştirilmesi ve CNA analizi OVITO programı ile gerçekleştirildi [29].

3. Bulgular

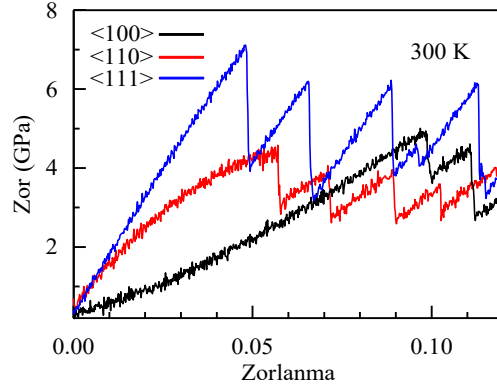
Bu çalışmada üç yüksek simetri doğrultusu boyunca atomların fcc örgü noktalarına yerleştirildiği Cu nano tel model sistemine x eksen boyu zora uygulanan gerilme deformasyonunun mekanik özellikler üzerindeki etkileri incelenmeye çalışıldı. Kristal yönelim etkilerini belirlemek için $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ üç yüksek simetri örgü yönelimi dikkate alındı. Şekil 1 de bu üç farklı kristal yönelimine sahip Cu nano tellerin başlangıç yapıları verilmiştir. Eksensel zorlanma işlemi, nano telin soldaki sabit uç hareketsiz tutularak, sağdaki sabit uç $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ zorlanma oranı ile

gerilerek uygulandı. Nano telin her iki sabit ucu ardaşık üç (100) atomik düzlemlerinde bulunan atomlardan oluşmaktadır.



Şekil 1: (a) $\langle 100 \rangle$, (b) $\langle 110 \rangle$ ve (c) $\langle 111 \rangle$ kristal yönelimine sahip Cu nano tellerinin başlangıç atomik görüntüleri. Kırmızı renkli küreler dinamik atomları, sarı renkli küreler sabit uç olarak tanımlanan hareketsiz sınır atomlarını göstermektedir.

Şekil 2 de $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ Cu nano tellerinin 300 K sıcaklık değerlerinde uygulanan eksensel zorlanmaya karşı mekanik tepkileri verilmiştir. Kristal yöneliminin bir fonksiyonu olarak Cu nano telleri elastik anizotropi davranışı sergilemektedir. Zor-zorlanma eğrisinden elastiklik modülünün, akma zorunun, plastik deformasyon davranışının kristal yönelimine kuvvetli bir şekilde bağlı olduğu açıkça görülmektedir. $\langle 100 \rangle$ ve $\langle 110 \rangle$ nano telleri için elastik deformasyonun meydana geldiği zorlanma bölgesinde sırasıyla yukarı ve aşağı yönlü bir eğrimsellik görülmektedir. Bunun aksine $\langle 111 \rangle$ nano telinin zor-zorlanma eğrisi doğrusal elastikliğe en yakın olandır. Zor-zorlanma eğrisinin elastik bölgede doğrusallıktan saparak aşağı doğru eğrisel olması elastik yumuşamanın, aynı şekilde eğrinin yukarı doğru olması elastik sertleşmenin bir göstergesidir. Elastik yumuşama ve elastik sertleşme elastik bölgede yüksek zorlanmalarda doğrusal olmayan zor-zorlanma tepkisini tanımlamada kullanılır. Burada elastiklik modülü saf elastik şartlarda beklenen değerden ya daha düşük veya daha yüksektir [19].



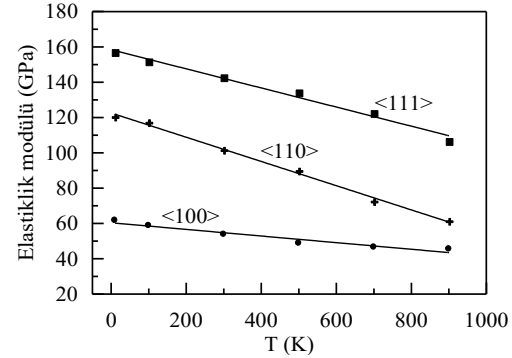
Şekil 2: Farklı kristal yönelimli nano teller için 300 K sıcaklık değerinde elde edilen zor-zorlanma eğrileri.

Şekil 2 de $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ zorlanma oranı ile x ekseninde çekilen üç kristal yönelimine sahip nano teller için zorlanmanın (ϵ) belirli bir değerine kadar zorda bir artış görülmektedir. Elastik bölge olarak bilinen bu bölgede zorlanma, $\langle 100 \rangle$ nano teli için $\epsilon=0,097$ (0,056), $\langle 110 \rangle$ nano teli için $\epsilon=0,057$ (0,041) ve $\langle 111 \rangle$ nano teli için $\epsilon=0,048$ (0,037) değerine ulaştığında zorda ani bir düşüş gözlenmektedir. Parantez içindeki ifadeler deneysel değerleri göstermektedir [18]. Zor değerinde ani düşüş başlamadan önce eğrinin maksimum değeri, plastik şekil değişiminin başladığı akma zoru olarak bilinmektedir. Zor değerindeki bu keskin azalmanın yapı içerisinde dislokasyonların çekirdeklenmesinden dolayı olduğu bilinmektedir. Daha sonra zor-zorlanma eğrisi testere dişi gibi bir görünüm sergiler. Bu değişim sebebinin çekirdeklenen dislokasyonların büyümesi ve yayılmasından dolayı olduğu söylenebilir [30]. MD benzetim çalışmasından elde edilen akma zoru değerleri $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ yönelimleri için sırasıyla 4,95 GPa (4,51 GPa), 4,45 GPa (4,15 GPa) ve 7,12 GPa (4,88 GPa) olarak belirlenmiştir [18]. Parantez içindeki ifadeler deneysel çalışmalardan elde edilen değerleri göstermektedir. Elastiklik modülü (E), elastik bölgede zor-zorlanma eğrisinin doğrusal değişiminin regresyon analizi sonucu belirlenmiştir. $\langle 100 \rangle$ nano kristali için elastiklik modülü 53,8 GPa, $\langle 110 \rangle$ nano teli için 101,6 GPa ve $\langle 111 \rangle$ nano teli için 146,2 GPa olarak tespit edilmiştir. Elastiklik modülünün $E_{\langle 111 \rangle} > E_{\langle 110 \rangle} > E_{\langle 100 \rangle}$ şeklinde farklı değerler alması E'nin kristal yönelimine kuvvetli bir

şekilde bağlılığını gösterir. $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ kristal yönelimli nano teller için elastiklik modülünün deneysel değerleri sırasıyla 80,04 GPa, 102,3 GPa ve 137,5 GPa olarak belirlenmiştir [31]. $\langle 110 \rangle$ nano teli için benzetim çalışmasından elde edilen elastiklik modülü deneysel değere oldukça yakındır. Bu karşılık $\langle 100 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ nano telleri için belirlenen sonuçlar deneysel değerlerden sapma göstermektedir. Bu tutarsızlığın sebeplerinden biri olarak termal şartlardaki farklılıklar gösterilebilir. Cu'nun elastik anizotropisi deneysel olarak elde edilen elastiklik modülünün değeri üzerinde bazı değişikliklere de sebep olabilir. Ayrıca model nano tel sistemimizde herhangi bir yapı kusurunun bulunmaması, buna karşılık deneysel olarak hazırlanan Cu nano telinde safsızlık atomları ve kusurların bulunabilme ihtimali elastiklik modülündeki bu farklılığa sebep olabilir. Bu durumlar göz önüne alındığında hesaplamalardan elde edilen elastiklik modülü değerinin kabul edilebilir sınırlar içerisinde olduğu söylenebilir. Johnson tarafından geliştirilen GAM potansiyeli kullanılarak yapılan bir çalışmada elastiklik modülü $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ nano telleri için sırasıyla 100,16 GPa, 115,69 GPa ve 164,76 GPa olarak belirlenmiştir [18]. Çalışmamızda kullanılan GAM ile elde edilen elastiklik modülünün deneysel değerlerle daha uyumlu sonuçlar ürettiği görülmektedir [31].

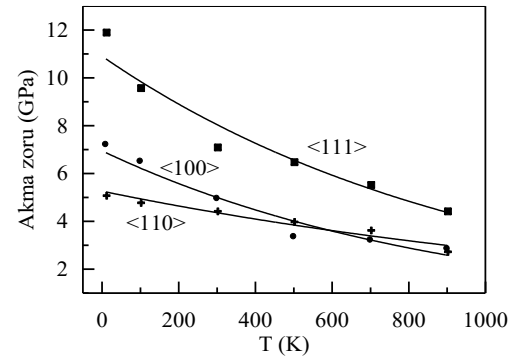
Üç farklı kristal yönelimine sahip Cu nano tel model sistemine 10 K, 100 K, 300 K, 500 K, 700 K ve 900 K sıcaklık değerlerinde germe deformasyonu uygulanarak sıcaklığın mekanik davranışlar üzerindeki etkisi belirlenmeye çalışıldı. Şekil 3'te elastiklik modülünün sıcaklıkla değişimi verilmiştir. Üç kristal yönelimi içinde elastiklik modülünün sıcaklık artışına karşı duyarlı olduğu açıkça görülmektedir. Bu değişim artan sıcaklıkla bağ kuvvetlerinde meydana gelen önemli derecede zayıflamadan kaynaklanmaktadır. Genel olarak elastiklik modülü sıcaklık artışıyla doğrusal olarak bir azalma göstermektedir. Elde ettiğimiz sonuçlardan bu değişimin her üç yönelim içinde doğrusal bir azalma sergilediği belirlenmiştir. Bu durum teorik olarak şu şekilde açıklanabilir. Elastiklik modülünün tanımına göre, denge konumuna göre potansiyelin birinci türevi elastiklik modülüne benzetilebilir. Eğer Lennard-Jones potansiyelinin birinci türevi göz önüne alınırsa kesinti süreci basitleştirilebilir ve

elastiklik modülü $1/r^c$ ile orantılıdır. Sonuç olarak sıcaklığın artması ile atom konumlarının denge mesafeleri artar. Bu durum elastiklik modülünün azalmasını etkiler. Bu nedenle hem zor-zorlanma eğrisinin değişimi hem de elastiklik modülündeki düşüş, sıcaklık artışı ile daha az kararlı kristal yapının meydana geldiğini gösterir [18].



Şekil 3: Sıcaklıkla elastiklik modülünün kristal yönelimine göre değişimi.

Şekil 4'te üç farklı kristal yönelimine sahip Cu nano telinin sıcaklıkla akma zorundaki değişimi verilmiştir. Geri döndürülemeyen şekil değişiminin başlamasını ifade eden akma zorunun sıcaklık artışı ile değişiminin doğrusal bir şekilde gerçekleşmediği görülmektedir. Sıcaklık artışı model sistemin entropisinin artmasına sebep olmuştur. Atomlar daha büyük titreşim genliklerine ve kinetik enerjiye sahiptirler. Bunun sonucu olarak enerjileri artan daha çok sayıda atom aktivasyon enerji engeli aşarak yapısal kusurların oluşumuna sebep olur. Bu da zor değerindeki azalmanın sebebi olarak verilebilir [32].

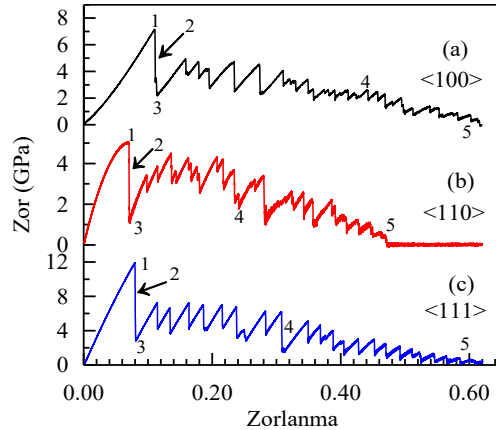


Şekil 4: Sıcaklıkla akma zorunun kristal yönelimine göre değişimi.

Farklı kristal yönelimine sahip model nano tel sistemlerinde tek eksenli gerilme sonucu meydana gelen plastik deformasyonun mekanizması OVITO programıyla görselleştirilen atomik konumlar ve Honeycutt ve Andersen tarafından önerilen CNA topolojik analiz yöntemi ile belirlenmeye çalışıldı. CNA analiz yönteminde model sistemde seçilen her referans atomu, bir atom ve en yakın komşuları arasındaki bağlar tarafından belirlenen bölgesel kristal yapılara göre sınıflandırılır. Bölgesel fcc düzenindeki atomlar fcc atomları, bölgesel bcc düzenindeki atomlar bcc atomları ve hcp düzenindeki atomlar fcc kristalinde oluşan yığılma kusuru yapılar olarak görülen hcp atomları olarak sınıflandırılırken, bu düzenlere uymayan atomlar ise "diğer" atomlar olarak adlandırılmaktadır [33].

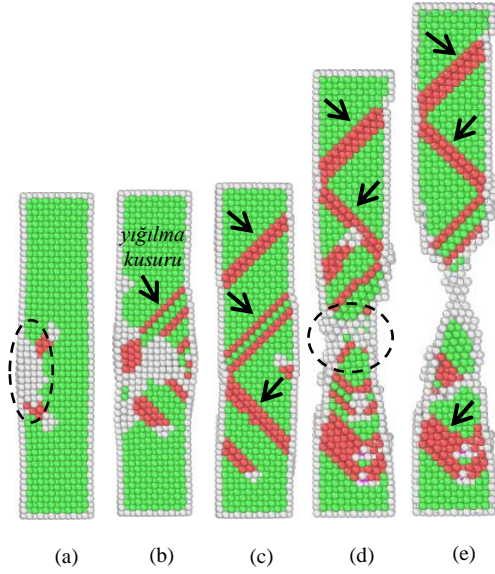
Şekil 5(a-c)'de 10 K sıcaklık değeri için üç farklı kristal yöneliminde sahip nano tel yapılarının zor-zorlanma eğrileri verilmiştir. $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ yönelimli nano tellerin sonuçlarıyla karşılaştırmak amacıyla ilk önce $\langle 100 \rangle$ Cu nano telinin plastik deformasyonunun yapısal gelişimi incelenmiştir. Şekil 5(a)'daki $\langle 100 \rangle$ kristal yönelimi için elde edilen zor-zorlanma eğrisinde akma zoru olarak bilinen 1 noktası için (100) düzlem kesitinden alınan nano telin atomik konumları Şekil 6(a) da verilmiştir. Şekilde noktalı kapalı eğrisel yüzeyle gösterilen bölgede kusursuz fcc kristal yapı içerisinde CNA analizinde "diğer" olarak adlandırılan, beyaz renkli atomlarla sembolize edilen ve herhangi bir atom türü olarak tanımlanmayan yapıların oluşumu görülmektedir. Yüzeye yakın bu bölgede zorlanmanın kritik bir değere ulaşmasıyla fcc atomlarının yeniden düzenlenmeye başlaması, dislokasyonların çekirdeklenmesinin bir göstergesi olarak ifade edilebilir. Şekil 5(a) da 2 nolu bölgeye karşılık gelen zorlanma değerine ulaşıldığında elde edilen atomik görüntüler Şekil 6(b) de verilmiştir. Artan zorlanma değeriyle birlikte tanımlanamayan atomlardan oluşan bölgenin yapı içerisinde genişlediği ve hcp atomlarından oluşan düzlemlerin meydana gelmeye başladığı görülmektedir. fcc kristalindeki atomlarının dizilim hatası olarak bilinen hcp atomları bir araya gelerek model nano tel içerisinde oklarla gösterilen bölgelerde yığılma kusurlarını oluşturmaktadır. Zorlanma değerinin artmasıyla hcp atomlarından oluşan yığılma kusuru düzlemlerinin nano telin bir ucundan diğer ucuna yayıldığı açıkça görülmektedir.

Model Cu nano tel sistemine (nano tel yapısındaki MD hesaplama hücresi) tek eksenli gerilme deformasyonu uygulanması sonucu elastik şekil değişiminin meydana geldiği zorlanma bölgesi geçilip kalıcı şekil değişiminin meydana geldiği kritik zorlanma değerine (Şekil 5(a)'da 3 noktası) ulaşıldığında fcc kristal yapı içerisinde hcp atomlarından oluşan bitişik düzlemler görülmektedir. hcp atomlarından oluşan bu düzlemler yapı içerisinde Shockley kısmi dislokasyonlarının aktif hale geçmesi sonucu oluşan yığılma kusurlarının bir göstergesi olarak ifade edilmektedir [8, 30]. Zorlanmanın artmasıyla tüm nano tel boyunca başka Shockley kısmi dislokasyonlarının çekirdeklenmesi ve yapı içerisinde yayılması yığılma kusurlarının artmasına yol açmaktadır [7]. Şekil 5(a) da 4 ve 5 numaralı noktaya karşılık gelen zorlanma değerinde elde edilen atomik konumlar Şekil 6 (d-e) de verilmiştir. Bu zorlanma değerlerine ulaşıldığında sırasıyla noktalı kapalı eğri ile gösterilen bölgede nano telin boyun verdiği ve sonrasında zorlanmanın artırılmasıyla nano telde kopmanın meydana geldiği görülmektedir.

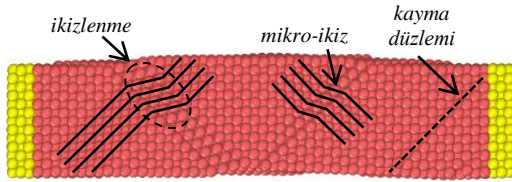


Şekil 5: Farklı kristal yönelimli nano teller için 10 K sıcaklık değerlerinde elde edilen zor-zorlanma eğrileri.

Ayrıca Şekil 7'de akma noktasında [100] doğrultusu boyunca elde edilen nano telin atomik konumları verilmiştir. Akma noktasında elde edilen bu yüzey atomlarının yerleşiminde ikizlenmeler, mikro ikizler ve kayma düzlemleri açıkça görülmektedir. Germe işlemi esnasında ikizlenme deformasyonu $\langle 100 \rangle$ nano telinin plastik deformasyonunda önemli bir rol oynamaktadır [18].



Şekil 6: $\langle 100 \rangle$ Cu nano telinin (100) düzlem kesitinden farklı zorlanma değerlerinde elde edilen atomik görüntüleri.

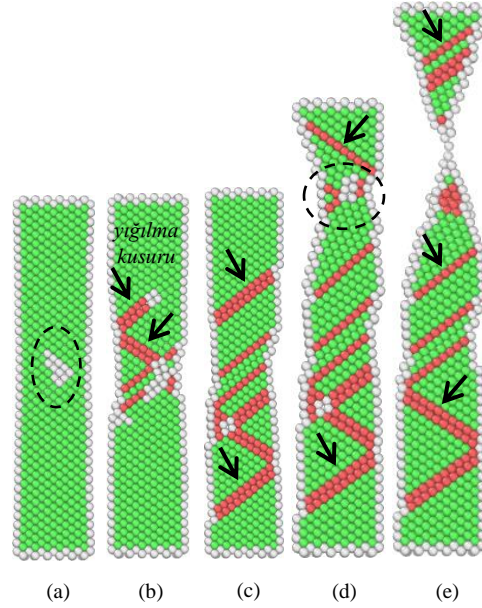


Şekil 7: Akma noktasında $\langle 100 \rangle$ Cu nano telinin [100] doğrultusu boyunca elde edilen yüzey atomik konumları.

Şekil 8'de $\langle 110 \rangle$ Cu nano telinin farklı zorlanma değerleri altında (100) düzlem kesitinden elde edilen atomik konumları verilmiştir. Şekil 8(a)'da akma zoruna karşılık gelen zorlanma değerinde (Şekil 5(b)'de 1 numara) kusursuz fcc yapının korunmadığı, yapı içerisinde beyaz renkli atomların kümelendiği bölgede ilk dislokasyon çekirdeklerinin oluşmaya başladığı söylenebilir. Şekil 8(b-c)'de, (sırasıyla Şekil 5(b) de 2 ve 3 numara) çekirdeklenen kısmi dislokasyonların $\{111\}$ kayma düzlemi boyunca nano telin kesiti boyunca zigzag çizerek ilerlediği ve bu şekilde fcc yapıda hcp atomlarından (kırmızı renkli atomlar) oluşan

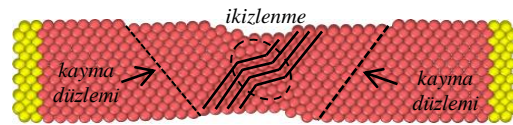
yığılma kusurlarının meydana geldiği tespit edilmiştir. Yapı içerisinde oluşan bu yığılma kusurları şekilde oklarla gösterilmiştir. Şekil 5(b)'de 4 numaralı noktaya karşılık gelen zorlanma değerinde nano telin boyun vermeye

başladığı Şekil 8(d)'de açıkça görülmektedir. Zorlanma değerinin artırılıp 5 numaralı noktaya ulaşıldığında Şekil 8(e)'de görüldüğü gibi nano tel tek bir atom teması oluştuktan sonra kopmuştur. Model nano tel yapısında boyun vermenin başladığı zorlanma değerinden kopmanın meydana geldiği zorlanma değerine kadar boyun bölgesi haricinde yeni yığılma kusurları meydana gelmemiştir.



Şekil 8: $\langle 110 \rangle$ Cu nano telinin (100) düzlem kesitinden farklı zorlanma değerlerinde elde edilen atomik görüntüleri.

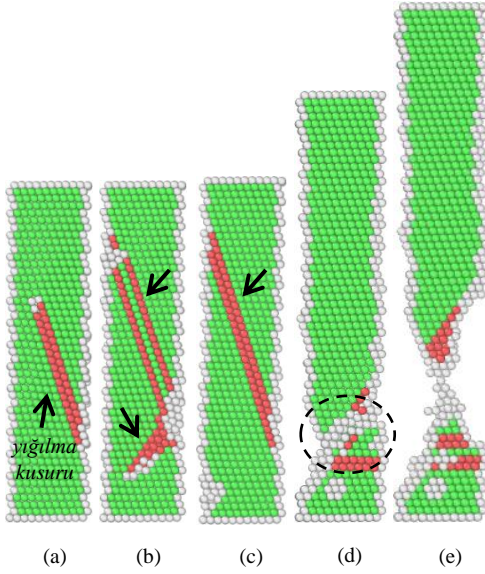
Şekil 9'da akma noktasında [100] doğrultusu boyunca nano tel yüzeyinin atomik konumları verilmiştir. Nano tel yapısının yüzeyinde ikizlenme ve kayma düzlemlerinin olduğu açıkça görülmektedir.



Şekil 9: Akma noktasında $\langle 110 \rangle$ Cu nano telinin [100] doğrultusu boyunca elde edilen atomik konumları.

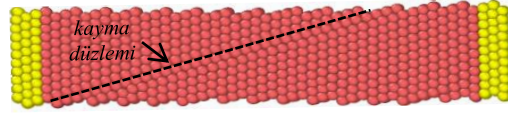
Şekil 10 (a-e)'de $\langle 111 \rangle$ Cu nano telinin gerilme deformasyonu esnasında (100) düzlem kesitinden elde edilen atomik görüntüleri verilmiştir. Şekil 10(a)'da akma noktasında

(Şekil 5 (c) de 1 numara) elde edilen atomik görüntüden plastik deformasyonun başlangıcında yapı içerisinde hcp atomlarının bir araya gelerek oluşturduğu yığılma kusur düzlemi görülmektedir. Zorlanma değeri artıp Şekil 5 (c) de sırasıyla 2 ve 3 numaralı bölgeye ulaşıldığında, “diğer” olarak adlandırılan tanımsız atomların bulunduğu yüzey bölgesinde kısmi dislokasyonların çekirdeklenmeye başladığı ve yığılma kusurlarının yapı içerisinde yayıldığı Şekil 10 (b-c)’de belirlenmiştir.



Şekil 10: <111> Cu nano telinin (100) düzlem kesitinden farklı zorlanma değerlerinde elde edilen atomik görüntüleri.

Bununla birlikte yüzeyde çekirdeklenmeye başlayan dislokasyonların yüzeyde kayma düzleminin oluşmasına yol açtığı Şekil 11 de açıkça görülmektedir. <100> ve <110> Cu nano telleriyle karşılaştırıldığında <111> nano telinin yüzeyinde herhangi bir ikizlenme deformasyonu gözlemlenmemiştir. Şekil 10(d-e) de nano tele uygulanan zorlanma değerinin artışı dislokasyon aktivitesini arttırdığından dolayı boyun bölgesi oluşmakta ve devam eden süreçte kopma gerçekleşmektedir. Nano tel boyun vermeye başladığında tanımsız atomların sayısı artmakta ve telin sünmesi ile en yüksek değerine ulaşmaktadır. Nano tel boyun vermeye başladıktan sonra kopma gerçekleşene kadar uygulanan gerilme işlemi esnasında yapı içerisinde herhangi bir yığılma kusuru gözlemlenmemiştir.



Şekil 11: Akma noktasında <111> Cu nano telinin [100] doğrultusu boyunca elde edilen atomik konumları.

4. Sonuç

Bu çalışmada $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ zorlanma oranı ile gerilme deformasyonu uygulanan Cu nano telinin mekanik davranışlarına sıcaklığın ve farklı kristal yönelimlerinin etkisi incelendi. Hem elastik hem de plastik özelliklerin kristal yöneliminden etkilendiği belirlendi. Elastiklik modülünün kristal yönelimine kuvvetli bir şekilde bağlı olduğu ve <111> Cu nano teli için en büyük değere, <100> nano teli için en küçük değere sahip olduğu tespit edildi. Ayrıca elastiklik modülünün bütün yönelimler için sıcaklıktaki artışla doğrusal bir azalma gösterdiği belirlendi. Bununla birlikte akma zorunun da kristal yönelimine bağlılık gösterdiği, buna karşılık sıcaklık artışıyla doğrusal olmayan bir azalma içerisinde olduğu görüldü. Cu nano telinde meydana gelen yapısal gelişim ve deformasyon davranışını incelemek için CNA analizi kullanıldı. <100>, <110> ve <111> yönelimleri için genel olarak plastik deformasyonun dislokasyonlar ve yığılma kusurlarının oluşumu şeklinde gerçekleştiği tespit edildi. <111> nano teli haricinde diğer nano tellerde ikiz yapıları belirlendi. <100> ve <111> nano telleri ile karşılaştırıldığında <110> nano telinin boyun bölgesinde üç atom uzunluğunda ince bir atomik zincir oluşturduktan sonra kopmanın meydana geldiği görüldü. Buna göre <110> Cu nano telinin diğer yönelimli nano tellere göre daha süneklik bir yapı gösterdiği ve çok ince nano tellerin üretilmesi için daha uygun olduğu söylenebilir.

Kaynakça

- [1] Diao, J., Gall, K., Dunn, M.L. 2004. Yield strength asymmetry in metal nanowires, Nano Lett, 4, pp. 1863-1867. doi.org/10.1021/nl0489992
- [2] Tosatti, E., Prestipino, S., Kostlmeier, S., Dal Corso, A., Di Tolla, F.D. 2001. String tension and stability of magic tip-suspended nanowires, Science, 291, pp. 288-290. doi: 10.1126/science.291.5502.288
- [3] Kondo, Y., Takayanagi, K. 1997. Gold nanobridge stabilized by surface structure, Phys. Rev. Lett. 79 (18),3455-3458. doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.3455

- [4] Pasquier, A., Unalan, H. E., Kanwal, A., Miller, S., Chhowalla, M. 2005. Conducting and transparent single-wall carbon nanotube electrodes for polymer-fullerene solar cells, *Appl. Phys. Lett.*, 87, 203511. doi.org/10.1063/1.2132065
- [5] Lee, K., Wu, Z., Chen, Z., Ren, F., Pearton, S. J., Rinzler, A. G. 2004. Single wall carbon nanotubes for p-type ohmic contacts to GaN light-emitting diode, *Nano Lett.*, 4, 911-914. doi.org/10.1021/nl0496522
- [6] Li, J., Hu, L., Wang, L., Zhou, Y., Gruner, G., Marks, T. J. 2006. Organic light-emitting diodes having carbon nanotube anodes, *Nano Lett.*, 6, 2472-2477. doi.org/10.1021/nl061616a
- [7] Sainath, G., Choudhary, B.K. 2016. Orientation dependent deformation behaviour of bcc iron nanowires, *Computational Materials Science*, 111, pp. 406-415. doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.09.055
- [8] Wen, Y.H., Zhang, Y., Wang, Q., Zheng J.C., Zhu, Z.Z. 2010. Orientation-dependent mechanical properties of Au nanowires, *Computational Materials Science*, 48, pp. 513-519. doi.org/10.1016/j.commatsci.2010.02.015
- [9] Kizuka, T. 1998. Atomistic visualization of deformation in gold, *Phys. Rev. B*, 57 (18), pp. 11158-11163. doi.org/10.1103/PhysRevB.57.11158
- [10] Tschopp, M.A., McDowell, D.L. 2007. Tension-compression asymmetry in homogeneous dislocation nucleation in single crystal copper, *Appl. Phys. Lett.*, 90, 121916. doi.org/10.1063/1.2715137
- [11] Tschopp, M.A., McDowell, D.L. 2008. Influence of single crystal orientation on homogeneous dislocation nucleation under uniaxial loading, *J. Mech. Phys. Solids*, 56, pp. 1806-1830. doi.org/10.1016/j.jmps.2007.11.012
- [12] Jing, Y., Meng, Q., Zhao, W. 2009. Molecular Dynamics simulations of the tensile and melting behaviours of silicon nanowires, *Physica E*, 41, pp. 685-689. doi.org/10.1016/j.physe.2008.11.006
- [13] Katakam, K. C., Yedla, N. 2021. Influence of orientation and temperature on the mechanical properties and deformation behavior of nickel nanowire under bending: A large scale molecular dynamics simulation, *Materials Today: Proceedings*, 39, pp. 1727-1732. doi.org/10.1016/j.matpr.2020.06.302
- [14] Jelinek, P., Perez, R., Ortega, J., Flores, F. 2003. First-principles simulations of the stretching and final breaking of Al nanowires: Mechanical properties and electrical conductance, *Phys.Rev. B.*, 68, 085403. doi.org/10.1103/PhysRevB.68.085403
- [15] Cai, J., Ye, Y.Y. 1996. Simple analytical embedded-atom-potential model including a long-range force for fcc metals and their alloys, *Phys. Rev. B*, 54, 8398. doi.org/10.1103/PhysRevB.54.8398
- [16] Tolpin, K.A., Bachurin, V.I., Yurasova, V.E. 2012. Features of energy dependence of NiPd sputtering for various ion irradiation angles, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, 273, pp. 76-79. doi.org/10.1016/j.nimb.2011.07.043
- [17] Hong, Z.H., Fang, T.H., Hwang, S.F. 2011. Phase transformation of stress-induced zinc oxide nanobelts using molecular dynamics, *Computational Materials Science*, 50, pp. 1994-1950. doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.01.049
- [18] Gao, Y., Wang, H., Zhao, J., Sun, C., Wang, F. 2011. Anisotropic and temperature effects on mechanical properties of copper nanowires under tensile loading, *Computational Materials Science*, 50, pp. 3032-3037. 10.1016/j.commatsci.2011.05.023
- [19] Zhang, L., Lu, C., Tieu, A.K. 2018. Nonlinear elastic response of single crystal Cu under uniaxial loading by molecular dynamics study, *Materials Letters*, 227, pp. 236-239. doi.org/10.1016/j.matlet.2018.05.094
- [20] Sarangi, S.S. 2021. Study on Young's modulus of metallic nanowires using classical molecular dynamics simulations, *Materials Today: Proceedings*, 41, pp. 413-415. doi.org/10.1016/j.matpr.2020.09.800
- [21] Xu, W., Kim, W.K. 2019. Molecular dynamics simulation of the uniaxial tensile test of silicon nanowires using the MEAM potential, *Mechanics of Materials*, 137, pp. 1031-1040. doi.org/10.1016/j.mechmat.2019.103140
- [22] Alian, A.R., Ju, Y., Muguid, S.A. 2019. Comprehensive atomistic modeling of copper nanowires-based surface connectors, *Materials and Design*, 175, 107812. doi.org/10.1016/j.matdes.2019.107812
- [23] <http://lammps.sandia.gov/LAMMPS> Molecular Dynamics Simulator (Erişim Tarihi:02.04.2021).
- [24] Kazanc, S. 2013. The effects on the lattice dynamical properties of the temperature and pressure in random NiPd alloy, *Can. J. Phys.*, 91 (10), pp.833-838. doi:10.1139/cjp-2013-0090
- [25] Kazanc, S., Ozgen, S., Adiguzel, O. 2003. Pressure effects on martensitic transformation under quenching process in a molecular dynamics model of NiAl alloy, *Physica B*, 334(3-4), pp. 375-381. doi:10.1016/S0921-4526(03)00101-7
- [26] Foiles, S.M., Baskes, M.I., Daw, M.S. 1986. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys, *Phys. Rev. B*, 33, pp. 7983-7993. doi.org/10.1103/PhysRevB.33.7983
- [27] Malins, A., Williams, S.R., Eggers, J., Royall, C.P. 2013. Identification of structure in condensed matter with the topological cluster classification, *The Journal of Chemical Physics*, 139, pp. 234506. doi.org/10.1063/1.4832897
- [28] Stukowski, A. 2012. Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 20, pp. 045021. doi.org/10.1088/0965-0393/20/4/045021
- [29] Stukowski, A. 2010. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(1), pp. 015012. doi:10.1088/0965-0393/18/1/015012
- [30] Wu, H.A. 2006. Molecular dynamics study of the mechanism of metal nanowires at finite temperature, *European Journal of Mechanics A/Solids*, 25, pp. 370-377. doi.org/10.1016/j.euromechsol.2005.11.008
- [31] Sanders, P.G., Eastman, J.A., Weertman J.R. 1997. Elastic and Tensile Behavior of Nanocrystalline

- Copper and Palladium, *Acta Mater.*, 45(10), pp. 4019-4025. doi:10.1016/S1359-6454(97)00092-X
- [32] Wen, Y. H., Zhu, Z. Z., Zhu, R. Z. 2008. Molecular dynamics study of the mechanical behavior of nickel nanowire: Strain rate effects, *Computational Materials Science*, 41, 553-560. doi.org/10.1016/j.commatsci.2007.05.012
- [33] Fang, R., Wang, W., Guo, L., Zhang, K., Zhang, X., Li, H. 2020. Atomic insight into the solidification of Cu melt confined in graphene Nanoslits. *Journal of Crystal Growth*, 532, 125382. doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2019.125382