

Atıf İçin: Kazanç, S. (2025). Pd Nano Teldeki Bauschinger Etkisinin Kristalografik Yönelime Bağlılığının Moleküler Dinamik Simülasyonu ile İncelenmesi. *İğdır Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi*, 15(2), 479-492.

To Cite: Kazanç, S. (2025). Investigation of the Crystallographic Orientation Dependence of the Bauschinger Effect in Pd Nanowire by Molecular Dynamics Simulation. *Journal of the Institute of Science and Technology*, 15(2), 479-492.

Pd Nano Teldeki Bauschinger Etkisinin Kristalografik Yönelime Bağlılığının Moleküler Dinamik Simülasyonu ile İncelenmesi

Sefa KAZANÇ

Öne Çıkanlar:

- Bauschinger etkisinin kristalografik yönelime bağlı olduğu belirlendi.
- Bazı kristalografik doğrultularda ters BE etkisi gözlemlendi.
- Çekme-sıkıştırma asimetrisi belirlendi.

Anahtar Kelimeler:

- Nano tel
- Kristalografik yönelim
- Bauschinger etkisi
- Moleküler dinamik

ÖZET:

Bu çalışmada, Pd atomlarının [100], [110] ve [111] kristalografik doğrultularına yerleştirilmesiyle oluşturulan nano tel model sistemlerine tek eksen doğrultusu boyunca uygulanan çekme-sıkıştırma deformasyonu sonucu oluşan Bauschinger Etkisi (BE) Moleküler Dinamik (MD) benzetim yöntemi kullanılarak incelendi. Atomlar arasındaki kuvvetlerin belirlenmesinde çok cisim etkileşimlerini içeren Gömülmüş Atom Metodu (GAM) potansiyel fonksiyonunun gradientinden yararlanıldı. Uygulanan çekme ve sıkıştırma deformasyon işlemi sonucu farklı kristalografik doğrultular boyunca elde edilen gerilim-gerinim eğrileri arasında bir asimetri olduğu tespit edildi. Model nano tel sistemlerine, akma gerilim değeri aşıldıktan sonra farklı ön-gerinim değerlerinde uygulanan yükleme (çekme), yükün kaldırılması ve ters yükleme (sıkıştırma) deformasyon işlemi sonucu oluşan Bauschinger Etkisi (BE) belirlendi. Bazı kristalografik doğrultularda ters BE etkisinin oluşumu tespit edildi. Bauschinger Stress Parametresi (BSP), BE'nin farklı kristalografik yönelimlere sahip Pd nano telleri üzerindeki etkisini tespit etmek için hesaplandı. Ayrıca nano telde deformasyon sonucu oluşan toplam ve Shockly dislokasyon yoğunlukları gerinimin farklı değerleri için hesaplandı. Yükleme esnasında dislokasyonların arttığı, yük kaldırılırken azaldığı ve ters yükleme işleminde yeniden bir artış sergilediği bütün kristalografik doğrultular için gözlemlendi.

Investigation of the Crystallographic Orientation Dependence of the Bauschinger Effect in Pd Nanowire by Molecular Dynamics Simulation

Highlights:

- It was determined that the Bauschinger effect depends on the crystallographic orientation.
- Inverse BE effect was observed in some crystallographic directions.
- Tensile-compression asymmetry was determined.

Keywords:

- Nanowire
- Crystallographic orientation
- Bauschinger effect
- Molecular Dynamics

ABSTRACT:

In this study, the Bauschinger Effect (BE), which occurs as a result of tensile-compression deformation applied along a single axis direction to nanowire model systems formed by placing Pd atoms in the [100], [110] and [111] crystallographic directions was investigated using the Molecular Dynamics (MD) simulation method. The gradient of the Embedded Atom Method (EAM) potential function, which includes many-body interactions, was used to determine the forces between atoms. It was determined that there was an asymmetry between the stress-strain curves obtained along different crystallographic directions as a result of the applied tensile and compressive deformation process. The Bauschinger Effect (BE) that occurs as a result of loading (tensile), unloading and reverse loading (compression) deformation processes applied to model nanowire systems at different pre-strain values after the yield stress value is exceeded was determined. The occurrence of reverse BE effect was detected in some crystallographic directions. Bauschinger Stress Parameter (BSP) was calculated to detect the effect of BE on Pd nanowires with different crystallographic orientations. Additionally, the total and Shockly dislocation densities resulting from deformation in the nanowire were calculated for different values of strain. It was observed for all crystallographic directions that dislocations increased during loading, decreased when the load was removed, and increased again upon reverse loading.

¹ Sefa KAZANÇ (ORCID ID: 0000-0002-8896-8571) Fırat Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi Bölümü, Elazığ, Türkiye

*Sorumlu Yazar/Corresponding Author: Sefa KAZANÇ, e-mail: skazanc@firat.edu.tr

GİRİŞ

Nano yapıli malzemeler nano teknolojinin hızlı gelişimiyle özellikle son yıllarda mikro düzeydeki optik, mekanik ve elektronik uygulamalarından dolayı büyük ilgi görmektedir (da Silva ve ark., 2001; Hasmy ve Medina, 2002; Wu ve ark., 2005; Xia ve ark., 2016; Zhan ve ark., 2014; Sainath ve Choudhary, 2015). Metalik nano tellerin uygulama aşamasında güvenilirliklerini etkileyen önemli faktörlerden biri deformasyon davranışlarıdır. Ayrıca metalik nano tellerin deformasyon mekanizmalarının detaylı bir şekilde araştırılması nano-elektromekanik sistemlerin tasarlanması ve üretilmesi açısından gereklidir. Metalik nano teller yüksek termal-elektriksel iletkenlik, yüksek esneklik, çekme mukavemeti, optik şeffaflık gibi özelliklerinden dolayı tarama mikroskobu problemleri, tanısal biyosensörler, dokunmatik sensörler, süper kapasitörler gibi cihazların tasarlanması ve geliştirilmesinde kullanılmaktadırlar (Weinberg ve Cai, 2012; Wu ve ark., 2013; Jang ve ark., 2017; Ji ve ark., 2017).

Nano tellerin termodinamik ve mekanik özelliklerine tel yapısı, uygulanan sıkıştırma-gerinim oranı, kristalografik yönelim, yüzey ve sınır şartları etki etmektedir. Deformasyon davranışının incelendiği α -Fe nano telinde, dislokasyon kayması ve ikizlenme gibi farklı mekanizmalarla oluşan plastik deformasyonun kristal yönelimine bağlı olduğu tespit edilmiştir (Sainath ve Choudhary, 2016). Au nano telindeki atomların kristalografik yöneliminin mekanik özelliklere etkisinin incelendiği bir çalışmada, yönelimin akma gerilimi, elastiklik modülü ve Schmidt faktörü üzerinde etkili olduğu, ayrıca Shockly kısmi dislokasyonların plastik deformasyonun oluşumunda önemli bir etkiye sahip olduğu tespit edilmiştir (Wen ve ark., 2010). Diano ve arkadaşları (Diao ve ark., 2004) yüzey etkili iç gerilimlerden dolayı [100] ve [110] kristalografik yönelimlerine sahip Au nano tellerinde simetrik olmayan bir akma gerinimi ve çekme-sıkıştırma esnasında farklı kayma sistemlerini MD benzetim yöntemini kullanarak gözlemlediler.

Elastik bölge sınırları içerisinde malzemeye uygulanan çekme-sıkıştırma deformasyonu sonucu gerilim-gerinim arasındaki simetrinin korunduğu bilinmektedir. 1886 yılında bu simetrinin malzemenin akma gerilimi aşıldığında bozulduğunu Bauschinger tarafından tespit edildi. Bauschinger Etkisi (BE) olarak bilinen bu durumda numuneye ileri yönde bir yükleme uygulanması sonucu meydana gelen akma gerilimi değerine karşılık, ters yükleme yönünde daha düşük bir akma gerilimi meydana gelmektedir (Mahato ve ark., 2016; Paul ve ark., 2016). BE; Al (Stoltz ve Pelloux, 1976), Cu (Pedersen ve ark., 1981), Nb (Waheed ve ark., 2017), çelik (Han ve ark., 2005) dahil olmak üzere birçok tek ve polikristal metalik malzemelerde gözlemlenir. Ancak numunede oluşan BE'nin değeri mikro yapısal özelliklerine bağlı olarak metalden metale farklılık göstermektedir. Levhaların ve çubukların düzleştirilmesi, metallerin şekillendirilmesi işlemleri gibi birçok endüstriyel uygulama BE'den etkilenir (Chun ve ark., 2002; Chun ve ark., 2002; Gui ve ark., 2015).

Atomik benzetim teknikleri, nano ölçekteki materyallerin özelliklerinin belirlenmesi ve deformasyon mekanizmalarının atomik boyuttaki ayrıntılarının tespiti için özellikle bilgisayar hesaplama yöntemlerinin gelişimi ile son derece önemli bir hale gelmiştir. Ayrıca deneysel çalışmalarda karşılaşılan zorluklara atomik benzetim yöntemleri iyi bir alternatif olmuştur (Sofiah ve ark., 2018). Modellenecek sistem için potansiyel fonksiyonunun belirlenmesi, çalışmadan elde edilecek sonuçlar üzerinde son derece önemlidir. Literatürde farklı sistemlerin modellenmesi için birçok potansiyel fonksiyonu mevcuttur. Son yıllarda GAM potansiyeli kullanılarak nano tellerin deformasyon davranışının incelendiği (Finbow ve ark., 1997; Branicio ve Rino, 2000) MD benzetim çalışmalarının yanı sıra ilk-prensip metoduyla da (Nakamura ve ark., 1999; Walsh ve ark., 2001) yapılan çalışmalar mevcuttur.

Bu çalışmada farklı kristalografik yönelimlere sahip Pd nano tellerine $1 \times 10^9 \text{s}^{-1}$ gerinim değerinde uygulanan çekme-sıkıştırma deformasyon sürecinde düşük sıcaklık (10K) ve oda sıcaklığında (300K) Bauschinger etkisi MD benzetim yöntemi ile incelendi. Nano tellerin MD benzetim çalışmalarında LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator-Büyük Ölçekli Atomic/Moleküler Kitlesel Paralel Simülatör) açık kaynak kodu kullanıldı (<http://lammps.sandia.gov>). Çekme-sıkıştırma çevrimi sonucu nano tellerde oluşan plastik deformasyon ve dislokasyon oluşumları sırasıyla OVITO (Stukowski, 2010) programındaki CNA ve DXA analiz yöntemleri ile incelendi.

MATERYAL VE METOT

Farklı kristalografik yönelimlere sahip Pd nano tellerin deformasyonu sürecinde nano tel eksen boyunca uygulanan gerilim, denklem (1) tarafından hesaplanmaktadır (Kazanc ve ark., 2003; Kazanc, 2013).

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

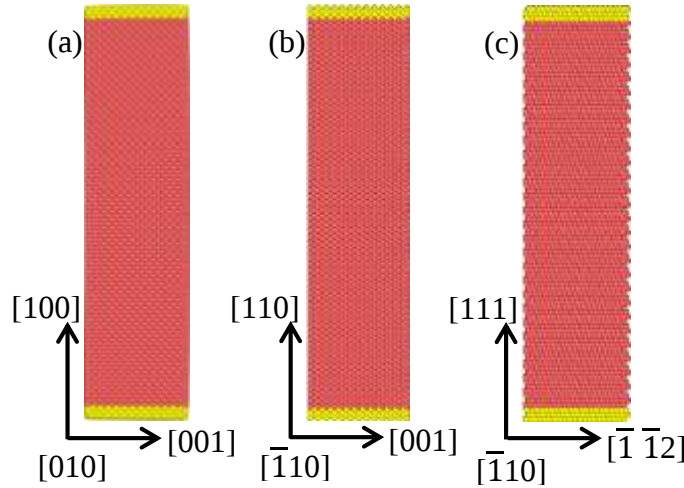
Model nano tel sisteminin kurulumunda fcc örgü noktaları Pd atomlarının başlangıç konumları olarak seçildi. Sadece x doğrultusu boyunca periyodik sınır şartları uygulanırken y ve z doğrultuları serbest bırakıldı. Atomların başlangıç yapısında ilk hızları Maxwell-Boltzman hız dağılımına uygun olacak şekilde rasgele belirlendi. Ön-gerilim değerinin sıfır olabilmesi için tüm kristalografik yönelimlere çekme-sıkıştırma işlemi uygulanmadan, model sistem NVT kanonik topluluğu kullanılarak 5×10^4 MD adımı süresince dengeye gelmesi sağlandı. Yapılan çalışmada gerinim oranı ve bir integrasyon adımı, sırasıyla $1 \times 10^9 \text{s}^{-1}$ ve 1fs olarak belirlendi. Verlet algoritmasının hız formu, modellenecek sistemin hareket denklemlerinin sayısal çözümü için seçildi. Başlangıç yapısında enerjiyi minimize etmek için konjuge gradyan algoritması kullanıldı. Pd atomları arasındaki etkileşmelerin belirlenmesi için GAM potansiyel fonksiyonundan yararlanıldı (Paul ve ark., 2016).

Bu çalışmada Pd nano tel yapıları [100], [110] ve [111] yönelimleri için sırasıyla 32187, 33583 ve 34561 atomdan meydana gelmektedir. Nano telin 30nm x yönündeki uzunluğu, 4,71nm ise y ve z yönlerindeki uzunluğudur. Bütün MD çalışmalarında deformasyon işlemleri, Pd nano telinin sadece x eksen boyunca uygulandı. Model nano telin iki uç bölgesinde birkaç atomik tabaka dinamik olarak sabit tutuldu. Bunların haricinde kalan ara bölgedeki atomların dinamik davranışına izin verildi. Deneysel çekme yöntemiyle uyumlu olması bakımından model sistemin alttaki sabit uç hareketsiz tutulurken üstteki diğer uca çekme-sıkıştırma işlemi uygulandı.

BULGULAR VE TARTIŞMA

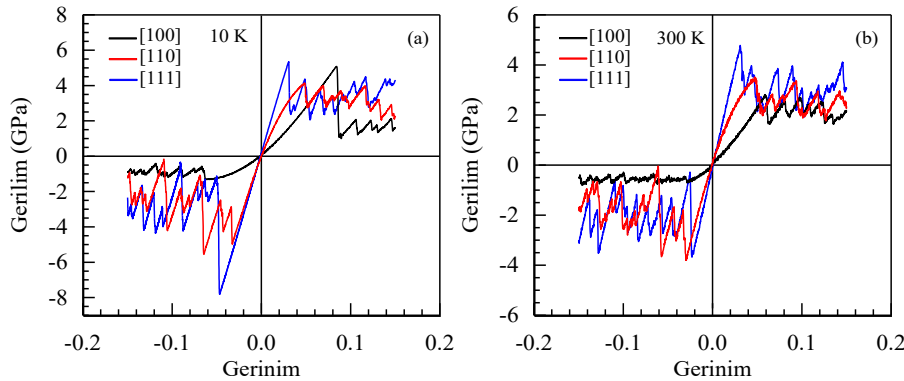
Şekil 1’de görüldüğü gibi fcc örgü noktalarına [100], [110] ve [111] yüksek simetri doğrultuları boyunca Pd atomlarının yerleştirilmesiyle nano tellerin başlangıç yapıları elde edilmiştir.

10K ve 300K sıcaklık değerleri için Pd nano teline ayrı ayrı uygulanan $1 \times 10^{10} \text{s}^{-1}$ gerinim oranı ile çekme ve sıkıştırma deformasyon işlemi sonucu farklı kristalografik doğrultular boyunca elde edilen gerilim-gerinim eğrileri sırasıyla Şekil 2(a-b)’de sunulmuştur. Kristalografik yönelimlerin, MD hesaplamaları sonucu elde edilen gerilim-gerinim eğrileri üzerinde oldukça önemli bir etkiye sahip olduğu dikkat çekmektedir. Hem çekme hem sıkıştırma işlem sürecinde gerilim-gerinim eğrilerinde gerinimin belirli bir değere ulaşmasından sonra gerilimde ani bir düşüş meydana gelerek plastik deformasyonun başladığı görülmektedir.



Şekil 1: Pd atomlarının (a) [100], (b) [110] ve (c) [111] doğrultuları boyunca yerleştirilmesiyle elde edilen nano tellerin başlangıç yapıları. Sarı ve kırmızı renkli atomlar sırasıyla dinamik davranışa izin verilmeyen ve dinamik davranışına izin verilen atomları temsil etmektedir

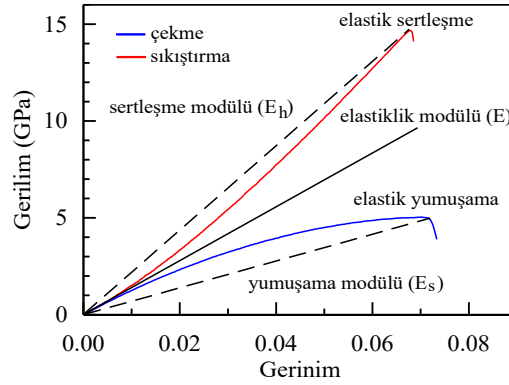
Gerilim değerinde bu ani değişimin oluşumunun, nano tel sistemindeki dislokasyonların çekirdeklenmeye başlamasından dolayı olduğu bilinmektedir (Setoodeh ve ark., 2008; Wang ve ark., 2011). Shockley kısmi dislokasyonlarının hakim olduğu kısmi dislokasyonlar, {111} kristal düzlemi boyunca hızla kayarak, gerilimde keskin bir düşüşe neden olur. En büyük gerilim değişimlerinin hem 10K hem de 300K sıcaklık değerleri için <111> nano telinde meydana geldiği ve bu kristalografik yönelimin dislokasyonların çekirdeklenmesi, büyümesi ve hareketi için nano teldeki atomların en uygun yerleşimi olduğu söylenebilir.



Şekil 2. (a) 10K ve **(b)** 300K sıcaklık değerlerinde farklı kristalografik doğrultular boyunca elde edilen gerilim-gerinim eğrileri

Farklı kristal yönelimleri için akma gerilimleri arasında önemli farklılıklar bulunmaktadır. Hem 10K hem de 300K sıcaklık değerleri için gerilim-gerinim eğrilerinin elastik bölgesi, çekme deformasyon işleminde [100] ve [110] kristalografik yönelimleri için doğrusal olmayan bir tepki gösterirken, bu durum sıkıştırma işleminde sadece [100] yöneliminde görülmektedir. Bu doğrusal olmayan tepki, farklı yükleme koşullarında elastik sertleşme ve elastik yumuşama olarak tanımlanır. Bu durum Şekil 3’de gösterilmektedir (Zhang ve ark., 2018).

10K ve 300K sıcaklıklarında [100] yönelimine sahip nano tele uygulanan çekme işleminde elastik sertleşme gözlenirken, sıkıştırma işleminde elastik yumuşama meydana gelmektedir. Kristal yöneliminin bir fonksiyonu olarak bu doğrusal olmayan elastik davranış yüksek bir anizotropi gösterir. Bununla birlikte [110] yönelimi için çekme işleminde elastik yumuşama gözlenmesine karşılık sıkıştırma işleminde elastik davranış doğrusaldır.



Şekil 3. Nano tel yapıda çekme ve sıkıştırma işleminde elastik sertleşme ve elastik yumuşama (Zhang ve ark., 2018)

[111] yönelimi için ise hem çekme hem de sıkıştırma deformasyon işlem sürecinde elastik bölge doğrusal bir değişim sergilemektedir. Doğrusal olmayan elastik davranışı niceliksel olarak tanımlamak için sertleşme modülü (E_h) ve yumuşama modülü (E_s) tanımlanmıştır. Bu parametreler akma gerilim değerinin bu değere karşılık gelen çekme veya sıkıştırma gerinim değerine bölünmesiyle elde edilir. Bu parametreler kullanılarak doğrusal olmayan indeks;

$$\Delta E = (E_{h(s)} - E) / E \quad (2)$$

ifadesi ile belirlenmiştir (Zhang ve ark., 2018). Bu ifadede pozitif değer elastik sertleşmeye, negatif değer ise elastik yumuşamaya karşılık gelir. Model sisteme uygulanan çekme ve sıkıştırma yükleri altındaki dayanıklılık (strength) farkını karşılaştırmak için, çekme-sıkıştırma asimetrisi ($\sigma_y - \sigma_r$) / σ_y formülü kullanıldı (Zhou ve ark., 2022). Gerilim-gerinim eğrisinde çekme yönündeki akma gerilimi (σ_y) ve sıkıştırma yönündeki akma gerilimi (σ_r) olarak ifade edilmektedir. Farklı kristalografik doğrultular için çekme ve sıkıştırma deformasyon işlemi sonucu akma gerilimi, sertleşme ve yumuşama modülleri, doğrusal olmayan indeks ve akma asimetrisi Tablo 1’de verilmiştir.

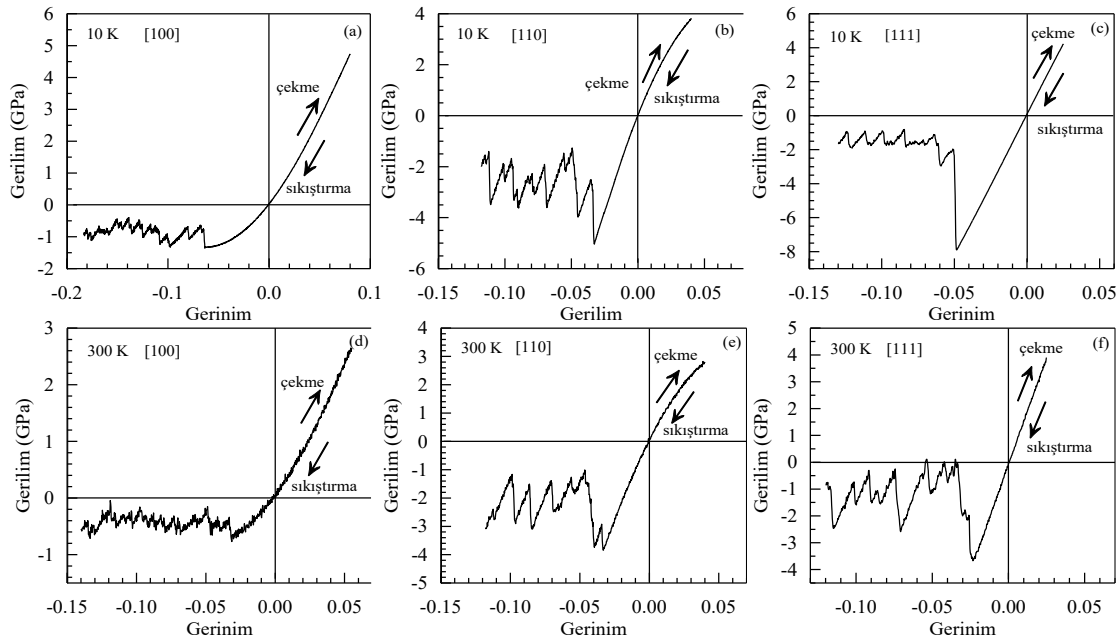
Tablo 1. Pd nano telinin çekme-sıkıştırma akma gerilimleri ve asimetrisi

T (K)	yönelim	çekme			sıkıştırma				
		E (GPa)	E_h veya E_s (GPa)	ΔE	σ_y (GPa)	E_h veya E_s (GPa)	ΔE	σ_r (GPa)	asimetri (%)
10	[100]	46.9	60.9	29.8%	5.12	21.4	-54.4%	1.35	73.6
	[110]	119.3	84.7	-29.0%	4.15	157.5	32.0%	5.04	-21.4
	[111]	173.5	173.2	-0.17%	5.37	163.3	-5.87%	7.84	-45.9
300	[100]	37.7	47.8	26.8%	2.82	25.5	-32.3%	0.74	73.7
	[110]	103.6	73.1	-29.4%	3.58	127.6	23.1%	3.83	-6.9
	[111]	159.1	150.3	-5.5%	4.81	154.6	-2.82%	3.71	22.8

Her üç kristalografik yönelime sahip nano teller içinde çekme ve sıkıştırma deformasyonu, tellerdeki serbest yüzey etkileriyle ilişkili olarak mekanik özelliklerde bir asimetri göstermektedir. 10 K için $\langle 100 \rangle$ nano tel sistemine uygulanan çekme işlemi sonucu $\sigma_y = 5.12$ GPa iken bu değer sıkıştırma işleminde $\sigma_r = 1,35$ GPa olarak belirlenmiştir. Bununla birlikte [110] ve [111] nano telleri için ise bu durum tam tersidir ($\sigma_r > \sigma_y$). 300K değeri için ise [100] ve [111] yönelimlerinde $\sigma_y > \sigma_r$ dir. Ayrıca her iki sıcaklık değeri ve farklı yönelimler için gerilim-gerinim eğrisi zik-zak şeklinde değişim sergilemektedir. Yapı içerisinde çekirdeklenen dislokasyonların büyümesi ve yayılmasının bu değişimden kaynaklandığı söylenebilir (Wu, 2006; Setoodeh ve Attariani, 2008). Hem çekme hem de sıkıştırma akma gerilimleri eşitse malzeme izotropik bir şekilde davranış sergiler. $\langle 100 \rangle$ nano telinin çekme-sıkıştırma asimetre yüzdesinin, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ nano tellerinin asimetri yüzdesinden daha yüksek bir değerde olduğu Tablo 1’de açıkça görülmektedir. Sıcaklık artışı [100] yönelimi için asimetride bir değişime sebep olmazken diğer yönelimlerde önemli bir düşüş görülmektedir.

10 K sıcaklığında çekme deformasyon işleminde [100] ve [110] yönelimleri için ΔE 'nin mutlak değerleri birbirine yakın yüzdelere sahiptir. Nano tel yapı [100] yönelimi için elastik sertleşme gösterirken, [110] yönelimi için elastik yumuşama meydana gelmiştir. Bununla birlikte [111] yönelimi için düşük yüzdede bir elastik yumuşama görülmektedir. Nano tele uygulanan sıkıştırma işleminde [100] ve [110] yönelimleri için çekme işleminde elde edilen sonuçların tersi bir durum görülürken, [111] yönelimi için ise çekme işleminde olduğu gibi elastik yumuşama durumu devam etmektedir. 300 K sıcaklık değeri için elastik yumuşama ve elastik sertleşme durumları 10 K sıcaklığında olduğu gibi aynı niteliksel değişimi göstermektedir. Ayrıca ΔE ve asimetri arasında bir korelasyon görülmemektedir.

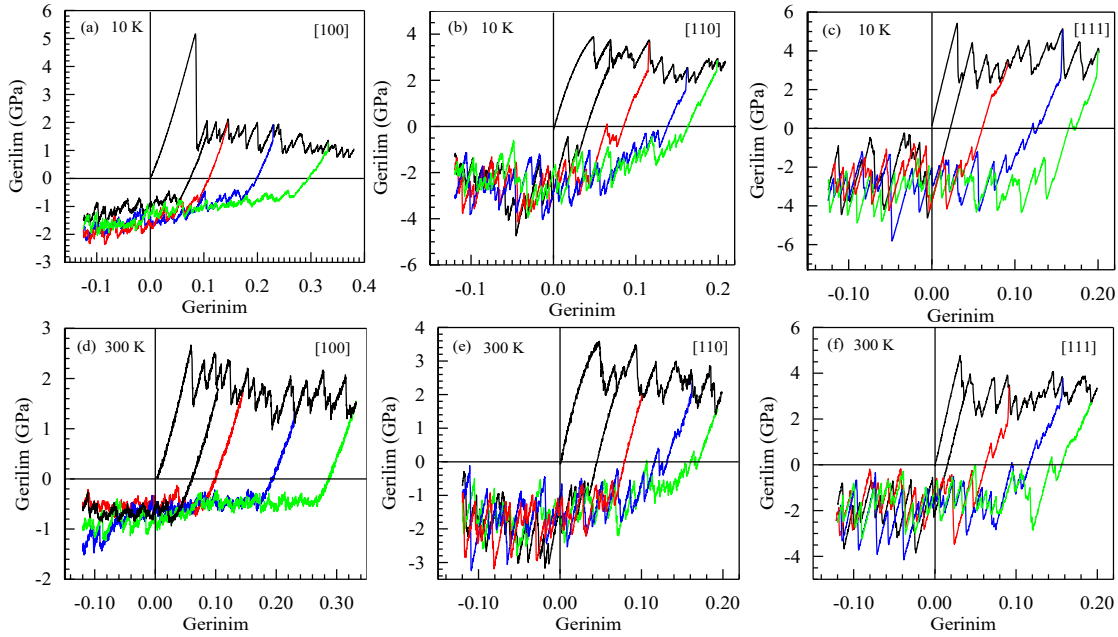
10K ve 300K sıcaklık değerlerinde üç farklı kristalografik yönelime sahip Pd nano tellerine elastik sınırlar içerisinde uygulanan çekme-sıkıştırma deformasyon işlemi sonucu elde edilen gerilim-gerinim eğrileri Şekil 4(a-f)'de verilmiştir. İlk olarak Şekil 4(a)'da görüldüğü gibi [100] nano teli elastik bölge sınırları içerisinde 0.08 gerinim değerine kadar çekme işlemine tabi tutuldu. Bu gerinim değerine ulaşıldıktan sonra uygulanan yük kaldırılarak sıkıştırma işlemi gerçekleştirildi. Sıkıştırma akma gerilimi 1,35 GPa olarak belirlendi. Bu değer Şekil 2(a)'da verilen orijinal sıkıştırma akma gerilimi ile aynı değerdir. Aynı işlemler Şekil 4(b-f)'de görüldüğü gibi 10 K sıcaklığı için [110] ve [111] yönelime sahip nano teller ve 300K için [100], [110] ve [111] yönelimlerine sahip nano tellerin elastik bölge sınırları için de uygulandı. Elde edilen sıkıştırma akma gerilimleri orijinal sıkıştırma akma gerilimleri ile aynı değerde bulundu. Bu durumda düşük ve oda sıcaklık değerlerindeki farklı yönelime sahip nano tel sistemlerinde, nano teller plastik olarak deforme olmadığından BE gözlenmediği söylenebilir.



Şekil 4. Farklı yönelim ve sıcaklık değerleri için elastik bölge sınırları içerisinde uygulanan çekme-sıkıştırma işlemi sonucu elde edilen gerilim-gerinim eğrileri

Plastik deformasyona maruz kalan metallerin verdiği mekanik tepki sadece mevcut gerilim durumuna değil, aynı zamanda deformasyon geçmişlerine de bağlıdır. Bu geçmiş, sünek bir malzemede çekme ve sıkıştırma akma gerilimi arasında meydana gelen fark şeklinde görülebilir (Jordon ve ark., 2007). Deformasyon geçmişine bağlı olan BE'yi belirlemek için Şekil 5(a-b)'de görüldüğü gibi 10K ve 300K sıcaklıklarında farklı kristalografik yönelimlere sahip nano tellere

uygulanan çekme yüklemesi sonucu plastik deformasyon meydana gelmeye başladıktan sonra rasgele belirlenen farklı ön gerinim değerlerinde uygulanan yük kaldırılmış ve sonrasında ters yükleme (sıkıştırma) işlemi uygulanmıştır. Şekil 5'(a) da görüldüğü gibi 10K sıcaklığında [100] nano teline ayrı ayrı 0.16, 0.145, 0.23 ve 0.33 ön gerinim değerlerine kadar çekme deformasyonu uygulandı. Bu değerlere ulaşıldıktan sonra yük kaldırılarak ters yükleme işlemi gerçekleştirildi. Aynı işlemler Şekil 5(b-f)'de görüldüğü gibi diğer sıcaklık ve kristalografik yönelime sahip nano teller içinde farklı ön-gerinim değerlerinde yapıldı.



Şekil 5. Farklı kristalografik yönelim ve sıcaklık değerlerinde farklı ön-gerinim değerleri için elde edilen gerilim-gerinim eğrileri

BE iki farklı mekanizma ile açıklanmaya çalışılmıştır. İlki numuneye uygulanan çekme işlemi sonucu oluşan plastik deformasyon sırasında dislokasyonların yapı içerisindeki çeşitli engellerle karşılaşarak buralarda birikmesi, hem uzun menzilli hem de kısa menzilli etkileşimler üretmesi ve bunun sonucunda dislokasyon yığınlarının oluşmasıdır. Bu durum numunede ters yükleme, dislokasyon hareketine yardımcı olan geri gerilimi (back stress) geliştirir. İkinci mekanizmada ise numuneye uygulanan yükleme yönü tersine çevrildiğinde zıt işaretli dislokasyonlar üretilir. Bu dislokasyonların birbirini çekmesi sonucu dislokasyonların yok olması gerçekleşir. Gerilim sertleşmesi dislokasyon yoğunluğu ile ilişkili olduğundan dislokasyon sayısının azalması mukavemeti azaltmaktadır. Sonuç, sıkıştırma akma dayanımının çekme akma dayanımından daha küçük olmasıdır (Abel ve Muir, 1972; Brown, 1977). Bununla birlikte Bauschinger etkisi tane sınırları, ikizlenmeler, fazlar arası sınırlar, ikinci fazlar gibi birçok faktörden etkilenir (Zhu ve ark., 2013).

Bauschinger etkisinin büyüklüğünü ölçmek için birçok farklı tanım kullanılmıştır. Bauschinger etkisi, gerilim-gerinim eğrilerinden niteliksel olarak gözlemlenebilir. Nano boyuttaki benzetim çalışmaları için BE'yi niceliksel olarak açıklamak amacıyla Abel, Bauschinger Stress Parametresi (BSP) olarak adlandırılan ön-gerilimin bir fonksiyonu olan bir parametre tanıttı (Abel, 1987; Horstemeyer, 1998). BSP, ileri ön gerilim seviyesinden ters akma gerilimine kadar gerilimdeki göreceli azalmayı tanımlar. Bununla birlikte Caceres ve ark. BSP'nin, parçacıkların matris içindeki dislokasyonlar üzerinde uyguladıkları geri gerilim miktarını ölçen bir parametre olduğunu ifade ettiler

(Caceres ve ark; 1996). σ_f , çekme yönündeki ön gerinim akma gerilimi, σ_r sıkıştırma yönündeki ön gerinim akma gerilimi olmak üzere;

$$BSP = \frac{|\sigma_f| - |\sigma_r|}{|\sigma_f|} \quad (3)$$

şeklinde belirlenir (Mahato ve ark., 2016).

10K, 300K sıcaklıkları ve üç farklı kristalografik yönelim için farklı ön gerinime (ε) sahip Pd nano tellerinin σ_f , σ_r , σ_r / σ_f ve hesaplanan BSP değerleri Tablo 2’de verilmiştir. Numuneye uygulanan yükleme, yükün kaldırılması ve ters yükleme işlemleri sonucu $\sigma_r / \sigma_f < 1$ ve $\sigma_r / \sigma_f > 1$ durumları sırasıyla BE ve ters BE etkisine karşılık gelmektedir.

Tablo 2. Farklı sıcaklık ve yönelimlere sahip Pd nano telinde farklı ön-gerinimler için BSP değerleri

T (K)	Yönelim	ε	σ_f (GPa)	σ_r (GPa)	σ_r / σ_f	BSP
10	[100]	0.106	2.08	-0.95	0.45	0.54
		0.145	2.05	-0.88	0.43	0.57
		0.230	1.98	-0.80	0.40	0.59
		0.332	1.35	-0.69	0.51	0.48
	[110]	0.069	3.78	-1.31	0.34	0.65
		0.116	3.76	-0.90	0.24	0.76
		0.162	2.58	-0.92	0.35	0.64
		0.200	2.93	-0.69	0.23	0.76
	[111]	0.037	2.51	-4.68	1.86	-0.86
		0.091	3.50	-1.70	0.48	0.51
		0.157	5.18	-0.31	0.06	0.94
		0.200	4.12	-0.16	0.04	0.96
300	[100]	0.106	1.81	-0.94	0.52	0.48
		0.145	1.76	-0.65	0.37	0.63
		0.230	1.36	-0.61	0.44	0.55
		0.332	1.54	-0.56	0.36	0.64
	[110]	0.069	2.25	-1.09	0.48	0.51
		0.116	2.10	-1.29	0.61	0.38
		0.162	2.39	-0.41	0.17	0.82
		0.200	1.61	-0.24	0.15	0.85
	[111]	0.037	3.24	-2.31	0.71	0.28
		0.091	3.49	-1.87	0.53	0.46
		0.157	3.88	-1.09	0.28	0.72
		0.200	2.73	-0.68	0.29	0.75

10 K sıcaklığında [100] nano teli için ön gerinim değeri arttıkça BSP’nin arttığı ve nano telde daha güçlü bir BE oluştuğu görülmektedir. Numuneye uygulanan çekme işleminin tanımlandığı ön-gerinim değerlerindeki artışın, malzemede plastik deformasyonun artışına ve bunun sonucunda σ_f ve σ_r değerleri arasındaki farkın artmasına neden olacağı ve bunda bu kristalografik yönelim için bir BE etkisi oluşmasına sebep olduğu düşünülmektedir (Kazanc ve Aksu, 2024). Nano ölçekteki birçok fcc metalde oda sıcaklığında deformasyon; yığılım kusurlarının oluşumu ve yığılım kusurları ile ilişkili kısmi dislokasyonların hareketi ile sağlanır (Prinz ve Argon, 1980; Rzychoń ve Rodak; 2007). Setoodah ve ark. daha büyük bir ön-gerinim değerinin malzemede daha yüksek dislokasyon yoğunluğuna neden olduğu ve dolayısıyla ters yönde daha düşük bir akma dayanımına yol açtığını buldular (Setoodah ve Attariani, 2008). Ayrıca çekme deformasyonu altında oluşan dislokasyonların, sıkıştırma deformasyonu altında kayma olasılığı daha yüksek olduğundan bu erken akmaya neden olur. $\sigma_f = \sigma_r$ durumuna karşılık gelen ve plastik deformasyonla bir malzemenin akma yüzeyinin genişlemesi olarak ifade edilen izotropik sertleşmeden, [100] nano telinin artan ön-gerinim ile uzaklaştığı

söylenbilir (Jordon ve ark., 2007). Bununla birlikte 0,33 ön-geriniminde numunede BSP'nin azaldığı tespit edilmiştir. İleri ön-gerinim miktarındaki artışla birlikte daha fazla dislokasyon etkileşimi ve daha kararlı dislokasyon yapısının olası oluşumu nedeniyle hareketli dislokasyon sayısı azalabilir (Novak ve Sittner, 1990). Bu nedenle ön-gerinim miktarının artmasıyla malzemede mevcut olan hareketli dislokasyonların sayısına bağlı olarak geri gerilim belirli bir ön-gerinim düzeyine kadar artmakta ve daha sonra azalmakta veya doygun hale gelmektedir (Han ve ark., 2012; Sohn ve ark., 2013; De ve ark., 2013, Kazanc ve Aksu, 2024).

10 K'da [110] nano telinde her bir ön-gerinim için σ_f değerlerinin σ_r den büyük olduğu ve BE'nin oluştuğu görülmektedir. Bununla birlikte BSP'de önemli bir değişim meydana gelmemektedir. [111] kristalografik yöneliminde uygulanan en düşük ön-gerinim olan 0.037 değerinde $\sigma_r / \sigma_f > 1$ olduğundan nano telin ters BE davranışı sergilediği söylenebilir. Sıkıştırma deformasyonu altında oluşan ikiz yapılar dislokasyonların hareketini engeller, bu da sıkıştırma akma geriliminin çekme akma geriliminden daha büyük olmasına neden olur ve ters BE ortaya çıkar (Zhou ve ark., 2022). Numuneye uygulanan diğer ön-gerinim değerlerinde ise Tablo 2'de görüldüğü gibi BSP'deki artış daha büyük bir BE'nin oluşumunu sağlamaktadır.

[100] kristalografik yönelimi için 300K sıcaklığında elde edilen BSP değerleri 10K sıcaklığı için elde edilen değerlerle karşılaştırıldığında çok büyük bir değişimin oluşmadığı görülmektedir. Buna karşılık 10 K'da en yüksek ön-gerinimde en düşük değerde olan BSP, 300 K sıcaklığında en yüksek değerine ulaşmıştır. Sıcaklık artışının bu kristalografik yönelim için nano telde önemli bir BE değişimine sebep olmadığı söylenebilir. Nano tele uygulanan çekme işlemi sonucu plastik deformasyonun meydana gelmesini sağlayan dislokasyonların, sıcaklığın yükselmesiyle daha kolay kaymasından dolayı düşük sıcaklıktaki değerlere göre daha düşük çekme ve sıkıştırma akma değerlerine neden olduğu düşünülmektedir. [110] kristalografik yönelimine sahip nano telde 300K sıcaklığında BE'nin 10K sıcaklığıyla karşılaştırıldığında düşük ön-gerinimlerde (0,069 ve 0,116) düşük, yüksek ön-gerinimlerde (0,162 ve 0,2) daha büyük bir değerde olduğu Tablo 2'de BSP'den görülmektedir. Sıcaklık artışının bu kristalografik yönelimde özellikle yüksek ön-gerinim değerlerinde daha büyük BE oluşumuna neden olduğu söylenebilir. [111] yönelimine sahip nano telde ön-gerinim değerinin artması BSP değerinin artmasına ve dolayısıyla yüksek bir BE'ye neden olmaktadır. Bununla birlikte düşük sıcaklıktaki BSP değerlerinin oda sıcaklığındaki BSP değerlerinden yüksek olması bu yönelim için sıcaklık artışının BE'nin azalmasına neden olduğunu göstermektedir. Birçok fcc metalde özellikle nano ölçekli kristallerde oda sıcaklığında deformasyon, yığılma kusurlarının oluşumu ve yığılma kusurları ile ilişkili kısmi dislokasyonların hareketi ile sağlanır (Prinz ve Argon, 1980).

Tablo 3'de üç kristalografik yönelim için 10 K ve 300 K sıcaklıklarında Pd nano tele uygulanan yükleme, yükü kaldırma ve ters yükleme süreci boyunca oluşan toplam ve Shockley dislokasyon yoğunlukları verilmiştir. 10 K sıcaklık değerinde nano tele uygulanan çekme işlemi sonucu toplam ve Shockly dislokasyonlarının arttığı, yükleme işleminin kaldırılması sonucunda ise dislokasyon yoğunluklarının azaldığı bütün yönelimler için görülmektedir. Ters yükleme işleminde ise dislokasyon yoğunluklarında yeniden bir artış belirlenmiştir. Aynı değişim 300 K sıcaklığında da meydana gelmektedir. Bununla birlikte sıcaklık artışı bütün yönelimler için dislokasyon yoğunluğunda bir azalmaya neden olmuştur. Sadece [100] yönelimi için yükün kaldırılması esnasında toplam ve Shockly dislokasyon yoğunluklarında bir artış tespit edilmiştir.

Pd nano teline uygulanan yükleme, yükü kaldırma ve ters yükleme deformasyon işlemleri sonucu DXA analiz yöntemi ile dislokasyon gelişimleri Şekil 6'da görüldüğü gibi 0,332 ön gerinim

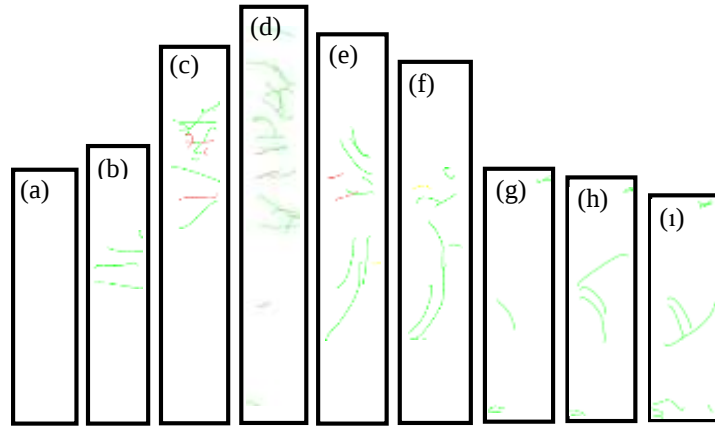
değeri için 10 K sıcaklığında belirlenmeye çalışıldı. Şekil 6(a-d) numuneye çekme deformasyon işleminin uygulandığı yükleme durumuna karşılık gelmektedir. Şekil 6(a)'da $\varepsilon=0$ gerinim değerinde ve elastik deformasyon sırasında herhangi bir dislokasyon aktivitesi görülmemektedir. Uygulanan gerinim arttıkça gerilim değeri de artmaktadır. Gerinim değeri $\varepsilon=0.09$ 'e ulaştığında, plastik deformasyonun başlamasıyla birlikte dislokasyonların oluşumu ve artan gerinim değeri ile gelişimi Şekil 6(b-c)'de açıkça görülmektedir.

Tablo 3. Yükleme, yükü kaldırma ve ters yükleme süreci boyunca nano telde oluşan toplam ve Shockly dislokasyon yoğunlukları

[100]	Gerinim	Toplam dislokasyon		Shockly dislokasyon	
		10 K	300 K	10 K	300 K
yükleme	0.11	0.019	0.024	0.019	0.013
	0.20	0.047	0.035	0.035	0.011
	0.33	0.092	0.049	0.084	0.034
Yükü kaldırma	0.23	0.046	0.016	0.040	0.008
	0.17	0.037	0.049	0.034	0.015
	0.00	0.010	0.051	0.010	0.033
Ters yükleme	-0.035	0.019	0.054	0.019	0.044
	-0.090	0.026	0.063	0.026	0.047
[110]	Gerinim	Toplam dislokasyon		Shockly dislokasyon	
		10 K	300 K	10 K	300 K
yükleme	0.08	0.006	0.004	0.006	0.002
	0.15	0.012	0.005	0.006	0.005
	0.20	0.014	0.009	0.008	0.002
Yükü kaldırma	0.15	0.010	0.007	0.004	0.001
	0.04	0.007	0.002	0.007	0.00
	0.00	0.005	0.001	0.00	0.001
Ters yükleme	-0.05	0.006	0.006	0.006	0.00
	-0.10	0.004	0.010	0.004	0.001
[111]	Gerinim	Toplam dislokasyon		Shockly dislokasyon	
		10 K	300 K	10 K	300 K
yükleme	0.08	0.024	0.015	0.020	0.015
	0.15	0.060	0.031	0.037	0.020
	0.20	0.063	0.033	0.053	0.032
Yükü kaldırma	0.05	0.044	0.027	0.032	0.016
	0.01	0.039	0.027	0.027	0.018
	0.00	0.033	0.017	0.023	0.013
Ters yükleme	-0.10	0.037	0.030	0.024	0.025
	-0.15	0.038	0.029	0.023	0.022

Bununla birlikte ön-gerinim $\varepsilon=0.332$ olduğunda Şekil 6(d)'de görüldüğü gibi nano telde yoğun bir dislokasyon yapısı oluşmaktadır. DXA analizinde yeşil renkli çizgiler $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley kısmi dislokasyonlarını, kırmızı renkli çizgiler “diğer” olarak ifade edilen dislokasyonları, pembe renkli çizgiler $1/6\langle 110 \rangle$ Stair-rod dislokasyonları ve sarı renkli çizgiler ise $1/3\langle 100 \rangle$ Hirth dislokasyonlarını temsil etmektedir. Tablo 3'den numuneye uygulanan çekme işlemi (yükleme) esnasında hem toplam hem de Shockley kısmi dislokasyon yoğunluklarındaki bu artış görülmektedir. Dislokasyon yoğunlukları dislokasyon çizgi uzunluklarının model sistem hacmine oranlanması sonucu hesaplanmaktadır. Shockly dislokasyonları hareketli dislokasyonlardır. Buna karşılık yapı içerisinde oluşan Shockley dislokasyonları hariç, kalan dislokasyon türleri ise yerleşiklerdir.

Hareketsizliklerinden dolayı yerleşik dislokasyonlar deformasyon ilerledikçe kayan Shockley kısmi dislokasyonlarına karşı bir engel oluşturmaktadırlar. Dislokasyonların engellenmesi, malzemeleri güçlendiren ve akma gerilimini artıran, uygulanan gerinime karşı bir iç gerilim geliştirir. Ön yüklemeden sonra yükün kaldırılması işlemi sonucu yapı içerisinde dislokasyonların gelişimi Şekil 6(e-g)'de verilmiştir. Yükün kaldırılması işlemi esnasında dislokasyon yoğunluğunun azalması Tablo 3'ten de görülmektedir. Dislokasyon yoğunluğu yükün kaldırılmasıyla $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley kısmi dislokasyonunun küçülmesi ve devam eden süreçte yok olması nedeniyle azalır (Ashutosh ve Surajit, 2023). Dislokasyon yok olmasında zıt işaretli dislokasyonlar etkileşime girmek için birbirine yaklaşır ve etkileşimden sonra kaybolur. Dislokasyon yoğunluğunun azalması yükün kaldırılıp $\epsilon=0$ değerine ulaşana kadar devam eder. Azaltılmış dislokasyon yoğunluğu nano tel Pd'de BE'ye neden olan gerilimin tersine çevrilmesiyle yumuşama etkisi üretir. Bununla birlikte ters yükleme deformasyon işlemi sırasında dislokasyon yoğunluklarındaki artış, hem Şekil 6(h-i)'da hem de Tablo 3'te açıkça görülmektedir.



Şekil 6: [100] yönelimi için 10 K sıcaklığında 0.332 ön-gerinim değeri için dislokasyonlar

SONUÇ

Bu çalışmada GAM potansiyel fonksiyonu ile modellenen, farklı kristalografik yönelime sahip Pd nano tellerine uygulanan tek eksenli çekme-sıkıştırma deformasyonu sonucu oluşan BE, MD benzetimi ile incelendi. Kristalografik yönelimler, hesaplamalar sonucu elde edilen gerilim-gerinim eğrileri üzerinde oldukça önemli bir etkiye sahiptir. Üç farklı atomik yönelime sahip Pd nano telleri için 10 K ve 300 K sıcaklıkları altında çekme-sıkıştırma asimetrisinin varlığı belirlendi. $\langle 100 \rangle$ nano telinin çekme sıkıştırma asimetre yüzdesinin, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ nano tellerinden daha belirgin olduğu tespit edildi. Sıcaklık artışı [100] yönelimi için asimetride bir değişime sebep olmamakla birlikte diğer yönelimlerde önemli bir düşüş görülmektedir. Farklı kristalografik yönelimlere sahip Pd nano telinde BE'si çok açık bir şekilde görüldü. BE'nin sonuçları nano malzemelerin nano ölçekte şekillendirilme süreçlerinde önemlidir.

Çıkar Çatışması

Makale tek yazarlı olup, yazar/yazarlar aralarında herhangi bir çıkar çatışması olmadığını beyan ederler.

KAYNAKLAR

- Abel, A., Muir, H. (1972). The Bauschinger effect and discontinuous yielding. *Phil Mag.*, 26, 489–504.
- Abel, A. (1987). Historical perspectives and some of the main features of the Bauschinger effect. *Mater. Forum*, 10(1), 11–26.
- Ashutosh, R., Surajit K. P. (2023). Influence of hard inclusion on Bauschinger effect and cyclic deformation behavior: an atomistic simulation on single-crystal and polycrystal aluminum, *Materials Today Communications* 34, 105126.
- Branicio, P. S., Rino, J. P. (2000). Large Deformation and Amorphization of Ni Nanowires under Uniaxial Strain: A Molecular Dynamics Study. *Physical Review B*, 62, 16950–16955.
- Brown, L.M. (1977). Orowan's explanation of the Bauschinger effect. *Scr Metall*, 11, 127–131.
- Zhu, D., Zhang, H., Li, D.Y. (2013). Influence of Nanotwin Boundary on the Bauschinger's Effect in Cu: A Molecular Dynamics Simulation Study. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 44A, 4207-4217.
- Caceres, C.H., Griffiths, J.R., Reiner, P. (1996). Influence of microstructure on the Bauschinger effect in an Al Si–Mg alloy. *Acta Metall.*, 44, 15–23.
- Chun, B.K., Kim, H.Y., Lee, J.K. (2002). Modeling the Bauschinger effect for sheet metals, part II: applications. *Int. J. Plast.*, 18, 597–616.
- Chun, B.K., Jinn, J.T., Lee, J.K. (2002) Modeling the Bauschinger effect for sheet metals, part I: theory, *Int. J. Plast.*, 18, 571–595.
- da Silva, E. Z., da Silva, A. J. R. and Fazzio, A. (2001). How Do Gold Nanowires Break?. *Physical Review Letters*, 87, 256102.
- De, P.S., Kundu, A., Chakraborti, P.C. (2013). Effect of prestrain on tensile properties and ratcheting behavior of Ti-stabilised interstitial free steel. *Mat Des.*, 87–97.
- Diao, J., Gall, K., Dunn, M.L. (2004). Yield strength asymmetry in metal nanowires, *Nano Lett*, 4, 1863-1867.
- Finbow, G. M., Lynden-Bell, R. M., McDonald, I. R. (1997). Atomistic simulation of the stretching of nanoscale metal wires. *Molecular Physics*, 92, 705–714.
- Gui, H.L., Li, Q., Huang, Q.X. (2015). The influence of Bauschinger effect in straightening process. *Math. Probl. Eng*, 2015, 1-5.
- Han, K., Van, T.C.J., Levy, B.S. (2005). Effect of strain and strain rate on the bauschinger effect response of three different steels. *Metall Mater Trans A*, 36, 2379-2384.
- Han, S.Y., Sohn, S.S., Shin, S.Y., Bae, J.H., Kim, H.S., Lee, S. (2012) Effect of microstructure and yield ratio on strain hardening and Bauschinger effect in two API X80 linepipe steels. *Mat Sci Engg A*, 551, 192–199.
- Hasmy, A. and Medina, E. (2002). Thickness Induced Structural Transition in Suspended fcc Metal Nanofilms. *Physical Review Letters*, 88, 096103.
- Horstemeyer, M.F. (1998). Damage influence on Bauschinger effect of a CAST A356 alluminum alloy. *Scripta Mater.*, 39, 1491–1495.
- Jang, J., Hyun, B. G., Ji, S., Cho, E., An, B. W., Cheong, W. H. and Park, J. U. (2017). Rapid production of large-area, transparent and stretchable electrodes using metal nanofibers as wirelessly operated wearable heaters. *NPG Asia Materials*, 9 (9), e432.

- Ji, S., Jang, J., Cho, E., Kim, S. H., Kang, E. S., Kim, J., Kim, H. K., Konh, H., Kim, S. K., Kim, J. Y., Park, J. U. (2017). High dielectric performances of flexible and transparent cellulose hybrid films controlled by multidimensional metal nanostructures. *Advanced Materials*, 29, 1700538.
- Jordon, J.B., Horstemeyer, M.F., Solanki, K., Xue, Y. (2007). Damage and stress state influence on the Bauschinger effect in aluminum alloys. *Mechanics of Materials*, 39, 920–931.
- Kazanc, S., Ozgen, S., Adiguzel, O. (2003). Pressure effects on martensitic transformation under quenching process in a molecular dynamics model of NiAl alloy. *Physica Bi* 334, 375-381.
- Kazanc, S. (2013). The effects on the lattice dynamical properties of the temperature and pressure in random NiPd alloy. *Canadian Journal of Physics*, 91, 833-838.
- Kazanc, S., Canbay, C. A. (2024). Molecular Dynamics Simulation of Bauschinger Effect in Cu Nanowire with Different Crystallographic Orientation. *Turkish Journal of Science & Technology*, 19(1), 203-211.
- 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.
- <http://lammps.sandia.gov/>. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator (Erişim Tarihi:02.04.2021).
- Mahato, J.K., De, P.S., Sarkar, A., Kundu, A., Chakraborti, P.C. (2016). Effect of deformation mode and grain size on Bauschinger behavior of annealed copper. *International Journal of Fatigue*, 83, 42-52.
- Nakamura, A., Brandbyge, M., Hansen, L. B., Jacobsen, K. W. (1999). Density functional simulation of a breaking nanowire. *Physical Review Letters*, 82, 1538–1541.
- Novak, V., Sittner, P. (1990). Stability of dislocation structure. *Acta Universities Caroline-Math et Phys.*, 22, 89–94.
- Paul, J.D.H., Hoppe, R., Appel, F. (2016). On the Bauschinger effect in TiAl alloys. *Acta Materialia*, 104, 101-108.
- Pedersen, O.B., Brown, L.M., Stobbs, W.M. (1981) The bauschinger effect in copper. *Acta Metall*, 29, 1843-1850.
- Prinz, F., Argon, A.S. (1980). Dislocation cell formation during plastic deformation of copper single crystals. *Phys. Status Solidi A*, 57, 741-753.
- Rzychoń, T., Rodak, K. (2007). Microstructure characterization of deformed copper by XRD line broadening. *Arch. Mater. Sci. Eng.*, 28, 605-608.
- Sainath, G., Choudhary, B. (2015). Molecular dynamics simulation of twin boundary effect on deformation of Cu nanopillars. *Physics Letters A*, 379(34), 1902–1905.
- Sainath, G., Choudhary, B.K. (2016). Orientation dependent deformation behaviour of bcc iron nanowires. *Computational Materials Science*, 111, 406-415.
- Setoodeh, A.R., Attariani, H., Khosrownejad, M. (2008). Nickel nanowires under uniaxial loads: A molecular dynamics simulation study. *Computational Materials Science*, 44, 378-384.
- Setoodeh, A.R., Attariani, H. (2008). Nanoscale simulations of Bauschinger effects on a nickel nanowire. *Materials Letters*, 62, 4266–4268.
- Sofiah, A. G. N., Samykano, M., Kadirgama, K., Mohan, R. V., Lah, N. A. C. (2018). Metallic nanowires: Mechanical properties-Theory and experiment. *Applied Materials Today*, 11, 320–337.
- Sohn, S.S., Han, S.Y., Shin, S.Y., Bae, J.H., Lee, S. (2013). Effect of microstructure and pre-strain on Bauschinger effect in API X70 and X80 line pipe steel. *Met Mater Int.*, 19, 423–431.

- Stoltz, R.E., Pelloux, R.M. (1976). The Bauschinger effect in precipitation strengthened aluminum alloys. *Metall Trans A*, 7, 1295-1306.
- 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), 015012.
- Waheed, S., Hao, R., Bhowmik, A., Balint, D.S., Giuliani, F. (2017). A unifying scaling for the Bauschinger effect in highly confined thin films: a discrete dislocation plasticity study. *Model Simulat Mater Sci Eng.*, 25, 54003.
- Walsh, P., Li, W., Kalia, R. K., Nakano, A., Vashishta, P., Saini, S. (2001). Structural Transformation, Amorphization, and Fracture in Nanowires: A Multi-million Atom Molecular Dynamics Study. *Applied Physics Letters*, 78, 3328–3330.
- Wang, P., Chou, W., Nie, A., Huang, Y., Yao, H., Wang, H. (2011). Molecular dynamics simulation on deformation mechanisms in bodycentered-cubic molybdenum nanowires. *J Appl Phys*, 093521.
- Weinberger, C. R., Cai, W. (2012). Plasticity of metal nano wires. *J. Mater. Chem.* 22, 3277–3292.
- 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, 513-519.
- Wu, B., Heidelberg, A. and Boland, J. J. (2005). Mechanical properties of ultrahigh-strength gold nanowires. *Nature Materials*, 4(7), 525-529.
- Wu, H.A., (2006). Molecular dynamics study of the mechanism of metal nanowires at finite temperature. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 25, 370-377.
- Wu, H., Kong, D., Ruan, Z., Hsu, P. C., Wang, S., Yu, Z., Carney, T. J., Hu, L., Fan, S. and Cui, Y. (2013). A transparent electrode based on a metal nanotrough network. *Nature Nanotechnology*, 8 (6), 421-425.
- Xia, S., Liu, L., Kong, Y., Wang, M. (2016). Uniaxial strain effects on the optoelectronic properties of GaN nanowires, *Superlattices and Microstructures*, 97, 327–334.
- Zhan, H., Gu, Y., Yan, C., & Yarlagadda, P. K. (2014). Bending properties of Ag nanowires with pre-existing surface defects. *Computational Materials Science*, 81, 45–51.
- 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, 236–239
- Zhou, J., Shen, J., Essa, F.A., Yu, J. (2022). Twins and grain boundaries-dominated the reverse Bauschinger effect and tension-compression asymmetry. *Journal of materials research and technology*, 18, 15 -28.