

Araştırma Makalesi - Research Article

Ni Nano Telinin Deformasyon Davranışına İkiz Sınır Aralığının Etkisi: Moleküler Dinamik Çalışması

Effect of Twin Boundary Spacing on Deformation Behavior of Ni Nanowire: A Molecular Dynamics Study

Sefa Kazanç^{1*}

Geliş / Received: 29/03/2022

Revize / Revised: 07/11/2022

Kabul / Accepted: 07/11/2022

ÖZ

Periyodik olarak uyumlu ikizlenmiş tane yapılarına sahip metalik nano tellere uygulanan tek eksenli çekme zorlanması, onların mekanik davranışları ve deformasyon mekanizmaları üzerinde önemli etkiler oluşturmaktadır. Bu çalışmada tek kristal ve farklı sayıda birbiriyle uyumlu ikiz tane yapılarına sahip Nikel (Ni) nano tellerinin deformasyon davranışı Moleküler Dinamik (MD) benzetim yöntemi kullanılarak incelenmeye çalışıldı. İkiz sınır aralığının elastiklik modülü ve akma zorunda değişimler meydana getirdiği, bununla birlikte nano tellerin dislokasyon hareketi ve deformasyon ikizlenmesi ile plastik şekil değişimine uğradıkları belirlendi. Atomlar arası etkileşmelerin belirlenmesinde çok cisim etkileşmelerini içeren Gömülmüş Atom Metodu (GAM) kullanıldı.

Anahtar Kelimeler- Nano Tel, İkiz Sınır Aralığı, Moleküler Dinamik, Zor-Zorlanma

ABSTRACT

Uniaxial tensile stress applied to metallic nanowires with periodically coherent twinned grain structures has significant effects on their mechanical behavior and deformation mechanisms. In this study, the deformation behavior of Ni nanowires with single crystal and different numbers of coherent twin grain structures was investigated using the Molecular Dynamics (MD) simulation method. It was determined that the twin boundary space caused changes in the modulus of elasticity and yield strength; however, the nanowires underwent plastic deformation with dislocation motion and deformation twinning. The Embedded Atom Method (EAM), which includes many-body interactions, was used to determine the interactions between atoms.

Keywords- Nanowire, Twin Boundary Spacing, Molecular Dynamics, Stress-Strain

^{1*}Sorumlu yazar iletişim: skazanc@firat.edu.tr (<https://orcid.org/0000-0002-8896-8571>)
Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi Bölümü, Fırat Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, Elazığ, Türkiye

I. GİRİŞ

Son yıllarda nano bilim ve nano teknolojinin hızlı gelişimiyle nano yapıları malzemeler büyük ilgi görmektedir [1-3].Metalik nano teller mikro seviyedeki elektronik, optik, termal ve mekanik uygulamalarından dolayı teknolojiye önemli bir yere sahiptir [4-6]. Metalik nano tellerin deformasyon davranışları, onların teknolojiye uygulamalarını ve güvenilirliklerini etkileyen önemli faktörlerdendir. Bundan dolayı, çeşitli yapı ve özellikte üretilen nano tellerin mekanik özelliklerinin ve deformasyon mekanizmalarının detaylı bir şekilde araştırılması gerekmektedir. Yüksek esneklik, çekme mukavemeti, yüksek elektriksel ve termal iletkenlik, optik şeffaflık ve kimyasal eylemsizlik gibi çok yönlü özelliklerinden dolayı metalik nano teller moleküler elektronik, süper kapasitörler, dokunmatik sensörler, yeni tarama mikroskobu problemleri, tanısal biyosensörler gibi yeni cihazların tasarımı ve geliştirilmesinde kullanılmaktadırlar [7-11].

Nano telleri daha güçlü hale getirmek için yeni bir malzeme olarak ikiz yapıları nano teller üretilmiş ve bunların ikiz içermeyen nano tellere göre olağandışı mekanik özellikler sergilediği belirlenmiştir [12]. İkiz yapıları metalik nano tellerin gücü ikiz sınır aralığından önemli ölçüde etkilenmektedir [13]. Nano ikizli malzemeler yüksek mukavemet, süneklilik ve tane kararlılığının yanı sıra yüksek elektriksel iletkenlik sergilemekte ve bu da onları sayısız teknolojik uygulamalar için çekici kılmaktadır [14-16]. Yapılan çalışmalarda nano ikizli yapılarda maksimum güçlendirme için tane boyutu ve kritik ikiz sınır aralığı arasında yakın bir bağlantı olduğunu göstermektedir [17, 18].

Afanasyev ve Sansoz [19], sıkıştırma altında silindirik yapıdaki nano sütunlardaki tane sınırı güçlendirme etkisini, Cao vd. [20], çekme gerilimi altında kare kesitli nano sütunlarda tane sınırlarının rolünü araştırmışlardır. Her iki çalışmada nano yapıları içindeki ikiz sınır aralığının değiştirilmesinin sonuçları üzerinde önemli etkileri olduğu tespit edilmiştir. Bununla birlikte Dang ve Sansoz [21, 22] ikiz nano tel yapıları çekme deformasyonu altında güçlendirici ve zayıflatıcı etkisinin ikiz sınır aralığının bir fonksiyonu olduğunu gözlemlemişlerdir. Tane sınırlarının etkisinin yanı sıra ikiz yöneliminin nano ikiz sütunların çekme gerilimi altında akma dayanımı ve kopma üzerinde de etkisinin olduğu belirlenmiştir [23].

Bilgisayar teknolojisinin ve hesaplama yöntemlerinin hızlı gelişimi ile atomik benzetim teknikleri, nano malzemelerin yeni özelliklerini belirlemek ve deformasyon mekanizmasının atomik ayrıntılarını tespit etmek için yaygın olarak kullanılan popüler ve etkili bir araç haline gelmiştir. Ayrıca nano yapıları modellenmesinde kullanılan atomik benzetim ve analiz yöntemleri, deneysel süreçlerde ortaya çıkan karmaşıklığa ve zorluğa da bir alternatif olmuştur [24]. Özellikle son yıllarda MD benzetim yöntemi polikristal metallerin deformasyon karakteristiklerini incelemek için etkili bir şekilde kullanılmaktadır [25, 26].

Modellenecek bir sistem için uygun bir potansiyel fonksiyonunun seçilmesi çalışmanın en önemli adımlarından biridir. Potansiyel fonksiyonları benzetim çalışması boyunca modellenecek sistemdeki atomlar arasındaki enerjileri ve kuvvetleri belirler [27, 28]. Bu fonksiyonlar belirli malzeme özelliklerinin mümkün olduğunca deneysel değerlere yakın olacak şekilde hesaplanabilmesi için geliştirilir. Bir potansiyel enerji fonksiyonunun işlevi, atomik bağın doğasına bağlı olarak atomlar arası etkileşim enerjisini tanımlamaktır. Farklı atomlar arası potansiyel fonksiyonları mevcuttur ve bu fonksiyonlar formülizasyonun kökenine ve fonksiyonlarda kullanılan parametrelerin değerine göre sınıflandırılır. Son yıllarda nano tellerin deformasyonu GAM potansiyelinin kullanıldığı [29, 30] MD benzetim yönteminin yanı sıra yoğunluk fonksiyonu teorisine dayalı ilk-prensip metoduyla da [31, 32] incelenmiştir. Çok cisim etkileşimlerini içeren GAM, MD çalışmalarında basit matematiksel yapısı, etkili ve kabul edilebilir doğrulukta sonuç üretmesi ve büyük atomik sistemleri tanımlayabilmesindeki verimliliğinden dolayı en çok tercih edilen fonksiyonlardandır. İkiz sınır aralığının metalik nano tellerin dayanımı üzerindeki etkisi hem deneysel hem de benzetim yöntemleriyle kapsamlı bir şekilde incelenmeye çalışılmaktadır.

Bu çalışmada çekme zorlanması uygulanan periyodik olarak ikizlenmiş polikristal Ni metal nano tellerin mekanik özellikleri ve plastik şekil değiştirme mekanizması MD benzetim yöntemi kullanılarak incelenmeye çalışıldı. Modelleme çalışması için LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) MD benzetim programı kullanıldı [33]. Ni metal nano telline uygulanan tek eksenli çekme zorlanmasının ikiz sınır aralığının bir fonksiyonu olarak nano tellin zorlanma eğrisi, elastiklik modülü, akma zoru ve atomik konumlar gibi mekanik ve yapısal özellikleri üzerinde önemli değişimler meydana getirdiği belirlendi.

II. MD BENZETİM METODU

N parçacıktan meydana gelmiş bir atomik yapının MD yöntemi ile modellenmesinde sistemin hareket denklemleri Lagrange fonksiyonu kullanılarak

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

şeklinde elde edilir. Burada s_i , h , G ve P_{ext} parametreleri sırasıyla kalandırılmış koordinat, hesaplama hücresinin eksenleri, metrik tensör ve dış basıncınca karşılık gelmektedir.

Çekme veya sıkıştırma zorlanması altındaki bir atomik sistem için zor ifadesi, mikroskobik zor tensörü tarafından Denklem (2)'de verildiği gibi hesaplanmaktadır [34, 35].

$$\sigma = V^{-1} \left[\sum_{i=1}^N m_i \vartheta_i \vartheta_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{F_{ij}}{r_{ij}} r_i \cdot r_j \right] \quad (2)$$

Zor tensörü maddenin herhangi bir noktasındaki zorun dokuz bileşeni tarafından tayin edilir.

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \quad (3)$$

Sistem üzerine uygulanan çekme ve sıkıştırma zoru sırasıyla zor tensörünün normal bileşenlerin pozitif ve negatif değerlerine karşılık gelmektedir [36].

Çekme deformasyonu uygulanacak Ni ikiz nano tel sistemi, tek kristal ve birbiriyle uyumlu ikizlerden oluşan çoklu taneli yapı olmak üzere toplam 8 farklı başlangıç yapısında oluşturuldu. Çalışma boyunca tek kristal nano tel yapı Ni1 olarak ifade edilirken 2, 3, 4, 5, 8, 10 ve 14 taneden oluşan nano teller sırasıyla Ni2, Ni3, Ni4, Ni5, Ni8, Ni10 ve Ni14 olarak adlandırıldı. Ni1, Ni2, Ni3, Ni4, Ni5, Ni8, Ni10 ve Ni14 nano tel yapıları sırasıyla 20777, 20766, 20777, 20766, 20777, 20788, 20722 ve 20766 atomdan meydana gelmektedir. Nano tel yapıda her bir tane grain (gr) olarak tanımlanmıştır. Tek kristal yapıya sahip Ni1 nano telinde atomlar x , y ve z doğrultularında [031], [0 $\bar{1}$ 3] ve [100] kristalografik yönelimlerine sahip olacak şekilde yerleştirilirken, birbiriyle uyumlu ikiz yapı nano tellerde ise atomlar [031], [0 $\bar{1}$ 3], [100] ve [03 $\bar{1}$], [013], [100] kristalografik yönelimlerinde yerleştirildi. Nano tellerin x yönündeki uzunluğu 14 nm iken y ve z yönlerindeki uzunluğu atomların farklı yönelimlerinden dolayı 4,1 nm ile 4,48 nm arasında değerler almaktadır.

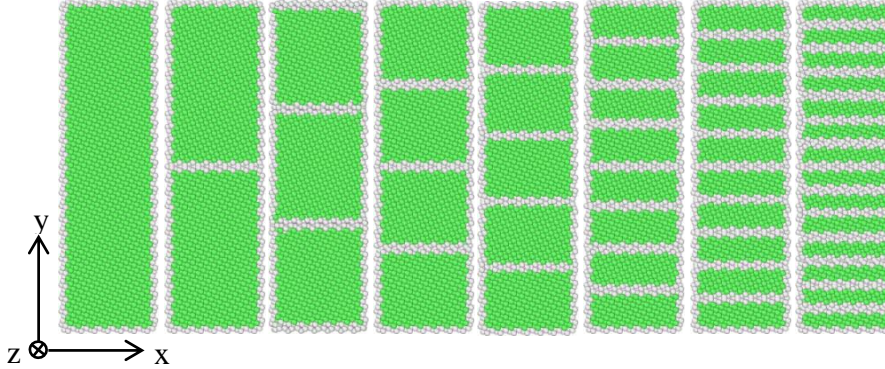
Atomik benzetim çalışmalarında model sisteme uygulanan termal ve mekanik işlemler sonrası oluşan mikro yapısal değişimlerin tespit edilmesi son derece önemlidir. Bunun için birçok yapısal analiz algoritması geliştirilmiştir. Bu algoritmalarda her parçacığa bir yapısal tür atamak temel amaçtır. Ayrıca bu yöntemler yerel bir yapıyı idealleştirilmiş bir yapıyla eşleştirerek, ne kadar yakın olduklarını belirlemeye çalışır. MD benzetim çalışmalarında merkez simetri parametre analizi (centrosymmetry parametre analysis), genel yakın komşu analizi (common neighbor analysis), bağ-yönelim analizi (bond-order analysis), bağ açısı analizi (bond-angle analysis), Honeycutt-Andersen, Voronoi analizi oldukça sık kullanılan yapısal analiz yöntemleridir [37, 38].

Bu çalışmada Ni nano tel sistemleri, atomlar fcc örgü noktalarına yerleştirilerek oluşturuldu. Nano telin sadece [100] doğrultusu boyunca periyodik sınır şartları uygulandı. Atomların başlangıç hızları Maxwell-Boltzman hız dağılımına uygun olarak rastgele atandı. Sistemin hareket denklemlerinin sayısal integrasyonu 1 fs zaman adımlarında Verlet algoritmasının hız formu kullanılarak gerçekleştirildi. Nano tel sistemine uygulanan tek eksenli çekme işlemleri için NVT istatistik topluluğu kullanıldı. Nano tellerin kararlı yapıya ulaşması için model sistem 5×10^4 MD adımı dengeletildi. Çalışmada bütün nano tel sistemlerine uygulanan çekme işlemleri 1×10^8 s⁻¹ zorlanma oranında ve 10K sabit sıcaklıkta gerçekleştirildi. Ni atomları arasındaki etkileşimleri hesaplamak için çok cisim etkileşimlerini içeren GAM potansiyel fonksiyonu kullanıldı. Literatürden kullanılan potansiyel fonksiyonu ile ilgili detaylar bulunabilir [39]. Fonksiyonunun kesilim mesafesi (cut-off) $r_c = 2a_{Ni}$ olarak belirlendi. Bu ifade de a , Ni elementinin örgü parametresidir.

III. BULGULAR

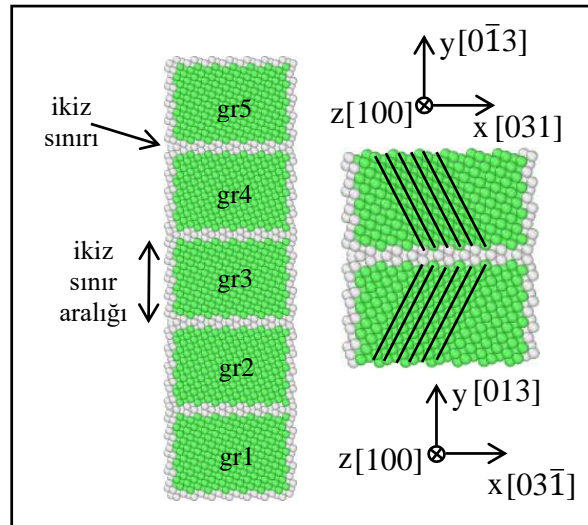
Bu çalışmada tek kristal ve birbiriyle uyumlu 7 farklı ikiz sınır aralığına sahip Ni metal nano tellerine 10 K sabit sıcaklık ve 1×10^8 s⁻¹ zorlanma oranında y doğrultusu boyunca uygulanan tek eksenli çekme işlemi sonucu, sistemin mekanik özelliklerinde meydana gelen değişimler ve plastik deformasyon mekanizması MD yöntemi kullanılarak incelenmeye çalışıldı. Şekil 1'de çalışmada kullanılan farklı Ni nano tel yapılarının başlangıç atomik konumları verilmiştir. Herhangi bir ikizlenmenin bulunmadığı tek kristal ve 2, 3, 4, 5, 8, 10 ve

14 ikiz tane sınırağına sahip nano tel model sisteminde Ni atomları başlangıç yapısı olarak fcc örgü noktalarına yerleştirilmiştir.



Şekil 1. Tek kristal ve farklı ikiz yapıları tanelerden oluşan Ni nano tellerinin [001] düzlem kesitinden alınmış başlangıç atomik konumları.

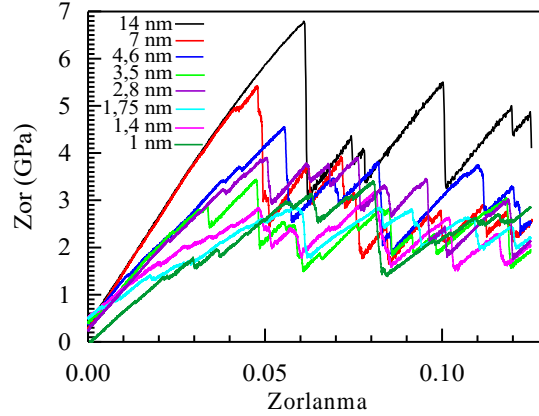
Şekil 2’de 5 taneli yapıdan oluşan Ni5 nano tel sistemi üzerinde, gr olarak ifade edilen taneler, ikiz sınırları, ikiz sınır aralığı ve birbiriyle uyumlu yönelim içinde ikizlenmiş bölgeler detaylı bir şekilde gösterilmiştir. Genel komşu analizinden (Common Neighbor Analysis-CNA) elde edilen sonuçlara göre yeşil renkli atomlar fcc birim hücreli atomik yapıları ve beyaz renkli atomlar ise bu analizde tanımlanmamış düzende atomları göstermektedir. Periyodik sınır şartlarının uygulanmadığı serbest yüzey atomları ve ikiz sınırlarındaki atomlar bu düzensizliklerden dolayı beyaz renkli görülmektedir.



Şekil 2. 5 uyumlu ikizlenmiş taneden oluşan Ni5 nano telindeki ikiz sınırı, ikiz sınır aralığı ve tane içerisindeki atomların yönelimleri.

Şekil 3’te çalışmada kullanılan 14 nm uzunluğundaki tek kristal ve 7 nm, 4,6 nm, 3,5 nm, 2,8 nm, 1,75 nm, 1,4 nm, 1 nm ikiz sınır aralığına sahip Ni metal nano tellere uygulanan tek eksenli çekme zorlanması sonucu elde edilen zor-zorlanma eğrileri verilmiştir. Deformasyon işlemi esnasında zor-zorlanma arasındaki ilişki malzemelerin temel mekanik özelliklerini yansıtır. Bütün model nano tellere uygulanan zorlanmanın belirli bir değerine kadar zorun, zorlanmayla hemen hemen doğrusal bir değişim sergilediği görülmektedir. Elastik bölge olarak adlandırılan bu bölgenin regrasyon analizi, malzemenin elastiklik modülünü vermektedir. Maddeye uygulanan kuvvet altında elastik şekil değiştirmesinin bir ölçüsü olarak bilinen elastiklik modülünün yüksek değerleri o maddenin elastik özelliğinin azaldığını ifade etmektedir. Ni1 ve Ni2 nano tellerine uygulanan çekme zorlanması sonucu elastik bölgenin hemen hemen benzer değişim sergilediği ve sırasıyla elastiklik modülünün 115,9 GPa ve 114,8 GPa değerlerine sahip olduğu belirlenmiştir. Bu, iki nano telin benzer elastik deformasyon davranışı sergilediği ve ikiz sınır aralığının bu iki nano telin elastiklik modülü üzerinde zayıf bir etkisinin olduğu söylenebilir. Yapılan çalışmalarda ikiz sınır aralıklı Cu ve Ag nano tellerinde elastiklik modülünün etkisinin çok zayıf olduğu belirlenmiştir [20, 40]. Bununla birlikte ikiz sınır aralığının çalışmada kullanılan diğer nano tellerin elastiklik modülü üzerinde etkisinin olduğu Şekil 3’ten açıkça görülmektedir.

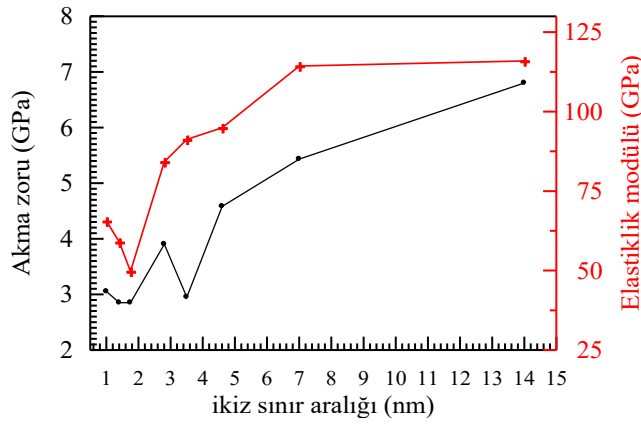
Zorlanma belirli bir değere ulaştıktan sonra bütün nano tellerde zor değerinde ani bir düşüşün meydana geldiği görülmektedir. Bu ani düşüş başlamadan önce zorun aldığı en yüksek değer akma zoru olarak ifade edilmekte ve bu plastik şekil değişiminin başlangıcı olarak bilinmektedir. Akma zoru değerine karşılık gelen zorlanmanın üzerinde bir zorlanma malzemeye uygulandığında plastik şekil değişimi mekanizmaları devreye girmeye başlar.



Şekil 3. Farklı sınır aralığına sahip Ni nano tellerine uygulanan tek eksenli çekme deformasyonu sonucu elde edilen zor-zorlanma eğrisi.

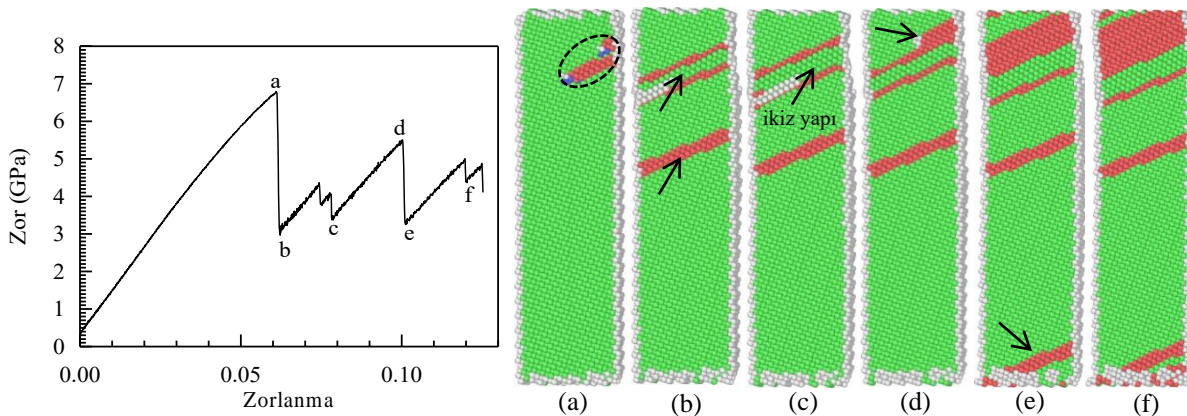
Tane sınır aralığına bağlı, elastiklik modülünün ve akma zorunun değişimi Şekil 4'te verilmiştir. İkiz sınır aralığının artışı, bir başka ifadeyle tane boyutunun büyümesi hem akma zorunda hem de elastiklik modülünde genel olarak bir yükselişe neden olduğu görülmektedir. Bu durum, tane sayısının fazla olduğu ikiz yapı nano tellerin daha sünek bir davranış sergilediğini göstermektedir. Akma zoru, ikiz sınır aralığı artarken 2,8 nm değerine kadar büyük bir değişim göstermezken, bu değerde bir pik yaptıktan sonra artmaya başlamıştır. İkiz sınır aralığının artışıyla elastiklik modülünün ise 1,75 nm ikiz sınır aralığına kadar bir düşüş sergilediği bu aralıktan sonra ise artmanın başladığı tespit edilmiştir. Hou ve ark. [41] silindirik yapıda ikizlenmiş Au nano telinin tek eksenli çekme deformasyonu altında mekanik özelliklerini inceledikleri çalışmada, ikiz sınır aralığının azalmasıyla akma zorunun azaldığı ve belirli bir değerden sonra bir artışın meydana geldiği bununla birlikte elastiklik modülünde bir değişimin olmadığını belirlemişlerdir. Ayrıca 2 nm ikiz sınır aralığına kadar elde edilen akma zorunun, tek kristal Au nano telinin akma zoru değerinin altında, 2 nm den daha küçük ikiz sınır aralığına sahip nano tellerde ise üstünde olduğu tespit edilmiştir. Yaptığımız çalışmada bütün nano teller için elde ettiğimiz akma zoru değerlerinin Ni nano yapı için elde edilen değerlerin altında olduğu belirlenmiştir. Yapılan benzetim çalışmalarında ikiz sınırlarının Pd'nin akma zorunu düşürürken, aksine nano ikizli Cu'nun akma dayanımında artışa sebep olduğu tespit edilmiştir [42].

Tek kristal ve farklı ikiz sınır aralığına sahip Ni nano tellerin plastik deformasyon mekanizmalarını incelemek için OVITO [43] programında yer alan CNA analizinden elde edilen atomik görüntülerden ve DXA (Dislocation Extraction Algorithm) dislokasyon analiz yönteminden yararlandı. Honeycutt ve Andersen tarafından ortaya atılan CNA topolojik analiz yöntemi, kristal yapılardaki tane sınırları, yığılma kusurları, değişik fazlar gibi yapısal değişimleri ve gelişimleri tespit etmek için kullanılmaktadır. Bu yöntemde, seçilen bir referans atomunun en yakın komşularının geometrik bir analizi yapılır. Her bir atom, en yakın komşuları arasındaki bağlar tarafından belirlenen bölgesel kristal yapıya göre sınıflandırılır. Hacim merkezi kübik (bcc), cisim merkezli kübik (fcc), hegzagonal sıkı paket (hcp) ve "diğer" olarak isimlendirilen 4 farklı yapı türü mevcuttur. Bölgesel bir bcc düzenindeki atomlar bcc atomları, bölgesel bir fcc düzenindeki atomlar fcc atomları olarak kabul edilir. bcc, fcc ve hcp yapılarının haricindeki diğer tüm yerel düzenlenmelerdeki atomlar "diğer" atomlar olarak adlandırılır. Elde edilen atomik konfigürasyonlarda mavi renk bcc, yeşil renk fcc, kırmızı renk hcp ve beyaz renk ise "diğer" olarak adlandırılan birim hücre yapılarını göstermektedir [44, 45].



Şekil 4. Elastiklik modülü ve akma dayanımının ikiz sınır aralığına bağlı değişimi.

Farklı ikiz sınır aralığına sahip Ni nano tellerinin plastik deformasyon mekanizmasını sadece Ni1, Ni4 ve Ni10 model sistemleri için incelendi. Şekil 5’de Ni1 nano teline uygulanan çekme deformasyonu sonucu elde edilen zor-zorlanma eğrisi ve bu eğride seçilen farklı noktalara karşılık gelen, CNA analizinden belirlenen atomik konumlar görülmektedir. Zor-zorlanma eğrisi üzerinde gösterilen her bir harfe karşılık gelen atomik görüntüler aynı harf ile gösterilmiştir. Zor-zorlanma eğrisinin hemen hemen doğrusal değiştiği elastik bölgenin geçilip kalıcı şekil değişiminin başladığı akma zoru olan (a) noktasına ulaşıldığında, noktalı daire ile gösterilen bölgede matris içinde hcp birim hücrelerden meydana gelen bir kümelenmenin oluşmaya başladığı belirlenmiştir. Bu bölge, yapı içerisinde Shockley kısmi dislokasyonlarının çekirdeklenmesi ve aktif hale geçmesi sonucu oluşan yığılma kusurlarını ifade etmektedir [46, 47]. Birçok çalışma ikiz nano tellerin akma zorunun, dislokasyonların çekirdeklenmesiyle yakından ilişkili olduğunu göstermiştir [48-51]. Zorlanmanın artmasıyla akma noktası geçildiğinde eğride ani bir düşüşün meydana geldiği b noktasında yeni dislokasyonların çekirdeklenmesi ve matris içerisinde yayılması sonucu hcp yapılı yığılma kusurları artış göstermiştir. Yapılan bir çalışmada ikiz sınırsız tek kristal Ni nano telinin serbest yüzey köşelerinden $\{111\}$ düzleminde $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley kısmi dislokasyonunun çekirdeklenmesi yoluyla aktığı belirlenmiştir [52]. Bununla birlikte birçok çalışma ikiz nano tellerin ilk akma dayanımının dislokasyonların çekirdeklenmesiyle yakından ilişkili olduğunu göstermektedir [48-51]. Daha sonra bu bölgeler, zorlanmanın artırılıp c noktasına ulaşılmasıyla yeni yığılma kusurları oluşturulmadan yapı içerisinde gelişir. Uygulanan zorlanmanın artması, eğride bir sonraki düşüşü üreten yeni yığılma kusur bölgelerinin ortaya çıkmasına neden olur [53]. Çekme işleminde zor-zorlanma eğrisindeki zigzaglar yığılma kusur bölgelerinin oluşumuna atfedilir ve bu durum Cu, Ag ve Ni numunelerinde gözlenmiştir [54, 55]. Bununla birlikte zor-zorlanma eğrisindeki (a-c) noktaları için belirlenen DXA analizi sonucu, $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley kısmi dislokasyonunun çekirdeklenmesi ve yayılması Şekil 6’da verilmiştir. Yeşil renkli çizgiler $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley kısmi dislokasyon çizgilerini, kırmızı renkli çizgiler ise DXA analizinde tanımsız olan dislokasyon çizgilerini göstermektedir.



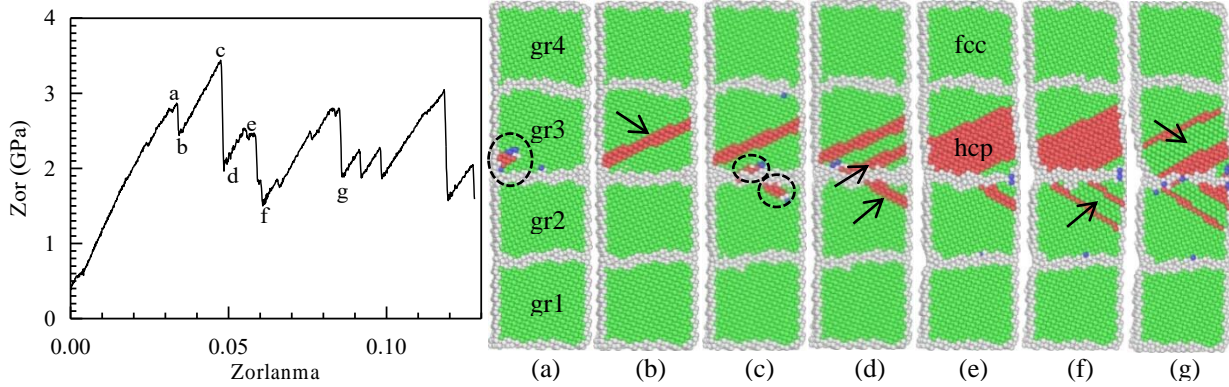
Şekil 5. Tek kristal Ni nano tel model sistemi için elde edilen zor-zorlanma eğrisi ve bu eğri üzerinde gösterilen farklı noktalar için [001] düzlem kesitinden CNA analizi kullanılarak belirlenen atomik görüntüler.

İki bitişik hcp atom katmanı içsel yığılma kusuru olarak tanımlanır. Aralarında bir fcc atom katmanı bulunan iki hcp atom katmanı dışsal yığılma kusuru ve iki hcp katman arasında birden fazla fcc atomlardan oluşan tabaka ise deformasyon ikizleri olarak ifade edilir [1, 41]. Buna göre Şekil 5' de (b) noktasına karşılık gelen ve nano telin orta bölgesinde okla gösterilen yerde bir içsel yığılma kusuru ve nano telin üst bölgesinde bir harici yığılma kusuru oluşumu tespit edilmiştir. (c) noktasında ise zorun artmasıyla okla gösterilen bölgede atomların yeniden düzenlenmesi sonucu küçük ikiz plakalar şeklinde oluşan deformasyon ikizlenmesi meydana geldiği gözlenmiştir. Devam eden süreçte Şekil 5(d-f) de verilen atomik görüntülerden hcp yığılma kusurlarının arttığı ve yeni yığılma kusurlarının oluşumu sonucu plastik şekil değişiminin devam ettiği tespit edilmiştir.



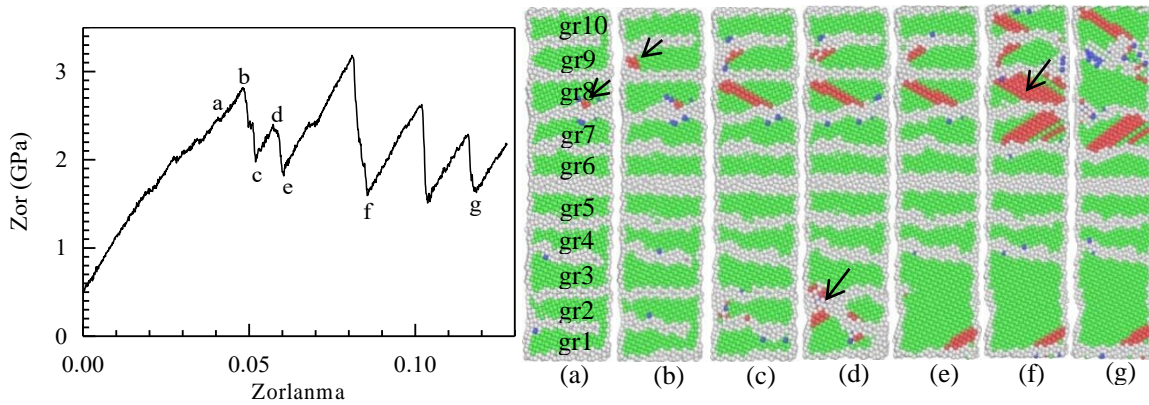
Şekil 6. Tek kristal Ni nano telinin zor-zorlanma eğrisinde a-c noktaları için elde edilen atomik konfigürasyonların DXA analizi sonucu Shockly kısmi dislokasyon çizgilerinin yapı içerisindeki gelişimi.

Şekil 7'de Ni4 ikiz sınırlı nano teline uygulanan çekme deformasyonu sonucu elde edilen zor-zorlanma eğrisi ve bu eğrinin farklı noktaları için [001] düzlem kesitinden belirlenen atomik konumlar verilmiştir. Şekil 7'(a) da 3,5 nm ikiz sınır aralığına sahip Ni4 nano telinin akma noktası (a) da gr3 tanesi içerisinde, noktalı daire ile gösterilen ikiz sınırı ve serbest yüzeyin kesişim noktasında hcp ve bcc birim hücreli atomlarının kümelendiği bölgede $1/6[\bar{1}12]$ burgers vektörlü, $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley kısmi dislokasyonunun çekirdeklediği tespit edilmiştir. Cu nano teline çekme deformasyonunun uygulandığı bir çalışmada, akma başlangıcının uyumlu ikiz sınırları ve serbest yüzey arasındaki kesişme noktasında kısmi dislokasyonların çekirdeklenmesi ve yayılması ilişkili olduğu ifade edilmiştir [22]. Bununla birlikte serbest yüzeyden çekirdeklenen kısmi dislokasyonlar bloke olmadan uyumlu ikiz sınırlarını kesebilir, bu da ilk akma noktasından sonra keskin bir akma ve önemli zor düşmesine neden olur [22]. Zorlanmanın artmasıyla hcp birim hücreli yapıların tane içerisinde yayılması sonucu içsel yığılma kusurlarının oluşumu Şekil 7 (b)'de ok ile gösterilmiştir. Zor-zorlanma eğrisinin c noktası için elde edilen atomik görüntüde, gr2 ve gr3 tanelerini ayıran ikiz sınırında noktalı daireler ile işaretlenen bölgelerde hcp birim hücrelerinden oluşan yeni çekirdeklenme noktaları tespit edilmiştir. Zor değerinin yeniden ani bir düşüş gösterdiği d noktasında, gr2 ve gr3 taneleri içerisinde çekirdeklerin gelişip tane içlerine yayılması sonucu oklarla gösterilen hcp yapı yığılma kusur düzlemlerinin oluşumu görülmektedir. Bununla birlikte gr3 tanesi içerisinde hcp birim hücreli yığılma kusur düzlemlerinin arasında dışsal bir yığılmanın da meydana geldiği dikkat çekmektedir. İkiz sınırlarının, dislokasyon çekirdeklenmesi için kritik zoru azaltan bir kaynak olarak hizmet ettiği ve dislokasyonların ikiz sınırları ile serbest yüzeyler arasındaki kesişme noktasında çekirdeklenmeyi tercih ettiği bildirilmiştir [49-51]. Zorlanmanın artmasıyla gr3 tanesinin içinde hcp atomlarından oluşan yığılma kusurlu tabakaların sayısının arttığı, (e) de verilen atomik konfigürasyonlardan açıkça görülmektedir. İlerleyen çekme işlemi esnasında gr2 ve gr3 taneleri içerisinde okla gösterilen bölgelerde deformasyon ikizlenmelerinin oluşumu, (f) ve (g) atomik konumlarından tespit edilmiştir. Deformasyon ikizlenmesi, dislokasyon kaymasına ek olarak plastik deformasyonda önemli bir rol oynayan büyük taneli fcc metaller ve alaşımlarda yaygın olarak gözlemlenir [56, 57]. Deformasyon ikizlerinin oluşumunun, bitişik {111} kayma düzlemleri üzerinde ard arda Shockly kısmi dislokasyon kaymasını içerdiği kabul edilmektedir. Dislokasyonlar ve ikiz sınırları arasındaki etkileşimler ikiz oluşumunu teşvik eder [58].



Şekil 7. İkiz yapılı Ni4 nano tel model sistemi için elde edilen zor-zorlanma eğrisi ve bu eğri üzerinde gösterilen farklı noktalar için CNA analizinden belirlenen atomik görüntüler.

Şekil 8’de, Ni10 nano tel model sistemine uygulanan çekme deformasyonu esnasında elde edilen zor-zorlanma eğrisi ve bu egride belirlenen farklı noktalar için nano telin atomik konumları gösterilmiştir. Zor-zorlanma eğrisinde akma noktasından önceki a noktası ve plastik şekil değişiminin başladığı b-c noktalarından elde edilen atomik görüntülerden, oklarla gösterildiği gibi gr8 tanesinin tane sınırında ve gr9 tanesinin tane sınırı ve serbest yüzeyin kesiştiği noktada Shockly kısmı dislokasyonlarının çekirdeklendiği ve sonrasında da bu dislokasyonların yapı içerisinde yığılım kusurları oluşturduğu tespit edilmiştir. İkiz yapıdaki Cu nano sütunlar üzerine yapılan çekme testlerinde ikiz sınırları ve serbest yüzeylerin kesiştiği yerlerde dislokasyon çekirdeklenmelerinin baskın olduğu bulunmuştur [59]. Tane sınırlarının, oluşan yığılım kusurlarının yayılımını engellediği elde edilen bütün atomik konfigürasyonlarda açıkça görülmektedir. Bununla birlikte zor-zorlanma eğrisinde (d) noktasına karşılık gelen atomik konumda, gr1 ve gr2 tanelerini ayıran ikiz tane sınırı ile gr2 ve gr3 tanelerini ayıran ikiz tane sınırlarının okla gösterilen bölgede birleşmeye başladığı dikkat çekmektedir. Artan zorlanmayla birlikte atomlar yeniden düzenlenerek gr1, gr2 ve gr3 tanelerinin sınır bölgelerinin kalktığı ve tek bir tane yapısına dönüştüğü ve bu yapının ilerleyen süreçlerde korunduğu belirlenmiştir. Koherent ikiz sınırları dislokasyon kayması için bir bariyer görevi görür. Ancak belirli koşullar altında kayma, koherent ikiz sınırları üzerinden aktarılabilir. Koharent ikiz sınırlarının tüm kristal yönelimleri için etkili bir bariyer olarak hareket etmediği, kayma transfer mekanizmasının tüm fcc metalleri için aynı olmadığı tespit edilmiştir [60]. Düşük açılı tane sınır oluşturan ayırık örgü dislokasyonları belirli bir gerilim seviyesinde hareketli hale gelebilir ve tane sınırı ortadan kalkar [61]. Benzer bir davranış koherent ikiz konfigürasyonuna sahip olan tane sınırları için de rapor edilmiştir [62, 63]. Yapılan çalışmalarda Ni nano tel sistemine uygulanan çekme deformasyonu sonucu ikiz sınırların birbirine doğru yayıldığı ve ardından bozulmamış bir <100> nano tel bırakarak yok oldukları belirlenmiştir [64]. (f) noktası için elde edilen atomik görüntüde gr7, gr8 ve gr10 tanelerinde hcp atomlarından oluşan yığılım kusurlu düzlemlerin sayısının arttığı tespit edilmiştir. Son olarak gr8 tanesindeki yığılım kusurlarının ortadan kalktığı, atomların yeniden düzenlenerek fcc birim hücreli tane yapısının oluştuğu ve gr9 tanesinin ise diğer olarak adlandırılan tanımsız birim hücrelerden oluşan bir yapıya dönüştüğü tespit edilmiştir.



Şekil 8. İkiz yapılı Ni10 nano tel model sistemi için elde edilen zor-zorlanma eğrisi ve bu eğri üzerinde gösterilen farklı noktalar için CNA analizinden belirlenen atomik görüntüler.

IV. SONUÇ

Bu çalışmada farklı ikiz sınır aralığına sahip Ni nano tellerine uygulanan tek eksenli çekme zorlanması sonucu mekanik özelliklerin değişimi ve plastik şekil değişiminin mikro yapısal gelişimleri MD benzetim yöntemi ile incelendi. Farklı ikiz sınır aralığına sahip ve uyumlu ikiz sınırlar içeren Ni nano tellerinde atomlar arası etkileşimler GAM kullanılarak modellendi. İkiz sınır aralığının Ni nano tellerinin elastiklik modülü ve akma zoru üzerinde etkili olduğu belirlendi. Plastik şekil değişiminin dislokasyonlar ve ikiz deformasyonu oluşumu ile meydana geldiği görüldü. Bununla birlikte nano tel içerisinde yığılım kusurlarının ve dislokasyonların yayılımının ikiz sınırları tarafından engellendiği belirlendi. Dislokasyon emisyonunun her zaman Shockly kısmi dislokasyonunun tane sınırlarında çekirdeklenmesiyle gerçekleştiği görüldü. İkiz sınır aralığının azalmasıyla nano tellerde sünekliliğin arttığı bilinirken çalışmamızda bu artışın istenilen düzeyde olmadığı belirlenmiştir. Bu durumun atom sayısı, nano telin geometrisi, ikiz sınır açısı, uygulanan zorlanma oranı gibi faktörlerden kaynaklandığı düşünülmektedir.

KAYNAKLAR

- [1] Wu, B., Heidelberg, A., & Boland, J. J. (2005). Mechanical properties of ultrahigh-strength gold nanowires. *Nature Materials*, 4(7), 525-529.
- [2] Hasmy, A., & Medina, E. (2002). Thickness Induced Structural Transition in Suspended fcc Metal Nanofilms. *Physical Review Letters*, 88, 096103.
- [3] da Silva, E. Z., da Silva, A. J. R., & Fazzio, A. (2001). How Do Gold Nanowires Break?. *Physical Review Letters*, 87, 256102.
- [4] 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.
- [5] Sainath, G., Choudhary, B. (2015). Molecular dynamics simulation of twin boundary effect on deformation of Cu nanopillars. *Physics Letters A*, 379(34), 1902-1905.
- [6] 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.
- [7] Pak, O. S., Gao, W., Wang, J., Lauga E. (2011). High-speed propulsion of flexible nano wire motors: theory and experiments, *Soft Matter*, 7, 8169-8181.
- [8] Weinberger, C. R., Cai, W. (2012). Plasticity of metal nano wires. *J. Mater. Chem.* 22, 3277-3292.
- [9] Wu, H., Kong, D., Ruan, Z., Hsu, P. C., Wang, S., Yu, Z., Carney, T. J., Hu, L., Fan, S., & Cui, Y. (2013). A transparent electrode based on a metal nanotrough network. *Nature Nanotechnology*, 8 (6), 421-425.
- [10] Jang, J., Hyun, B. G., Ji, S., Cho, E., An, B. W., Cheong, W. H., & 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.
- [11] 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.
- [12] Liu, H., Zhou, J. (2016). Plasticity in nanotwinned polycrystalline Ni nanowires under uniaxial compression. *Materials Letters*, 163, 179-182.
- [13] Wang, L., Zhang, Z., Han, X. (2013). In situ experimental mechanics of nanomaterials at the atomic scale. *NPG Asia Materials*, 5, e40.
- [14] Lu, L., Shen, Y., Chen, X., Qian, L., Lu, K. (2004). Ultrahigh strength and high electrical conductivity in copper. *Science*, 304, 422-426.
- [15] Lu, L., Chen, X., Huang, X., Lu, K. (2009). Revealing the maximum strength in nanotwinned copper. *Science*, 323, 607-610.
- [16] Hammami, F., & Kulkarni, Y. (2014). Size effects in twinned nanopillars. *Journal of Applied Physics*, 116, 033512.

- [17] Li, X., Wei, Y., Lu, L., Lu, K., & Gao, H. (2010). Dislocation nucleation governed softening and maximum strength in nano-twinned metals. *Nature*, 464, 877-880.
- [18] Wei, Y. (2011). Scaling of maximum strength with grain size in nanotwinned fcc metals. *Physical Review B*, 83, 132104.
- [19] Afanasyev, K. A., & Sansoz, F. (2007). Strengthening in Gold Nanopillars with Nanoscale Twins. *Nano Letters*, 7, 2056-2062.
- [20] Cao, A. J., Wei, Y. G., & Mao, S. X. (2007). Deformation mechanisms of face-centered-cubic metal nanowires with twin boundaries. *Applied Physics Letters*, 90, 151909.
- [21] Deng C., & Sansoz, F. (2009). Size-dependent yield stress in twinned gold nanowires mediated by site-specific surface dislocation emission. *Applied Physics Letters*, 95, 091914.
- [22] Deng, C., & Sansoz, F. (2009). Fundamental differences in the plasticity of periodically twinned nanowires in Au, Ag, Al, Cu, Pb and Ni. *Acta Materialia*, 57, 6090-6101.
- [23] Jang, D., Li, X., Gao, H., & Greer, J. R. (2012). Deformation mechanisms in nanotwinned metal nanopillars. *Nature Nanotechnology*, 7, 594-601.
- [24] 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.
- [25] Spearot, D. E., Tschopp, M. A., Jacob, K. I., McDowell, D. L. (2007). Tensile strength of <100> and <110> tilt bicrystal copper interfaces. *Acta Materialia*, 55(2), 705-714.
- [26] Spearot, D. E., Capolungo, L., Qu, J., Cherkaoui, M. (2008). On the elastic tensile deformation of <100> bicrystal interfaces in copper. *Computational. Material Science*, 42(1), 57-67.
- [27] Rapaport, D. (2004). *The art of molecular dynamics simulation*, 2nd ed. Cambridge University press., 199-244.
- [28] Leach, A. R., Schomburg, D. (2001). *Molecular Modelling: Principles and Applications*, 2nd ed. Longman, London, 353-406.
- [29] 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.
- [30] 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.
- [31] Nakamura, A., Brandbyge, M., Hansen, L. B., Jacobsen, K. W. (1999). Density functional simulation of a breaking nanowire. *Physical Review Letters*, 82, 1538-1541.
- [32] 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.
- [33] <http://lammps.sandia.gov/>. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator (Erişim Tarihi:02.04.2021).
- [34] 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.
- [35] 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.
- [36] Jacobus, K., Sehitoglu, H., Balzer, M. (1996). Effect of stress state on the stress-induced martensitic transformation in polycrystalline Ni-Ti alloy. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 27(A), 3066-3073.
- [37] 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, 234506.
- [38] Stukowski, A. (2012). Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 20, 045021.
- [39] 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. *Physical Review B*, 33, 7983.
- [40] Gao, Y., Sun, Y., Yang, Y., Sun, Q., Zhao, J. (2015). Twin boundary spacing-dependent deformation behaviours of twinned silver nanowires. *Molecular Simulations*, 41, 1546.
- [41] Hou, Z., Xiao, Q., Wang, Z., Wang, J., Liu, R., Wang, C. (2020). Effect of twin boundary spacing on the deformation behaviour of Au nanowire. *Physica B*, 581, 411952.
- [42] Stukowski, A. (2010). *Atomic- Scale Modeling of Nanostructured Metals and Alloys*. Zur Erlangung des akademischen Grades des Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.) genehmigte Dissertation vorgelegt von Dipl.-Phys. Technische Universität, Darmstadt.
- [43] 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.

- [44] Bañuelos, E. U., Aburto, C. C., Arce, A. M. (2016). A common neighbor analysis of crystallization kinetics and excess entropy of charged spherical colloids. *The Journal of Chemical Physics*, 144, 094504.
- [45] Fanga, R., Wanga, W., Guoa, L., Zhanga, K., Zhanga, X., Lib, H. (2020). Atomic insight into the solidification of Cu melt confined in graphene Nanoslits. *Journal of Crystal Growth*, 532, 125382.
- [46] 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.
- [47] 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.
- [48] Hyde, B., Espinosa, H. D., Farkas, D. (2005). An atomistic investigation of elastic and plastic properties of Au nanowires. *The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society*, 57, 62-66.
- [49] Yin, Q., Wang, Z., Mishra, R., & Xia, Z. (2017). Atomic simulations of twist grain boundary structures and deformation behaviors in aluminum. *Aip Advances*, 7, 015040.
- [50] Deng, C., Sansoz, F. (2009). Near-Ideal Strength in Gold Nanowires Achieved through Microstructural Design. *ACS Nano*, 3, 3001.
- [51] Guo, X., Xia, Y. Z. (2011). Repulsive force vs. source number: Competing mechanisms in the yield of twinned gold nanowires of finite length. *Acta Materialia*, 59, 2350.
- [52] Paul, S. K. (2018). Effect of twist boundary angle on deformation behavior of $\langle 100 \rangle$ FCC copper nanowires. *Computational Materials Science*, 150, 24–32.
- [53] Kardani, A., & Montazeri, A. (2020). Metal-matrix nanocomposites under compressive loading: Towards an understanding of how twinning formation can enhance their plastic deformation. *Scientific Reports*, 10, 9745.
- [54] Bejaud, R., Durinck, J., & Brochard, S. (2018). Twin-interface interactions in nanostructured Cu/Ag: Molecular dynamics study. *Acta Materialia*, 144, 314–324.
- [55] Pukic, N., Jenko, M., Godec, M., & Mcguiness, P. J. A. (2017). comparison of the uniaxial deformation of copper and nickel (1119). surfaces: A molecular dynamics study. *Scientific Reports*, 7, 42234.
- [56] Christian, J. W., Mahajan, S. (1995). Deformation twinning. *Prog.Mater Sci.*, 39, 1– 157.
- [57] Beyerlein, I. J., Zhang, X., Misra, A. (2014). Growth twins and deformation twins in metals. *Annu. Rev. Mater. Res.*, 44, 329–363.
- [58] Zhao, X., Lu, C., Tieu, A. K., Zhan, L., Huang, M., Su, L., Pei, L., Zhang, L. (2018). Deformation twinning and dislocation processes in nanotwinned copper by molecular dynamics simulations. *Computational Materials Science*, 142, 59–71.
- [59] Jang, D., Li, X., Gao, H., Greer, J. (2012). Deformation mechanisms in nanotwinned metal nanopillars. *Nature Nanotechnology*, 7, 594.
- [60] Ezaz, T., Sangid, M. D., Sehitoglu, H. (2011). Energy barriers associated with slip twin interactions. *Phil. Mag.*, 91, 1464-1488.
- [61] Farkas, D., & Patrick, L. (2009). Tensile deformation of fcc Ni as described by an EAM potential. *Philos. Mag.*, 89(34),3435–3450.
- [62] Bitzek, E., Derlet, P. M., Anderson, P. M., & Swygenhoven, H. V. (2008). The stress-strain response of nanocrystalline metals: A statistical analysis of atomistic simulations. *Acta Materialia*, 56(17), 4846–4857.
- [63] Froseth, A. G., Derlet, P. M., & Swygenhoven, H. V. (2006). Vicinal twin boundaries providing dislocation sources in nanocrystalline. *Al. Scr. Mater.*, 54(3), 477–481.
- [64] Park, H. S., Gall, K., Zimmerman, J. A. (2006). Deformation of fcc nanowires by twinning and slip. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54, 1862–1881.