

Nano İkiz Yapılı Çok Kristalli Au Nano Teline Uygulanan Tek Eksenli Çekme ve Sıkıştırma İşleminin Moleküler Dinamik İncelenmesi

***Makale Bilgisi / Article Info**

Alındı/Received: 18.09.2024

Kabul/Accepted: 13.11.2024

Yayımlandı/Published: 11.04.2025

Molecular Dynamics Investigation of Uniaxial Tensile and Compressive Deformation Applied to Nanotwin Structured Polycrystalline Au Nanowire

Sefa KAZANÇ* 

Fırat Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, Matematik ve Fen Bilimleri Bölümü, Elazığ, Türkiye



© Afiyon Kocatepe Üniversitesi

© 2025 The Authors | Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 (CC BY-NC) International License

Öz

Bu çalışmada nano ikiz yapıları sahip çok kristalli Altın (Au) nano tellerine tek eksen doğrultusunda uygulanan çekme ve sıkıştırma deformasyon sürecinde meydana gelen mekanik ve yapısal özelliklerdeki değişimler Moleküler Dinamik (MD) benzetim yöntemi kullanılarak incelenmeye çalışıldı. Au nano tel yapılarında ikiz sınır aralığının bir fonksiyonu olarak Hall-Petch (HP) ve ters HP ilişkisi gözlemlendi. Ters HP ilişkisinin varlığından ikiz sınırlarının, çok kristalli nano tellerin sıkıştırma ve çekme deformasyon işlemlerinde önemli bir rol oynayabileceği belirlendi. Hem sıkıştırma hem de çekme deformasyonu altında nano tel yapıları içerisinde çok sayıda kısmi dislokasyonların oluşumu ve gelişimi tespit edildi.

Abstract

In this study, the changes in mechanical and structural properties occurring during the tensile and compression deformation process applied in the uniaxial direction to polycrystalline Gold (Au) nanowires with nanotwin structures were tried to be examined using the Molecular Dynamics (MD) simulation method. Hall-Petch (HP) and inverse HP relationships were observed in Au nanowire structures as a function of twin boundary spacing. From the existence of the inverse HP relationship, it was determined that twin boundaries may play an important role in the compression and tensile deformation processes of polycrystalline nanowires. The formation and development of numerous partial dislocations within the nanowire structures were detected under both compression and tensile deformation.

Anahtar Kelimeler: Çoklu kristal, İkiz aralığı, Hall-Petch etkisi, Moleküler Dinamik

Keywords: Polycrystalline, twin spacing, Hall-Petch effect, Molecular Dynamics

1. Giriş

Nano ölçekteki teller nano-elektronik sistemlerde sahip oldukları üstün termal, mekanik, elektronik ve optik özelliklerinden dolayı oldukça dikkat çekmektedir. (Fan vd. 2006, Teo vd. 2009, Veerababu vd. 2024, Niu vd. 2024). Ayrıca nano tellerin biyosensörler, taramalı tünelleme ve atomik kuvvet mikroskobu için uçlar, yeni nesil yapısal malzemeler ve nano ölçekteki birçok cihazda bağlantı sağlayan devre elemanı olarak etkili bir şekilde kullanılması için çalışılmaktadır (Hochbaum ve Yang 2010, Li vd. 2019, Hu vd. 2022). Bununla birlikte nano tellerin kullanıldıkları ortamlardaki dış etkilere bağlı olarak sergiledikleri davranışlar performansları açısından oldukça önemlidir. Malzeme biliminde özellikle son yıllarda nano tellerin mekanik özelliklerinin belirlenmesi üzerine yapılan çalışmalar ön plana çıkmaktadır. Nano tel sistemlerinin yüzey/hacim oranının hacimsel (bulk)

yapılara göre daha büyük olması yüzey gerilimi ve enerjisinin artmasına neden olarak mekanik özellikleri değiştirebilmektedir (Diao vd. 2003, Diao vd. 2004). Yapılan deneyler, tane sınırlarının nano tellerin mekanik özelliklerini önemli ölçüde etkilediğini göstermektedir (Wu vd. 2004, Wu vd. 2005, Klinger ve Rabkin 2006). Malzemelerin termodinamik, mekanik ve elektriksel özellikleri tane boyutuna, sayısına, şekline, tanelerde bulunan atomların kristalografik yönelimlerine ve ikiz yapıların varlığına bağlı olarak değişiklik göstermektedir (Philips 2001, Molares vd. 2004, Klinger ve Rabkin 2006).

Uygulamada kullanılan nano tellerin bilinmesi gereken en önemli özellikleri elastik davranışları ve dayanıklılıklarıdır (Niu vd. 2012). Nano tellere uygulanan deformasyon testleri sonucu Young modülü, akma zorlanması, kopma gerilmesi özellikleri belirlenebilmektedir (Smith 1996). Bu özelliklerin belirlenmesi amacıyla makro boyutta

gerçekleştirilen testlerin kolay olmasına karşılık nano boyutlarda bu durum zorlaşmaktadır. Ayrıca sınırlı deneysel imkanlar, nano boyuttaki kusurların mekanik davranışlar üzerindeki etkisinin belirlenmesinde sorun oluşturmaktadır. Nano boyutta tel numunesi hazırlanması, nano tel eksensel yönünün yükleme yönü ile hizalanması ve uygun çekme testini gerçekleştirilmesi hala karşılaşılan zorluklar arasındadır (Chen vd. 2017).

Nano telleri daha güçlü hale getirebilmek için ikiz yapılı nano teller, yeni bir nano malzeme ailesi olarak üretilmiş ve bu yapıların ikiz yapı içermeyenlere göre olağandışı mekanik özellikler sergilemesi beklenmektedir (Cao ve Wei 2006, Wu vd. 2006). İkiz yapılı mekanik nano tellerin ikiz sınır aralığının bir fonksiyonu olarak Hall-Petch etkisi sergilediği ve ikiz sınır aralığının azaltılmasıyla neredeyse ideal bir mukavemet elde edildiği belirlenmiştir (Wu vd. 2006, Afanasyev ve Sansoz 2007, Deng ve Sansoz 2009). Nano tellerin sıkıştırma deformasyon mekanizmaları üzerinde hem tane sınırlarının hem de ikiz sınırlarının etkilerini araştıran az sayıda çalışma bulunmaktadır.

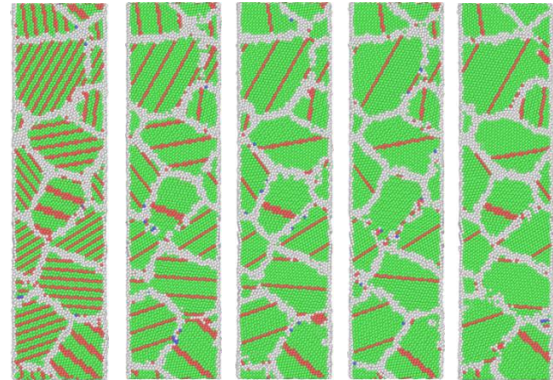
Nano ölçek seviyesinde deneysel çalışmaların gerçekleştirilmesindeki zorluklardan dolayı bilgisayar benzetimleri üzerine yapılan çalışmaların sayısı artmış ve malzemelerin fiziksel ve mekanik özelliklerinin belirlenmesinde oldukça faydalı sonuçlar elde edilmiştir (Rawat ve Mitra 2020, Rajput ve Paul 2023). Benzetim teknikleri arasında MD, uygulanan deformasyon şartları altında nano malzemelerin mekanik davranışlarını ve deformasyon esnasındaki atomik konfigürasyonları analiz etmekte sıklıkla kullanılmaktadır (Kazanc vd. 2003, Kazanc 2013). Bununla birlikte polikristal nano tellerin mekanik özelliklerinin belirlenmesi amacıyla yapılan çalışmalar hala yeterli değildir.

Bu çalışmada, farklı ikiz sınır aralıklarına sahip polikristal Au nano tellerine 300 K sıcaklık değeri ve $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ zorlanma oranında uygulanan tek eksenli çekme ve sıkıştırma deformasyon işlemi sonucu mekanik özelliklerdeki değişimler LAMMPS MD benzetim yazılım paketi kullanılarak incelendi. Gömülmüş Atom Metodu (GAM) potansiyel fonksiyonunun gradientinden Au atomları arasındaki kuvvetler hesaplandı. Bu fonksiyonun seçilmesindeki en büyük avantaj model sistem için daha fazla parçacıkla çalışabilme imkanı sağlaması ve bilgisayar hesaplama süresinin kısa olmasından dolayıdır. Nano tellere uygulanan deformasyon işlemleri sonucu mekanik özellikler zor-zorlama eğrilerinden, plastik deformasyon sonucu atomik yapıda meydana gelen değişimler OVITO programından elde edilen ortak komşu analiz (Common Neighbour Analysis-CNA) yönteminden tespit edildi. Ayrıca deformasyon sürecinde nano telde meydana gelen

kısmi dislokasyonlar ve gelişim süreçleri Dislokasyon Çıkarma Analizi (Dislocation Extraction Algorithm-DXA) analiz yöntemiyle belirlendi.

2. Materyal ve Metot

Bu çalışmada model polikristal Au nano telinde taneler Atoms programı Hirel (2015) tarafından Voronoi mozaikleme (Voronoi tessellation) algoritması kullanılarak oluşturuldu. Model sistemde oluşturulan tanelerin ortalama boyutu d , tane sayısı n ve MD hücre hacmi V olmak üzere $n = [6V / (\pi d^3)]$ ifadesi ile belirlenir (Zhang vd. 2021). Bu çalışmada kullanılan nano tellerdeki ortalama tane boyutu 7.59 nm olarak hesaplanmıştır. 128000 parçacıktan meydana gelen polikristal Au nano tel sistemi x ekseninde 32,5 nm, y ve z ekseninde 8,4 nm boyutlarına sahiptir. Her bir tane içerisinde, matrisin bir kısmının ikiz düzleme göre yansıtılmasıyla farklı ikiz sınır aralıklarına sahip nano tel yapıları oluşturuldu (Liv d. 2010). Bunun sonucunda Şekil 1'de görüldüğü gibi taneler içerisinde ikiz sınırları arasındaki mesafeler 0,36 nm, 1,08 nm, 1,74 nm, 2,35 nm ve 3,13 nm olacak şekilde beş farklı ikiz sınır aralıklı Au nano tel sistemlerinin başlangıç yapıları oluşturuldu. Yapı açısından kristalografik yönelimler ve tane morfolojisi aynıdır.



Şekil 1. Beş farklı ikiz sınır aralığına sahip çok kristalli Au nano tel sistemlerinin başlangıç yapıları.

Atomlar arası potansiyelin modellenecek sisteme uygun olarak seçimi MD benzetim çalışmalarından elde edilecek sonuçlarının deneysel sonuçlarla uyum içerisinde olmasında en büyük etkidir. Matematiksel olarak basit bir yapıya sahip olmasından dolayı birçok çalışmada tercih edilen GAM (Daw ve Baskes 1983) malzemelerin mekanik, fiziksel ve termodinamik özelliklerinin belirlenmesinde oldukça etkilidir. Çok cisim etkileşmelerini içeren ve yarı deneysel bir potansiyel fonksiyonu olan GAM

$$E_{top} = \sum_i^N F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \Phi(r_{ij}) \quad (1)$$

şeklinde ifade edilmektedir. Bu fonksiyonda sistemdeki atom sayısı N olmak üzere $F_i(\rho_i)$, gömme enerjisini ve

$\Phi(r_{ij})$ ise ikili etkileşme enerjisini temsil etmektedir (Guellil ve Adams 1992). Literatürden potansiyel fonksiyonunun detayları ve Au elementi için potansiyel parametreleri bulunabilir (Zhakhovskii vd. 2009).

Model sisteme uygulanacak çekme veya sıkıştırma deformasyon işlemi için MD benzetim çalışmalarında mikroskobik zor tensörü,

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

şeklinde hesaplanmaktadır (Kazanc 2013).

Bu çalışmada 5 farklı ikiz sınır aralığına sahip çok kristalli Au nano tel sisteminde atomlar başlangıç yapısı olarak örgü parametresi 4.06 Å olacak şekilde fcc örgü noktalarına yerleştirildi. Model sistemde periyodik sınır şartları sadece nano telin x doğrultusu boyunca uygulanırken y ve z yönleri serbest bırakıldı. Atomlara ilk hızların atanması Maxwell-Boltzman hız dağılımı ile rastgele olacak şekilde gerçekleştirildi. Hareket denklemlerin sayısal integrasyonu için Verlet algoritmasının hız formu kullanıldı. İntegrasyon adım aralığı 1 fs olarak belirlendi. Deformasyondan önce nano teller, izotermal-izobarik topluluk (NPT) altında 300K sıcaklığında 100 ps boyunca sıfır basınçta dengeye getirildi. Kararlı denge durumuna ulaşıldıktan sonra tel eksenini boyunca $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ sabit gerinim hızında ayrı ayrı çekme ve sıkıştırma deformasyon işlemi uygulamak için kanonik istatistik topluluğu (NVT) kullanıldı. Deformasyon sonucu meydana gelen plastik deformasyon CNA tekniği ile görselleştirildi. Ayrıca yapı içerisinde kısmi dislokasyonların oluşumu ve gelişimi DXA analiz tekniğinden yararlanılarak tespit edildi.

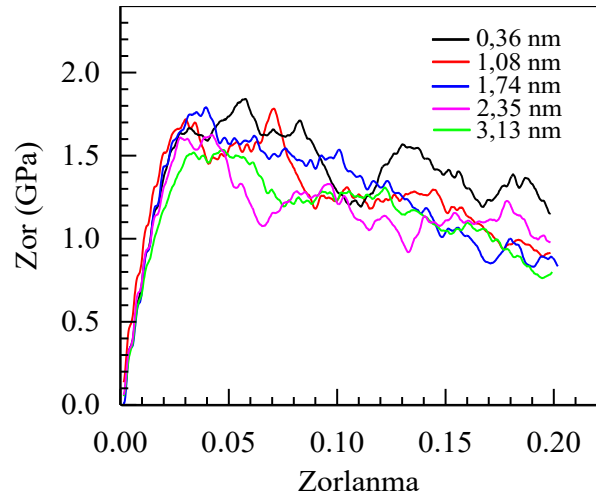
3. Bulgular

Bu çalışmada MD benzetim yöntemi ile farklı ikiz sınır aralıklarına sahip çok kristalli Au nano tellerine 300 K sabit sıcaklık ve 0 GPa basınç değeri altında x eksenini boyunca uygulanan $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ deformasyon zorlanması sonucu meydana gelen mekanik özelliklerdeki değişimler ve plastik deformasyon mekanizması incelenmeye çalışıldı. Model nano tel sistemlerine ayrı ayrı uygulanan sıkıştırma ve çekme zorlanması sonucu elde edilen bulgular aşağıdaki bölümlerde tartışılmıştır.

2.1 Çok kristalli nano tel sistemlerine tek eksen boyunca sıkıştırma zorlanmasının uygulanması

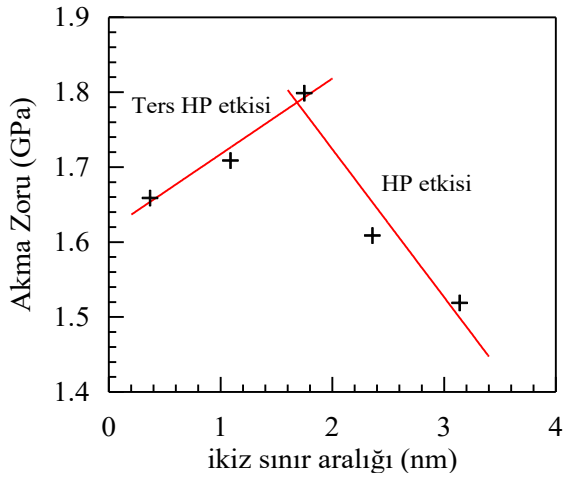
Beş farklı ikiz sınır aralığına sahip çok kristalli Au nano tel sistemine x eksenini boyunca uygulanan sıkıştırma deformasyon işlemi sonucu elde edilen zor-zorlanma eğrileri Şekil 2'de görülmektedir. Zor-zorlanma eğrilerinden numuneye uygulanan deformasyon işlemi sonucu mekanik özellikler belirlenmektedir. Uygulanan

sıkıştırma zorlanması sonucu elastik bölge olarak adlandırılan ve zor ile zorlanmanın hemen hemen doğrusal olarak değişim sergilediği bölgenin regresyon analiziyle elastiklik modülü belirlenmektedir. Şekil 2'den görüldüğü gibi elastik bölgedeki değişimin farklı ikiz sınır aralığına sahip nano tel sistemler için hemen hemen üst üste olduğu ve elastiklik modülünün 54,7 GPa, 57,1 GPa, 56,4 GPa, 51,3 GPa ve 49,7 GPa şeklinde belirlenen birbirine yakın değerlere sahip olduğu görülmektedir. Elde edilen sonuçlardan ikiz sınır aralıklarının elastiklik modülü üzerinde zayıf bir etkiye sahip olduğunu söylenebilir. Bu durum Fang'ın [35] tercihli olarak yönlendirilmiş nano ikizlere sahip Cu, Ag, Al ve Ni metalik sistemleri için yaptığı çalışmadan elde edilen sonuçlarla tutarlıdır. Zorlanmanın 0.03 ile 0.05 değerleri arasında farklı ikiz sınır aralığına sahip nano teller için elde edilen zor-zorlanma eğrilerinin pik yaparak model sistemde plastik şekil değişimin başladığı ve bundan sonra eğrilerde bir düşüş meydana geldiği görülmektedir.



Şekil 2. Au nano tel sistemine uygulanan sıkıştırma zorlanması sonucu elde edilen zor-zorlanma eğrileri.

İkiz sınır aralığının bir fonksiyonu olarak çizilen ve plastik şekil değişiminin başladığı değer olarak bilinen akma zorundaki değişimler Şekil 3'de verilmiştir. Şekilden ikiz sınır aralığının 3,13 nm'den 1,74 nm'ye düşmesiyle birlikte akma zorlanmasının kademeli olarak artarak Hall-Petch ilişkisi eğilimi gösterdiği söylenebilir. Wen (2019) tarafından yapılan çalışmada elmas elementinde ikiz sınır aralığının azalmasıyla elmasın sertliğinin arttığı belirlenmiştir. Bununla birlikte 1,74 nm değerinden sonra azalan ikiz sınır aralığıyla akma zorlanmasında da bir azalma tespit edilmiş ve ters HP ilişkisi eğilimi belirlenmiştir. Elde edilen sonuçların son deneysel bulgular ve benzetim çalışmaları ile niteliksel olarak uyumlu olduğu görülmektedir (Wu vd. 2006, Deng ve Sansoz 2009). İkiz yapıların polikristal Au nano tel sistemi üzerinde güçlendirici bir etkiye sebep olduğu ancak ters HP etkisini bastıramadığı söylenebilir.



Şekil 3. İkiz sınır aralığına bağlı olarak akma zorunun değişimi.

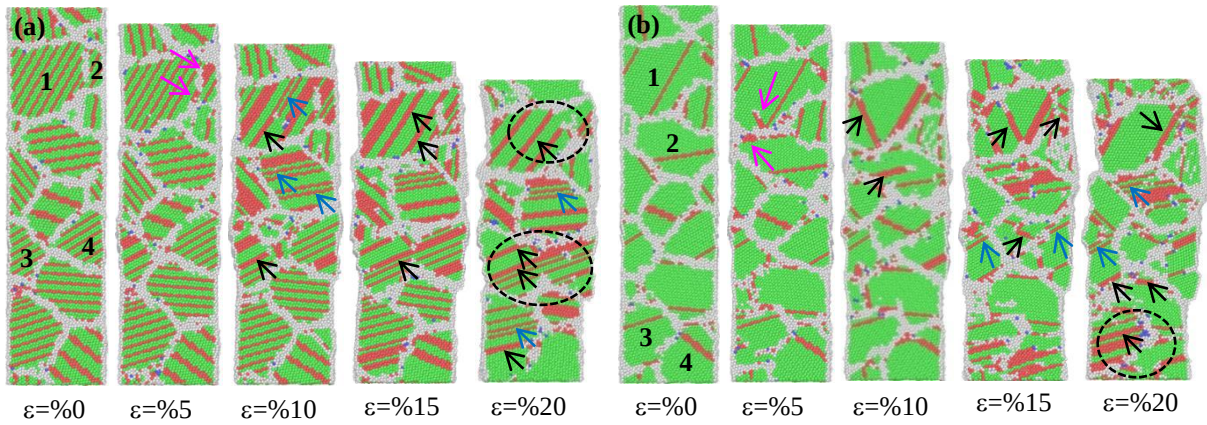
Şekil 4'de ikiz sınır aralığının en küçük (0,36 nm) ve en büyük (3,13 nm) değerlerine sahip nano tel sistemlerinin, $\epsilon=0$, $\epsilon=5$, $\epsilon=10$, $\epsilon=15$ ve $\epsilon=20$ zorlanma değerlerinde [010] düzlem kesitinden CNA analizi ile elde edilmiş atomik görüntüleri verilmiştir. CNA analiz yöntemi, modellenen sistemdeki tane ve ikiz sınırları, yığılma kusurları, farklı fazların oluşumunu ve gelişimlerini belirlemek amacıyla Honeycutt ve Andersen tarafından geliştirilmiştir. Referans olarak seçilen bir atomunun yakın komşularının geometrik analizi bu yöntemin temelini oluşturur. Her bir atom, en yakın komşuları arasındaki bağlar tarafından belirlenen bölgesel kristal yapıya göre sınıflandırılır. Yapı içerisinde bcc, fcc, hcp ve "diğer" olarak adlandırılan 4 farklı kristal birim hücresi, bir atomun çevresindeki en yakın komşu atomlarıyla yaptığı bağlar tarafından belirlenir. Elde edilen atomik konfigürasyonlarda mavi renk bcc, yeşil renk fcc, kırmızı renk hcp ve beyaz renk ise "diğer" olarak adlandırılan birim hücre yapılarını göstermektedir. "Diğer" olarak adlandırılan birim hücre yapısı bcc, fcc ve hcp yapılarına uymayan ve herhangi bir düzen içermeyen yapıları ifade etmektedir (Bañuelos vd. 2016, Fanga vd. 2020).

Şekil 4(a-b)'de her iki ikiz sınır aralığına sahip Au nano tellerinin taneleri içerisindeki atomların fcc yapıda olduğu görülmektedir. Bununla birlikte tane sınırlarındaki atomlar düzensiz bir yapıya sahiptir. Uygulanan sıkıştırma deformasyon işleminde zorlanma değerinin artmasıyla nano tellerin tanelerinde yığılma kusurlarının oluşumu belirlenmiştir. İkiz sınırları ve yığılma kusurlarındaki atomlar hcp sıkı paket yapıya sahiptir. Oluşan yığılma kusurları yapılarına göre şu şekilde tanımlanmaktadır. İki bitişik hcp atom katmanı içsel yığılma kusuru olarak ifade edilmektedir. İki hcp atom katmanı aralarında bir fcc atom tabakası bulunuyorsa bu durum dışsal yığılma kusuru olarak ifade edilir (Wu vd. 2005, Hou vd. 2020). Şekil 4(a-b)'de atomik konfigürasyonlar üzerinde belirtilen siyah oklar içsel yığılma kusurlarını, mavi oklar dışsal yığılma

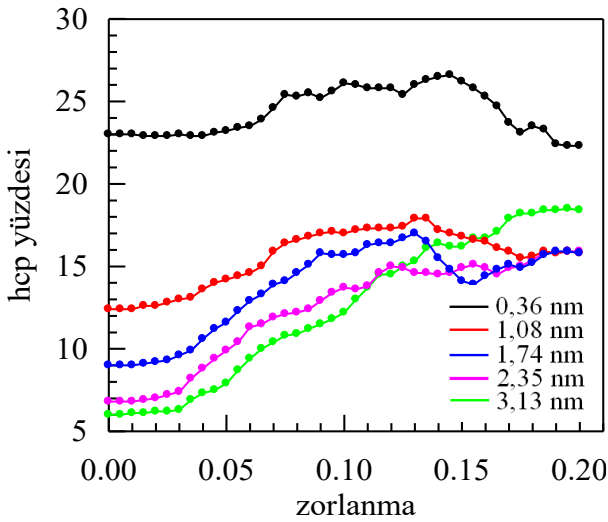
kusurlarını ve pembe oklar ise ikiden fazla hcp tabakanın bir araya gelmesiyle oluşan hcp tabakalı yapı bölgelerini göstermektedir.

Şekil 4(a)'da soldaki ilk şekil herhangi bir sıkıştırmanın uygulanmadığı $\epsilon=0$ durumuna karşılık gelen nano tele sisteminin atomik konfigürasyonu göstermektedir. Zorlanma $\epsilon=5$ 'e ulaşıncaya 1 ve 2 numaralı tanelerin tane sınırında pembe renkli oklarla işaretlenen bölgede hcp birim hücreli yapıların oluşumu belirlenmiştir. $\epsilon=10$ değerinde siyah ve mavi oklarla gösterilen içsel ve dışsal yığılma kusurlarındaki artış net bir şekilde görülmektedir. Bununla birlikte $\epsilon=5$ zorlanma değerinde oluşan yığılma kusurları 1 ve 2 numaralı taneler arasındaki tane sınırı geçerek tane sınırını kısmen tahrip etmiştir. Bu durum 1 ve 2 numaralı tanelerin birleşme eğiliminde olmasına karşılık gelir. Yığılma kusurları ikiz sınırlarında kesişerek ikiz sınırları üzerinde basamaklar oluşturarak ikiz sınırlarını kısmen yok eder ve ikiz sınırlarına paralel olan yığılma kusurları ikiz sınırının yer değiştirmesine neden olur. Bunun nedeni, ikizler içeren nano polikristalde tane yöneliminin rasgele dağılması, ikiz sınırı ile çekme yönü arasındaki açının rasgele olmasıdır. Ayrıca tane sınırı ve oluşan dislokasyonlar arasındaki etkileşim tane sınırlarını bozarak tanelerin birleşme eğilimine neden olmaktadır (Chen vd. 2024). Benzer durum $\epsilon=15$ zorlanma değerine ulaşıldığında 3 ve 4 numaralı tane sınırlarında da tespit edilmekte ve atomik konfigürasyonların elde edildiği son zorlanma değeri olan $\epsilon=20$ 'de noktali dairelerle gösterilen bölgelerde tane sınırlarının tamamen tahrip olup tanelerin birleşimi görülmektedir.

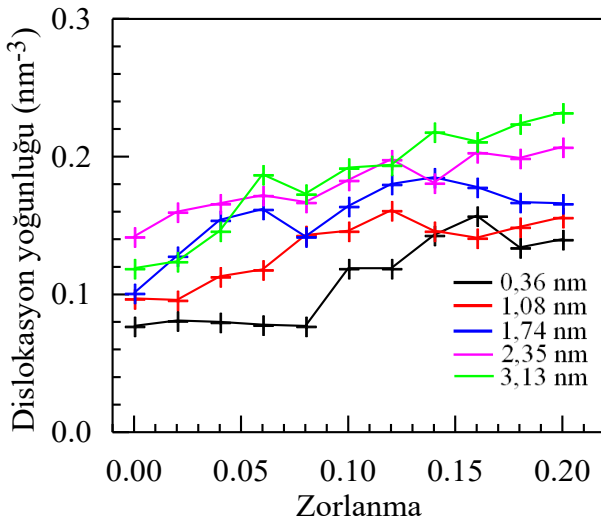
Şekil 4(b)'de ikiz sınır aralığı 3,13 nm olan polikristal nano tel sisteminin farklı zorlanma değerlerindeki atomik görüntüleri verilmiştir. İlk şekil $\epsilon=0$ değerine karşılık gelmektedir. Uygulanan zorlanma $\epsilon=5$ olduğunda 1 ve 2 numaralı taneler arasındaki sınırda pembe renkli oklarla işaretlenen bölgelerde yığılma kusurlarının oluşmaya başladığı görülmektedir. Bu durum tane sınırlarının dislokasyonların emisyon kaynakları olduğunu gösterir. $\epsilon=10$ olduğunda siyah okla gösterilen noktalarda içsel yığılma kusurlarının meydana geldiği tespit edilmiştir. Zorlanmanın $\epsilon=15$ ve $\epsilon=20$ değerinde içsel yığılma kusurlarının arttığı ve yapı içerisinde dışsal yığılma kusurlarının da oluşumu görülmektedir. $\epsilon=15$ zorlanma değerinde 3 numaralı tane içerisinde oluşan yığılma kusurlarının 3 ve 4 numaralı taneler arasındaki sınırı kısmen tahrip ettiği ve bunun sonucunda $\epsilon=20$ değerinde noktali daire ile gösterilen bölgede bu iki tanenin birleşmesi yönünde bir eğilim olduğu belirlenmiştir.



Şekil 4. (a) 0,36 nm ve (b) 3,13 nm ikiz sınır aralığına sahip nano tel sistemlerinin farklı zorlanma değerlerinde CNA analizinden elde edilen atomik görüntüleri.



Şekil 5. Uygulanan sıkıştırma zorlanması ile farklı ikiz sınır aralığına sahip polikristal nano tellerde hcp birim hücreli yapıların yüzde değişimleri.



Şekil 6. Uygulanan sıkıştırma zorlanması ile toplam dislokasyon yoğunluğundaki değişim.

Uygulanan sıkıştırma deformasyonu sonucu nano tel sistemlerde meydana gelen bu yığılma kusurlarının değişiminin belirlenmesi için zorlanmaya karşı hcp yüzdeleri Şekil 5'te verilmiştir. Elastik deformasyonun

meydana geldiği $\varepsilon=0,03$ değerine kadar nano tellerdeki hcp yüzdeleri hemen hemen sabit kalmaktadır. Bu zorlanma değerinden sonra çeşitli plastik şekil değiştirme mekanizmalarına bağlı olarak mikro yapıdaki hcp yüzdeleri artış sergilemektedir. Azalan ikiz sınır aralığına karşı yapı içerisinde hcp yüzdeleri $\varepsilon=0,1$ değerine kadar bir artış göstermektedir. $\varepsilon=0,13$ değerinden sonra nano tel sistemlerindeki hcp yüzdeleri bir azalma meydana gelirken 3,13 nm ikiz sınır aralığına sahip nano telde artış devam etmektedir. $\varepsilon=0,2$ zorlanma değerinde hemen bütün nano tel sistemlerinde hcp yüzdeleri sabit bir değere ulaşmıştır. Bununla birlikte $\varepsilon=0$ ve $\varepsilon=0,2$ zorlanma değerleri için nano tel model sistemlerinin hcp yüzdeleri arasındaki farka bakıldığında ikiz sınır aralığı artışıyla bu farkın arttığı görülmektedir. Bunun nedeni olarak model sistemlerde ikiz sınır aralığının azalmasıyla sadece yığılma kusurlarını oluşturacak dislokasyon hareketi değil, aynı zamanda ikizler arasındaki etkileşim ve ikiz sınırlarını yok edecek dislokasyonlarında bulunması olarak düşünülebilir (Chen vd. 2024).

Şekil 6'da farklı ikiz sınır aralıklarına sahip nano tellere uygulanan zorlanma ile toplam dislokasyon yoğunluğundaki değişim verilmiştir. Zorlanmadaki artışın dislokasyon yoğunluğunda da bir artışa sebep olduğu açıkça görülmektedir. Bununla birlikte azalan ikiz sınır aralığına sahip model sistemlerde dislokasyon yoğunlukları azalmaktadır. İkiz sınır aralıklarının azalması ve buna bağlı olarak tanelerin içerisinde daha fazla sayıda ikiz yapıların meydana gelmesi dislokasyonların çekirdeklenmesini ve gelişimini zorlaştırmaktadır.

İkiz sınır aralığı en düşük değerdeyken dislokasyon yoğunluğunda ki artış zorlanmanın daha büyük değerlerinde meydana gelmektedir. Buna karşılık dislokasyon yoğunluğundaki artış ikiz sınır aralığının artmasıyla zorlanmanın daha düşük değerlerinde başlamaktadır. Bunun ikiz sınır aralığının düşük olduğu

nano tellerde dislokasyonların çekirdeklenmesi ve gelişimi için daha az uygun ortam bulmasından kaynaklandığı düşünülmektedir. Şekil 6'da model sistemlere uygulanan zorlanma artarken dislokasyon yoğunlukları da artmasına rağmen bazı zorlanma değerlerinde bir azalma ve sonrasında tekrar bir artış görülmektedir. Bu durumun uygulanan zorlanma ile çekirdeklenen dislokasyonların gelişimin ve yayılımının tane ve ikiz sınırları tarafından engellenmesinden meydana geldiği düşünülmektedir. Artan zorlanma değerlerinde bu engelleri aşan dislokasyonlar yapı içerisinde gelişimine devam edecek ve bu durumda yoğunluğun artmasına sebep olacaktır (Zhang vd. 2016).

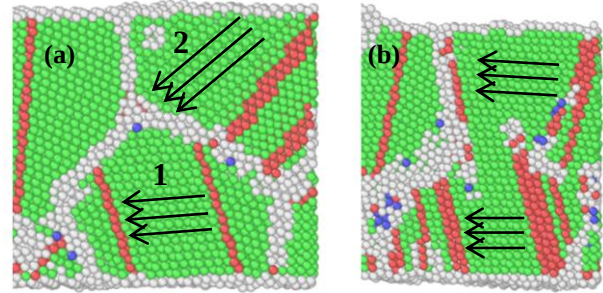
Tane dönme mekanizması oda sıcaklığında veya yüksek sıcaklıklarda nano polikristal malzemelerde yaygın olarak gözlenen bir deformasyon mekanizmasıdır ve birçok deneysel ve benzetim çalışmalarında belirlenmiştir (Haslam vd. 2001, Haslam vd. 2003, Schiøtz ve Jacobsen 2003). Wang (2014) yaptığı benzetim çalışması sonucu nano polikristal Pt'nin tane boyutu 6 nm'den küçük olduğunda tane dönmesinin ana deformasyon mekanizması olduğunu göstermiştir. Liu (2020) MD benzetim çalışması ile nano polikristal Au'nun deformasyon mekanizmasını incelemiştir. Tane boyutu ne kadar küçükse tane sınırı kaymasının ve tane dönmesinin o kadar kolay gerçekleştiğini göstermiştir. Bununla birlikte ikiz içeren yapılarda tane dönmesi belirgin değildir. Bunun nedeni ikiz sınırlarının tane dönüşünü engellemesidir. 2,35 nm ikiz sınır aralığına sahip nano tel sisteminde zorlanma uygulanmadan önce 1 ve 2 numaralı tanelerdeki atomik yönelimler Şekil 7(a) üzerinde gösterilen oklarla belirlenmiştir. Oklar, 1 ve 2 numaralı tanelerdeki atomik yönelim farklarını açıkça ifade etmektedir. Şekil 7(b)'de görüldüğü gibi gerilme uygulandıktan sonra iki tane bölgesi için çizilen okların birbirine paralel olduğu bir başka deyişle her iki tanedeki atomik yönelimlerin aynı olduğu belirlenmiştir.

Model sisteme sıkıştırma gerilmesi uygulandıktan sonra taneler dönerek yeniden yönelim almış ve aynı yönelime sahip taneler birleşerek daha büyük tek bir tane oluşturmuştur. Bunun haricinde diğer ikiz sınır aralığına sahip nano tel model sistemlerde tane dönmesi deformasyon mekanizması ile tane birleşimi gözlenmemiştir.

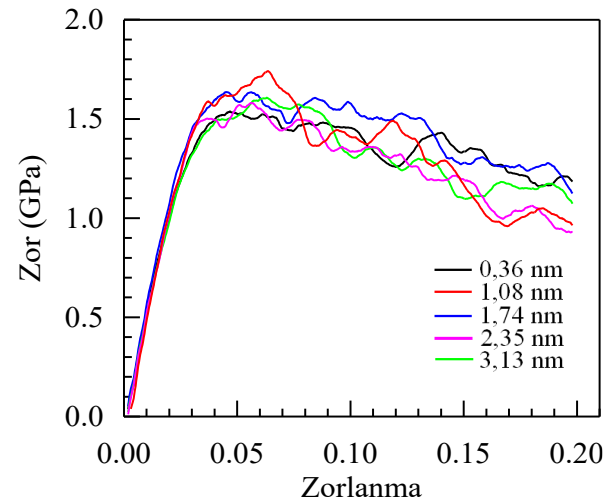
3.2. Çok kristalli nano tel sistemlerine tek eksen boyunca çekme zorlanmasının uygulanması

Her bir tanenin içerisinde farklı ikiz sınır aralığına sahip ikiz yapıların oluşturuldu Au nano tel sistemine uygulanan çekme deformasyon işlemi sonucu elde edilen zor-zorlanma eğrileri Şekil 8'de verilmiştir. Elastik değişimin

meydana geldiği 0,02 zorlanma değerine kadar farklı ikiz sınır aralığına sahip model nano sistemlerin zor-zorlanma eğrilerinin hemen hemen çakışık olduğu açıkça görülmektedir. Doğrusal değişimin sergilendiği bu bölgeden elastiklik modülü 52,3 GPa olarak tespit edildi. Uygulanan çekme deformasyon işlemi sonucu belirlenen nano tellerin elastiklik modülüne ikiz sınır aralıklarının herhangi bir etkisinin olmadığı söylenebilir. Zorlanma değeri 0.02 ile 0.07 arasında zor-zorlanma eğrilerinin pik yaparak nano tel sistemlerinde plastik şekil değişimin başladığı ve bundan sonra bir düşüş meydana geldiği görülmektedir.



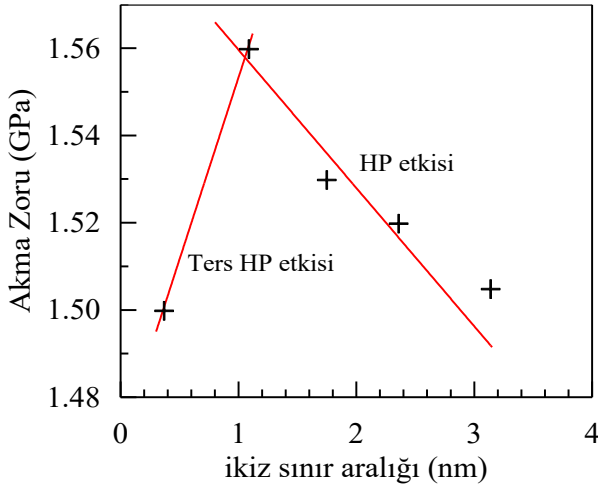
Şekil 7. (a) $\epsilon=0$ ve (b) $\epsilon=20$ zorlanma değerlerinde tane içlerindeki atomik yönelimler.



Şekil 8. Au model nano tel sistemine uygulanan çekme zorlanma sonucu elde edilen zor-zorlanma eğrileri.

İkiz sınır aralığına karşı plastik deformasyonun başladığı akma zorunun değişimi Şekil 9'da verilmiştir. İkiz sınır aralığının 3,13 nm'den 1,08 nm'ye düşmesiyle birlikte akma zorlanmasının kademeli olarak artarak Hall-Petch ilişkisi eğilimi gösterdiği söylenebilir. Bununla birlikte 1,08 nm değerinden sonra ikiz sınır aralığında azalmayla akma zorlanmasında bir düşüş tespit edilmiş ve ters HP ilişkisi eğilimi belirlenmiştir. Sıkıştırma deformasyon işleminde olduğu gibi çekme deformasyon işleminin uygulandığı nano teller içinde ikiz yapıların sistem üzerinde güçlendirici bir etkiye sebep olduğu, ancak ters HP etkisini bastıramadığı söylenebilir. Hou vd. (2020) ikiz yapılara sahip Au nano telinin çekme deformasyonu altında

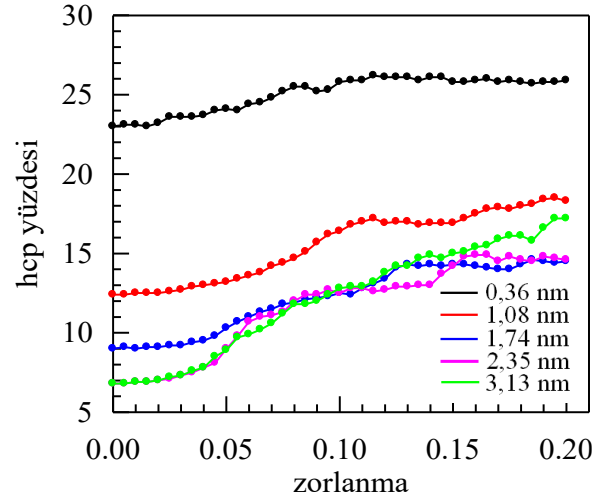
mekanik özelliklerindeki değişimleri incelediklerinde, azalan ikiz sınır aralığının akma zorunu azalttığı, buna karşılık belirli bir değerden sonra bir artışın meydana geldiğini belirlemişlerdir. Buna karşılık elastiklik modülünde ise herhangi bir değişimin tespit edilmemiştir. Bir başka çalışmada ikiz sınırlarının Pd'nin akma zorunu düşürdüğü, buna karşılık nano ikizli Cu'nun akma dayanımını artırdığı belirlenmiştir (Stukowski 2010). Ayrıca Cu ve Ag nano tellerinde ikiz sınır aralığının elastiklik modülü üzerinde oldukça zayıf bir etkiye sahip olduğu tespit edilmiştir (Cao vd. 2007, Gao vd. 2015). Ren vd. (2022) nano çok kristalli Al model sisteminde ikiz aralığının plastik deformasyon üzerindeki etkisini araştırdığı çalışmada, ikiz aralığı 2-12 nm arasında olduğunda ikiz aralığının azalmasıyla akma dayanımının azaldığını belirledi. İkiz sınır aralığının farklı kristal malzemelerin mekanik özellikleri üzerinde etkisinin farklı olduğu söylenebilir (Wen vd. 2019, Ren vd. 2022).



Şekil 9. Çekme deformasyon sonucu ikiz sınır aralığına bağlı olarak akma zorunun değişimi.

Şekil 10'te uygulanan çekme deformasyonu sonucu nano tel sistemlerde meydana gelen yığılma kusurlarının değişiminin belirlenmesi amacıyla zorlanmaya karşı hcp yüzdeleri çizilmiştir. Elastik deformasyon bölgesi olarak bilinen $\epsilon=0,02$ zorlanma değerine kadar nano tellerdeki hcp yüzdelerinin hemen hemen sabit kaldığı görülmektedir. Uygulanan zorlanmanın artmasıyla farklı deformasyon mekanizmalarının etkisiyle mikro yapıdaki hcp yüzde değerlerinin yükseldiği belirlenmiştir. hcp yüzdelerinde $\epsilon=0,09$ değerine kadar bir artış meydana gelmesine karşılık bu değerden sonra farklı ikiz sınır aralığına sahip nano tellerin hepsinde bazı zorlanma değerlerinde kısmi azalmalar göze çarpmaktadır. $\epsilon=0,2$ zorlanma değerinde hemen hemen bütün nano tel sistemlerde hcp yüzdeleri sabit bir değere ulaşmıştır. Bununla birlikte nano tel model sistemlerinin hcp yüzdelerinin $\epsilon=0$ ve $\epsilon=0,2$ 'ye karşılık gelen değerleri

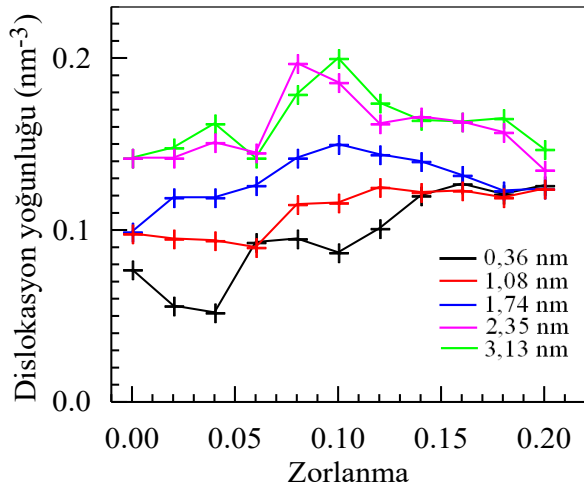
arasındaki farkına bakıldığında ikiz sınır aralığı artışıyla bu farkın arttığı görülmektedir. İkiz sınır aralığının azalmasıyla sadece yığılma kusurlarını oluşturacak dislokasyon hareketi değil, aynı zamanda ikizler arasındaki etkileşim ve ikiz sınırlarını yok edecek dislokasyonlarında bulunması bu farkın görülmesinin sebebi olarak düşünülebilir.



Şekil 10. Çekme zorlanması ile farklı ikiz sınır aralığına sahip polikristal nano tellerde hcp birim hücreli yapıların yüzde değişimleri.

Şekil 11'da farklı ikiz sınır aralıklarına sahip nano tellere uygulanan zorlanmaya karşı toplam dislokasyon yoğunluğundaki değişim verilmiştir. Dislokasyon yoğunluklarının azalan ikiz sınır aralığıyla azaldığı görülmektedir. İkiz sınır aralıklarının azalmasından dolayı tanelerde daha fazla sayıda ikiz yapılarının bulunması dislokasyonların çekirdeklenmesi ve gelişiminde bir engeldir. Dislokasyon yoğunluğunda ki artışın ikiz sınır aralığı küçük değerlerdeyken yüksek zorlanmalarda, ikiz sınır aralığı büyük değerlerdeyken zorlanmanın daha düşük değerlerinde artmaya başladığı görülmektedir. Bunun sebebinin düşük ikiz sınır aralıklarında dislokasyonların çekirdeklenmesi ve gelişimi için daha az uygun ortam bulması olarak ifade edilebilir. Şekil 11'den zorlanmadaki artışın dislokasyon yoğunluklarında inişli çıkışlı bir değişime sebep olduğu görülmektedir. Yapı içerisinde çekirdeklenen dislokasyonların gelişiminin ve yayılımının tane ve ikiz sınırları tarafından engellenmesi dislokasyon yoğunluklarındaki azalmalara, buna karşılık zorlanma değerinin artmasıyla dislokasyonların karşılaştıkları engelleri aşmasının ise yoğunluktaki artışa sebep olduğu söylenebilir (Zhang vd. 2019).

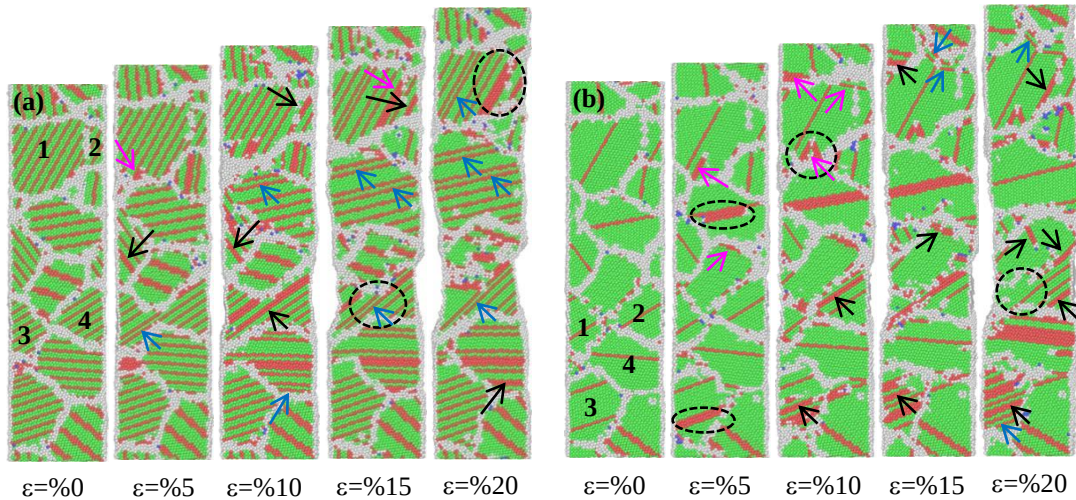
Şekil 12 (a-b)'de ikiz sınır aralığının en küçük değeri olan 0,36 nm ve en büyük olan 3,13 nm için $\epsilon=0$, $\epsilon=5$, $\epsilon=10$, $\epsilon=15$ ve $\epsilon=20$ çekme zorlanma değerlerinde [010] düzlem kesitinden CNA analizi ile elde edilmiş atomik görüntüleri verilmiştir.



Şekil 11. Uygulanan çekme zorlanması ile toplam dislokasyon yoğunluğundaki değişim.

Model Au nano tellerinin taneleri içerisindeki atomların fcc ve bu taneler içerisinde oluşturulan ikiz sınırlarının hcp bir hücreli yapıda olduğu, bununla birlikte tane sınırlarındaki atomların ise düzensiz bir yerleşim sergilediği görülmektedir. Şekil 12 (a)'da görülen ilk atomik konfigürasyon 0,36 nm ikiz sınır aralığına sahip nano tel sistemine çekme işleminin uygulanmadığı $\epsilon=0$ durumuna karşılık gelmektedir. $\epsilon=\%5$ olduğunda 1 numaralı tanenin tane sınırında pembe okla gösterilen noktada bir yığılma kusurunun oluşumu görülmektedir. Bununla birlikte yapı içerisinde içsel ve dışsal yığılma kusurları da oluşmaktadır. Çekme zorlanmasının artması ve $\epsilon=\%10$ değerine ulaşıldığında oluşan yığılma kusurlarında artış görülmektedir.

Ayrıca yığılma kusurlarının 1-2 ve 3-4 numaralı taneler arasındaki tane sınırını geçerek sınırları kısmen tahrip ettiği belirlenmiştir. Bu durum tanelerin uygulanan çekme zorlanmasının artışı durumunda birleşme eğilimi göstermesine karşılık gelmektedir. $\epsilon=\%15$ zorlanma değerine ulaşıldığında 1-2 numaralı tane sınırında hcp birim hücreli yığılma kusur düzlemleri pembe okla işaret edilen bölgede birikerek tane sınırlarını yok etmiş ve tanelerin birleşmeye başlamasına neden olmuşlardır. Aynı şekilde tane birleşimi olayı 3-4 numaralı taneler arasında siyah noktali daireler ile gösterilen bölgede de görülmektedir. Son olarak $\epsilon=\%20$ değerine ulaşıldığında yapı içerisinde yığılma kusurlarında bir artışın ve 1-2 numaralı tanelerin siyah noktali daire ile gösterilen bölgede birleşiminin meydana geldiği tespit edilmiştir. Şekil 12 (b)'de çekme zorlanması uygulanan çok kristalli nano tel sisteminin ikiz sınır aralığının 3,13 nm olduğu durumdaki atomik görüntüleri verilmiştir. $\epsilon=0$ herhangi bir çekme deformasyon işleminin uygulanmadığı durumu göstermektedir. Zorlanma değeri $\epsilon=\%5$ olduğunda pembe renkli oklarla işaretlenen tane sınırı bölgelerinde yığılma kusurlarının oluşmaya başladığı tespit edilmiştir. Bu durum tane sınırlarının dislokasyonların üretimi için bir kaynak vazifesi gösterdiğine karşılık gelmektedir. Ayrıca siyah noktali dairelerle gösterilen bölgelerde hcp birim hücreli düzlemler ikiz sınırları üzerinde birikmektedir. Zorlanmanın $\epsilon=\%10$ değerine ulaşmasıyla pembe oklarla gösterilen tane sınırı bölgelerinde yığılma kusurlarının oluşumunun devam ettiği görülmektedir. Buna ek olarak içsel yığılma kusurlarının da oluşumu tespit edilmiştir.



Şekil 12. (a) 0,36 nm ve (b) 3,13 nm ikiz sınır aralığına sahip nano tel sistemlerinin farklı çekme zorlanması değerlerinde CNA analizinden elde edilen atomik görüntüleri.

Zorlanmanın $\epsilon=\%15$ ve $\%20$ değerinde içsel yığılma kusurlarının yanında dışsal yığılma kusurlarının da meydana geldiği görülmektedir. 3 ve 4 numaralı taneler içerisinde çok sayıda yığılma kusuru ve hcp birim hücreli tabakalı yapıların oluştuğu belirlenmiştir. Ayrıca 1 ve 2

numaralı tane sınırlarında oluşan yığılma kusurları tane sınırını kısmen tahrip ederek tanelerin birleşme eğilimi göstermesine sebep olmuştur. Çekme deformasyon işlemi boyunca ikiz içeren nano tel sistemlerinde tane dönmesi belirgin bir şekilde tespit edilememiştir. Bunun

nedeni olarak ikiz sınırlarının tane dönüşünü engellemesi gösterilebilir. Uygulanan çekme işlemi sırasında bazı ikiz sınırları kısmen tahrip olmaktadır. Ancak çoğu ikiz sınırının kararlılığının değişmediği görülmektedir. Bu durum ikiz sınırlarının 300 K sıcaklığında plastik deformasyon sırasında iyi bir kararlılığa sahip olduğunu gösterir. Bu, literatürde bildirilen ikiz sınırlarının iyi bir kararlılığa sahip oldu ifadesiyle uyumludur (Lu ve Lu 2009, Lu 2016, Sun vd. 2020).

4. Sonuçlar ve Tartışma

Bu çalışmada beş farklı ikiz sınır aralığına sahip Au nano tellere uygulanan tek eksenli çekme ve sıkıştırma deformasyon işlemi sonucu meydana gelen mekanik ve yapısal özelliklerdeki değişimler MD benzetim yöntemi ile incelendi. Atomlar arasındaki etkileşmelerin GAM potansiyel fonksiyonu ile belirlendiği Au model sisteminde ikiz sınırlarının düşük ara yüzey enerjisine sahip olması nedeniyle yapı içerisindeki nano ikizlerin mekanik özellikler üzerinde etkili olduğu belirlendi. Sıkıştırma deformasyon işleminde elastik modülünün kısmen, çekme deformasyon işleminde ise elastiklik modülünü ikiz sınır aralığı değişiminden etkilenmediği tespit edildi. İkiz sınır aralığının değişimine bağlı olarak HP ve ters HP etkileri gözlemlendi. Sıkıştırma ve çekme deformasyon işlemlerinde nano teller içinde ikiz yapıların sistem üzerinde güçlendirici bir etkiye sebep olduğu, ancak ters HP etkisini bastıramadığı tespit edildi. İkiz sınır aralıklarının azalmasının dislokasyonların çekirdeklenmesi ve gelişiminde bir engel olmasından dolayı ikiz sınır aralığının azalmasıyla dislokasyon yoğunluklarının azaldığı gözlemlendi. Deformasyon işlemleri esnasında çok sayıda içsel ve dışsal yığılma kusurlarının yapı içerisinde oluşumu ve yayılımı atomik konfigürasyonlardan belirlendi.

Etik Standartlar Bildirgesi

Yazarlar tüm etik standartlara uyduklarını beyan ederler.

Çıkar Çatışması Beyanı

Yazarların bu makalenin içeriğiyle ilgili olarak beyan edecekleri hiçbir çıkar çatışması yoktur

Verilerin Kullanılabilirliği

Bu çalışma sırasında oluşturulan veya analiz edilen tüm veriler, yayınlanan bu makaleye dahil edilmiştir.

5. Kaynaklar

Afanasyev, K.A., Sansoz, F., 2007. Strengthening in gold nanopillars with nanoscale twins. *NanoLett.*, **7**, 2056–2062.
<https://doi.org/10.1021/nl070959l>
 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.
<https://doi.org/10.1063/1.4943001>
 Cao, A., Wei, Y., 2006. Atomistic simulations of the mechanical behavior of five fold twinned nanowires. *Phys. Rev. B*, **74**, 214108.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.214108>
 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.
<https://doi.org/10.1063/1.2721367>
 Chen, Y., An, X., Liao, X., 2017. Mechanical behaviors of nanowires. *Appl Phys Rev.*, **4**(3), 031104.
<https://doi.org/10.1063/1.4989649>
 Chen, J., Ding, Y., Gao, Y., Wang, B., Li, R., 2024. Twin spacing and grain size dependent tensile deformation mechanism of a nano-polycrystalline Ni-based alloy. *Journal of Materials Research and Technology*, **29**, 4306–4316.
<https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2024.02.175>
 Daw, M.S., Baskes, M.I., 1983. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals. *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 1285–1295.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.1285>
 Deng, C., Sansoz, F., 2009. Near-ideal strength in gold nanowires achieved through microstructural design. *ACS Nano*, **3**, 3001–3008.
<https://doi.org/10.1021/nn900668p>
 Diao, J., Gall, K., Dunn, M.L., 2003. Surface-stress-induced phase transformation in metal nanowires. *Nat. Mater.*, **2**, 656–660.
<https://doi.org/10.1038/nmat977>
 Diao, J., Gall, K., Dunn, M.L., 2004. Yield strength asymmetry in metal nanowires. *Nano Lett.*, **4**, 1863–1867.
<https://doi.org/10.1021/nl0489992>
 Fan, H.J., Werner, P., Zacharias, M., 2006. Semiconductor nanowires: from self-organization to patterned growth. *Small*, **2**(6), 700–717.
<https://doi.org/10.1002/sml.200500495>
 Fanga, R., Wang, 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.
<https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2019.125382>
 Fang, Q.J.L., Sansoz, F., 2021. Columnar grain-driven plasticity and cracking in nanotwinned FCC metals. *Acta Mater.*, **212**, 116925.
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.116925>
 Gao, Y., Sun, Y., Yang, Y., Sun, Q., Zhao, J., 2015. Twin boundary spacing-dependent deformation behaviours of twinned silver nanowires. *Molecular Simulations*, **41**, 1546–1552.

- <https://doi.org/10.1080/08927022.2014.999238>
- Guellil, A.M., Adams, J.B., 1992. The application of the analytic embedded atom method to bcc metals and alloys. *J. Mater. Res.*, **7**, 639-652.
<https://doi.org/10.1557/JMR.1992.0639>
- Haslam, A.J., Phillpot, S.R., Wolf, D., Moldovan, D., Gleiter, H., 2001. Mechanisms of grain growth in nanocrystalline fcc metals by molecular-dynamics simulation. *Mater Sci Eng. A*, **318**, 293-312.
[https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(01\)01266-7](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(01)01266-7)
- Haslam, A.J., Moldovan, D., Yamakov, V., Wolf, D., Phillpot, S.R., Gleiter, H., 2003. Stress-enhanced grain growth in a nanocrystalline material by molecular-dynamics simulation. *Acta Mater.*, **51**, 2097-2112.
[https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(03\)00011-9](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(03)00011-9)
- Hirel, P., 2015. AtomsK: a tool for manipulating and converting atomic data files. *Comput. Phys. Commun.*, **197**, 212.
<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.07.012>
- Hochbaum, A.I., Yang, P., 2010. Semiconductor nanowires for energy conversion. *Chem. Rev.*, **110**(1), 527-546.
<https://doi.org/10.1021/cr900075v>.
- 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.
<https://doi.org/10.1016/j.physb.2019.411952>
- Hu, Y., Xu, J., Zhang, Y., Ding, S., Xia, R., 2022. Tensile and Compressive Mechanical Properties of Polycrystalline Tungsten-Molybdenum Alloy. *Phys. Status Solidi A*, **219**, 2200288.
<https://doi.org/10.1002/pssa.202200288>
- 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**, 375-381.
[https://doi.org/10.1016/S0921-4526\(03\)00101-7](https://doi.org/10.1016/S0921-4526(03)00101-7)
- 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.
<https://doi.org/10.1139/cjp-2013-0090>
- Klinger, L., Rabkin, E., 2006. Thermal stability and creep of polycrystalline nanowires. *Acta Mater.*, **54**, 305-311.
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2005.08.034>
- 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.
<https://doi.org/10.1038/nature08929>
- Li, Q., Zhang, Y., Zou, X., Gao, J., Yang, C., Ding, L., Wu, Z., Li, N., Zhang, S., Huo, Z., 2019. Influence of rapid thermal annealing on the wafer warpage in 3D NAND flash memory. *Semicond. Sci. Technol.*, **34**, 02LT01.
<https://doi.org/10.1088/1361-6641/aafccd>
- Liu, J.L., Fan, X.F., Zheng, W.T., Singh, D.J., Shi, Y.F., 2020. Nanocrystalline gold with small size: inverse Hall-Petch between mixed regime and super-soft regime. *Philos. Mag.*, **100**, 2335-2351.
<https://doi.org/10.1080/14786435.2020.1765039>
- Lu, K., Lu, L., Suresh, S., 2009. Strengthening materials by engineering coherent internal boundaries at the nanoscale. *Science*, **304**, 349-52.
<https://doi.org/10.1126/science.1159610>
- Lu, K. 2016. Stabilizing nanostructures in metals using grain and twin boundary architectures. *Nat. Rev. Mater.*, **1**, 16019.
<https://doi.org/10.1038/NATREVMATS.2016.19>
- Molares, M.E.T., Balogh, A.G., Cornelius, T.W., Neumann, R., Trautmann, C., 2004. Fragmentation of nanowires driven by Rayleigh instability. *Appl. Phys. Lett.*, **85**, 5337-5339.
<https://doi.org/10.1063/1.1826237>
- Niu, J.J., Zhang, J.Y., Liu, G., Zhang, P., Lei, S.Y., Zhang, G.J., Sun, J., 2012. Size- dependent deformation mechanisms and strain-rate sensitivity in nanostructured Cu/X (X = Cr, Zr) multilayer films, *Acta Materialia*, **60**, 3677-3689.
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.03.052>
- Niu, Y., Jia, Y., Lv, X., Zhu, Y., Wang, Y., 2024. Molecular dynamics simulations of polycrystalline titanium mechanical properties: Grain size effect. *Materials Today Communications*, **40**, 109558.
<https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2024.109558>
- Philips, R., 2001. Crystals, Defects and Microstructures. *Cambridge University Press*.
- Rajput, A., Paul, S.K., 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.
<https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.105126>
- Rawat, S., Mitra, N., 2020. Twinning, phase transformation and dislocation evolution in single crystal titanium under uniaxial strain conditions: A molecular dynamics study. *Computational Materials Science*, **172**, 109325.
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109325>
- Ren, J.Q., Yang, D., Wang, Q., Lu, X.F., Zhang, X.D., Xue, H.T., Tang, F.L., Ding, Y.T., 2022. Effect of grain size and twin boundary spacing on plastic deformation of nano-polycrystalline al alloy by molecular dynamics study. *Rare Met Mater Eng.*, **51**, 2436-2445.
<https://doi.org/10.12442/j.issn.1002-185X.E20210014>
- Schiøtz, J., Jacobsen, K.W., 2003. A maximum in the strength of nanocrystalline copper. *Science*, **301**, 1357-9.
<https://doi.org/10.1126/science.1086636>

- Smith, W.F., 1996. Principles of Materials Science and Engineering, McGraw-Hill Inc., New York, USA.
- 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.
- Sun, L.G., Wu, G., Wang, Q., Lu, J., 2020. Nanostructural metallic materials: structures and mechanical properties. *Mater. Today*, **38**, 114–135.
<https://doi.org/10.1016/j.mattod.2020.04.005>
- Teo, B.K., Huang, S.P., Zhang, R.Q., Li, W.K., 2009. Theoretical calculations of structures and properties of one-dimensional silicon-based nanomaterials: Particularities and peculiarities of silicon and silicon-containing nanowires and nanotubes. *Coord. Chem. Rev.*, **253(23)**, 2935–2958.
<https://doi.org/10.1016/j.ccr.2009.08.001>
- Veerababu, J., Nagesha, A., Shankar, V., 2024. Slip to twinning to slip transition in polycrystalline BCC-Fe: Effect of grain size. *Physica B: Condensed Matter*, **694**, 416465.
<https://doi.org/10.1016/j.physb.2024.416465>
- Wang, L.H., Teng, J., Liu, P., Hirata, A., Ma, E., Zhang, Z., Chen, M.W., Han, X.D., 2014. Grain rotation mediated by grain boundary dislocations in nanocrystalline platinum. *Nat. Commun.*, **5**, 1–7
<https://doi.org/10.1038/ncomms5402>
- Wen, B., Xu, B., Wang, Y.B., Gao, G.Y., Zhou, X.F., Zhao, Z.S., Tian, Y.J., 2019. Continuous strengthening in nanotwinned diamond. *npj Comput. Mater.*, **5**, 117.
<https://doi.org/10.1038/s41524-019-0256-2>
- Wu, W., Brongersma, S.H., Hove, M.V., Maex, K., 2004. Influence of surface and grain-boundary scattering on the resistivity of copper in reduced dimensions. *Appl. Phys. Lett.*, **84**, 2838–2840.
<https://doi.org/10.1063/1.1703844>
- Wu, B., Heidelberg, A., Boland, J.J., 2005. Mechanical properties of ultrahigh-strength gold nanowires. *Nat. Mater.*, **4**, 525–529.
<https://doi.org/10.1038/nmat1403>
- Wu, B., Heidelberg, A., Boland, J.J., Sader, J.E., Sun, X., Li, Y., 2006. Microstructure hardened silver nanowires, *NanoLett.*, **6**, 468–472.
<https://doi.org/10.1021/nl052427f>
- Wu, A.H., Boland, J.J., Sader, J.E., Sun, X., Li, Y. 2009. Microstructure-hardened silver nanowires, *Nano Lett.*, **6**, 468–472.
<https://doi.org/10.1021/nl052427f>
- Zhakhovskii, V.V., Inogamov, N.A., Petrov, Y.V., Ashitkov, S.I., Nishihara, K., 2009. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials. *Applied Surface Science*, **255 (24)**, 9592–9596.
<https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2009.04.082>
- Zhang, L., Lu, C., Tieu, K., 2016. A review on atomistic simulation of grain boundary behaviors in face-centered cubic metals. *Comput. Mater. Sci.* **118**, 180–191.
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.03.021>
- Zhang, L., Shibuta, Y., Huang, X., Lu, C., Liu, M., 2019. Grain boundary induced deformation mechanisms in nanocrystalline Al by molecular dynamics simulation: From interatomic potential perspective. *Comput. Mater. Sci.*, **156**, 421–433.
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.10.021>
- Zhang, Y., Li, J., Hu, Y., Ding, S., Du, F., Xia, R., 2021. Mechanical properties and scaling laws of polycrystalline CuZr shape memory alloy. *J. Appl. Phys.*, **130**, 155106.
<https://doi.org/10.1063/5.0065441>