

Atf İçin: Kazanç S, 2021. Uygulanan Çekme Deformasyonu Altında Niyobyum Nano Telinin Mekanik Özelliklerinin Moleküler Dinamik Benzetimi ile İncelenmesi. İğdır Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi, 11(4): 2758-2771.

To Cite: Kazanç S, 2021. Investigation of Mechanical Properties of Niobium Nanowire Under Applied Tension Deformation by Molecular Dynamics Simulation. Journal of the Institute of Science and Technology, 11(4): 2758-2771.

Uygulanan Çekme Deformasyonu Altında Niyobyum Nano Telinin Mekanik Özelliklerinin Moleküler Dinamik Benzetimi ile İncelenmesi

Sefa KAZANÇ

ÖZET: Bu çalışmada farklı sıcaklık ve zorlanma oranlarında [100] doğrultusu boyunca uygulanan çekme deformasyonunun Nb nano telinin mekanik özellikleri üzerindeki etkisi Moleküler Dinamik (MD) benzetim yöntemi kullanılarak incelendi. Model sisteme uygulanan tek eksenli çekme zorlanması altında zor-zorlanma eğrisi, elastiklik modülü, akma zorlanması, poisson oranı ve oluşan plastik deformasyon belirlendi. Atomlar arasındaki kuvvetler çok cisim etkileşmelerini içeren Gömülmüş Atom Metodu (GAM) ile elde edildi. Sıcaklık ve zorlanma oranının Nb nano telinin mekanik davranışları üzerinde etkili olduğu tespit edildi. Elastiklik modülünün düşük sıcaklıklarda zorlanma oranından bağımsız olduğu, buna karşılık sıcaklık artışıyla azaldığı, ayrıca akma zorunun, sıcaklığın artmasıyla ve zorlanma oranının azalmasıyla azaldığı belirlendi. Uyarlanabilir genel komşu analiz (Adaptive Common Neighbor Analysis-aCNA) yöntemi kullanılarak plastik deformasyona karşılık gelen ikizlenmelerin hareketi ve bunun sonucu olarak bölgesel kristal yapıların yeniden yönelim aldığı gözlemlendi.

Anahtar Kelimeler: Nano tel, niyobyum, zor-zorlanma, moleküler dinamik benzetimi.

Investigation of Mechanical Properties of Niobium Nanowire Under Applied Tension Deformation by Molecular Dynamics Simulation

ABSTRACT: In this study, the effect of tensile deformation applied along the [100] direction at different temperatures and strain rates on the mechanical properties of Nb nanowire was investigated using the Molecular Dynamics (MD) simulation method. Under uniaxial tensile deformation applied to the model system, the stress-strain curve, modulus of elasticity, yielding strength, position ratio and the resulting plastic deformation were determined. The forces between atoms were obtained by the Embedded Atom Method (EAM), which includes many-body interactions. It was determined that temperature and strain rate were effective on the mechanical behavior of Nb nanowire. It was determined that the modulus of elasticity was independent of the strain rate at low temperatures, but decreased with the increase in temperature, and the yielding strength decreased with increasing temperature and decreasing strain rate. Using the Adaptive Common Neighbor Analysis (aCNA) method, it was observed that the movement of twinings corresponding to plastic deformation and, as a result, the reorientation of regional crystal structures.

Keywords: Nanowire, niobium, stress-strain, molecular dynamics simulation

GİRİŞ

Nano ölçekteki hem metalik hem de yarıiletken nano teller üstün mekanik, elektrik, termal, manyetik ve optiksel özelliklerinden dolayı son zamanlarda dikkat çeken malzemeler arasındadır (Park ve Zimmerman, 2005; Suresh ve Li, 2008; Gao ve ark., 2016). Bu alışılmadık karakteristikler nano tellere olan ilgiyi arttırarak birçok farklı araştırma ve uygulama alanında kullanılma fırsatı sunmuştur. Bir boyutlu önemli nano yapılardan biri olan nano teller gelecekte elektronik, optik ve nano-elektromekanik cihazların tasarlanmasında ve üretimde önemli bir rol oynayacaktır (Gan ve Chen, 2009; Jing ve ark., 2009). Son yıllarda nano laser (Huang ve Mao, 2001), alan etkili transistör (Arnold ve ark., 2003), ışık yayan diod (Changwook ve ark., 2008) gibi değişik nano cihazlar nano tellerden geliştirilmiştir. Teknolojide nano tellerin uygulamalarını arttırmak için nano ölçekteki mekanik davranışları üzerine birçok çalışma yapılmaktadır (Zhu ve Shi, 2011; Sainath ve Choudhary, 2016; Godet ve ark., 2019). Bu davranışların belirlenmesi amacıyla hacimsel yapıdaki (bulk) metalik malzemeler için birçok araştırma yapılmasına rağmen nano ölçekteki malzemeler için yapılan çalışmalar yetersiz kalmaktadır. Deneysel olarak değişik metalik nano tellerin termal, mekanik ve elektriksel özelliklerini belirlemek için birçok çalışma yapılmıştır (Lee ve ark., 2004; Pasquier ve ark., 2005; Li ve ark., 2006). Deneysel olarak nano ölçekteki metalik malzemeleri atomik boyutta incelemek için dinamik yüksek çözünürlüklü geçirmeli elektron mikroskobu (Legoas ve ark., 2002), atomik kuvvet mikroskobu (Marszalek ve ark., 2000) ve geçirmeli elektron mikroskobu (Landman ve ark., 1996) kullanılmaktadır. Nano tellerin deformasyonu ve kırılması sıcaklık, yönelim, yük uygulama oranı, yüzey ve sınır şartları gibi birçok faktör tarafından kolaylıkla etkilenebilir. Bundan dolayı metalik nano teller deneysel şartlar altında daima özel ve öngörülemez davranırlar.

Düşük yoğunluk, yüksek erime sıcaklığı, korezyon direnci, düşük nötron yakalama kesiti, oda sıcaklığında mükemmel süneklik ve şekillendirilebilmesinden dolayı Niyobyum (Nb), hem deneysel hem de teorik çalışmalarda ilgi çeken geçiş elementlerindedir (Yang ve Qi, 2019; Singh ve ark., 2020). Bununla birlikte Nb ve Nb alaşımları implarda, reaktör borularında ve uzay sanayinde tercih edilen malzemeler arasındadır (Grill ve Gnademberger, 2006; Divya ve Avinash, 2018). Literatürde Nb'nin hacimsel (bulk), kümeli (cluster), ince film yapıları hakkında birçok teorik çalışma bulunmasına karşılık (Yang ve Wu, 2010; Abdeslam ve Chihi, 2018; Singh ve ark., 2019) Nb nano teli ile ilgili yapılan çalışmaların sayısı oldukça azdır.

Bilgisayar benzetimleri atomik seviyede maddelerin yapısal ve termodinamik özelliklerinin anlaşılmasında önemli bir rol oynamaktadır. Atomik benzetim tekniklerinden MD yöntemi çekme ve sıkıştırmaya maruz kalan nano tellerin deformasyonunu ve kırılma karakterlerini değerlendirmek için etkili yöntemlerden biridir. Özellikle son yıllarda literatürde klasik MD benzetim yöntemi ile hacimsel ve nano yapıların mekanik davranışları ve deformasyon mekanizmalarını belirlemek amacıyla birçok teorik çalışma yapılmıştır (Salehinia ve Bahr, 2014; Zhanga ve ark., 2017; Rawat ve Mitra, 2020). Bununla birlikte yoğunluk fonksiyonu teorisine dayalı ilk prensip metotları (first principle) ile yapılan çalışmalarda bulunmaktadır (Krüger ve ark., 2002; da Silava ve ark., 2004). Ancak bu yöntemde atomik sistemleri modellemek için düşük parçacık sayısı ve çok sayıda işlemci içeren bilgisayarlara ihtiyaç duyulmaktadır. MD benzetim yöntemi ile faz uzayında sonlu bir zaman üzerinden atomların yörüngeleri üretilir ve bu yörüngelerden yararlanılarak sistemin istenilen fiziksel ve termodinamik özellikleri belirlenebilir (Davoodi ve Ahmadi, 2012). Atomlar arasındaki etkileşimleri matematiksel olarak ifade eden potansiyel enerji fonksiyonunun belirlenmesi modellenecek sistem için elde edilen sonuçların deneysel değerlerle uyum içerisinde olması açısından son derece önemlidir (Voter ve Chen, 1987). Farklı element ve alaşım sistemleri için farklı araştırmacılar tarafından geliştirilmiş çok sayıda

potansiyel fonksiyonu bulunmaktadır (Cai ve Ye, 1996; Malins ve ark., 2013). Çok cisim etkileşimleri temeline dayalı GAM, MD benzetim yöntemi ile yapılan çalışmalarda en çok kullanılan potansiyel fonksiyonlarından biridir. Horstemeyer ve arkadaşları (Horstemeyer ve ark., 2001) basit bir kesme altında fcc (yüzey merkezli kübik) yapılı metallerin plastik akmalarına uzunluğun ve zamanın etkisini, Liang ve Zhou (Liang ve Zhou, 2003) Cu nano telinin gerilme davranışına boyutun ve zorlanma oranının etkisini çalışmışlardır. Son zamanlarda Cu ve Ag nano tellerinde şekil hatırlama etkisi ve suni elastiklik davranış da MD benzetim yöntemi ile incelenmiştir (Park ve ark., 2005; Park ve Ji, 2006). Bununla birlikte tek atomlu ve alaşım nano teller için yapılan birçok çalışma bulunmaktadır (Güder ve Çeltek, 2020; Yıldız, 2021).

Bu çalışmada Nb nano tel sistemine [100] doğrultusu boyunca farklı sıcaklık ve zorlanma oranları altında çekme işlemi uygulanarak sistemin mekanik davranışları MD benzetim yöntemiyle incelenmeye çalışıldı. Çalışmada LAMMPS açık kaynak kodlu MD benzetim programı kullanıldı (LAMMPS, 2021). GAM potansiyel fonksiyonu ile Nb atomları arasındaki kuvvet etkileşimleri belirlendi. Elde edilen sonuçlarda sıcaklığın ve zorlanma oranlarının nano telin mekanik özellikler üzerinde etkili olduğu tespit edildi. Uygulanan zorlanma sonucu oluşan atomik yapı değişimlerinin belirlenmesi amacıyla aCNA metodu kullanıldı.

MATERYAL VE YÖNTEM

Klasik MD yöntemi, N atomlu bir sistemin Lagrange fonksiyonundan elde edilen hareket denklemlerinin sayısal integrasyonu ile atomların faz uzayındaki yörüngelerini hesaplamayı amaçlar. MD benzetim yönteminin detayları literatürden bulunabilir (Parrinello ve Rahman, 1980; Parrinello ve Rahman, 1981).

Hesaplama hücresine uygulanan eksensel zor, sistemdeki bütün atomların kinetik ve potansiyel enerjilerinin hacim ortalaması tarafından belirlenir. Zor tensörü, virial teoremi kullanılarak aşağıda verilen şekilde hesaplanabilir.

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

Bu ifade de V ve N sistemin hacmini ve toplam atom sayısını m_i ve $\boldsymbol{\vartheta}_i$ i inci atomun kütlelerini ve hızını, F_{ij} ve r_{ij} ise i ve j atomları arasındaki kuvveti ve mesafeyi göstermektedir. Denklem (1) de ilk toplam terimi sistemin termal titreşiminden, ikinci toplam terimi atomlar arası kuvvetten dolayıdır (Wen ve ark., 2010).

Dış kuvvetlerin etkisinde kalan bir cismin zorlanmış durumda olduğu söylenir. Maddenin herhangi bir noktasındaki zorun durumu dokuz bileşenli zor tensörü tarafından tayin edilir.

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \quad (2)$$

Zor tensörünün σ_{11} , σ_{22} , σ_{33} (sırasıyla σ_x , σ_y , σ_z olarak da ifade edilebilir) bileşenleri zorun normal bileşenleri, diğer bileşenleri ise zorun kesme bileşenleri olarak bilinir. Normal bileşenlerin pozitif değerleri germe zoruna, negatif değerleri sıkıştırma zoruna karşılık gelmektedir. Sisteme x eksenli boyunca uygulanan tek eksenli yüklenmede sadece σ_x bileşeni değişir. Buna karşılık diğer bileşenler sıfırdır (Jacobus ve ark., 1996).

x eksenli boyunca zorlanma $\varepsilon_x = (l_x - l_{x0}) / l_{x0}$ olarak tanımlanır. Bu ifade de l_{x0} telin x doğrultusunda yüklenme uygulanmadan önceki uzunluğu ve l_x yüklenme altındaki uzunluğudur (Saitoh ve Liu, 2009).

Bu çalışmada başlangıç yapısı olarak Nb nano tel sistemi için atomlar bcc örgü noktalarına yerleştirildi. Periyodik sınır şartları nano telin [100] doğrultusu boyunca uygulanırken [010] ve [001] doğrultuları boyunca sınır şartları uygulanmadı. Maxwell-Boltzman hız dağılımına uygun olarak model sistemdeki atomların başlangıç hızları rastgele belirlendi. Verlet algoritmasının hız formu kullanılarak 1 fs zaman adımlarında sistemin hareket denklemlerinin sayısal integrasyonu gerçekleştirildi. Tek eksenli gerilme testleri parçacık sayısının, hacmin ve sıcaklığın belirli değerlerde sabit tutulduğu NVT istatistik topluluğuna uygulandı. Gerilme yüklenmesi uygulanmadan önce bütün çalışmalarda 5×10^4 MD adımı sistemin kararlı yapıda dengeye gelmesi sağlandı. Kullanılan potansiyel fonksiyonunun kesme mesafesi (cut-off) $r_c = 2a_{Nb}$ olarak belirlendi.

Potansiyel Enerji Fonksiyonu

Tek atomlu ve alaşım sistemlerinin modellenmesi için çok cisim etkileşme terimlerini içeren GAM fonksiyonu en çok kullanılan fonksiyonlardandır. GAM'da N atomdan meydana gelen bir hesaplama hücresinde sistemin toplam enerji ifadesi (Finnis ve Sinclair, 1984);

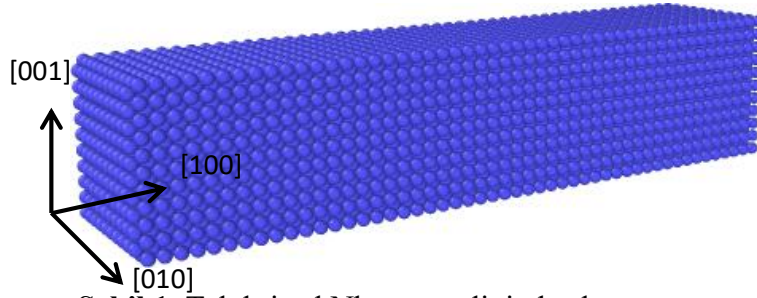
$$E_T = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ (i \neq j)}}^N \phi(r_{ij}) + \sum_i^N F(\bar{\rho}_i) \quad (3)$$

şeklinde verilmektedir. İlk terim atomlar arasındaki ikili etkileşmeleri ifade etmektedir. İkinci terim çok cisim etkileşmelerini içeren ve gömme fonksiyonu olarak bilinen çekici etkileşmeleri tanımlamaktadır. İkili etkileşme potansiyeli ve gömme fonksiyonu farklı sistemler için farklı türde tanımlanabilir. Bundan dolayı farklı türlerde GAM potansiyel fonksiyonları bulunmaktadır (Finnis ve Sinclair, 1984; Sutton ve Chen, 1990). Bu çalışmada kullanılan GAM potansiyel fonksiyonunun detayları ve Nb elementi için parametrelerin değerleri literatürden bulunabilir (Fellinger ve ark., 2010).

MD benzetim çalışmalarında model sistemdeki fcc, hcp, bcc gibi sıkı paket yapıların belirlenmesi önemli sorunlardan biridir. Katı fazdaki bu yapıların analizi için birçok yöntem geliştirilmiştir. Bu yöntemlerin genel amacı sistem içerisindeki her bir parçacığa yapısal bir tür atamaktır. Bununla birlikte bu yöntemler yerel bir yapıyı idealleştirilmiş bir yapıyla eşleştirerek ne kadar yakın olduklarını belirlemeye çalışır. MD hücresinde mevcut olan yapıların karakterizasyonu için 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 gibi yöntemler oldukça sık kullanılmaktadır (Stukowski, 2012).

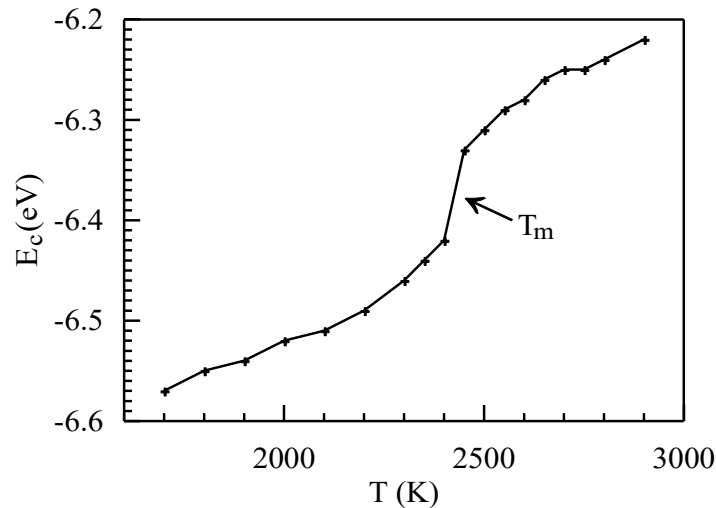
BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada [100] doğrultusu boyunca farklı sıcaklık ve zorlanma oranlarında uygulanan tek eksenli çekme deformasyonunun tek kristal Nb nano tel model sisteminin mekanik davranışlarına etkisi MD yöntemi kullanılarak incelenmeye çalışıldı. Nano tel yapısı Şekil 1'de görüldüğü gibi x, y ve z yönlerinde [100], [010] ve [001] kristalografik doğrultuları boyunca Nb atomlarının bcc örgü noktalarına yerleştirilmesiyle kuruldu. Benzetim çalışmasının başlangıcında nano tel x yönünde 16.5 nm (50 bcc birim hücre), y ve z yönünde 3.3 nm (10 bcc birim hücre) uzunluğa sahiptir. x eksenli boyunca periyodik sınır şartları uygulanmış, diğer yönlerdeki yüzeyler serbest bırakılmıştır. Tüm çalışma boyunca çekme işlemleri x doğrultusu boyunca uygulanmıştır. Çekme işlemi uygulanmadan önce sistemi dengeye getirmek için 5×10^4 MD benzetim adımı kullanılmıştır.



Şekil 1. Tek kristal Nb nano telinin başlangıç yapısı..

Nb nano telinin erime sıcaklığını belirlemek amacıyla 1700 K sıcaklığında nano tel dengeye getirilerek yapının bcc fazda kararlı kaldığı belirlendi ve model sistemin sıcaklığı 1700 K den 3400 K'e 100 K aralıklarla arttırıldı. Her sıcaklık değerinde sistem dengeye ulaşması için 5×10^4 MD adımı bekletildi. Erime sıcaklığının hassas belirlenmesi için sıcaklık değeri 2300 K den 2800 K'e 50 K aralıklarla arttırıldı. Çalışma sonunda her sıcaklık değeri için birim atom başına bağlanma enerjisi olan kohesif enerji (E_c)'nin son 5000 MD adımı üzerinden ortalaması alındı. Elde edilen sonuçlar Şekil 2'de gösterilmiştir. Sıcaklık 2400 K e ulaştığında enerjide bir süreksizlik meydana gelmektedir. Kohesif enerjide meydana gelen bu süreksizlik yapının katı fazdan sıvı faza geçişinin bir göstergesidir (Karimi ve ark., 1997). Model Nb nano tel sistemi için erime sıcaklığı 2425 ± 25 K olarak belirlenmiştir. Nb bulk elementinin deneysel olarak erime sıcaklığı 2750 K dir (Ishikawa ve ark., 2003). Birçok çalışma geniş yüzey-hacim oranından dolayı nano tellerin bulk sistemlerin erime sıcaklığından daha düşük erime sıcaklığına sahip olduğunu göstermektedir (Li ve ark., 2005; Pullini ve ark., 2007; Locharoenrat ve ark., 2007). Bununla birlikte nano telin boyutu ve yapısı erime sıcaklığı üzerinde önemli bir etkiye sahiptir (Wang ve ark., 2003).

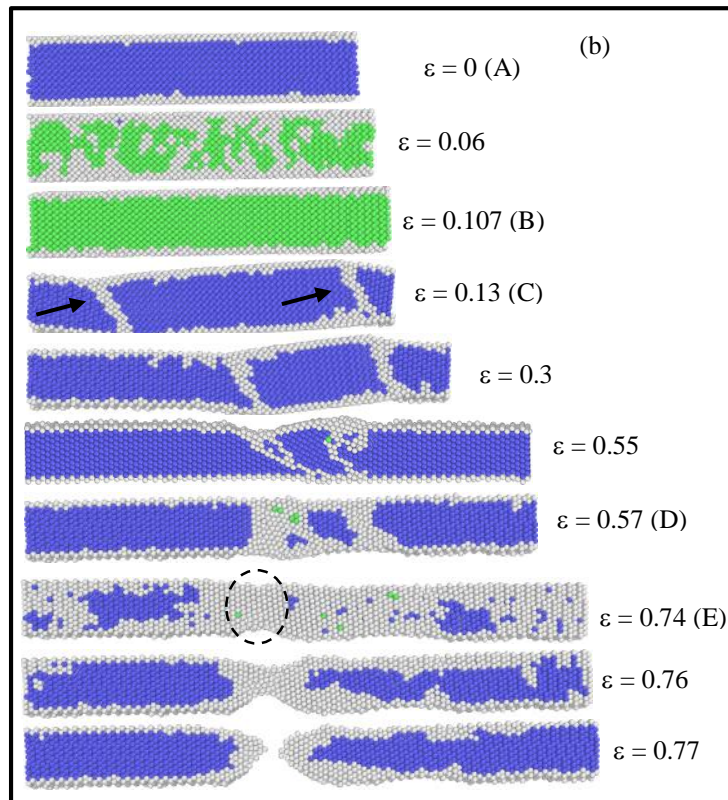
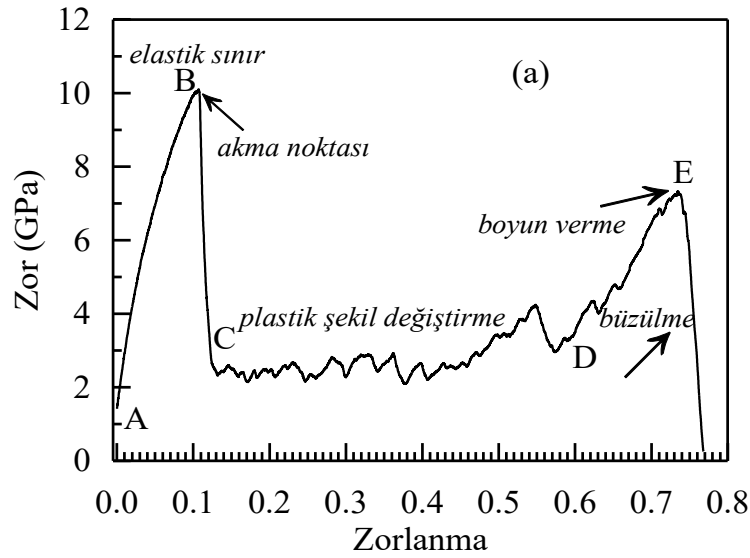


Şekil 2. Sıcaklıkla birim atom başına bağlanma enerjisinin (E_c) değişimi

Tek eksenli çekme çalışmalarında ilk olarak 10 K sıcaklığında Nb nano telinin kopma gerçekleşene kadar gerilme davranışı incelendi. Şekil 3 (a-b)'de sırasıyla nano telin $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ zorlanma oranındaki zor-zorlanma eğrisi ve çekme işlemi esnasında farklı MD adımlarında OVITO programından aCNA analizi ile elde edilen atomik konumlar verilmiştir (Stukowski, 2010). Şekil 3(a)'da verilen zor-zorlanma eğrisinde iki pik ve ortada düz bir bölge şeklindeki değişim açıkça görülmektedir. AB bölgesinde zor, zorlanmanın artışı ile 0.03 değerine kadar hemen hemen doğrusal bir değişim sergilemektedir. Bu değerden sonra B noktasına kadar doğrusal değişimden bir miktar sapma görülmektedir. Zor-zorlanma grafiğinde AB noktaları arası elastik bölge olarak ifade edilir.

Zordaki ani düşüşün başlamadan önceki ulaştığı en yüksek değer (B noktası) akma zoru olarak bilinmektedir. Kritik bir zorlanma değerine ulaşıldıktan sonra zorda ani bir düşüşün meydana geldiği görülmektedir (C noktası). Zor-zorlanma grafiğindeki bu ani azalma model sistemde meydana gelen plastik deformasyonun başlangıcının bir göstergesidir. Akma zoru değerine karşılık gelen zorlanmanın üzerinde bir zorlanma malzemeye uygulandığında plastik şekil değişimi başlamış olur ve kayma mekanizması devreye girer. Başka bir ifadeyle dislokasyonlar hareket etmeye başlar ve plastik şekil değiştirme meydana gelmiş olur. Bu durum C noktasından D noktasına kadar olan geniş bir zorlanma aralığıdır ve zorda önemli bir değişim görülmez. D noktasına gelindiğinde zor-zorlanma eğrisi zorlanma işleminin başlangıcında olduğu gibi bir değişim sergilemeye başlar (DE aralığı). Zorlanma devam ettikçe ikinci maksimum değerden sonra zor aniden sıfıra düşer. Bu durum nano telin kopmasına karşılık gelir. Zor-zorlanma grafiğinde görülen deformasyon evreleri başka metalik nano teller için yapılan çalışmalarda da gözlemlenmiştir (Landman ve ark., 1996; Li ve ark., 2010). Bu çalışmada, çekme işlemi esnasında model sistemdeki atomların etrafında oluşan fcc, hcp, bcc gibi bölgesel yapıların yüzdesini belirlemek için Honeycutt ve Andersen tarafından önerilen aCNA topolojik analiz yöntemi kullanıldı. aCNA analizi kristal yapıların yığılma kusurları, tane sınırları, deformasyon ve değişik fazlar gibi yapısal gelişimlerini belirlemek için kullanılan yararlı bir karakterizasyon tekniğidir. aCNA algoritması, bir referans atomu etrafındaki en yakın komşuların geometrik bir analizini gerçekleştirir. Radyal dağılım fonksiyonunun ilk iki tepe noktası arasındaki minimum değeri ile seçilen atomların belirli bir mesafe içerisindeki dizilimleri tek tek analiz edilir (Bañuelos ve ark., 2016). Bu analizde model sistemdeki her bir atom, bir atom ve en yakın komşuları arasındaki bağlar tarafından belirlenen bölgesel kristal yapılara göre sınıflandırılır. Bu nedenle burada atomlar fcc, hcp, bcc ve “diğer” olmak üzere 4 sınıfa ayrılır. Bölgesel bir fcc düzenindeki atomlar fcc atomları olarak kabul edilir. Bölgesel bir hcp düzenindeki atomlar, fcc kristalinde oluşan yığılma kusuru yapılar olarak görülen hcp atomları olarak dikkate alınır. Diğer tüm yerel düzenlenmelerdeki atomlar ise “diğer” atomlar olarak adlandırılır (Fanga ve ark., 2020). aCNA metodu mekanik deformasyon esnasında mikroyapısal gelişimleri analiz etmek için kullanıldı. Şekil 3(b)’de yukarıda ifade edilen zor-zorlanma tepkisinin açıklanmasına katkıda bulunmak amacıyla Nb nano telinin farklı MD adımlarındaki OVITO programından elde edilmiş atomik görüntüleri ve aCNA analizi görülmektedir. Mavi bcc, yeşil fcc kırmızı hcp ve beyaz renk “diğer” olarak adlandırılan ve bu yapıların haricindeki bölgesel yerleşme gösteren atomları temsil etmektedir. Nano telin (010) düzlem kesitinden alınan atomik görüntüsü $\epsilon=0$ için gerilme uygulanmadan önceki zor-zorlanma eğrisindeki A noktasına aittir. Yapının %61.6 sını bcc ve %38.4 u diğer yapılar olarak belirlenmiştir. Nano telin y ve z doğrultularında periyodik sınır şartları uygulanmadığından telin yüzeyindeki ve yüzeye yakın atomlar bcc birim hücre yapısı olarak değerlendirilmemiştir. $\epsilon=0.06$ değeri ile en yüksek zor değerine karşılık gelen $\epsilon=0.107$ değeri arasındaki elastik bölgenin doğrusallıktan bir miktar saptığı bölgede zorlanmanın artışı ile yapı içerisinde fcc birim hücreli bölgelerin arttığı görülmektedir. Zorlanmanın artması ile örgü içi zorların, yapının bcc birim hücreli yapıdan fcc birim hücreli yapıya bir dönüşüm göstermesine sebep olduğu söylenebilir. Bununla birlikte zorun ulaştığı en yüksek değer olarak adlandırılan akma zoru noktasında (B noktası) model nano telin %58.9 unun fcc ve kalan %41.1 lik bölümünün de diğer yapılardan oluştuğu aCNA analizinden görülmektedir. Zorlanmanın artırılmasıyla akma zor değeri olan B noktasından C noktasına ani bir düşme sonucu yapı içerisindeki fcc birim hücreli yapıların yeniden bcc hücreli yapılara dönüştüğü açıkça belirlenmiştir. Bu ani düşüşten sonra nano telde ikizlenmelerin oluştuğu görülmektedir. Ok işaretleri yapı içerisindeki ikizlenme sınırlarını göstermektedir. $\epsilon=0.13$ den $\epsilon=0.57$ ye kadar artan zorlanma değerlerinde nano teldeki ikizlenmelerin

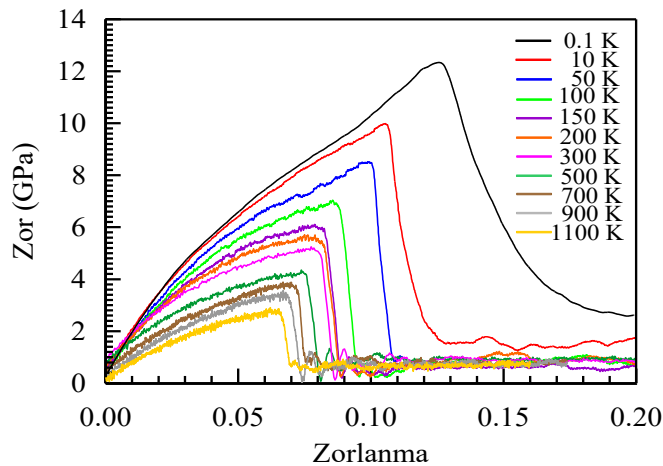
hareket ettiği ve nano telin kristalografik olarak yeniden yönelim içerisine girdiği belirlenmiştir (Ikeda ve ark., 1999). Bu durumda nano tel plastik şekil değişimine maruz kalmaktadır. $\varepsilon = 0.74$ değerine ulaştığında ikizlenmeler kaybolmuş ve yeniden yönelimin tamamlanmıştır. $\varepsilon = 0.74$ değerinde nano telin şekilde daire içerisinde gösterilen bölgesinde boyun verdiği, $\varepsilon = 0.76$ değerinde ise büzülme meydana geldiği görülmektedir. $\varepsilon = 0.77$ değerinde zor sıfırdır ve kopma gerçekleşir. Bu çalışmada model sistem, uygulanan tek eksenli çekme sonucu ikizlenme mekanizmasıyla deformasyona uğramış, bu sıcaklık değerinde kayma davranışı ve dislokasyonlar gözlenmemiştir.



Şekil 3. 10 K sıcaklık değerinde $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ zorlanma oranında Nb nano teli için (a) zor zorlanma eğrisi, (b) farklı zorlanma değerlerinde aCNA yönteminden elde edilen atomik görüntüler

Şekil 4'te 0.1 K-1100 K aralığında 11 farklı sıcaklık değeri için tek kristal Nb nano teline [100] doğrultusu boyunca uygulanan çekme işlemi sonucu elde edilen zor-zorlanma eğrileri verilmiştir. $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ zorlanma oranı her sıcaklık değeri için model sisteme uygulanmıştır. Her sıcaklık değeri için zor-zorlanma grafiği düşük zorlanmalarda ($\epsilon < 0.04$) doğrusal bir değişim sergilemekte, bununla birlikte artan zorlanma ile akma meydana gelmeden önce hafifçe doğrusal olmayan bir davranış göstermektedir. Doğrusallıktan sapmanın yüksek sıcaklıklarda biraz daha fazla olduğu tespit edilmiştir. Bilindiği gibi termal etkili atomik titreşimler sıcaklık artışıyla baskın hale gelir ve bu da Nb-Nb bağlarının kolayca deforme olmasına sebep olur. Bu durum nano telin gerilmesi esnasında zorlanmaya karşı zorun tepkisinin doğrusal olmayan bir davranış sergilemesine sebep olur. Bu tür davranışlar diğer metalik nano tellerde de gözlemlenmiştir (Saha ve ark., 2017).

Şekil 4'ten her bir sıcaklık değeri için elastiklik modülü belirlenmiştir. Model Nb nano tel sisteminin artan sıcaklık değerleri için elastiklik modülünün, akmanın meydana geldiği maksimum zorlanmanın ve akma zorunun değişimleri Tablo 1'de verilmiştir. Artan sıcaklık elastiklik modülünün değerini azaltmaktadır (Wang ve ark., 2008). Maddeye uygulanan kuvvet altında elastik şekil değiştirmesinin bir ölçüsü olarak bilinen elastiklik modülünün yüksek değerleri o maddenin elastik özelliğinin azaldığını göstermektedir. Erime sıcaklığında atomlar arası çekim kuvveti olmadığından, elastiklik modülü değeri sıfıra yaklaşır (Koh ve ark., 2005). Elastiklik modülü, elastik bölgede zor-zorlanma eğrisinin doğrusal değişiminin regrasyon analizi sonucu belirlenmiştir. 0.1 K sıcaklık değeri için bu işlem doğrusal değişim sergilendiği 0-0.025 zorlanma aralığında gerçekleştirildi. Diğer sıcaklık değerleri içinde bu doğrusal değişim aralıkları tespit edilerek elastik modülü değerleri hesaplanmıştır. Zorun hızlı bir düşüş gösterdiği kritik zorlanma değerinde model sistem plastik deformasyona uğramaktadır. Dislokasyon çekirdeklenmesinin, kayma ve ikizlenmelerin meydana gelmeye başladığı bu maksimum zor değeri akma zoru olarak bilinmektedir (Zhang ve ark., 2018). Önemli materyal özelliklerinden olan akma zoru, geri çevrilemeyen plastik deformasyonun başlangıcıyla ilişkili bir zor seviyesidir (Schiotz ve ark., 1998). Tablo 1'den sıcaklığın artmasıyla akma zoru değerinin azaldığı açıkça görülmektedir. Yüksek sıcaklık değerlerinde atomik yapı yüksek entropiye sahiptir. Atomlar denge konumları etrafında sıcaklığa bağlı olarak büyük genliklerle titreşirler. Düşük sıcaklık değerleriyle karşılaştırıldığında yüksek sıcaklıklarda yeterli kinetik enerjiyi kazanan çok sayıda atom aktivasyon enerji engelini aşar ve deformasyon meydana gelir. Bu durum ikizlenmelerin yayılması ve yok olmasına sebep olduğundan dolayı zor değerinde bir azalmaya neden olur. Elde edilen sonuçlardan termal sürecin Nb nano telinin uzamasında aktif bir rol oynadığı söylenebilir (Wen ve ark., 2008; Jing ve ark., 2009).



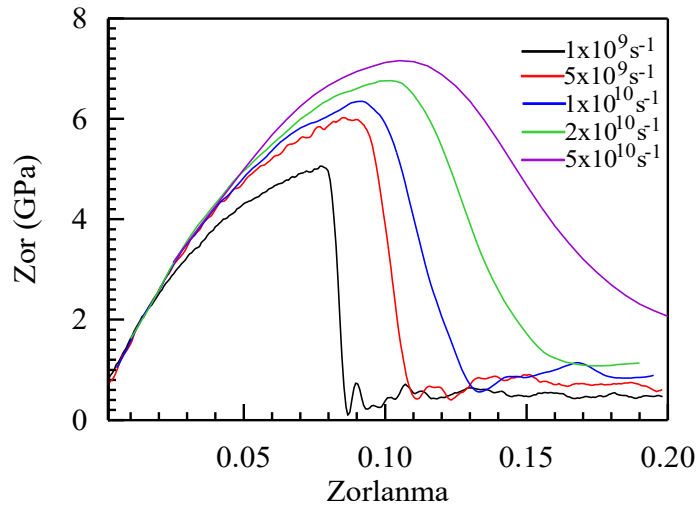
Şekil 4. 11 farklı sıcaklık değeri için $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ zorlanma oranında elde edilmiş zor-zorlanma eğrisi

Tablo 1. Nb nano telinin $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ zorlanma oranı için farklı sıcaklık değerlerinde bazı mekanik özelliklerin değerleri

T (K)	Elastiklik Modülü (GPa)	Maksimum zorlanma	Akma Zoru (GPa)
0.1	137.3	0.126	12.46
10	127.4	0.105	10.26
50	120.1	0.099	8.65
100	112.1	0.085	7.22
150	106.1	0.081	6.21
200	99.3	0.079	5.85
300	92.1	0.075	5.17
500	77.1	0.073	4.48
700	64.5	0.071	4.02
900	60.1	0.068	3.78
1100	58.1	0.056	2.81

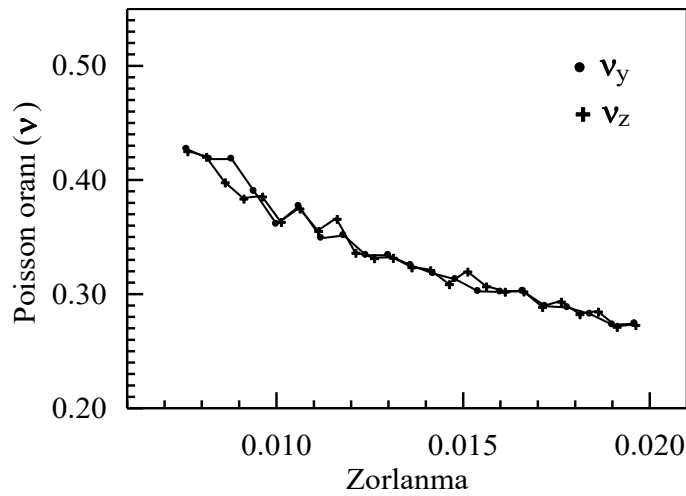
Akma zorunun 300 K sıcaklığında 5.38 GPa olan değeri hacimsel yapıdaki (bulk) Nb elementinin deneysel akma zoru değeri olan 0.07 GPa değerinden oldukça yüksek değerde tespit edilmiştir. Benzetim çalışmaları sonucu elde edilen akma zoru değerinin deneysel değerden farklı çıkmasında en büyük etken benzetim çalışmalarında kullanılan Nb model sisteminde deformasyon sürecini destekleyen herhangi bir kusur, dislokasyon, boşluk ve safsızlık bulunmaması gösterilebilir. Bununla birlikte nano telin boyutları da akma zorunu etkileyen faktörlerden biridir. Ayrıca bu çalışmada deneysel değerlerle karşılaştırıldığında kullanılan zorlanma oranları oldukça yüksektir. Çünkü MD nin zaman ölçeği atomik hareketlilik tarafından belirlendiği için çok kısa bir süre benzetim yapılabilir. Kısa zaman ölçeğinin bir sonucu olarak mevcut zamanda uygun bir deformasyon için yüksek bir zorlanma oranı gereklidir (Wen ve ark., 2008).

Nb nano tel model sisteminin $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$, $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$, $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$, $2 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ ve $5 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ zorlanma oranları için elde edilen zor-zorlanma eğrileri 300 K sıcaklık değeri için Şekil 5'te verilmiştir. Bütün zorlanma oranları için zor değerinin, zorlanmanın 0.03 değerine kadar doğrusal olarak arttığı açıkça görülmektedir. Elastik bölge olarak bilinen bu bölgede zor-zorlanma eğrisi uygulanan bütün zorlanma oranları için aynıdır. Bundan dolayı model sistem için elastik özelliklerin zorlanma oranına bağlı olmadığı ifade edilebilir. Ayrıca elastiklik modülünün zorlanma oranına bağlı olmaması, tek kristallerde aynı kristalografik yönlerde oluşan elastik deformasyon esnasında bağların aynı gerilme değerleri için aynı atomlararası kuvvete ihtiyaç duymasından kaynaklandığını göstermektedir. Benzer şekilde farklı zorlanma oranlarında olsa bile aynı kristal doğrultularında ikizlenmelerin çekirdeklenmesi için aynı zor gereklidir. Bu nedenle de elastiklik modülünün zorlanma oranından bağımsız olduğu söylenebilir (Karimi ve ark., 1997). Zor-zorlanma grafiğinde elastik deformasyonun meydana geldiği doğrusal bölgenin regrasyon analizi sonucu elastiklik modülü 92.1 GPa olarak belirlenmiştir. Bununla birlikte Nb nano teli için akma zoru $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$, $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$, $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$, $2 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ ve $5 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ zorlanma oranları için sırasıyla 5.17 GPa, 6.02 GPa, 6.39 GPa, 6.78 GPa ve 7.18 GPa olarak belirlenmiştir. Zorlanma oranının artmasıyla akma zor değerinin arttığı açıkça görülmektedir. Zorlanma oranının artmasıyla model sistemin plastik deformasyona uğraması için daha yüksek zorlara ihtiyaç duyulduğu söylenebilir.



Şekil 5. 5 farklı zorlanma oranı için 300 K sıcaklık değerinde belirlenen zor-zorlanma eğrisi

Maddelerin deformasyonunu belirleyen önemli bir parametre de Poisson oranı (ν) dır. Bir maddeye elastik bölge sınırları içinde çekme ve sıkıştırma şeklinde bir zor uygulandığında atomlar birbirine yaklaşacak veya uzaklaşacağından hacimde bir değişiklik meydana gelecektir. Zorlanma yönüne dik yöndeki doğrultularda meydana gelen değişim Poisson oranı ile hesaplanır. Eğer malzemeye x yönünde bir çekme uygulanırsa y ve z yönlerindeki Poisson oranı $\nu_y = -\epsilon_y/\epsilon_x$ ve $\nu_z = -\epsilon_z/\epsilon_x$ olarak hesaplanır. Burada ϵ_x , ϵ_y ve ϵ_z sırasıyla x, y ve z yönlerindeki zorlanmaları göstermektedir. Poisson oranı bütün metaller için hemen hemen 0.28 ile 0.34 arasında değer almaktadır (Yang ve ark., 2017). Malzeme plastik deformasyona maruz kaldıktan sonra birim hücrede bir sıkışma veya genişleme meydana gelmediğinden dolayı hacim sabit kalmaktadır ve bu durumda Poisson oranı 0.5 değerini alır. Şekil 6 te Nb model sistemine elastik sınırları içinde uygulanan zorlanmaya karşı y ve z yönlerinde hesaplanan Poisson oranının değişimi görülmektedir. Bu değişimin ortalama değerleri alındığında y ve z yönlerindeki Poisson oranları $\nu_y = 0.381$ ve $\nu_z = 0.379$ olarak belirlenmiştir. Deneysel olarak Nb nano telinin Poisson oranı bulunmamakla birlikte hacimsel yapıdaki Nb için Poisson oranı 0.40 değerindedir.



Şekil 6: 300 K sıcaklık ve $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ zorlanma oranı için elastik bölgede elde edilen Poisson oranının zorlanma değeri ile değişimi

SONUÇ

Atomlar arası etkileşmelerin GAM potansiyel fonksiyonu ile temsil edildiği Nb nano tel sisteminin [100] doğrultusu boyunca farklı sıcaklık ve zorlanma oranları altındaki mekanik davranışları MD benzetim yöntemi kullanılarak incelendi. Model sistemin mekanik davranışlarına sıcaklık ve zorlanma oranı etki etmektedir. Sıcaklık artışı, atomların büyük genlikli termal titreşimlerini önemli derecede arttırdığından bağ kuvvetlerini zayıflatmakta ve elastik modülünü azaltmaktadır. Bununla birlikte akma zorunun, sıcaklığın artmasıyla ve zorlanma oranının azalmasıyla azaldığı belirlenmiştir. Farklı zorlanma oranlarının elastik bölge sınırları içerisinde nano telin elastiklik modülü üzerinde bir etkisi yoktur. Nano teldeki plastik deformasyonun ikizlenmelerin çekirdeklenmesi ve yayılmasından dolayı meydana geldiği söylenebilir.

Çıkar Çatışması

Çalışma hazırlanırken; veri toplanması, sonuçların yorumlanması ve makalenin yazılması aşamalarında herhangi bir çıkar çatışması alanı bulunmamaktadır.

Yazar Katkısı

Çalışma hazırlanması; veri toplanması, sonuçların yorumlanması ve makalenin yazılması gibi tüm aşamalarda katkı tamamen yazara aittir.

KAYNAKLAR

- Abdeslam S, Chihi T, 2018. Molecular dynamics study of size and cooling rate effects on physical properties of Niobium nanoclusters. *Chinese Journal of Physics*, 56: 2710–2717.
- Arnold MS, Avouris P, Pan ZW, Wang ZL, 2003. Field-effect transistors based on single semiconducting oxide nanobelts. *Journal of Physical Chemistry B*, 107(3): 659-663.
- Bañuelos EU, Aburto CC, Arce AM, 2016. A common neighbor analysis of crystallization kinetics and excess entropy of charged spherical colloids. *The Journal of Chemical Physics*, 144: 094504.
- Cai J, Ye YY, 1996. Simple analytical embedded-atom-potential model including a long-range force for fcc metals and their alloys. *Physical Review B*, 54: 8398.
- Changwook K, Wenhua G, Martha B, Ian MR, Hyungsoo C, Kyekyoon K, 2008. Copper Nanowires with a Five-Twinned Structure Grown by Chemical Vapor Deposition. *Advanced Materials*, 20: 1859–1863.
- da Silva EZ, Novaes FD, da Silva AJR, 2004. Theoretical study of the formation, evolution, and breaking of gold nanowires. *Physical Review B*, 69: 115411.
- Davoodi J, Ahmadi M, 2012. Molecular Dynamics simulation of elastic properties of CuPd nanowire. *Composites: Part B*, 43: 10-14.
- Divya S, Avinash P, 2018. Effect of symmetric and asymmetric tilt grain boundaries on the tensile behaviour of bcc-Niobium. *Computational Materials Science*, 143: 126-132.
- 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.
- Fellinger MR, Park H, Wilkins JW, 2010. Force-matched embedded-atom method potential for niobium. *Physical Review B*, 81: 144119.
- Finnis MW, Sinclair JE, 1984. A simple empirical N-body potential for transition metals. *Philosophical Magazine*, 50: 45-55.

- Gan Y, Chen JK, 2009. Molecular dynamics study of size, temperature and rate dependent thermomechanical properties of copper nanofilms. *Mechanics Research Communications*, 36: 838-844.
- Gao Y, Sun Y, Yang X, Sun Q, Zhao J, 2016. Investigation on the mechanical behaviour of faceted Ag nanowires. *Molecular Simulation*, 42(3): 220-228.
- Godet J, Pizzagalli L, Guillotte M, 2019. Molecular dynamics study of mechanical behavior of gold-silicon core-shell nanowires under cyclic loading. *Acta Materialia*, 5: 100204.
- Grill R, Gnadenberger A, 2006. Niobium as mint metal: Production-properties-processing. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 24(4): 275-282.
- Güder V, Çeltek M, 2020. CuTi nanotellerinin germe oranı ve boyuta bağlı mekanik davranışı. *Türk Doğa ve Fen Dergisi*, 9(2): 24-34.
- Horstemeyer MF, Baskes MI, Plimpton SJ, 2001. Length scale and time scale effects on the plastic flow of fcc metals. *Acta Materialia*, 49: 4363-4374.
- Huang MH, Mao S, 2001. Room-temperature ultraviolet nanowire nanolasers. *Science*, 292: 5523.
- Ikeda H, Qi Y, Çagin T, Samwer K, Johnson WL, Goddard WA, 1999. Strain rate induced amorphization in metallic nanowires. *Physical Review Letters*, 82: 2900-2903.
- Ishikawa T, Paradis PF, Itami T, Yoda S, 2003, Non-contact thermophysical property measurements of refractory metals using an electrostatic levitator. *The Journal of Chemical Physics*, 118: 7912–7920.
- 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.
- Jing Y, Meng Q, Zhao W, 2009. Molecular dynamics simulations of the tensile and melting behaviours of silicon nanowires. *Physica E*, 41: 685-689.
- Karimi M, Stapay G, Kaplan T, Mostoller M, 1997. Temperature dependence of the elastic constants of Ni: reliability of EAM in predicting thermal properties. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 5: 337.
- Koh SJA, Lee HP, Lu C, Cheng QH, 2005. Molecular dynamics simulation of a solid platinum nanowire under uniaxial tensile strain: Temperature and strain-rate effects. *Physical Review B*, 72: 085414.
- Krüger D, Fuchs H, Rousseau R, Marx D, Parrinello M, 2002. Pulling Monatomic Gold Wires with Single Molecules: An Ab Initio Simulation. *Physical Review Letters*, 89: 186402.
- LAMMPS, <http://lammps.sandia.gov/>. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator (Erişim Tarihi:02.04.2021).
- Landman U, Luedtke WD, Salisbury BE, Whetten RL, 1996. Reversible Manipulations of Room Temperature Mechanical and Quantum Transport Properties in Nanowire Junctions. *Physical Review Letters*, 77: 1362.
- Lee K, Wu Z, Chen Z, Ren F, Pearton SJ, Rinzler AG, 2004. Single wall carbon nanotubes for p-type ohmic contacts to GaN light-emitting diodes. *Nano Letters*, 4: 911-914.
- Legoas SB, Galvao DS, Rodrigues V, Ugarte D, 2002. Origin of Anomalously Long Interatomic Distances in Suspended Gold Chains. *Physical Review Letters*, 88: 076105.
- Li H, Pederiva F, Wang BL, Wang JL, Wang GH, 2005. How does the nickel nanowire melt? *Applied Physics Letters*, 86: 011913.

- Li J, Hu L, Wang L, Zhou Y, Gruner G, Marks TJ, 2006. Organic light-emitting diodes having carbon nanotube anodes. *Nano Letters*, 6: 2472-2477.
- Li S, Ding X, Deng J, 2010. Superelasticity in bcc nanowires by a reversible twinning mechanism. *Physical Review B*, 82: 205435.
- Liang WW, Zhou M, 2003. Size and strain rate effects in tensile deformation of Cu nanowires. *Nanotechnology*, 2: 452-455.
- Locharoenrat K, Sano H, Mizutani G, 2007. Phenomenological studies of optical properties of Cu nanowires. *Science and Technology of Advanced Materials*, 8: 277-281.
- Malins A, Williams SR, Eggers J, Royall CP, 2013. Identification of structure in condensed matter with the topological cluster classification. *The Journal of Chemical Physics*, 139: 234506.
- Marszalek PE, Greenleaf WJ, Li HB, Oberhauser AF, Fernandez JM, 2000. Atomic force microscopy captures quantized plastic deformation in gold nanowires. *PNAS*, 97: 6282-6286.
- Park HS, Gall K, Zimmerman JA, 2005. Shape Memory and Pseudoelasticity in Metal Nanowires. *Physical Review Letters*, 95: 255504.
- Park HS, Ji C, 2006. On the thermomechanical deformation of silver shape memory nanowires. *Acta Materialia*, 54: 2645.
- Park HS, Zimmerman JA, 2005. Modeling inelasticity and failure in gold nanowires. *Physical Review B*, 72: 054106.
- Parrinello M, Rahman A, 1980. Crystal structure and pair potentials: a molecular-dynamics study. *Physical Review Letters*, 45(11): 1196.
- Parrinello M, Rahman A, 1981. Polymorphic transitions in single crystals: a new molecular dynamics method. *Journal of Applied Physics*, 52(12): 7182-7190.
- Pasquier A, Unalan HE, Kanwal A, Miller S, Chhowalla M, 2005. Conducting and transparent single-wall carbon nanotube electrodes for polymer-fullerene solar cells. *Applied Physics Letters*, 87: 203511.
- Pullini D, Innocenti G, Busquets D, Ruotolo A, 2007. Investigation of multilayer local tilt within long portion of single Co/Cu nanowires. *Applied Physics Letters*, 90: 133106.
- 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.
- Saha S, Motalab M, Mahboob M, 2017. Investigation on mechanical properties of polycrystalline W nanowire. *Computational Materials Science*, 136: 52-59.
- Sainath G, Choudhary BK, 2016. Orientation dependent deformation behavior of bcc iron nanowires. *Computational Materials Science*, 111: 406-415.
- Saitoh KI, Liu WK, 2009. Molecular dynamics study of surface effect on martensitic cubic-to-tetragonal transformation in Ni-Al alloy. *Computational Materials Science*, 46: 531-544.
- Salehinia I, Bahr DF, 2014. Crystal orientation effect on dislocation nucleation and multiplication in fcc single crystal under uniaxial loading. *International Journal of Plasticity*, 52: 133-146.
- Schiotz J, Tolla FDD, Jacobsen KW, 1998. Softening of nanocrystalline metals at very small grain sizes. *Nature*, 391: 561-563.
- Singh D, Sharma P, Jindal S, Kumar P, Kumar P, Parashar A, 2019. Atomistic simulations to study crack tip behaviour in single crystal of bcc niobium and hcp zirconium. *Current Applied Physics*, 19:37-43.

- Singh D, Sharma P, Parashar A, 2020. Atomistic simulations to study point defect dynamics in bi-crystalline niobium. *Materials Chemistry and Physics*, 255: 123628.
- 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.
- Stukowski A, 2012. Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 20: 045021.
- Suresh S, Li J, 2008. Deformation of the ultra-strong. *Nature*, 456: 716–717.
- Sutton AP, Chen J, 1990. Long-range Finnis-Sinclair potentials. *J. Philosophical Magazine Letter*, 61: 139-146.
- Voter AF, Chen SP, 1987. Accurate Interatomic Potentials for Ni, Al, and Ni₃Al. *Materials Research Society Symposium Proceedings*, 82: 175.
- Wang BL, Wang GH, Chen XS, Zhao JJ, 2003. Melting behavior of ultrathin titanium nanowires. *Physical Review B*, 67: 193403.
- Wang J, Huang QA, Yu H, 2008. Size and temperature dependence of Young's modulus of a silicon nano-plate. *Journal of Physics D*, 41: 165406.
- Wen YH, Zhang Y, Wang Q, Zheng JC, Zhu ZZ, 2010. Orientation- dependent mechanical properties of Au nanowires under uniaxial loading. *Computational Materials Science*, 48: 513-519.
- Wen YH, Zhu ZZ, Zhu RZ, 2008. Molecular dynamics study of the mechanical behavior of nickel nanowire: Strain rate effects. *Computational Materials Science*, 41: 553-560.
- Yang C, Qi L, 2019. Modified embedded-atom method potential of niobium for studies on mechanical properties. *Computational Materials Science*, 161: 351-363.
- Yang XY, Wu D, 2010. The melting behaviors of the Nb(1 1 0) nanofilm: a molecular dynamics study. *Applied Surface Science*, 256: 3197-3203.
- Yang Z, Yang Q, Zhang G, 2017. Poisson's ratio and Young's modulus in single-crystal copper nanorods under uniaxial tensile loading by molecular Dynamics. *Physics Letters A*, 381: 280-283.
- Yıldız YO, 2021. Ni nanoteller için mühendislik parametreleri ölçeklendirme kuralı. *Uludağ Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Dergisi*, 26(1): 315-324.
- Zhang L, Lu C, Tieu AK, 2018. Nonlinear elastic response of single crystal Cu under uniaxial loading by molecular dynamics study. *Materials Letters*, 227: 236-239.
- Zhang L, Lua C, Tieu K, Sua L, Zhao X, Peib L, 2017. Stacking fault tetrahedron induced plasticity in copper single crystal. *Materials Science and Engineering A*, 680: 27-38.
- Zhu J, Shi D, 2011. Reorientation mechanisms and pseudoelasticity in iron nanowires. *Journal of Physics D*, 44: 055404.