

Farklı Kristal Yönelimine Sahip Cu Nano Tellerine Uygulanan Mekanik Çevrimin Moleküler Dinamik Benzetimi ile İncelenmesi

Sefa Kazanç *₁,

*₁Fırat Üniversitesi Eğitim Fakültesi Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi Bölümü, ELAZIĞ

(Alınış / Received: 26.01.2022, Kabul / Accepted: 31.05.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Anahtar Kelimeler

Nano tel,
kristal yönelimi,
mekanik çevrim,
moleküler dinamik.

Öz: Bu çalışmada Cu atomlarının farklı kristalografik doğrultulara yerleştirilmesiyle oluşturulan nano tellere tek eksen boyunca uygulanan çekme yüklemesi-yükün kaldırılması çevrimlerinin model sistemin mekanik özellikleri üzerindeki etkisi Moleküler Dinamik (MD) benzetim yöntemi ile incelendi. Çok cisim etkileşmelerini içeren Gömülmüş Atom Metodu (GAM) potansiyel fonksiyonunun türevinden atomlar üzerine etki eden kuvvetler belirlendi. $1 \times 10^{10} \text{s}^{-1}$ zorlanma değeri için 10 K ve 300 K sıcaklıklarında nano tellere üç çekme yüklemesi-yükün kaldırılması deformasyonu uygulanarak zor-zorlanma eğrileri, elastiklik modülü (E), akma zoru değerleri incelendi. Uygulanan çevrim işlemleri sonucu elde edilen atomik görüntüler ve ortak komşu analiz metodu (Common Neighbor Analysis-CNA) kullanılarak nano tellerde meydana gelen plastik deformasyonun, bütün yönelimler için dislokasyonların aktif hale geçmesi, yığılım kusurları ve ikizlenmeler sonucu meydana geldiği tespit edildi. Bununla birlikte yüklemenin kaldırılması durumunda bütün yönelimler için nano telin ilk şekline tamamen dönmediği belirlendi. Ayrıca $\langle 110 \rangle$ Cu nano teli için üçüncü çevrimde kopma meydana geldiği görüldü. Uygulanan çevrim işleminin nano telin farklı kristal yönelimleri için mekanik özellikler üzerinde önemli bir etkiye sahip olduğu tespit edildi.

Investigation by Molecular Dynamic Simulation of Mechanical Cycle Applied to Cu Nanowires with Different Crystal Orientations

Keywords

Nanowire,
crystal orientations,
mechanical cycle, molecular
dynamics

Abstract: In this study, the effect of uniaxial tensile loading-unloading cycles applied to nanowires formed by placing Cu atoms in different crystallographic directions on the mechanical properties of the model system was investigated by Molecular Dynamics (MD) simulation method. The forces affecting on atoms were determined from the derivative of the Embedded Atom Method (EAM) potential function, which includes many-body interactions. For the $1 \times 10^{10} \text{s}^{-1}$ strain value, the stress-strain curves, modulus of elasticity (E), yield stress values were examined by applying three tensile loading-unloading deformations to the nanowires at temperatures of 10 K and 300 K. By using the atomic images obtained as a result of the applied cycle processes and the common neighbor analysis method (CNA), it was determined that the plastic deformation in the nanowires occurred as a result of activation of dislocations, stacking defects and twinning for all orientations. However, it was determined that the nanowire did not fully return to its original shape for all orientations when the loading was removed. In addition, it was observed that break up occurred in the third cycle for $\langle 110 \rangle$ Cu nanowire. It was found that the applied cycling process had a significant effect on the mechanical properties for different crystal orientations of the nanowires.

*İlgili Yazar, email: skazanc@firat.edu.tr

1. Giriş

Nano teknolojinin temel yapı taşlarından olan nano teller üstün özelliklerinden dolayı teknolojiye oldukça ilgi çekmektedir. Son yıllarda araştırmacıların nano teknoloji ve bilimiyle daha çok ilgilendikleri ve bu alanlarda yapılan çalışmaların sayısının arttığı görülmektedir. Nano metre ve mikro metre ölçeğinde yapılar kullanılarak elektronik cihazlar ve nano/mikro elektromekanik sistemler geliştirilmeye başlanmıştır. Nano ölçekteki elektriksel, optik, manyetik ve mekanik sistemler için birçok deneysel çalışma yapılmıştır [1-3]. Bununla birlikte nano materyallerin mekanik özelliklerinin anlaşılması sadece bilimsel olarak ilgi çekmelerinden değil aynı zamanda tasarım ve üretim süreçleri gibi mühendislik kullanışlılığı açısından da önemlidir. Birçok faktör nanotellerin nano boyutlarından dolayı onların deformasyon mekanizmasını etkileyebilir. Nano teller büyük yüzey-hacim oranına sahip olduğundan dolayı serbest yüzeylerin enerjisi ve sonuç olarak yüzey zoru önemli olur. Buda nano tellerde hem yüzey-zor etkili faz dönüşümüne [4-6] hem de suni-elastik ve şekil hatırlama etkilerine yol açabilir [7-10].

Nano tellerin farklı kristalografik yönelimlere sahip olması onların esneklik modülü, akma zoru, akma zorlanması plastik deformasyon mekanizması gibi mekanik özelliklerini önemli ölçüde etkiler. Diano ve arkadaşları [11] MD benzetim yöntemini kullanarak yüzey etkili iç zorlardan dolayı [100] ve [110] yönelimleri için Au nano telinde simetrik olmayan bir akma zorlanması ve gerilme-sıkıştırma esnasında farklı kayma sistemleri gözlemlenildi. Park ve arkadaşları [12, 13] farklı kristalografik yönelimli fcc nano telleri için gerilme deformasyonun etkilerini inceledi. Wu ve arkadaşları [14, 15] farklı sıcaklık, boyut ve zorlanma oranları için Cu nano telinin mekanik özelliklerini belirledi. Komandori ve arkadaşları [16, 17] bcc ve fcc yapıdaki nano telleri modellemek için Morse potansiyelini kullandılar. Yaptıkları çalışmada iki cisim potansiyeli kullanılarak modellenen bcc nano tellerinin gerilme davranışlarının doğru sonuçlar vermediğini belirlediler.

Cu elementi, kristal yönelimine bağlı olarak anizotropik özellik sergiler ve akma zoru ve elastiklik modülü gibi mekanik özellikler önemli derecede değişiklik gösterir [18, 19].

Suni elastiklik veya süper elastiklik, şekil hatırlamalı materyallerin önemli bir özelliğidir [20-23]. Genel olarak suni elastiklikten sorumlu mekanizma yüklenme-yükün kaldırılması süreci esnasında zor etkili ileri ve geri yönlü martensitik dönüşümdür. Tek kristal fcc ve bcc metalik nano tellerde suni elastiklik ve şekil hatırlama etkisi son yıllarda dikkat çeken çalışmalar arasındadır [24-26]. Özellikle $\langle 110 \rangle / \{111\}$ fcc nano tellerinde ilk olarak MD benzetim yöntemiyle belirlenen suni elastik davranış daha sonra nano mekanik deneylerle de doğrulanmıştır. [27].

Son yıllarda bilgisayar benzetim teknikleri nano ölçekteki materyallerin mekanik özellikleri incelemek için kullanılmaktadır. Bilgisayar teknolojisinin ve sayısal hesaplama yöntemlerinin hızlı gelişimi, bununla birlikte gerçekçi atomlararası potansiyellerin varlığı, MD benzetim yöntemini nano materyallerin mekanik davranışlarını incelemek için etkili bir araç haline getirmiştir. MD benzetim yöntemi zor altında nano materyallerin elastik ve plastik deformasyonu, kopma, dislokasyonların temel mekanizmasının belirlenmesi gibi bazı süreçlerin açıklanmasında oldukça etkilidir. Nano tellerin mekanik davranışlarının belirlenmesi amacıyla MD benzetimi ve yoğunluk fonksiyonu teorisi üzerine kurulu ilk prensip (first-principles) metodu gibi farklı yaklaşımlarla birçok teorik çalışma yapılmıştır [28-30]. Farklı potansiyel fonksiyonları farklı sistemlerin modellenmesi için geliştirilmiştir [31-33]. Basit yapısı ve gerçeğe yakın sonuçlar üretmesi açısından çok cisim etkileşmelerini içeren GAM fonksiyonu benzetim çalışmalarında en çok kullanılan fonksiyonlardandır.

Bu çalışmada farklı kristalografik yönelimlere sahip Cu nano tellerine 10K ve 300K sıcaklık değerlerinde uygulanan çekme yüklemesi-yükün kaldırılması (tensile loading-unloading) çevrim süreçlerinde oluşan yapısal ve mekanik özellikler MD benzetim metodu ile incelendi. Bu sıcaklık değerlerinin seçilmesinin sebebi model nano tel sistemine uygulanan mekanik işlemlerin etkisinin sadece düşük sıcaklık ve oda sıcaklığında belirlenmesi olarak ifade edilebilir. Çalışmada büyük ölçekli atomik/moleküler kitlesel paralel simülasyon (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator-LAMMPS) açık kaynak kodlu MD benzetim programı kullanıldı [34]. Uygulanan çevrimler sonucu meydana gelen plastik deformasyon mekanizmasının incelenmesi için OVITO [35] programından CNA analiz yöntemi ile belirlenen atomik konumlar kullanıldı.

2. Materyal ve Metot

Klasik MD benzetim yönteminde bir sistemin hareket denklemleri Lagrange fonksiyonundan

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

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

Deformasyona maruz bırakılan bir sistem için zor, denklem (2) de verildiği gibi mikroskobik zor tensörü tarafından hesaplanmaktadır [36, 37].

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

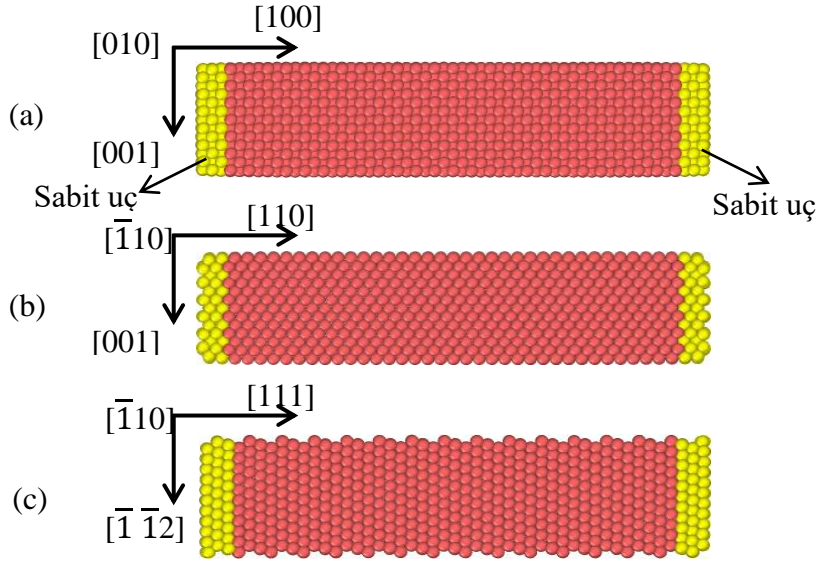
Bu çalışmada başlangıç konumları olarak fcc yapıdaki model nano tel sistemine Cu atomları yüksek simetrikli $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ örgü yönelimlerinde yerleştirildi. Periyodik sınır şartları sadece x doğrultusu boyunca uygulandı. y ve z doğrultuları boyunca herhangi bir sınır şartı uygulanmadı. Parçacık sayısının, hacmin ve sıcaklığın sabit olarak alındığı NVT kanonik topluluğu kullanıldı. Verlet algoritmasının hız formu ile hareket denklemlerinin sayısal çözümü gerçekleştirildi. Nano telin kararlı yapıda olabilmesi için tüm kristalografik yönelimler için çevrim işlemi uygulanmadan önce sistem 5×10^4 MD adımı dengeletildi. Zorlanma oranı yapılan çalışmada $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ olarak seçildi. Bir integrasyon adımı 5 fs olarak seçildi. Ayrıca model hesaplama hücresinde Cu atomları arasındaki etkileşimleri hesaplamak için GAM potansiyel fonksiyonu kullanıldı. Potansiyel ile ilgili detaylar literatürden bulunabilir [38].

$\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ yönelimlerine sahip Cu nano teller sırasıyla 4647, 4857 ve 4903 atomdan meydana gelmektedir. Nano telin x yönündeki uzunluğu 10,8 nm, y ve z yönlerinde 2,17 nm dir. Bütün çalışmalarda farklı yönelimli Cu nano teline çekme deformasyonu ve bu deformasyonun kaldırılması işlemi (bu işlem bir çevrim olarak ifade edilecektir) sadece x eksenini boyunca uygulandı. Model nano tel sisteminin x-doğrultusu boyunca iki uç bölgesindeki birkaç atomik tabaka sabitlendi. Ara bölgede kalan atomların dinamik davranışına izin verildi. Sabit uç olarak ifade edilen bölgedeki atomlar birbirleriyle ve ara bölgede kalan atomlarla etkileşmemektedir. Deneysel çekme yöntemine uygun olması açısından sabit uçlardan biri hareketsiz tutulurken çekme işlemi diğer uca uygulandı.

MD çalışmalarında model sisteme uygulanan termal veya mekanik işlemler sonucu oluşan fcc, hcp, bcc gibi mikro yapıların tespit edilmesi ve gelişimlerinin belirlenmesi oldukça önemlidir. Birçok sayısal analiz yöntemi bu yapıların belirlenmesi amacıyla geliştirilmiştir. Her bir parçacığa bir yapısal tür atamak bu yöntemlerin temel hedefidir. Ayrıca bu yöntemler yerel bir yapıyı idealleştirilmiş bir yapıyla eşleştirerek, ne kadar yakın olduklarını belirlemeye çalışır. MD benzetim çalışmalarında yapı tahlili için genel olarak merkez simetri parametre analizi (centrosymmetry parametre analizi), 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 kullanılmaktadır [39, 40].

3. Bulgular

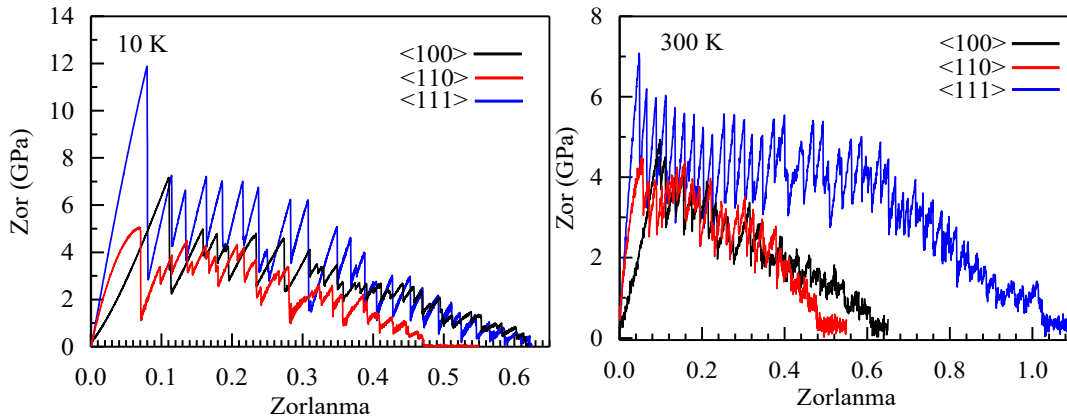
Bu çalışmada Cu atomlarının fcc örgü noktalarına $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ yüksek simetri doğrultuları boyunca yerleştirildiği nano tellere x eksenini boyunca arka arkaya 3 çekme yüklemesi-yükün kaldırılması (tension loading-unloading) çevrim işlemleri uygulanarak model sistemin mekanik özellikleri incelendi. Şekil 1'de bu üç farklı kristal yönelimine sahip Cu nano tellerin başlangıç yapıları verilmiştir. Çekme yüklemesi-yükün kaldırılması mekanik işlem süreci, nano telin soldaki sabit ucu hareketsiz tutularak, sağdaki sabit uç $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ zorlanma oranı ile çekilerek ve aynı zorlanma oranı ile çekme zorlanmasının kaldırılması şeklinde uygulandı. Nano telin her iki sabit ucu da üç atomik tabakadan oluşmaktadır.



Şekil 1. (a) $\langle 100 \rangle$, (b) $\langle 110 \rangle$ ve (c) $\langle 111 \rangle$ Cu nano tellerinin başlangıç atomik yapıları. Sarı renkli küreler sabit uç olarak tanımlanan atomları, kırmızı renkli küreler dinamik atomları göstermektedir.

Şekil 2’de $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ Cu nano tellerine 10K ve 300 K sıcaklık değerleri için kopma noktasına kadar uygulanan eksensel zorlanmaya karşı zorun değişim eğrileri verilmiştir. Cu nano telleri kristal yöneliminin bir fonksiyonu olarak elastik anizotropi göstermektedir. Kristal yöneliminin zor-zorlanma eğrileri üzerinde oldukça önemli bir etkiye sahip olduğu dikkat çekmektedir. Zorlanmanın uygulanmaya başlamasıyla zor değerindeki hemen hemen doğrusal değişim elastik şekil değişimin meydana geldiği bölge olarak bilinmektedir. Zorlanmanın arttırılmaya devam ettirilmesiyle zor değerinin bir maksimuma ulaştıktan sonra ani bir düşüş gösterdiği nokta plastik şekil değişimin başladığı akma zoru olarak bilinmektedir. Zor değerindeki bu ani düşüşün nano tel sistemi içerisinde dislokasyonların çekirdeklenmeye başlamasından kaynaklandığı bilinmektedir [41]. Zorlanma değerinin arttırılmaya devam etmesiyle zor-zorlanma eğrisinin testere dişi gibi bir değişim sergilediği görülmektedir. Bu değişim sebebinin çekirdeklenen dislokasyonların büyümesi ve yayılmasından dolayı olduğu söylenebilir [42]. Zor-zorlanma eğrisinden görüldüğü gibi her iki sıcaklık değeri için de elastiklik modülü, akma zoru, akma zorlanması kristal yönelimine kuvvetli bir şekilde bağlılık sergilemektedir. 10 K sıcaklığında $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ Cu nano tellerinde kopmanın meydana geldiği zorlanma değerleri sırasıyla 0.617, 0.471 ve 0.622 olarak belirlenmiştir. 300 K sıcaklık değeri için ise aynı yönelime sahip nano teller için kopma zorlanmaları sırasıyla 0.607, 0.477 ve 1.26 dır.

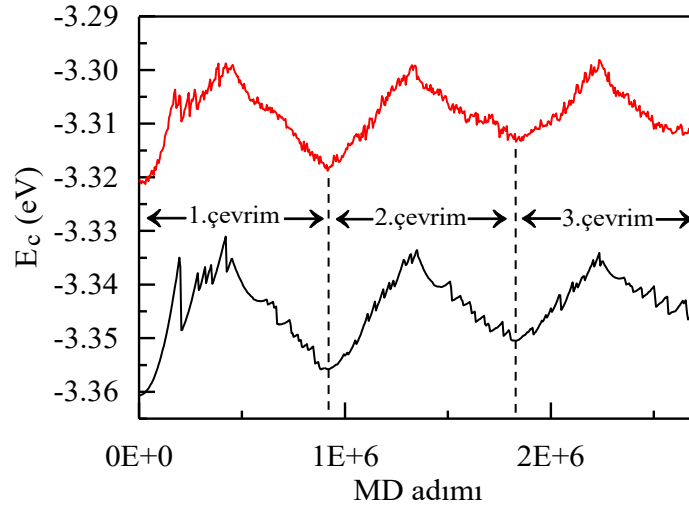
Yapılan çalışmada mekanik çevrimler, bütün kristalografik yönelimler için çekme yüklemesi 0.25 zorlanma değerine kadar nano tel sistemine uygulanmış, bu değerden sonra sistem üzerinden kaldırılmıştır. Bu işlem model sistem üzerine yapılan bir çevrim sürecini ifade etmektedir. 0.25 zorlanma değeri bütün yönelimler için elastik bölgenin aşılp nano tellerde plastik şekil değişimin meydana geldiği gölgeye karşılık gelmektedir. Bu çevrim işlemi bütün yönelimler için nano tel sistemine 3 kez uygulanarak zor-zorlanma eğrisindeki değişimler incelenmeye çalışılmıştır.



Şekil 2. 10 K ve 300 K sıcaklık değerlerinde farklı kristal yönelimine sahip nano teller için elde edilen zor-zorlanma eğrileri.

Şekil 3'te 10 K ve 300 K sıcaklık değerleri için sadece <100> Cu nano teline uygulanan 3 çevrim boyunca potansiyel enerjinin MD adımı ile değişimi verilmiştir. Kinetik enerji sistemin momentum ve termal uyarılmasını yönetirken, potansiyel enerji materyalin mekanik özelliklerini yansıtmaktadır. Bir çevrim boyunca potansiyel enerji değişim eğrisinin, nano tele uygulanan zorlanmanın artırılmasıyla artarak bir maksimum değere ulaştığı ve sonrasında bu zorlanmanın kaldırılmasıyla hemen hemen ilk değerine geri döndüğü görülmektedir. Bir çevrim boyunca potansiyel enerji değişim eğrisi maksimum değere ulaşana kadar iki aşamadan geçmektedir. İlki potansiyel enerji eğrisinin hemen hemen doğrusal bir artış sergilediği elastik bölgedir. İkinci aşama zorlanmanın artmaya devam etmesiyle ilk dislokasyonların oluşmaya başlaması ve enerji eğrisinin ani bir azalış göstermesi ve çekme işleminin son bulduğu 0.25 zorlama değerine kadar enerjinin artmasıdır. Model sisteme uygulanan çekme işlemi tamamlanıp yüklemenin kaldırılmaya başlamasıyla nano teldeki atomlar arası mesafe azalacak ve potansiyel enerji artacaktır. Bununla birlikte sıcaklık artışıyla nano tel sisteminin potansiyel enerjisi azalmış ve plastik şekil değişimi daha düşük MD adımında başlamıştır. 10 K'da dengeletilmiş <100> nano teli için mekanik çevrim işlemi başlamadan önce model sistemin denge durumundaki enerji değeri $E_{ilk} = -3.36$ eV tur. Bu değer birinci çevrimin sonunda $E_1 = -3.355$ eV, ikinci çevrimin sonunda $E_2 = -3.349$ eV ve üçüncü çevrimin sonunda $E_3 = -3.348$ eV olarak belirlenmiştir. Denge durumuna göre üçüncü çevrimin sonunda 0.012 eV değerinde bir enerji farkı oluşmuştur. <110> nano telinin çevrim süreci başlamadan önce denge durumundaki enerjisi $E_{ilk} = -3.359$ eV tur. Birinci çevrim sonunda $E_1 = -3.354$ eV ve ikinci çevrim sonunda $E_2 = -3.345$ eV tur. Nano tel sisteminde üçüncü çevrimin çekme işlemi sürecinde kopmanın meydana geldiği gözlenmiştir. İkinci çevrimin sonunda denge durumuna göre oluşan enerji farkı 0.014 eV olarak bulunmuştur. <111> nano telinde ise denge durumunda enerji $E_{ilk} = -3.361$ eV olarak tespit edilmiş ve birinci çevrim sonunda $E_1 = -3.356$ eV, ikinci çevrim sonunda $E_2 = -3.351$ eV ve üçüncü çevrim sonunda $E_3 = -3.348$ eV olarak belirlenmiştir. <111> nano teli için enerji farkı ise 0.013 eV değerindedir.

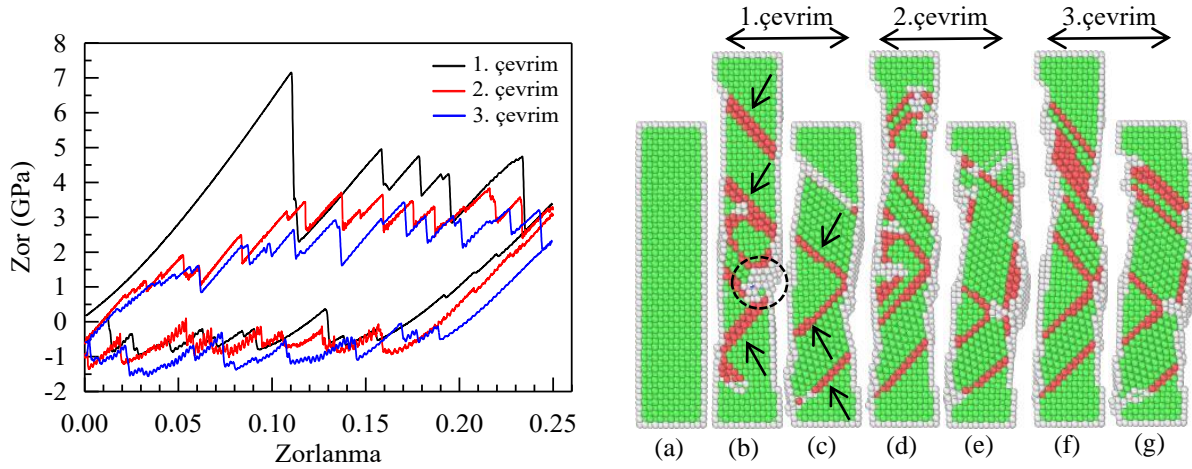
300 K sıcaklık değeri için enerji değerleri denge durumundaki <100> nano telinde $E_{ilk} = -3.32$ eV, birinci çevrimde $E_1 = -3.318$ eV, ikinci çevrimde $E_2 = -3.311$ eV ve üçüncü çevrimde $E_3 = -3.31$ eV, <110> nano telinde $E_{ilk} = -3.321$ eV, $E_1 = -3.315$ eV, $E_2 = -3.312$ eV, $E_3 = -3.308$ eV, <111> nano telinde $E_{ilk} = -3.317$ eV, $E_1 = -3.315$ eV, $E_2 = -3.313$ eV ve $E_3 = -3.312$ eV olarak belirlenmiştir. <100>, <110> ve <111> nano telleri için denge durumuna göre son çevrimde oluşan enerji farkları sırasıyla 0.01 eV, 0.013 eV ve 0.005 eV değerindedir. Hem 10 K hem de 300 K sıcaklık değerlerinde her üç kristalografik yönelim içinde çevrim sonlarında enerji değerlerinin çevrim işlemi başlamadan önceki denge durumunda nano tel sisteminin sahip olduğu enerji değerlerine göre arttığı görülmektedir. Çevrim işlemleri sonucu nano tel sisteminde kalıcı şekil değişimini oluşturan dislokasyonların, düzlem kaymalarının, ikiz yapılarının bu enerji farklarının oluşumuna sebep olduğu düşünülmektedir.



Şekil 3. 10 K (siyah eğri) ve 300 K (kırmızı eğri) sıcaklık değerlerinde <100> nano teline uygulanan 3 çevrim boyunca elde edilen MD adımı ile kohesif enerji değişimi.

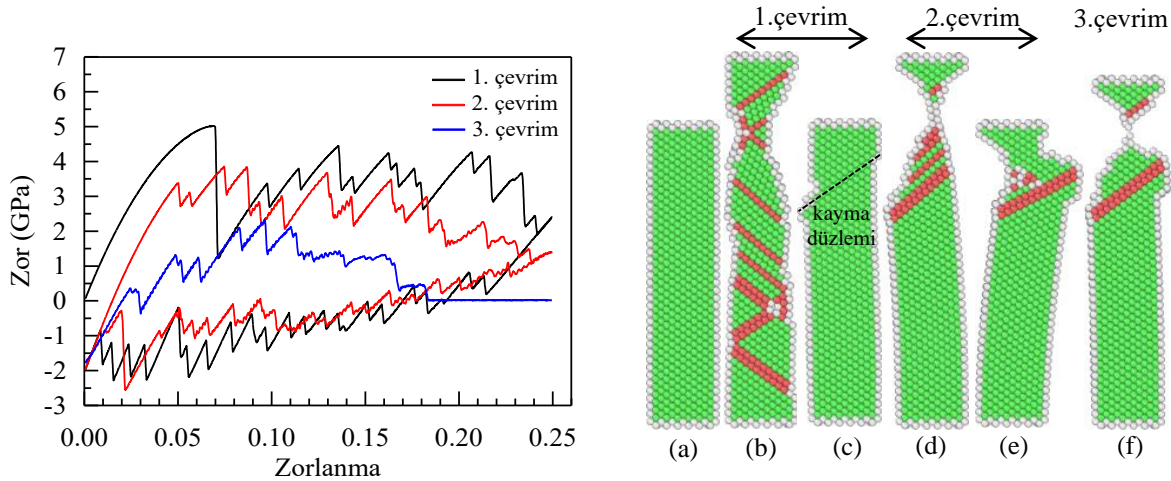
Şekil 4'te 10 K sıcaklık değeri için <100> Cu nano teline uygulanan çekme yüklemesi-yükün kaldırılması çevrimleri sonucu elde edilen zor-zorlanma eğrileri ve [010] doğrultu kesitinden elde edilen atomik konumlar verilmiştir. İlk çevrimde nano tele uygulanan çekme yüklemesi işleminde, zor-zorlanma eğrisinin zorlanmanın 0.11 değerine kadar hemen hemen doğrusal bir değişim sergilediği elastik bölge görülmektedir. Zorun en büyük değerine ulaşmasından sonra zorlanmanın artırılmaya devam etmesiyle yapı içerisinde dislokasyonlar çekirdeklenmeye başlamakta ve eğride ani bir düşüş meydana gelmektedir. Akma zoru olarak adlandırılan zorun

bu en büyük değerinden sonra nano tel kalıcı olarak şekil değişimine maruz kalmaktadır. Yükleme işleminin son bulunduğu 0.25 zorlanma değerine kadar eğrinin testere dişleri gibi girintili çıkıntılı bir yapıda değişim sergilediği görülmektedir. Bu değişimin sebebinin model nano tel sistemi içerisinde çekirdeklenen dislokasyonların büyümesi ve yayılmasından dolayı olduğu söylenebilir [42]. Bu değişim diğer çevrim işlemlerinde de meydana gelmektedir. İlk çevrim işlemi başlamadan önce denge durumundaki nano tel sisteminin fcc birim hücreli yapısı ve yükleme işlemi tamamlandıktan sonra oluşan yapısal değişim, atomik görüntülerin verildiği Şekil 4'te (a) ve (b) de görülmektedir. CNA analizine göre yeşil renkli atomlar fcc birim hücreli yapıları ve kırmızı renkli atomlar hcp birim hücreli yapıları göstermektedir. Beyaz renkli atomlar ise yüzey atomlarını ve CNA analizinde herhangi bir şekilde tanımlanmamış atomik yapıları ifade edilmektedir. Çekme işleminin son bulunduğu 0.25 zorlanma değerine ulaşıldığında, yapı içerisinde fcc kristalindeki atomların dizilim hatası olarak bilinen hcp atomlarından oluşan düzlemlerin (ok işaretleri ile gösterilen) nano telin bir ucundan diğer ucuna yayıldığı belirlenmiştir. hcp atomlarından oluşan bu düzlemler yapı içerisinde Shockley kısmi dislokasyonlarının aktif hale geçmesi sonucu oluşan yığılma kusurlarının bir göstergesi olarak ifade edilmektedir [42, 44]. Zorlanmanın arttırılmaya devam etmesi durumunda tüm nano tel boyunca başka Shockley kısmi dislokasyonları çekirdeklenerek yapı içerisine yayılacak ve yığılma kusurlarının artmasına yol açacaktır [19]. Bununla birlikte nano tel sisteminde plastik şekil değişimine kayma düzlemlerinin de katkıda bulunduğu görülmektedir. Ayrıca noktali kapalı eğrisel yüzeyle gösterilen, (b), bölgede CNA analizinde "diğer" olarak adlandırılan, beyaz renkli atomlarla ifade edilen yapıların oluşumu belirlenmiştir. Bu tanımsız atomların bir araya geldiği bölge, zorlanmanın arttırılmaya devam etmesi durumunda yeni dislokasyonların çekirdeklenecikleri bölge olarak gösterilebilir. Çekme yüklemesinin kaldırıldığı ve zorlanmanın sıfır değerine ulaşıldığı birinci çevrimin sonunda zor, yaklaşık olarak -0.5 GPa değerindedir. Diğer çevrimlerin tamamlanmasında da zor hemen hemen bu değerdedir. Zorun negatif değerde olması nano telin sıkıştırılmış durumda olduğunu göstermektedir. Yüklemenin kaldırılmasıyla dislokasyon yoğunluğu azalacaktır. Birinci çevrimin sonunda elde edilen model sistemin atomik görüntüsüne, (c), bakıldığında nano tel yapısının ilk haline tamamen geri dönmediği hcp birim hücreli yığılma kusurlarının azaldığı fakat yapı içerisinde bulunmaya devam ettiği görülmektedir. Aynı zamanda yapı içerisinde yükleme durumundakinden daha fazla kayma düzlemlerinin varlığı ve bununla birlikte ikizlenmelerin oluşumu da tespit edilmiştir. Kırmızı renkli atomlarla temsil edilen yığılma kusurları ikiz sınırlarını oluşturmaktadır. Nano tel sistemine uygulanan ikinci ve üçüncü çevrimlerde zor-zorlanma eğrisi ilk çevrimdekine benzemekle birlikte, akma zorlanma değerinin azalmasıyla oluşan histeresizler daralmıştır. İkinci çevrimde yükleme ve yüklemenin kaldırıldığı durumlarda elde edilen atomik görüntülere (d-e) bakıldığında yükleme durumunda dislokasyonlar artmakta ve yüklemenin kaldırılmasıyla dislokasyonlar azalmaktadır. Bununla birlikte çekme yüklemesi durumunda nano telin incelendiği görülmektedir. İkinci çevrimin sonunda yükleme tamamen kaldırılmasına rağmen yapı içerisinde hcp birim hücreli yığılma kusurlarının varlığı birinci çevrime göre bir miktar daha fazla görülmektedir. Son çevrim işleminde de ikinci çevrimde olduğu gibi deformasyon mekanizmasının yığılma kusurları, kayma düzlemleri ve ikizlenmelerden meydana geldiği belirlenmiştir. Bütün çevrimlerde nano telin yüzeyinin girintili-çıkıntılı bir yapıda olduğu dikkat çekmektedir. Bunun sebebinin dislokasyon kaymaları olduğu söylenebilir. Çekme işlemi esnasında ikizlenme deformasyonu $\langle 100 \rangle$ nano telinin plastik deformasyonunda önemli bir rol oynamaktadır [18]. İlk çevrimde esneklik modülü 57.8 GPa, ikinci çevrimde 62.51 GPa ve üçüncü çevrimde 62.97 GPa olarak belirlenmiştir. Malzemenin elastik şekil değişiminin bir göstergesi olan elastiklik modülünün düşük değerleri o maddenin elastik özelliğinin arttığını göstermektedir. Uygulanan çevrim işlemlerinde elastiklik modülünün artması her çevrimde nano tel yapısının esneklik özelliğinin azaldığını ifade etmektedir.



Şekil 4. $\langle 100 \rangle$ nano teli için 10 K sıcaklık değerinde gerçekleştirilen çevrim sürecindeki zor-zorlanma eğrileri ve CNA analizi sonucu elde edilen $[010]$ doğrultusundaki atomik görüntüler. Ok işaretleri yığılma kusurlarını ve ikiz sınırlarını göstermektedir.

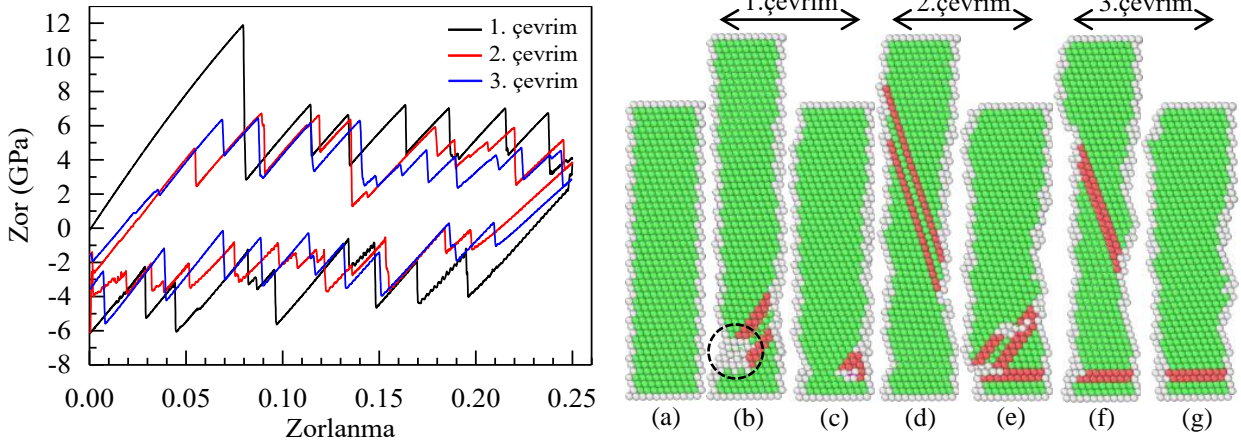
Şekil 5'te 10 K sıcaklık değerinde $\langle 110 \rangle$ Cu nano teline uygulanan çekme yüklemesi-yükün kaldırılması çevrimleri sonucu belirlenen zor-zorlanma eğrileri ve $[010]$ doğrultu kesitinden elde edilen atomik konumlar verilmiştir. İlk çevrimde zorlanmanın 0.04 değerine kadar zor-zorlanma eğrisinde hemen hemen doğrusal bir değişim meydana geldiği elastik bölge görülmektedir. Zor değeri, yapı içerisinde dislokasyonların çekirdeklenmeye başlamasıyla ani bir düşüş göstermekte ve sonrasında zor-zorlanma eğrisi $\langle 100 \rangle$ nano telinde olduğu gibi zikzak şeklinde bir değişim sergilemektedir. Çekme yüklemesinin kaldırıldığı ve zorlanmanın sıfır değerine ulaştığı çevrim sonlarında zorun negatif değerde olduğu görülmektedir. Nano tel sisteminin fcc birim hücreli denge durumu ve ilk çevrimde yüklemeye işleminin tamamlandığı 0.25 zorlanma değerinde elde edilen yapısal değişimin atomik görüntüleri Şekil 5'te (a) ve (b) de verilmiştir. Model sistemi içerisinde hcp birim hücreli yığılım kusur düzlemlerinin bir uçtan diğer uca yayıldığı (kırmızı renkli atomlar), bununla birlikte nano telin üst bölgesindeki uç kısmında bir boyun oluşumu görülmektedir. Ayrıca nano tel içerisinde ikizlenmeler de oluşmuştur. Yüklemenin nano tel üzerinden tamamen kaldırıldığı ilk çevrim sonunda, (c), yapı fcc birim hücreli ilk durumuna dönmüştür. Hiçbir yığılım kusuru ve dislokasyon görülmemektedir. Bununla birlikte atomik tabakaların birbiri üzerinden hareket ederek şekil değişiminin meydana geldiği bir kayma düzlemi belirlenmiştir. İkinci çevrim sürecinde yüklemenin tamamlandığı durumda, (d), nano telin uç kısmında boyun bölgesinin daha belirgin bir şekilde oluştuğu ve yapı içerisinde yığılım kusur düzlemlerinin sadece bu bölgede meydana geldiği, yükün kaldırılması sonucu, (e), bu yığılım kusur düzlemlerinin azalarak yine boyun bölgesinde yoğunlaştığı görülmektedir. Bununla birlikte ikinci çevrimin sonunda yüklemenin tamamen kaldırılması durumunda boyun bölgesinin durumunu koruduğu belirgin bir şekilde görülmektedir. Son çevrimde çekme yüklemesi sürecinde zorlanma 0.18 değerine ulaştığında, (f), nano tel sistemi boyun bölgesinden kopmuştur. İlk çevrimde esneklik modülü 116.5 GPa, ikinci çevrimde 126.1 GPa ve üçüncü çevrimde 92.5 GPa olarak belirlenmiştir. Üçüncü çevrimde belirlenen esneklik modülünün diğer çevrimlerde belirlenen değerlerden düşük çıkması, nano telin üçüncü çevrimde esneklik özelliğinin artmasını ve böylece kopma olayının meydana gelmesi olarak ifade edilebilir. Uygulanan çevrim süreci boyunca ilk çevrim hariç nano tel sisteminde herhangi bir ikizlenme yapısı gözlemlenmemiştir.



Şekil 5. $\langle 110 \rangle$ nano teli için 10 K sıcaklık değerinde gerçekleştirilen çevrim sürecindeki zor-zorlanma eğrileri ve CNA analizi sonucu elde edilen $[010]$ doğrultusundaki atomik görüntüler.

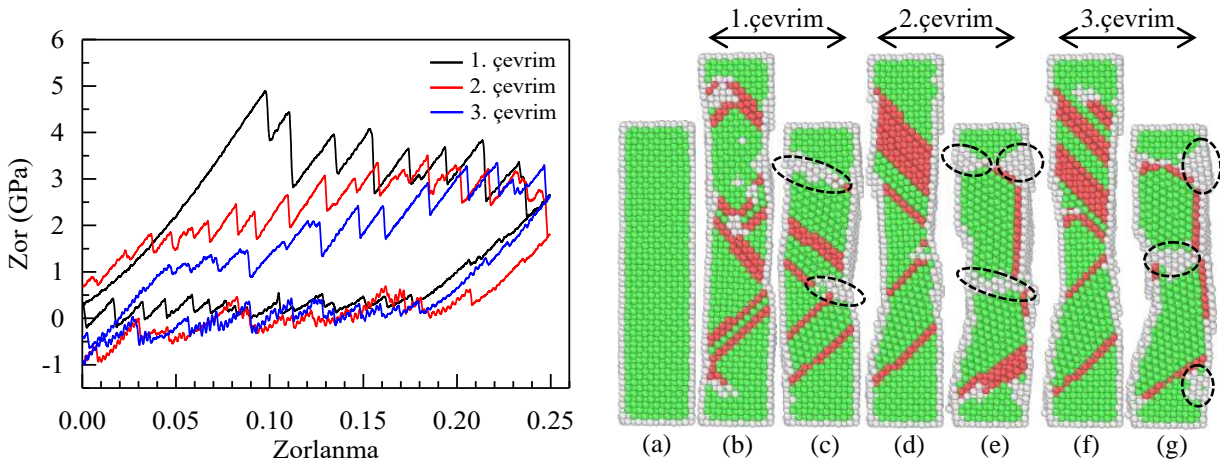
Şekil 6'da 10 K sıcaklık değerinde $\langle 111 \rangle$ kristalografik yönelimine sahip Cu nano teline uygulanan çekme yüklemesi-yükün kaldırılması çevrimleri sonucu elde edilen zor-zorlanma eğrileri ve $[010]$ doğrultu kesitinden elde edilen atomik konumlar verilmiştir. İlk çevrimde zorlanmanın yaklaşık 0.08 değerine kadar elastik şekil değişiminin meydana geldiği doğrusal bölge görülmektedir. Bu değerden sonra akma meydana gelmiş ve zorlanmanın artırılmasıyla diğer kristalografik yönelimlere sahip nano tellerde olduğu gibi zor-zorlanma eğrisi zikzak şeklinde bir değişim sergilemiştir. Uygulanan çevrimler esnasında zorlanmanın sıfır değerine karşı zorun negatif değerde olduğu bu yönelime sahip nano tel sisteminde de görülmektedir. Yüklemeye uygulanmadan ve ilk çevrimde çekme yüklemesinin tamamlandığı 0.25 zorlanma değerinde elde edilen atomik görüntüler (a) ve (b) şeklinde verilmiştir. Çekme yüklemesi tamamlandığında nano telin alt ucunda hcp birim hücreli yığılım kusur düzlemleriyle birlikte, zorlanmanın arttırılmaya devam etmesi durumunda yeni yığılım kusurları için çekirdek vazifesi görece "diğer" olarak adlandırılan ve noktalı kapalı eğri ile işaretlenen tanımsız atomların bir araya geldiği bölge görülmektedir. Yüklemeye tamamen kaldırılıp ilk çevrim tamamlandığında, (c), nano yapı hemen hemen ilk haline dönmüştür. Bununla birlikte az miktarda da olsa hcp atomlarının bir arada olduğu bir bölge bulunmaktadır. İkinci çevrim için elde edilen (d) ve (e) şekillerinde sırasıyla yüklemenin son değerine ulaşıldığında hcp atomlarından oluşan yığılım düzlemlerinin nano telin orta kısmında yer aldığı ve yüklemenin kaldırılması durumunda bu düzlemlerin nano telin alt bölgesinde yoğunlaştığı görülmektedir. Uygulanan son

çevrimde, (f-g), nano telde çekme yüklemesi sonucu hcp yığılma düzlemlerinin varlığı ve yüklemenin kaldırılmasıyla yapı içerisinde az miktarda bu yığılma kusurlarının kalmasıyla yapının hemen hemen başlangıç yapısına dönüştüğü tespit edilmiştir. Uygulanan çevrimler esnasında herhangi bir ikizlenme yapısı gözlenmemiştir. Zor-zorlanma eğrilerinden bu kristalografik yönelime sahip nano tel sistemi için elastik modülü ilk çevrim için 159.8 GPa, ikinci çevrim için 140.6 GPa ve üçüncü çevrim için 116.1 GPa olarak belirlenmiştir.



Şekil 6. <111> nano teli için 10 K sıcaklık değerinde gerçekleştirilen çevrim sürecindeki zor-zorlanma eğrileri ve CNA analizi sonucu elde edilen [010] doğrultusundaki atomik görüntüler.

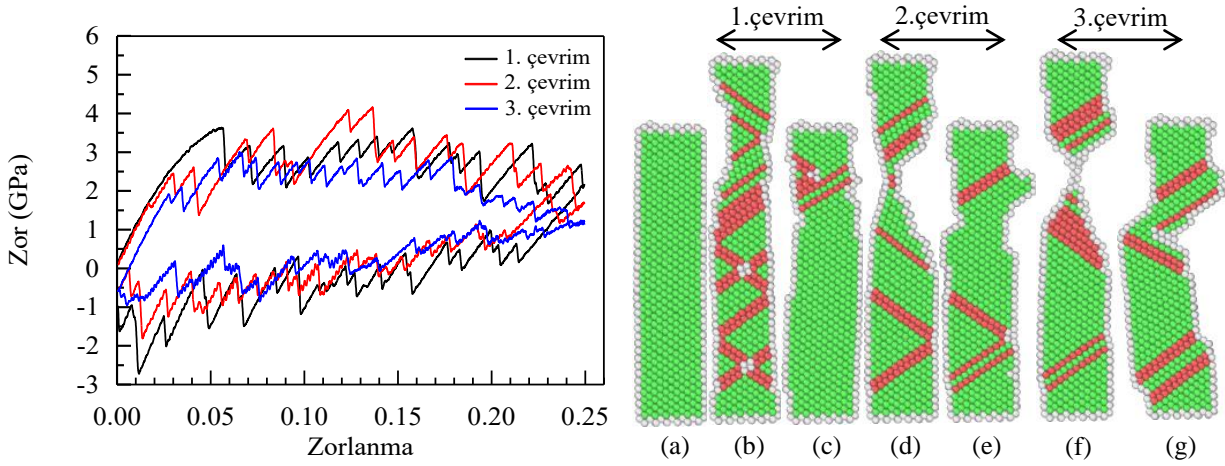
Üç farklı kristalografik yönelime sahip Cu nano tel sistemine çekme yüklemesi-yükün kaldırılması çevrim süreci 300 K sıcaklık değeri için de uygulandı. <100> nano teli için gerçekleştirilen çevrim süreçlerinde elde edilen zor-zorlanma eğrileri ve yüklemenin maksimum olduğu ve yükün tamamen kaldırıldığı durumlardaki atomik görüntüler Şekil 7'de verilmiştir. Çevrim sürecinde elde edilen zor-zorlanma eğrileri ve meydana gelen plastik deformasyonlar, 10 K sıcaklık değerindeki nano telden elde edilen sonuçlarla hemen hemen benzer özellikler göstermektedir. Bununla birlikte zorun artırılmaya devam etmesi durumunda dislokasyonların çekirdeklenecekleri ve CNA analizinde "diğer" olarak adlandırılan ve noktalı kapalı eğriler ile gösterilen beyaz renkli atomların bir arada olduğu bölgelerin yoğunluğu dikkat çekmektedir. Özellikle nano tel sisteminin üzerinden yüklemenin kaldırıldığı durumlarda, (c-e-g) bu bölgelerin arttığı ve tekrar çekme yüklemesiyle birlikte yapı içerisinde Shockley kısmi dislokasyonlarının aktif hale geçmesi sonucu yığılma kusurlarının (kırmızı renkli atomlar) meydana gelmesine sebep olduğu görülmektedir. Ayrıca uygulanan çevrim işlemlerinde nano tel yapısı içerisinde ikizlenmelerin meydana geldiği belirlenmiştir. İlk çevrimde esneklik modülü 38.75 GPa, ikinci çevrimde 46.7 GPa ve üçüncü çevrimde 47.8 GPa olarak belirlenmiştir.



Şekil 7. <100> nano teli için 300 K sıcaklık değerinde gerçekleştirilen çevrim sürecindeki zor-zorlanma eğrileri ve CNA analizi sonucu elde edilen [010] doğrultusundaki atomik görüntüler.

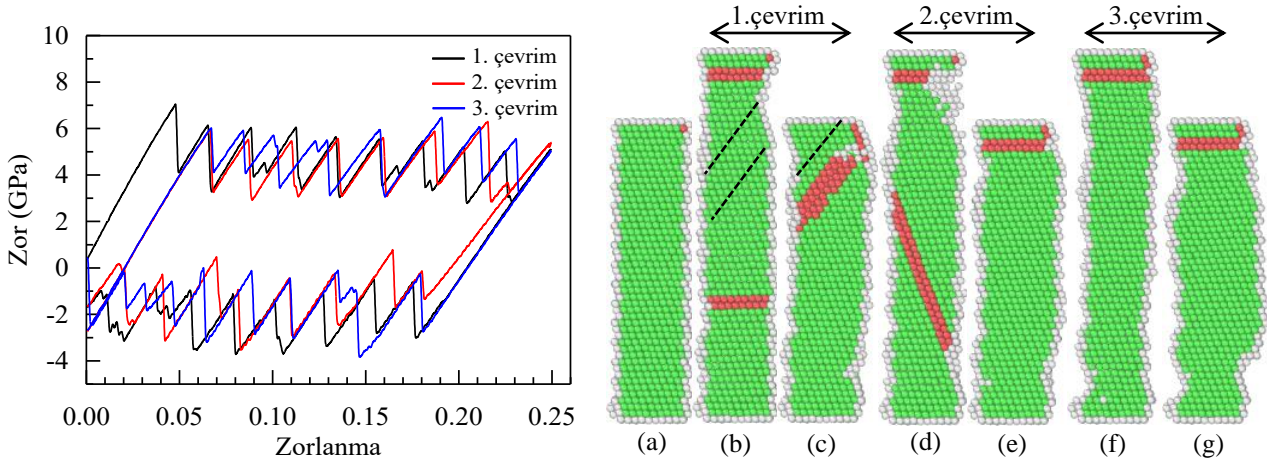
300 K sıcaklık değerinde <110> nano teli için gerçekleştirilen çevrim süreçlerinde elde edilen zor-zorlanma eğrileri ve atomik görüntüler Şekil 8'de verilmiştir. 10 K sıcaklık değerindeki nano tel sistemiyle karşılaştırıldığında hcp birim hücreli yığılma kusurlu düzlemlerin fazlalığı göze çarpmaktadır. Bunun sebebi olarak sıcaklık artışının nano teldeki atomların sahip olduğu kinetik enerji değerini artırması ve bunun da çok

sayıda Shockley kısmi dislokasyonlarının aktif hale geçmesini sağlayarak yığılma kusurlarının fazlaşmasına sebep olduğu şeklinde ifade edilebilir. Üçüncü çevrim yüklemesinde, (f), nano telin boyun bölgesi oldukça incelemek sünek bir yapı göstermiş ama nano tel kopmamıştır. Bu çevrimler esnasında nano telde meydana gelen plastik şekil değişimine kayma düzlemleri ve ikizlenmeler de katkıda bulunmuştur. İlk çevrimde esneklik modülü 100.5 GPa, ikinci çevrimde 97.5 GPa ve üçüncü çevrimde 95.9 GPa olarak belirlenmiştir.



Şekil 8. <110> nano teli için 300 K sıcaklık değerinde gerçekleştirilen çevrim sürecindeki zor-zorlanma eğrileri ve CNA analizi sonucu elde edilen [010] doğrultusundaki atomik görüntüler.

Son olarak <111> nano teli için 300 K sıcaklık değerinde gerçekleştirilen çevrim süreçlerinde elde edilen zor-zorlanma eğrileri ve atomik görüntüler Şekil 9'da görülmektedir. 10 K sıcaklık değerinde elde edilen sonuçlarla karşılaştırıldığında 300 K sıcaklık değerinde de kalıcı şekil değişiminin yapı içerisinde bulunan az sayıda hcp birim hücreli yığılma kusurları ve kayma düzlemleri tarafından (noktalı çizgiler) meydana getirildiği tespit edilmiştir. Herhangi bir ikiz yapının var olmadığı belirlenmiştir. İlk çevrimde esneklik modülü 143.9 GPa, ikinci çevrimde 133.6 GPa ve üçüncü çevrimde 133.4 GPa olarak tespit edilmiştir.



Şekil 9. <111> nano teli için 300 K sıcaklık değerinde gerçekleştirilen çevrim sürecindeki zor-zorlanma eğrileri ve CNA analizi sonucu elde edilen [010] doğrultusundaki atomik görüntüler.

4. Tartışma ve Sonuç

Cu atomlarının farklı kristal yönelimleriyle yerleştirildikleri nano tellere tek eksen doğrultusu boyunca uygulanan çekme yüklemesi-yükün kaldırılması çevrimlerinin, model sistemin mekanik özelliklerinde meydana getirdiği değişimler MD yöntemiyle incelendi. 10 K ve 300 K sıcaklık değerlerinde, $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ zorlanma oranıyla gerçekleştirilen çalışmada atomlar arasındaki etkileşimler GAM potansiyel fonksiyonu ile belirlendi. Uygulanan çevrim işlemlerinde sadece 10 K sıcaklık değerinde <110> nano telinin ilk çevriminin sonunda, 10 K ve 300 K sıcaklık değerinde <111> nano telinin tüm çevrimlerinde kısmen nano telin ilk şekline geri dönüşüm sergileyerek süper esneklik özelliği gösterebileceği belirlendi. Bununla birlikte <110> nano telinin üçüncü çevrim esnasında boyun bölgesinden koptuğu gözlemlendi. Nano tellerde plastik şekil değişimini oluşturan deformasyon mekanizmasının dislokasyonların hareketi sonucu kaymalar, yığılma kusurları ve ikizlenmelerle

meydana geldiği tespit edildi. Rezaei ve Deng yaptıkları çalışmada [27] Ag ve Au nano tellerinin uygulanan çekme yüklemesinin kaldırılması sonucu örgü yeniden yönelimiyle herhangi bir yapısal kusur kalmadan ilk yapılarına geri döndükleri Cu ve Ni nano tellerinde bu durumun oluşmadığını belirlediler. Ag ve Au nano telleri uygulanan çekme yüklemesinin kaldırılmasıyla tamamen geri kazanılabilen suni esneklik davranış sergilemişlerdir. Nano tel sistemine uygulanan çevrimler esnasında yüklemenin tamamen kaldırıldığı, zorlanmanın sıfır değerine karşı zorun negatif değere sahip olması model sistem içerisinde yapı kusurlarının görülmesinin bir sonucu olduğu söylenebilir.

Kaynakça

- [1] Pasquier, A., Unalan, H. E., Kanwal, A., Miller, S., Chhowalla, M. 2005. Conducting and transparent single-wall carbon nanotube electrodes for polymer-fullerene solar cells. *Appl. Phys. Lett.*, 87(2005), 203511.
- [2] Lee, K., Wu, Z., Chen, Z., Ren, F., Pearton, S. J., Rinzler, A. G. 2004. Single wall carbon nanotubes for p-type ohmic contacts to GaN light-emitting diode. *Nano Letters*, 4(2004), 911-914.
- [3] Li, J., Hu, L., Wang, L., Zhou, Y., Gruner, G., Marks, T. J. 2006. Organic light-emitting diodes having carbon nanotube anodes. *Nano Lett.*, 6(2006), 2472-2477.
- [4] Diao, J., Gall, K., Dunn, M.L. 2003. Surface-stress-induced phase transformation in metal nanowires. *Nature Materials*, 2(2003), 656-660.
- [5] Lao, J., Moldovan, D. 2008. Surface stress induced structural transformations and pseudoelastic effects in palladium nanowires. *Appl. Phys. Lett.*, 93(2008), 093108.
- [6] Zheng, H., Cao, A., Weinberger, C.R., Huang J.Y., Du, K., Wang, J., Ma, Y., Xia, Y., Mao., S.X. 2010. Discrete plasticity in sub-10-nm-sized gold crystals *Nature. Communications*, 1(2010), 144.
- [7] Liang, W., Zhou, M. 2005. Shape Memory Effect in Cu Nanowires. *Nano Letters*, 5(2005), 2039-2043.
- [8] Liang, W., Zhou, M. 2006. Atomistic simulations reveal shape memory of fcc metal nanowires. *Physical Review B*, 73(2006), 115409.
- [9] Park, H.S., Gall, K., Zimmerman, J.A. 2005. Shape Memory and Pseudoelasticity in Metal Nanowires. *Physical Review Letters*, 95(2005), 255504.
- [10] Park, H.S., Ji, C. 2006. On the thermomechanical deformation of silver shape memory nanowires. *Acta Materialia*, 54(2006), 2645-2654.
- [11] Diao, J., Gall, K., Dunn, M.L. 2004. Yield Strength Asymmetry in Metal Nanowires. *Nano Letters*, 4(2004), 1863-1867.
- [12] Park, H.S., Zimmerman, J.A. 2005. Modeling inelasticity and failure in gold nanowires, *Physical Review B*, 72(2005), 054106.
- [13] Park, H.S., Gall, K., Zimmerman, J.A. 2006. Deformation of FCC nanowires by twinning and slip. *J. Mech. Phys. Solids*, 54, 1862-1881.
- [14] Wu, H.A. 2006. Molecular dynamics study of the mechanics of metal nanowires at finite temperature. *Euro. J. Mech. A Solids*, 25(2006), 370-377.
- [15] Wu, H.A. 2006. Molecular dynamics study on mechanics of metal nanowire. *Mech. Res. Commun.*, 33(2006), 9-16.
- [16] Komandori, R., Chadrsekaran, N., Raff, L.M. 2003. Molecular Dynamics Simulations of Uniaxial Tension at Nanoscale of Semiconductor Materials for MEMS Applications. *Mater. Sci. Eng. A*, 340(2003), 58-67.
- [17] Komandori, R., Chadrsekaran, N., Raff, L.M. 2001. Molecular Dynamics (MD) Simulations of Uniaxial Tension of Some Single Crystal Cubic Metals at Nanolevel. *Int. J. Mech. Sci.* 43(2001), 2237-2260.
- [18] Gao, Y., Wang, H., Zhao, J., Sun, C., Wang, F. 2011. Anisotropic and temperature effects on mechanical properties of copper nanowires under tensile loading. *Computational Materials Science*, 50(2011), 3032-3037.
- [19] Sainath, G., Choudhary, B.K. 2016. Orientation dependent deformation behaviour of bcc iron nanowires. *Computational Materials Science*, 111(2016), 406-415.
- [20] Jani, J.M., Leary, M., Subic, A., Gibson, M.A. 2014. A review of shape memory alloy research, applications and opportunities. *Materials Design*, 56(2014), 1078-1113.

- [21] Lobo, P.S., Almeida, J., Guerreiro, L. 2015. Shape memory alloys behaviour: a review. *Procedia Eng.*, 114(2015), 776-783.
- [22] Sun, L., Huang, W.M., Ding, Z., Zhao, Y., Wang, C.C., Purnawali, H., Tang, C. 2012. Stimulus responsive shape memory materials: a review. *Materials Design*, 33(2012), 577-640.
- [23] Pathak, A., Chatterjee, R., Prakash, C. 2010. Improvement in shape memory in magnesium niobate modified PZST. *Ceram. Int.*, 36(2010), 2263-2267.
- [24] Deng, C., Sansoz, F. 2016. A new form of pseudo-elasticity in small-scale nanotwinned gold. *Extreme Mech. Lett.*, 8(2016), 201-207.
- [25] Seo, J.H., Park, H.S., Yoo, Y., Seong, T.Y., Li, J., Ahn, J.P., Kim, B., Choi, I.S. 2013. Origin of size dependency in coherent-twin-propagation-mediated tensile deformation of noble metal nanowires. *Nano Letters*, 13(2013), 5112-5116.
- [26] Cao, A. 2010. Shape memory effects and pseudoelasticity in BCC metallic nanowires. *J. Appl. Phys.*, 108(2010), 113531.
- [27] Rezaei, R., Deng, C. 2017. Pseudoelasticity and shape memory effects in cylindrical fcc metal nanowires. *Acta Materialia*, 132(2017), 49-56.
- [28] Jing, Y., Meng, Q., Zhao, W. 2009. Molecular Dynamics simulations of the tensile and melting behaviours of silicon nanowires. *Physica E*, 41(2009), 685-689.
- [29] Katakam, K. C., Yedla, N. 2021. Influence of orientation and temperature on the mechanical properties and deformation behavior of nickel nanowire under bending: A large scale molecular dynamics simulation. *Materials Today: Proceedings*, 39(2021), 1727-1732.
- [30] Jelinek, P., Perez, R., Ortega, J., Flores, F. 2003. First-principles simulations of the stretching and final breaking of Al nanowires: Mechanical properties and electrical conductance. *Phys.Rev. B.*, 68(2003), 085403.
- [31] Cai, J., Ye, Y.Y. 1996. Simple analytical embedded-atom-potential model including a long-range force for fcc metals and their alloys. *Phys. Rev. B*, 54(1996), 8398.
- [32] Tolpin, K.A., Bachurin, V.I., Yurasova, V.E. 2012. Features of energy dependence of NiPd sputtering for various ion irradiation angles. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, 273(2012), 76-79.
- [33] Hong, Z.H., Fang, T.H., Hwang, S.F. 2011. Phase transformation of stress-induced zinc oxide nanobelts using molecular dynamics. *Computational Materials Science*, 50(2011), 1944-1950.
- [34] <http://lammps.sandia.gov/>. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator (Erişim Tarihi:02.04.2021).
- [35] 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.
- [36] Kazanc, S. 2013. The effects on the lattice dynamical properties of the temperature and pressure in random NiPd alloy. *Can. J. Phys.*, 91(10), 833-838.
- [37] Kazanc, S., Ozgen, S., Adiguzel, O. 2003. Pressure effects on martensitic transformation under quenching process in a molecular dynamics model of NiAl alloy. *Physica B*, 334(3-4), 375-381.
- [38] Foiles, S.M., Baskes, M.I., Daw, M.S. 1986, Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Phys. Rev. B*, 33(1986), 7983.
- [39] 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(2013), 234506.
- [40] Stukowski, A. 2012. Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 20(2012), 045021.
- [41] Setoodeh, A.R., Attariani, H., Khosrownejad, M. 2008. Nickel nanowires under uniaxial loads: A molecular dynamics simulation study. *Computational Materials Science*, 44(2008), 378-384.
- [42] Wu, H.A. 2006, Molecular dynamics study of the mechanism of metal nanowires at finite temperature. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 25(2006), 370-377.
- [43] Guder, V., Sengul, S. 2020. Tensile strength and failure mechanism of hcp zirconium nanowires: Effect of diameter, temperature and strain rate. *Computational Materials Science*, 177(2020), 109551.
- [44] 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(2010), 513-519.