

## Boşluk ve Arayer Kusurlarının Cu Nano Telinin Mekanik Özelliklerine Etkisi: Moleküler Dinamik Çalışması

Sefa KAZANÇ<sup>1</sup>, Canan Aksu CANBAY<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>Fırat Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi, 23119, Elazığ/TÜRKİYE

<sup>2</sup>Fırat Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 23119, Elazığ/TÜRKİYE

<sup>1</sup>skazanc@firat.edu.tr, <sup>2\*</sup>caksu@firat.edu.tr

(Geliş/Received: 23/03/2023;

Kabul/Accepted: 03/07/2023)

**Öz:** Bu çalışmada farklı yüzdelerde boşluk ve arayer kusuru içeren Cu nano tellerine uygulanan tek eksenli çekme zorlanması sonucu mekanik özelliklerde meydana gelen değişimler Moleküler Dinamik (MD) benzetim yöntemiyle incelendi. Cu atomlarına etki eden kuvvetlerin belirlenmesinde çok cisim etkileşmelerini içeren Gömülmüş Atom Metodu (GAM) potansiyel fonksiyonundan yararlanıldı. Noktasal kusurların yoğunluğuna bağlı olarak, Cu model nano teline uygulanan tek eksenli çekme zorlanması sonucu zor-zorlanma eğrileri, Young modülü, akma zorlanması değerleri belirlendi. Uygulanan deformasyon sonucu oluşan yapısal değişimler, dislokasyon oluşumları ve yayılımları sırasıyla genel komşu analiz yöntemi (CNA) ve dislokasyon analizi (DXA) ile incelendi. Çekme zorlanması sonucu oluşan hcp birim hücreli yığılım kusurları ve Shockley dislokasyonlarının model nano telin mekanik özellikleri üzerinde etkili olduğu belirlendi.

**Anahtar kelimeler:** Noktasal kusurlar, zor-zorlanma, moleküler dinamik, nano tel.

## The Effect of Vacancy and Interstitial Defects on Mechanical Properties of Cu Nanowire: Study of Molecular Dynamics

**Abstract:** In this study, changes in mechanical properties as a result of uniaxial tensile strain applied to Cu nanowires containing different percentages of vacancy and interstitial defects were investigated by Molecular Dynamics (MD) simulation method. The Embedded Atom Method (EAM) potential function, which includes many-body interactions, was used to determine the forces acting on Cu atoms. Depending on the density of the point defects, the stress-strain curves, Young's modulus, yield stress values were determined as a result of the uniaxial tensile stress applied to the Cu model nanowire. Structural changes, dislocation formations and their spread resulting from the applied deformation were examined by common neighbour analysis method (CNA) and dislocation analysis (DXA), respectively. It was determined that hcp unit cell stacking fault defects and Shockley dislocations caused by tensile strain were effective on the mechanical properties of the model nanowire.

**Keywords:** Point defects, stress-strain, molecular dynamics, nanowire.

### 1. Giriş

Nano bilim ve nano teknolojinin yapı taşları olan nano malzemeler son yıllarda malzeme bilminde büyük ilgi görmektedir. Özellikle metalik nano teller yüksek mukavemetleri ve hafif olmaları sebebiyle gelecek nesil elektronik, opto-elektronik, süperiletken cihazlar, kompozit malzemeler, sensörler, taramalı tünelleme mikroskobu ve atomik kuvvet mikroskobu için uç olarak kullanılması gibi çeşitli uygulamalarda karşımıza çıkmaktadır [1-4]. Bu nedenle nano tellerde istenilen özelliklerin elde edilmesi teknolojik kullanımları açısından büyük önem taşımaktadır. Nano teller hacimsel (bulk) malzemelerle karşılaştırıldığında yüksek yüzey/hacim oranına sahiptirler. Bu da onların hacimsel yapı malzemelere göre üstün mekanik özelliklere sahip olmasına neden olur [5-6]. Mekanik özelliklerin araştırılması nano malzemelerin gelecekteki teknolojik uygulamaları için üstesinden gelinmesi gereken temel konulardan biridir. Şekil hatırlama etkisi [7], yüzey stress kaynaklı faz dönüşümü [8], akma mukavemeti asimetrisi [9] ve boyuta bağlı özelliklerinden [10-11] dolayı kusursuz nano tellerin mekanik özellikleri üzerine birçok çalışma yapılmıştır.

Nano teller boyut olarak çok küçük olmalarına rağmen onları kusursuz bir şekilde üretmek ve işlemek oldukça zor bir işlemdir [12, 13]. Deneysel olarak SEM [14, 15], AFM [16, 17] ve TEM [18, 19] gibi bir dizi yöntem, nano tellere uygulanan çekme deformasyonu esnasında mikroyapısal değişimleri belirlemek için kullanılmaktadır. Nano malzemelerin küçük boyutu göz önüne alındığında nano tel numunesi hazırlamak, nano tel eksensel yönünü

\* Sorumlu yazar: [caksu@firat.edu.tr](mailto:caksu@firat.edu.tr). Yazarların ORCID Numarası: <sup>1</sup> 0000-0002-8896-8571, <sup>2</sup> 0000-0002-5151-4576

yüklenme yönü ile hizalamak ve uygun çekme testini gerçekleştirmedeki zorluklar hala devam etmektedir [20]. Bununla birlikte deneysel teknikler hem pahalı hem de zaman alıcıdır. Daha da önemlisi çok az sayıda numune elde edilmektedir. Nano tellerin özelliklerinin kusurlardan büyük ölçüde etkilendiği yapılan çalışmalarda gözlemlenmiştir [21-24]. Nano tellerdeki kusurlar hem yüzeyde hemde iç bölgede tane sınırları, büyük boşluklar (void), boşluk ve arayer atomları olarak görülebilir [25]. Deneylerin sınırlı olması nedeniyle nano ölçekli kusurların nano tellerin mekanik davranışları üzerindeki etkisinin belirlenmesi oldukça zordur.

Deneysel tekniklerdeki bu karmaşıklıktan dolayı araştırmalar teorik hesaplamalı araçlara yönelmektedir. En çok kullanılan atomik boyutta hesaplama yöntemlerinden MD benzetim yöntemi, bilgisayar hesaplama kapasitesinin artması ve güvenilir potansiyel enerji fonksiyonlarının geliştirilmesi ile malzemelerin özelliklerini araştırmak için önemli bir araç haline gelmiştir. MD benzetim yöntemleri sıcaklık, boyut, zorlanma oranı, yapısal kusurlar gibi farklı koşullar altında nano tellerin atomik düzeyde araştırılmasına yardımcı olan bir sayısal hesaplama tekniğidir. Bununla birlikte MD benzetimlerinde çok sayıda örneklem elde edilmekte, mikro yapının gelişimi tam olarak açıklanmakta ve aynı zamanda malzemelerin mekanik özellikleri kapsamlı bir şekilde anlaşılmaktadır [26, 27]. Elektronik endüstrisinin gelişmesiyle Cu'nun elektrik bağlantı elamanı olarak kullanılması önemli hale gelmiştir [28]. Literatürde nano tel yapısındaki Cu elementinin fiziksel ve termodinamik özelliklerinin belirlenmesi için yapılmış birçok çalışma bulunmaktadır [29-31].

N parçacıktan oluşan bir sistemin Lagrange fonksiyonundan hem parçacıklar hem de hesaplama hücresi için elde edilen hareket denklemlerinin bir algortima ile sayısal çözümü klasik MD yönteminin temelini oluşturmaktadır [32]. Hesaplamalarda kullanılan potansiyel enerji fonksiyonunun (PEF) modellenen sisteme uygun olarak seçilmesi, elde edilecek sonuçların deneysel değerlerle uyum içerisinde olması açısından son derece önemlidir. Çok cisim etkileşmelerini içermesi ve matematiksel olarak sade bir yapıya sahip olmasının getirdiği avantajlardan dolayı GAM, MD benzetim çalışmalarında en çok tercih edilen fonksiyonlardandır [33].

Bu çalışmada farklı yüzdelerde boşluk ve arayer kusuru içeren Cu nano tel sistemine uygulanan tek eksenli çekme zorlanması sonucu mekanik özelliklerde ve mikro yapıda meydana gelen değişimler MD benzetim yöntemi kullanılarak belirlenmeye çalışıldı. Çalışmada büyük ölçekli atomic/moleküler kitlesel paralel simülatör (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator-LAMMPS) programı kullanıldı [34]. GAM potansiyel fonksiyonu ile modellenen Cu nano tel sisteminin deformasyonu sonucu oluşan yapısal değişimler, dislokasyon çekirdeklenmesi ve yayılımının belirlenmesi için sırasıyla CNA ve DXA analiz yöntemleri kullanıldı.

## 2. Materyal ve Metot

Parçacıklar ve hesaplama hücresinin kinetik ve potansiyel kısımlarını içeren Lagrange fonksiyonu MD yönteminde;

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

şeklinde verilmektedir. Denklemde  $i$  parçacığının koordinatını, metrik tensörü, MD hücre eksenlerini,  $i$  parçacığının kütlelerini, dış basıncı, hesaplama hücresinin kütlelerini ve hacmini sırasıyla  $s_i$ ,  $G$ ,  $\mathbf{h}$ ,  $m_i$ ,  $P_{ext}$ ,  $M$  ve  $V$  parametreleri ifade etmektedir. Bu fonksiyondan parçacıklar ve hesaplama hücresi için elde edilen hareket denklemleri sırasıyla aşağıda verilmiştir.

$$\ddot{\mathbf{s}}_i = -\frac{1}{m_i} \mathbf{F}_i - G^{-1} \hat{G} \dot{\mathbf{s}}_i \quad (2)$$

$$\ddot{\mathbf{h}} = M^{-1} (\mathbf{\Pi} - I P_{ext}) \sigma \quad (3)$$

$$\mathbf{\Pi} = V^{-1} \left[ \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{F_{ij}}{r_{ij}} \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_i \right] \quad (4)$$

Mikroskobik zor tensörü ( $\mathbf{\Pi}$ ) denklem (4)'te verildiği gibi ifade edilmektedir [35]. Tek atomlu element ve alaşım sistemlerini modellemek için kullanılan ve çok cisim etkileşmelerini içeren GAM, yarı deneysel bir potansiyel enerji fonksiyonudur. GAM da sistemin enerjisi bir atomu çevresindeki diğer atomların oluşturduğu yük yoğunluğuna gömmek için gerekli enerjiden belirlenir. GAM'da sistemin toplam enerjisi

$$E_T = \frac{1}{2} \sum_{i,j}^N \phi(r_{ij}) + \sum_i^N F(\bar{\rho}_i) \quad (5)$$

şeklinde ifade edilmektedir. Fonksiyondaki ilk terim olan  $F_i(\rho_i)$ , çok cisim etkileşmelerini içeren gömme enerjisini, ikinci terim  $\Phi(r_{ij})$  ise iki cisim etkileşmesini vermektedir [36]. Cu elementinin GAM parametreleri literatürden bulunabilir [37].

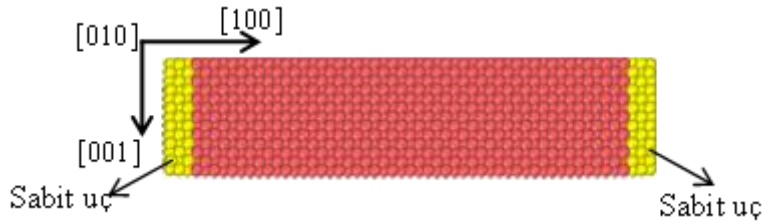
Modelleme çalışmalarında LAMMPS moleküler dinamik benzetim yöntemi kullanıldı. 4647 atomdan oluşan Cu nano tel yapısı x ve y yönlerinde 2,17 nm ve z yönünde 10,8 nm boyutlarına sahiptir. Atomlar fcc örgü noktalarına  $\langle 100 \rangle$  doğrultusu boyunca yerleştirilerek model sistemin başlangıç yapısı oluşturulmuştur. Atomlara ilk hızları rastgele ve Maxwell-Boltzman hız dağılımına uyacak şekilde atanmıştır. z-ekseni doğrultusunda çekme deformasyon işlemi NVT istatistiksel topluluğuna uygulanmıştır. İntegrasyon adım aralığı 1fs olarak alınarak hareket denklemlerinin Verlet algoritmasının hız formu kullanılarak çözülmesi sağlanmıştır. Periyodik sınır şartı sadece z eksenini doğrultusunda uygulanmış x ve y yönleri boyunca atomların hareketleri serbest bırakılmıştır. Noktasal kusurlara sahip Cu nano tel sistemine uygulanan tek eksenli germe deformasyonu sonucu mekanik özelliklerdeki değişimleri ve yapısal gelişimleri belirlemek için model sistem içerisinde rastgele bir şekilde %0,2, %0,4, %0,6, %0,8 ve %1 oranlarında boşluk ve arayer kusurları oluşturuldu. Çekme işlemi uygulanmadan önce model sistem  $5 \times 10^4$  MD adımı dengeletildi. Boşluk ve arayer kusurları içeren nano tel sistemlerine bütün çalışma boyunca  $1 \times 10^9$  s<sup>-1</sup> değerindeki germe zorlanması 10 K sıcaklık değerinde uygulandı. Çekme deformasyonu sonucu farklı yüzdelerde boşluk ve arayer kusuru içeren nano tellerden elde edilen zor-zorlanma eğrilerinden akma zorlanması, elastiklik modülü değerleri belirlenerek, kusurların bu değerler üzerinde değişime neden olduğu belirlendi. Çekme deformasyonu sonucu meydana gelen yapısal değişimler CNA analizi ile yapı içerisindeki dislokasyonlar DXA analizi ile tespit edildi.

Model sisteme uygulanan fiziksel, mekanik veya termodinamik işlemlerden sonra oluşan yapısal değişimlerin belirlenmesi MD benzetim çalışmalarında oldukça önemlidir. Bunun için farklı analiz yöntemleri geliştirilmiştir. Her atomun komşu atomlarıyla oluşturduğu birim hücreli yapıların belirlenmesi bu analiz yöntemlerinin temel amacıdır. Ayrıca bu analiz yöntemleri belirlenen yapıyı ideal bir yapıyla karşılaştırarak, ne kadar uyumlu olduklarını tespit etmeye çalışır. En çok kullanılan analiz yöntemleri arasında genel yakın komşu analizi (common neighbor analysis), merkez simetri parametre analizi (centrosymmetry parametre analysis), bağ-yönelim analizi, Honeycutt-Andersen ve Voronoi analizi sayılabilir [38, 39].

Bu analiz yöntemleri içerisinde CNA, MD çalışmalarında en çok kullanılan yöntemlerdendir [40]. Temel olarak bir atomun hangi tür yapıyı temsil ettiğini tayin etmek için 4 karakteristik tamsayı ( $i, j, k, l$ ) tanımlanır. İki atom bağlı ise  $i$  indisi 1 aksi halde 2 değerini alır. Atom çiftinin ortak paylaşılan yakın komşuları varsa bu yakın komşuların sayısı  $j$  indisi tarafından verilmektedir. Paylaşılan komşular arasındaki bağların sayısı  $k$  indeksine karşılık gelmektedir. Ortak komşulardaki en uzun zincirdeki bağ sayısı ise  $l$  indisi tarafından ifade edilmektedir [41].

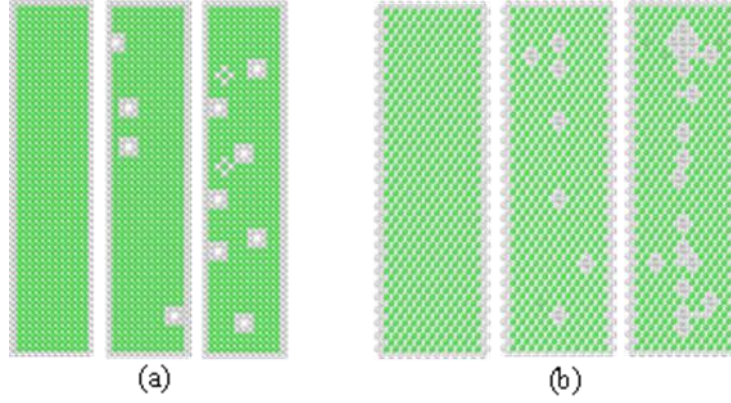
### 3. Bulgular

Bu çalışmada model Cu nano tel sistemi içerisinde %0,2, %0,4, %0,6, %0,8 ve %1 oranlarında oluşturulan boşluk ve arayer kusurlarının, nano tele uygulanan tek eksenli germe zorlanması sonu mekanik özellikleri üzerindeki etkisi belirlenmeye çalışıldı. Şekil 1'de kusursuz Cu nano telinin başlangıç yapısı verilmiştir. Sarı renkli atomlarla gösterilen ve üç atomik tabakadan oluşan bölgeler hareketsiz uçlar olarak belirlenmiştir. Çekme deformasyon işlemi soldaki sabit uç hareketsiz tutularak ve sağdaki sabit uç ise  $1 \times 10^{10}$  s<sup>-1</sup> zorlanma oranı ile çekilerek uygulanmıştır.



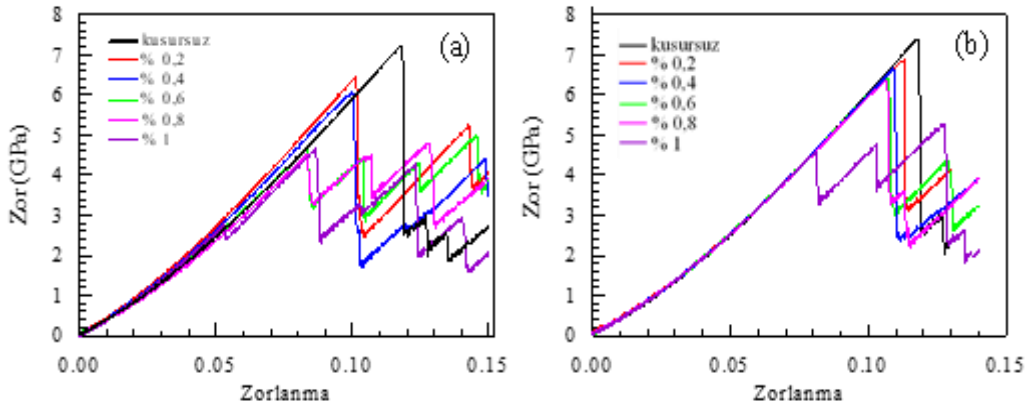
Şekil 1. Kusursuz Cu nano telinin başlangıç yapısı.

Şekil 2’de kusursuz, %0,4 ve %1 oranında sırasıyla boşluk ve arayer kusurlarını içeren Cu nano tel model sistemlerinin başlangıç yapılarının farklı düzlem kesitlerinden alınan atomik görüntüleri verilmiştir. Hem boşluk hem de arayer noktasal kusurları model nano tel sisteminde rastgele oluşturulmuştur. Kusurların bazılarının nano telin yüzeyinde meydana geldiği ve bazılarının ise iç bölgelerde olduğu belirlenmiştir.



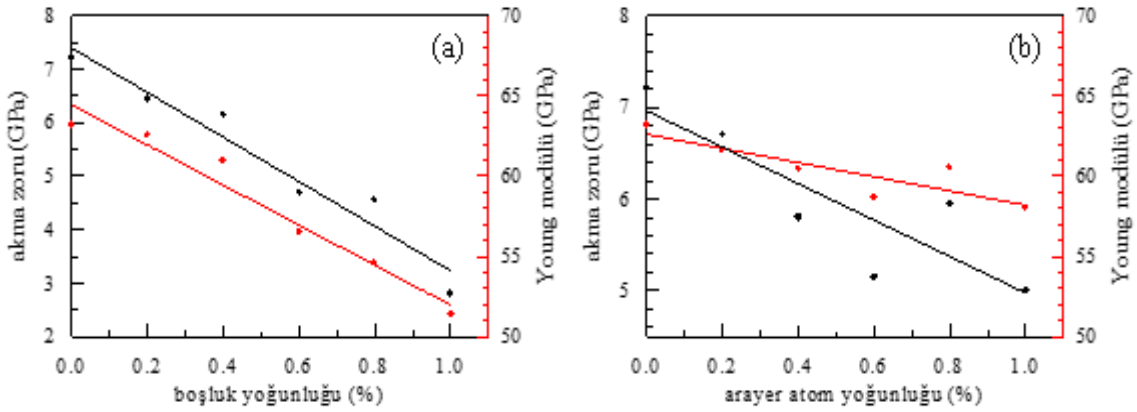
**Şekil 2.** Kusursuz, %0,4 ve %1 yoğunluğunda nokta kusurları içeren Cu nano telinin a) (100) düzlem kesitinden alınan boşluk, b) (110) düzlem kesitinden alınan arayer kusurlarının atomik görüntüleri.

Şekil 3’te farklı yüzdelerde boşluk ve arayer kusurları içeren Cu nano tel sistemlerine  $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  zorlanma oranında uygulanan tek eksenli germe deformasyonu esnasında elde edilen zor-zorlanma eğrileri verilmiştir. Her iki noktasal kusur içeren nano tel yapıları için zorlanma değerinin artırılmaya başlamasıyla zor değerinin hemen hemen lineer bir değişim sergilediği açık bir şekilde görülmektedir. Ayrıca bütün kusur yüzdeleri için bu değişimler neredeyse üst üste çakışık şekildedir. Doğrusal değişimin meydana geldiği bu bölge malzemenin elastik olarak şekil değiştirdiğini ifade etmektedir. Zor-zorlanma arasındaki ilişki incelenen malzemenin mekanik özellikleri hakkında bilgi vermektedir. Zor-zorlanma grafiğinde doğrusal olarak değişen bu bölgenin regresyon analizinden elastiklik modülü (Young modülü) belirlenmektedir. Düşük değerdeki elastiklik modülü malzemenin elastiklik özelliğinin arttığına bir göstergesidir. Şekil 3’de görüldüğü gibi hem boşluk hem de arayer kusurlarına sahip nano tellere uygulanan çekme deformasyonu işleminde, zorlanma değeri belirli bir değere ulaştığında zorda ani bir düşüş meydana gelmektedir. Ani düşüşün meydana geldiği bu nokta kalıcı şekil değişiminin oluşmaya başladığı akma zoru olarak ifade edilmektedir. Model sistem içerisinde dislokasyonların çekirdeklenmeye başlaması zor-zorlanma eğrisindeki bu ani azalmanın sebebi olarak bilinmektedir [42]. Akma noktasından sonra artan zorlanma değerlerinde zor-zorlanma eğrisinin her iki kusurlu yapı içeren nano tel sistemi içinde zig-zag şeklinde bir değişim sergilediği görülmektedir. Yapı içerisinde oluşan dislokasyonların büyümesi ve artan zorlanma ile yayılması bu değişimin sebebi olarak ifade edilebilir [43].



**Şekil 3.** Farklı yüzdelerde a) boşluk ve b) arayer kusuru içeren Cu nano telinin zor-zorlanma eğrileri.

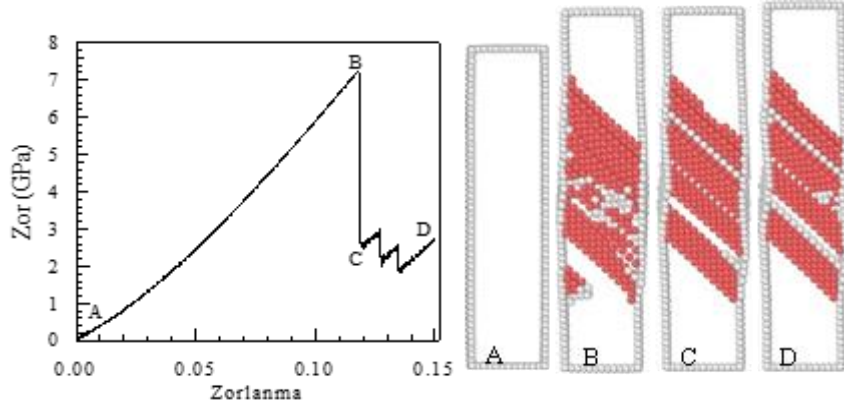
Model sistem için akma zoru ve Young modülü değerlerinin farklı yüzdelerdeki boşluk ve arayer kusurları ile değişimi Şekil 4’de verilmiştir. Hem akma zorunun hem de Young modülünün boşluk ve arayer kusur konsantrasyonundaki artış ile bir azalma sergilediği görülmektedir. Young modülü boşluk kusuru içeren nano teller için 64 GPa-51 GPa aralığında, arayer kusuru içeren nano tel yapıları için 64 GPa-58 GPa aralığındadır. Akma zorundaki azalma ise boşluk kusurlu nano teller için 7,2 GPa-3 GPa değerlerinde iken arayer kusurlu teller için ise 7,2 GPa-5 GPa aralığındadır. Bu azalmaların boşluk kusuru içeren nano tel yapılarda daha fazla olduğu belirlenmiştir. Boşluk kusurlarının nano telleri arayer kusurlarına göre daha fazla yumuşattığı söylenebilir. Zorlanma uygulandığında nano tel içerisinde oluşturulan nokta kusurları, kusurların yakınında uygulanan zoru azaltan atomik gevşeme için ortam sağladığı için Young modülünü azaltır [44]. Chang yaptığı çalışmada %3, %6, %9 ve %12 boşluk kusuruna sahip Cu nano tellerine uyguladığı çekme deformasyonu sonucu akma zorunun ve Young modülünün boşluk sayılarının artışıyla azaldığını tespit etmiştir [45]. Ayrıca Zr için yapılan bir çalışmada nokta kusur konsantrasyonundaki artışın çekme dayanımını azalttığı ifade edilmiştir [46]. Zhu ve ark. [47] boşluk yoğunluğunun artmasıyla elastiklik modülünün azaldığını belirlemişlerdir.



Şekil 4. Akma zoru ve Young modülü değerlerinin a) boşluk ve b) arayer kusur yoğunluğu ile değişimi.

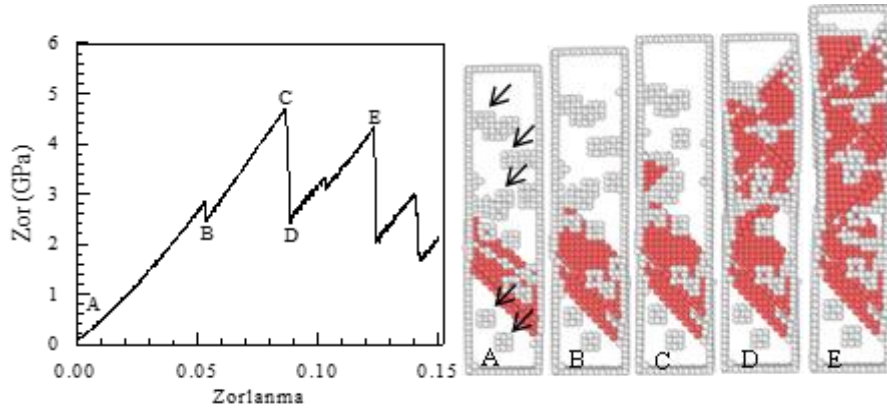
Noktasal kusurlar içeren model nano tel sistemlerine uygulanan tek eksenli gerilme deformasyonu esnasında mikro yapısal değişimleri belirlemek amacıyla OVITO programından [48] CNA analiz yöntemi kullanılarak zor-zorlanma eğrilerinin bazı noktaları için atomik konumlar incelenmiştir. Atomik görüntüler sadece başlangıç yapısında hiçbir kusur içermeyen, %1 boşluk ve %1 arayer noktasal kusur içeren nano teller için verilmiştir. Şekil 5’de kusur içermeyen model sisteme uygulanan çekme zorlanması sonucu elde edilen zor-zorlanma eğrisi ve farklı zorlanma değerlerine karşılık gelen atomik görüntüler verilmiştir. CNA analizinde bir atomun, çevresindeki en yakın komşu atomlarıyla olan geometrik yapısı analiz için ele alınır. Komşu atomlarla yapılan bağlar tarafından fcc, bcc, hcp gibi farklı kristal yapılar tespit edilir. Tanımlı yapıların haricindeki yapılar, bu analiz yönteminde “diğer” olarak adlandırılır. Her atom grubu farklı renklerle görselleştirilmiştir. Yeşil renk fcc, kırmızı, hcp ve mavi renk bcc birim hücreleri gösterirken, diğer olarak adlandırılan ve tanımlı birim hücre sınıfına girmeyen atomlar ise beyaz renk ile ifade edilmiştir [49, 50]. Deforme edilmemiş model nanotelin atomları fcc yapısına sahiptir ve yüzey atomları OVITO tarafından “diğer” olarak adlandırılan atomlar olarak kabul edilir. CNA analizinde  $\{111\}/\langle 112 \rangle$  kısmi kayması tarafından üretilen yığılma kusurlarını görselleştirmek için fcc atomları ve  $[100]$  doğrultusundaki yüzey atomları çıkartılmıştır. Şekil 5’te zorlanmanın uygulanmadığı A noktası için belirlenen atomik görüntüde model nano tel sisteminde herhangi bir yapısal kusur görülmektedir. Uygulanan germe zorlanması  $\epsilon=0,117$  olan B noktasına ulaşmış akma meydana gelene kadar nano tel elastik olarak deforme olmaktadır. B noktasına karşılık gelen zorlanma değerinde nano tel içerisinde %10,9 oranında hcp birim hücreli yığılma kusurlarının oluştuğu görülmektedir. Zor-zorlanma eğrisinde ani bir düşüş meydana gelip C noktasına ulaşıldığında yeni dislokasyonlar çekirdeklenerek yığılma kusurları %11,3 değerine gelmektedir. Literatürde Ni nano teli için yapılan bir çalışmada akmanın model sistemin serbest yüzey köşelerinden  $\{111\}$  düzleminde  $1/6\langle 112 \rangle$  Shockley kısmi dislokasyonunun çekirdeklenmesi sonucu meydana geldiği tespit edilmiştir [51]. Zorlama artırılıp  $\epsilon=0,127$  değerindeki D noktasına gelindiğinde yeni yığılma kusurları oluşmadan bu yığılma kusurlarının az da olsa gelişerek %11,9 oranına ulaştığı görülmektedir. Artan zorlanma yeni yığılma kusur bölgelerini ortaya çıkarmakta ve eğride bir sonraki düşüşü oluşturmaktadır [52]. Çekme deformasyonu sonucu elde edilen zor-zorlanma eğrisindeki testere dışı yapıları yığılma kusur bölgelerinin oluşumuna atfedilmiş ve bu durum Cu, Ag ve Ni elementleri için yapılan çalışmalarda gözlenmiştir [53, 54].





**Şekil 5.** Kusursuz Cu nano telinin zor-zorlanma eğrisi ve farklı zorlanma değerleri için nano telin (100) düzleminde elde edilen atomik görüntüler.

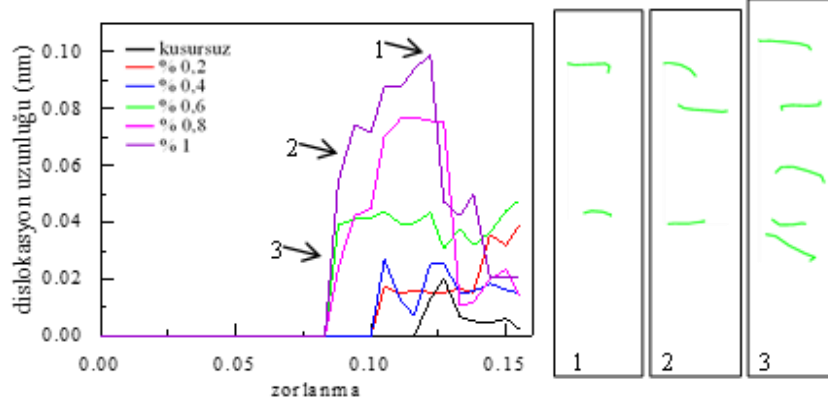
Şekil 6'da, %1 boşluk kusuru içeren Cu nano tel sisteminin zor-zorlanma eğrisi ve bu egride seçilen bazı noktalara karşılık gelen atom konumları görülmektedir. Ok işareti ile gösterilen bölgeler boşluk kusurlarına karşılık gelmektedir. A noktasına karşılık gelen ve rastgele oluşturulan boşluk kusurlu nano tel yapısına çekme deformasyonu uygulanmadan önce yapılan dengeleme işlemi sonucu yapı içerisinde %3,5 oranında hcp birim hücreli bir yığılım kusuru tabakası meydana geldiği görülmektedir. Bir boşluk oluştuğunda malzemenin termodinamik kararlılığını artırır. Örgüdeki atomlar boşluğun olduğu bölgede boşluğu bir şekilde telafi etmek için içe doğru itilirler [55].  $\epsilon=0,054$  e karşılık gelen zorlanma değerinde B noktası için verilen atomik görüntülerden hcp birim hücreli yığılım kusurlarının %4.1 değerine ulaştığı görülmektedir. Devam eden süreçte yeni yığılım kusurlarının çekirdeklendiği ve artan zorlanma değerleriyle birlikte bu kusurların yapı içerisinde bir uçtan diğer uca yayılarak plastik deformasyonun devam ettiği C, D ve E noktaları için sırasıyla %11,4, %12,8 ve %13,4 değerlerine ulaştığı atomik görüntülerden tespit edilmektedir.  $1/6\langle 112 \rangle$  Shockley kısmi dislokasyonlarının aktif hale gelmesi sonucu meydana gelen yığılım kusurları, hcp birim hücrelerden oluşan bu düzlemlerin oluşum sebebi olarak gösterilebilir [56, 57]. Artan zorlanmayla birlikte yeni Shockley kısmi dislokasyonları çekirdeklenecek ve yapı içerisine yayılarak yığılım kusurlarının artmasına yol açacaktır [58]. Brochard ve ark. [59] atomik boyutta iç kusur içeren fcc kristal yapıları nano teller üzerine yaptıkları çalışmalarda bu bölgelerin doğrudan dislokasyon çekirdeklenmesine yol açabileceğini göstermişlerdir.



**Şekil 6.** %1 boşluk kusuru içeren Cu nano telinin zor-zorlanma eğrisi ve farklı zorlanma değerleri için nano telin (100) düzleminde elde edilen atomik görüntüler.

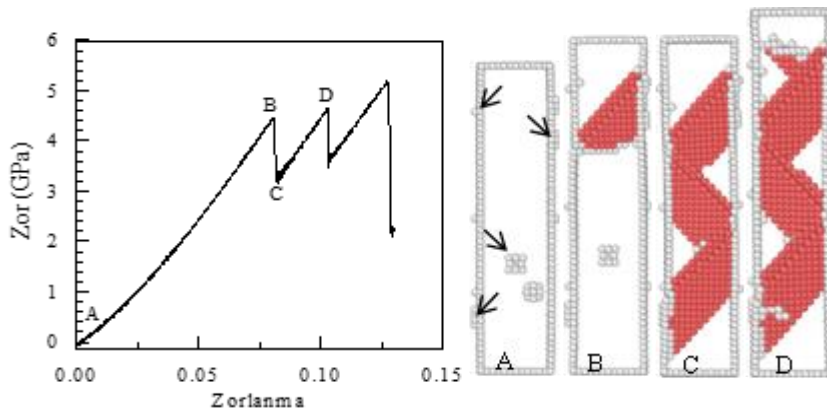
Şekil 7'de uygulanan germe zorlanması sonucu yapı içerisinde oluşan dislokasyonların uzunluğu, kusursuz ve farklı boşluk yüzdelere sahip nano tel yapıları için verilmiştir. Zorlanma değeri kusursuz nano tel için 0,0117, %0,2, %0,4 boşluk içeren nano teller için 0,1 ve %0,6, %0,8, %1 boşluk kusuru içeren yapılar için ise 0,083 değerine ulaşana kadar herhangi bir dislokasyon çekirdeklenmesi görülmemektedir. Şekil 7'deki %1 boşluk kusuru için belirlenen 1, 2 ve 3 numaralı noktalar Şekil 6'da zor-zorlanma eğrisindeki C, D ve E noktalarına karşılık

gelmektedir. Zorlanmanın artmaya devam etmesi ile birlikte özellikle akma noktası geçildikten sonra dislokasyonlar oluşmaya başlamakta, dislokasyon uzunluğu ve sayısında bir artış meydana gelmektedir. Akma zorlanmasından sonra yapı içerisinde kayma ve ikizlenme meydana gelmekte ve daha fazla dislokasyon ağı görülmektedir [46]. Bununla birlikte Şekil 7’de %1 boşluk kusuru için birkaç zorlanma değerinde DXA analizinden alınan nano tel yapı içerisindeki dislokasyonlar yeşil renkli çizgiler halinde görülmektedir. 1, 2 ve 3 noktalarında  $1/6\langle 112 \rangle$  Shockley kısmi dislokasyonların artan zorlanma ile birlikte yapı içerisinde yayıldığı tespit edilmiştir. Boşluklu nano tel yapısında gerilme zorlanması altında dislokasyon emisyonu vardır. Bu dislokasyon emisyonu ve çekirdeklenmesi zor değerini etkiler. Tüm süreçte zor daima boşluklar ve dislokasyon birikimi üzerine yoğunlaşır [60]. Kusursuz yapı ile karşılaştırıldığında boşluklar dislokasyon oluşumunu kolaylaştırır [46].



**Şekil 7.** Farklı yüzdelerde boşluk kusuru içeren Cu nano teline uygulanan zorlanmaya karşı dislokasyon uzunluklarının değişimi ve farklı noktalar için elde edilen Shockley kısmi dislokasyonlarının dağılımı.

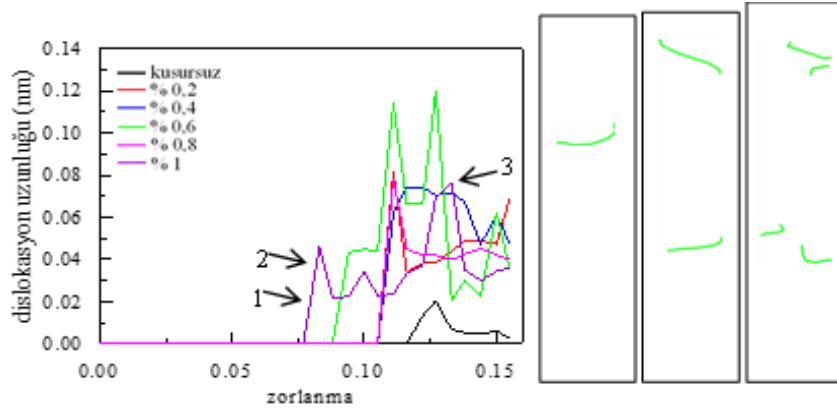
Şekil 8’de, %1 arayer kusuru içeren Cu nano tel sisteminin zor-zorlanma eğrisi ve bu egride seçilen bazı noktalara karşılık gelen atom konumları verilmiştir. Şekil üzerinde belirtilen oklar arayer atomlarının bulunduğu bölgeleri göstermektedir. Arayer atomları nano tel içerisinde kararlı değildirler ve nano tele germe deformasyonu uygulanmadan öndeki dengeleme sürecinde büyük çoğunluğu yüzeye göç eder [44].  $\epsilon=0$  a karşılık gelen A noktasında nano tel içerisinde herhangi bir yığılım kusurunun oluşumu görülmemektedir.  $\epsilon=0,08$ ’e karşılık gelen B noktasındaki akma gerilim değerinde matris içerisinde %1,7 oranında her birim hücrelerin bir araya gelmesinden oluşan bir yığılım tabakasının nano telin üst ucunda oluşmaya başladığı belirlenmiştir. Zor-zorlanma eğrisinde zor değerinin aniden düştüğü ve kalıcı şekil değişiminin başladığı C noktasında Shockley kısmi dislokasyonlarının aktif hale geçmesi sonucu yığılım kusurlarının zigzag şeklinde yapı içerisinde bir uçtan diğer uca yayılarak %13,3 değerine ulaştığı görülmektedir [1]. D noktasına karşılık gelen zorlanma değerinde yeni yığılım kusur düzlemleri %16,9 oranına ulaşmıştır.



**Şekil 8.** %1 arayer kusuru içeren Cu nano telinin zor-zorlanma eğrisi ve farklı zorlanma değerleri için nano telin (100) düzleminde elde edilen atomik görüntüler.

Nokta kusurları, Young modülünü ve akma zorlanmasını azaltarak Cu nano tellerini yumuşatır. Bununla birlikte yığılma kusurları Cu nano tellerini güçlendirir. Bu nedenle, hem yığılma kusurları hem de nokta kusurları içeren nano teller için, yumuşama (nokta kusurlarının neden olduğu) ve güçlendirme (yığılma kusurlarının neden olduğu) arasında bir çekişme olduğu söylenebilir [44].

Şekil 9'da uygulanan çekme zorlanması sonucu yapı içerisinde oluşan  $1/6\langle 112 \rangle$  Shockley kısmi dislokasyonların uzunluğu, kusursuz ve farklı arayer kusur yüzdelere sahip nano tel yapıları için verilmiştir. Zorlanma değeri kusursuz nano tel için 0,0117, %0,2, %0,4, %0,6 arayer kusuru içeren nano teller için 0,105, %0,8 için 0,088 ve %1 arayer kusuru içeren yapılar için ise 0,077 değerine ulaşana kadar herhangi bir dislokasyon çekirdeklenmesi görülmektedir. Bu zorlanma değerlerinden sonra dislokasyonlar yapı içerisinde giderek artmaktadır. Bununla birlikte Şekil 9'da %1 arayer kusuru için birkaç zorlanma değeri için DXA analizinden belirlenen  $1/6\langle 112 \rangle$  Shockley kısmi dislokasyonları görülmektedir. 1, 2 ve 3 noktalarında Shockley kısmi dislokasyonların artan zorlanma ile birlikte yapı içerisinde yayıldığı tespit edilmiştir.



Şekil 9. Farklı yüzdelerde arayer kusuru içeren Cu nano teline uygulanan zorlanmaya karşı dislokasyon uzunluklarının değişimi ve farklı noktalar için elde edilen Shockley kısmi dislokasyonlarının dağılımı.

#### 4. Sonuçlar

Bu çalışmada farklı yüzdelerde boşluk ve arayer kusuru içeren Cu nano teline uygulanan tek eksenli çekme zorlanması sonucu model nano telin mekanik özelliklerinde ve yapısal gelişiminde meydana gelen değişimler incelendi. Boşluk ve arayer noktasal kusurları nano telin mekanik özellikleri üzerinde etkili olduğu belirlendi. Kusur yoğunluklarının artmasıyla Young modülü ve akma zorlanması değerlerinde azalmanın meydana geldiği, bu azalmanın boşluk kusuru içeren nano tellerde daha fazla olduğu görüldü. Noktasal kusurların, zorlanmasının uygulanmasıyla kusurların çevresinde uygulanan zoru azaltan bir gevşeme ortamı oluşturarak Young modülünü azalttığı söylenebilir. Artan zorlanmayla birlikte özellikle akma noktası geçildikten sonra dislokasyonların oluşmaya başlamasıyla birlikte dislokasyon uzunluğu ve sayısının da arttığı belirlendi. Ayrıca Shockley kısmi dislokasyonlarının çekirdeklenmesi ve yapı içerisine yayılması model sistemde yığılma kusurlarının artmasına yol açmaktadır.

#### Kaynaklar

- [1] Sainath G, Choudhary B. Molecular dynamics simulation of twin boundary effect on deformation of Cu nanopillars. Phys Lett A 2015; 379(34): pp.1902–1905.
- [2] Zhan H, Gu Y, Yan C, Yarlagadda PK. Bending properties of Ag nanowires with pre-existing surface defects. Comput Mater Sci 2014; 81: pp.45–51.
- [3] Park HS, Cai W, Espinosa HD, Huang H. Mechanics of crystalline nanowires. MRS Bull 2009; 34(3): pp.178-183.
- [4] Wu H, Kong D, Ruan Z, Hsu PC, Wang S, Yu Z, Carney TJ, Hu L, Fan S, Cui Y. A transparent electrode based on a metal nanotrough network. Nat Nanotechnol 2009; 8(6): pp.421-425.
- [5] Diao J, Gall K, Dunn ML. Yield strength asymmetry in metal nanowires, Nano Lett 2004; 4: pp.1863-1867.
- [6] Tosatti E, Prestipino S, Kostlmeier S, Dal Corso A, Di Tolla FD. String tension and stability of magic tip-suspended nanowires. Science 2001; 291: pp.288-290.



- [7] Park HS, Gall K, Zimmerman JA. Shape memory and pseudoelasticity in metal nanowires. *Phys Rev Lett* 2005; 95(25): pp.255504.
- [8] Diao J, Gall K, Dunn M. Surface-stress-induced phase transformation in metal nanowires. *Nat Mater* 2003; 2: pp.656–660.
- [9] Diao J, Gall K, Dunn ML. Yield strength asymmetry in metal nanowires. *Nano Lett* 2004; 4(10): pp.1863-1867.
- [10] Jing GY, Duan HL, Sun XM, Zhang ZS, Xu J, Li YD, Wang JX, Yu DP. Surface effects on elastic properties of silver nanowires: contact atomic-force microscopy. *Phys Rev B* 2006; 73(23): pp.235409.
- [11] Yvonnet J, Mitrushchenkov A, Chambaud G, He QC. Finite element model of ionic nanowires with size-dependent mechanical properties determined by ab initio calculations. *Comput Meth Appl Mech Eng* 2011; 200(5-8): pp. 614-625.
- [12] Cao G, Wang Y. *Nanostructures and Nanomaterials: Synthesis, Properties, and Applications*. 2nd ed. World Scientific Series in Nanoscience and Nanotechnology, 2011.
- [13] Kazanc S, Aksu C.C. The Effect of Uniaxial Tensile Strain on the Mechanical Properties of Cu Element: Molecular Dynamics Method. *Firat University Journal of Engineering Science* 2021; 33(2): pp. 481-490.
- [14] Liu HJ, Owen JHG, Miki K. Degenerate electronic structure of reconstructed MnSi<sub>1.7</sub> nanowires on Si(001). *J. Phys Condens Matter* 2012; 24(9): pp.095005.
- [15] Wilson NS, Kraemer S, Pennachio DJ, Callahan P, Pendharkar M, Palmstrom CJ. Mechanism for embedded in-plane self-assembled nanowire formation. *Phys Rev Mater* 2020; 4 (6): pp. 066003.
- [16] Kim J. Nanoscale amorphization of GeTe nanowire with conductive atomic force microscope. *J Nanosci Nanotechnol* 2014; 14(10): pp.7688-7692.
- [17] Alducin D, Borja R, Ortega E, Velazquez-Salazar JJ, Covarrubias M, Santoyo FM, Bazan-Diaz L, Sanchez JE, Torres N, Ponce A, Jose-Yacamán M. In situ transmission electron microscopy mechanical deformation and fracture of a silver nanowire. *Scr Mater* 2016; 113: pp.63–67.
- [18] Wang L, Xu Z, Yang S, Tian X, Wei J, Wang W, Bai X. Real-time in situ TEM studying the fading mechanism of tin dioxide nanowire electrodes in lithium ion batteries. *Sci China Technol Sci* 2013; 56: pp.2630-2635.
- [19] Meng Y, Wang LH, Zhang Z, Han XD. In situ TEM studies of the large plastic deformation of nanocrystalline gold nanowire. *J Chinese Electron Microscopy Soc* 2014; 4: pp.295–299.
- [20] Chen Y, An X, Liao X. Mechanical behaviors of nanowires. *Appl Phys Rev* 2017; 4(3): pp. 031104.
- [21] Wu B, Heidelberg A, Boland JJ, Sader JE, Sun X, Li Y. Microstructure-hardened silver nanowires. *Nano Lett* 2006; 6(3): pp.468-472.
- [22] Cao AJ, Wei YG, Mao SX. Deformation mechanisms of face-centered-cubic metal nanowires with twin boundaries. *Appl Phys Lett* 2007; 90(15): pp.151909.
- [23] Zhang Y, Huang H. Do twin boundaries always strengthen metal nanowires?. *Nanoscale Res Lett* 2009; 4(1): pp.34-38.
- [24] Zhan HF, Gu YT, Yarlagadda PKDV. Advanced Numerical Characterization of Mono-Crystalline Copper with Defects. *Adv Sci Lett* 2011; 4: pp.1293-1301.
- [25] Kelly A, Knowles KM. *Crystallography and Crystal Defects*. 2nd ed. West Sussex, UK: John Wiley and Sons Ltd, 2012.
- [26] Yu Y, Cui J. Elastic-plastic deformation decomposition algorithm for metal clusters at the atomic scale. *Comput Mech* 2021; 67(2): pp.567–581.
- [27] Samiri A, Khmich A, Haouas H, Hassani A, Hasnaoui A. Structural and mechanical behaviors of Mg-Al metallic glasses investigated by molecular dynamics simulations. *Comput Mater Sci* 2020; 184: pp.109895.
- [28] Hu CK, Luther B, Kaufman FB, Hummel J, Uzo C, Pearson DJ. Copper interconnection integration and reliability. *Thin Solid Films* 1995; 262(1-2): pp. 84-92.
- [29] Nath SKD. Elastic, elastic-plastic properties of Ag, Cu and Ni nanowires by the bending test using molecular dynamics simulations. *Comput Mater Sci* 2014; 87: pp.138-144.
- [30] Sun J, Fang L, Ma A, Jiang J, Han Y, Chen H, Han J. The fracture behavior of twinned Cu nanowires: A molecular dynamics simulation. *Mater Sci Eng A* 2015; 634: pp.86-90.
- [31] Cao H, Rui Z, Yang F. Mechanical properties of Cu nanowires: Effects of cross-sectional area and temperature. *Mater Sci Eng A* 2020; 791: pp.139644.
- [32] Marque's LA, Pelaz L, Aboy M, Lopez P, Barbolla J. Atomistic modelling of dopant implantation and annealing in Si: damage evolution, dopant diffusion and activation. *Comput Mater Sci* 2005; 33: pp.92-105.
- [33] Daw MS, Hatcher RD. Application of the embedded atom method to phonons in transition metals. *Solid State Commun* 1985; 56(8): pp.697-699.
- [34] <http://lammps.sandia.gov/LAMMPS> Molecular Dynamics Simulator (online date:02.04.2021).
- [35] Parrinello M, Rahman A. Crystal Structure and Pair Potentials: A Molecular-Dynamics Study. *Phys Rev Lett* 1980; 45(14): pp.1196-1201.
- [36] Guellil AM, Adams JB. The application of the analytic embedded atom method to bcc metals and alloys. *J Mater Res* 1992; 7: pp.639–652.
- [37] Foiles SM, Baskes MI, Daw MS. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Phys Rev B* 1986; 33: pp.7983.
- [38] Malins A, Williams SR, Eggers J, Royall CP. Identification of structure in condensed matter with the topological cluster classification. *J Chem Phys* 2013; 139: pp.234506.
- [39] Stukowski A. Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials. *Modell Simul Mater Sci Eng* 2012; 20: pp.045021.

- [40] Bonny G, Castin N, Terentyev D. Interatomic potential for studying ageing under irradiation in stainless steels: the FeNiCr model alloy. *Model Simul Mater Sci Eng* 2013; 21: pp.085004.
- [41] Stukowski A. Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials. *Model Simul Mater Sci Eng* 2012; 20: pp.045021.
- [42] Setoodeh AR, Attariani H, Khosrownejad M. Nickel nanowires under uniaxial loads: A molecular dynamics simulation study. *Comput Mater Sci* 2008; 44: pp.378-384.
- [43] Wu HA. Molecular dynamics study of the mechanism of metal nanowires at finite temperature. *Eur J Mech A Solids* 2006; 25: pp.370-377.
- [44] Li W, Sun L, Xue J, Wang J, Duan H. Influence of ion irradiation induced defects on mechanical properties of copper nanowires. *Nucl Instrum Methods Phys Res, Sect B* 2013; 307: pp.158-164.
- [45] Chang WJ. Molecular-dynamics study of mechanical properties of nanoscale copper with vacancies under static and cyclic loading. *Microelectron Eng* 2003; 65: pp.239-246.
- [46] Li Y, Chen H, Chen Y, Wang Y, Shao L, Xiao W. Point defect effects on tensile strength of zirconium studied by molecular dynamics simulations. *Nucl Mater Energy* 2019; 20: pp.100683.
- [47] Zhu X, Gao X, Song H, Han G, Lin DY. Effects of vacancies on the mechanical properties of zirconium: an ab initio investigation. *Mater Des* 2017; 119: pp.30-37.
- [48] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool. *Modell Simul Mater Sci Eng* 2010; 18(1): pp.015012.
- [49] Bañuelos EU, Aburto CC, Arce AM. A common neighbor analysis of crystallization kinetics and excess entropy of charged spherical colloids. *J Chem Phys* 2016; 144: pp.094504.
- [50] Fanga R, Wanga W, Guoa L, Zhanga K, Zhanga X, Lib H. Atomic insight into the solidification of Cu melt confined in graphene Nanoslits. *J Cryst Growth* 2020; 532: pp.125382.
- [51] Paul SK. Effect of twist boundary angle on deformation behavior of (100) FCC copper nanowires. *Comput Mater Sci* 2018; 150: pp.24-32.
- [52] Kardani A, Montazeri A. Metal-matrix nanocomposites under compressive loading: Towards an understanding of how twinning formation can enhance their plastic deformation. *Sci Rep* 2020; 10(1): pp.9745.
- [53] Bejaud R, Durinck J, Brochard S. Twin-interface interactions in nanostructured Cu/Ag: Molecular dynamics study. *Acta Mater* 2018; 144: pp.314-324.
- [54] Pukšic N, Jenko M, Godec M, McGuinness PJ. A comparison of the uniaxial deformation of copper and nickel (111) surfaces: a molecular dynamics study. *Sci Rep* 2017; 7: pp.42234.
- [55] Carey B. Simulation and Analysis of Vacancies in Carbon Nanostructures. BinfTech, Metropolia University of Applied Sciences, Helsinki, Finland, 2018.
- [56] Wu HA. Molecular dynamics study of the mechanism of metal nanowires at finite temperature. *Eur J Mech A Solids* 2006; 25: pp.370-377.
- [57] Wen YH, Zhang Y, Wang Q, Zheng JC, Zhu ZZ. Orientation-dependent mechanical properties of Au nanowires. *Comput Mater Sci* 2010; 48: pp.513-519.
- [58] Sainath G, Choudhary BK. Orientation dependent deformation behaviour of bcc iron nanowires. *Comput Mater Sci* 2016; 111: pp.406-415.
- [59] Brochard S, Beauchamp P, Grilhé J. Combination of Continuum and Atomistic Approaches for the Study of Dislocation Nucleation from Atomic Size Surface Defects. *MRS Online Proc Lib* 2001; 677: pp.55.
- [60] Feng R, Cao H, Li H, Rui Z, Yan C. Effects of Vacancy Concentration and Temperature on Mechanical Properties of Single-Crystal  $\gamma$ -TiAl Based on Molecular Dynamics Simulation. *High Temp Mater Proc* 2018; 37(2): pp.113-120.