论文

单晶铜纳米线弯曲、扭转的变形机制的分子动力学研究

田霞^{①*}, 崔俊芝^②, 关晓飞^③

① 河海大学力学与材料学院, 南京 210098;

② 中国科学院数学与系统科学研究院, 北京 100190;

③ 同济大学数学系, 上海 200092

*联系人, E-mail: tianxia@lsec.cc.ac.cn

收稿日期: 2011-11-10; 接受日期: 2012-01-18; 网络出版日期: 2012-08-23

国家重点基础研究计划(编号: 2010CB832702)和国家自然科学基金(批准号: 90916027)资助项目

摘要 本文利用分子动力学方法研究了 $\langle 001 \rangle / \{100\}$ 和 $\langle 110 \rangle / \{111\}$ 两种单晶铜纳米线在弯曲、扭转载荷作用下的变形机制和力学行为. 在 $\langle 001 \rangle / \{100\}$ 铜纳米线的弯曲过程中, 当弯曲角度很大时, 我们观察到了一些五重变形孪晶. 分析表明, 配位数为 12 的其它原子类型与 hcp 原子类型间的相互转化是导致出现这种五重变形孪晶的重要因素. 这个结果与文献(Appl Phys Lett, 2006, 89: 041919) 所报道的纳米晶铜在拉伸状态下所观察到的五重变形孪晶的形成过程截然不同; 然而该孪生变形机制并未在相应的 $\langle 110 \rangle / \{111\}$ 单晶铜纳米线的弯曲加载过程中被发现. 此外, 通过对 $\langle 001 \rangle / \{100\}$ 和 $\langle 110 \rangle / \{111\}$ 单晶铜纳米线进行扭转模拟, 我们发现, 这两种纳米线的扭转塑性变形分别是以从表面边角和侧表面发射全位错为主的变形机制.

关键词 单晶铜纳米线, 弯曲, 扭转, 塑性变形机制, 孪晶, 位错

PACS: 21.10.Jx, 46.90.+s, 46.15.-x

doi: 10.1360/132011-1126

一维纳米线作为未来纳米科技重要的结构元素, 引起人们广泛的兴趣. 由于具有较大的表面体积比, 纳米线表现出和块体材料不同的热学、力学、光学和电学性质^[1,2]. 因此, 表征这些微结构材料的行为尤其是物理、力学行为, 对于纳米科技中结构材料的应用起着至关重要的作用. 采用传统的力学实验来刻画它们的力学特征有很大的难度, 而分子动力学为

研究纳米结构材料的变形行为和获得力学性能参数提供了理想工具.

随着计算机硬件的不断发展, 分子动力学方法逐渐成为研究纳米材料力学行为和变形机制的理想工具. 许多学者利用直接的原子方法研究了金属纳米线在拉、压载荷作用下的力学响应. 例如, Wu^[3,4] 讨论了表面效应、尺度效应以及温度效应对铜纳米线

引用格式: 田霞, 崔俊芝, 关晓飞. 单晶铜纳米线弯曲、扭转的变形机制的分子动力学研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2012, 42: 965–972

Tian X, Cui J Z, Guan X F. Atomistic simulations on the mechanical behavior of single-crystalline Cu nanowires under bending and torsion loads (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2012, 42: 965–972, doi: 10.1360/132011-1126

拉伸力学性质的影响; Park^[5-7]揭示了多种不同晶体取向的 fcc 金属纳米线在拉、压载荷作用下的变形机制; Yang^[8]通过对铜、金等纳米线进行模拟, 得到了屈服强度与材料尺寸的关系, 该结果与理论预测完全一致.

但到目前为止, 关于金属纳米线在弯曲、扭转(尤其是弯曲)载荷作用下的报道还比较匮乏, 只有少数学者对此进行了研究. 例如, Weinberger^[9]通过对柱状金纳米线进行扭转模拟, 指出纳米线中可能发生均匀或非均匀塑性变形, 具体取决于晶体的取向, 而与材料尺寸无关; Jiang^[10]研究了 $\langle 001 \rangle / \{100\}$ 中空铜纳米线在不同的轴向长度、加载速率以及温度作用下的扭转响应; McDowell^[11]结合分子静力学方法与连续介质力学方法, 得到了纳米线在拉伸以及弯曲荷载作用下的弹性模量计算表达式.

与前人工作的侧重点不同, 本文以单晶铜纳米线为例, 重点研究金属纳米线在弯曲、扭转荷载作用下的塑性变形机制. 这部分工作在之前的文献中几乎未见报道.

1 模型与方法

为了研究不同取向的单晶铜纳米线在弯曲、扭转作用下的力学行为和变形机制, 我们构造了两根单晶铜纳米线, 即图 1 所示的 $\langle 001 \rangle / \{100\}$ 单晶铜纳米线(轴向为 $\langle 001 \rangle$, 四个侧表面为 $\{100\}$ 面)和 $\langle 110 \rangle / \{111\}$ 单晶铜纳米线(轴向为 $\langle 110 \rangle$, 四个侧表面为 $\{111\}$ 面), 其轴向长度、截面边长均分别为 14.46 nm 和 3.615 nm. 构造完初始纳米线后, 让其在 300 K 温度下弛豫 30 ps 以得到初始的平衡构型. 模拟过程中所采用的势为 Foiles, Baskes 和 Daw^[12]发展的 EAM 势且纳米线在三个方向上均采用自由边界条件.

为了分辨出材料中的缺陷, 本文采用局部晶序法^[13]来区分 fcc 与 hcp 结构并用不同的颜色进行标记. 例如, 用浅蓝色表示 fcc 原子, 黄色表示 hcp 原子, 红褐色表示配位数为 12 的其它原子, 深蓝色表示配位数非 12 的原子. 单个 hcp 原子面表示孪晶面, 两个相邻的 hcp 原子面代表内禀堆垛层错, 两个 hcp 原子面中间夹着一层 fcc 原子面代表外禀层错. 配位数为 12 的其它原子出现在晶界或自由表面处, 配位数非 12 的原子属于位错核. 为了看清晶体的内部结构, 多数情况下, 我们未显示完好的 fcc 原子.

图 1 (a) 3.615 nm×14.46 nm×3.615 nm $\langle 001 \rangle / \{100\}$ 铜纳米线初始构型; (b) 晶格取向为 $\langle 001 \rangle$ 的方形横截面; (c) 3.615 nm×14.46 nm×3.615 nm $\langle 110 \rangle / \{111\}$ 铜纳米线初始构型; (d) 晶格取向为 $\langle 110 \rangle$ 的菱形横截面

Figure 1 (a) The structure of a 3.615 nm×14.46 nm×3.615 nm $\langle 001 \rangle / \{100\}$ Cu NW before relaxation; (b) its square cross section with $\langle 001 \rangle$ lattice configuration; (c) the structure of a 3.615 nm×14.46 nm×3.615 nm $\langle 110 \rangle / \{111\}$ Cu NW before relaxation; (d) its square cross section with $\langle 110 \rangle$ lattice configuration.

2 结果与讨论

2.1 $\langle 001 \rangle / \{100\}$ 铜纳米线弯曲的变形机制研究

弯曲加载的步骤如下: 首先从纳米线的初始平衡构型出发, 然后将系统内的所有原子按照给定的弯曲曲率半径移动到相应位置, 弯曲曲率半径由弯曲角度 θ 决定(图 2). 在弯曲加载过程中, 始终让纳米线的质心固定且中性层长度保持不变. 在每一步加载完成后, 固定纳米线两端部并将整个系统在 300 K 温度下弛豫 30 ps. 具体地, 我们在每个弯曲步中给纳米线的两端施加 1.8° 的弯曲角增量(即若当前为第 n 个加载步, 则弯曲角度 $\theta = 1.8^\circ \times n$), 并将弛豫阶段最后 5 ps 内, 除两端部原子外, 其余原子的平均每个原子的应变能作为整个系统的平均应变能. 图 3 给出了弯曲过程中平均每个原子的应变能与弯曲角度的

图 2 弯曲力矩作用下的弯曲变形示意图

Figure 2 Schematic diagram of a nanowire subjected to bending.

图 3 $\langle 001 \rangle / [100]$ 单晶铜纳米线弯曲加载过程中平均每个原子的应变能与弯曲角度关系Figure 3 The variation of the strain energy per atom with the bending angle of $\langle 001 \rangle / [100]$ Cu NW.

关系.

由图3可以看出, OA段, 平均每个原子的应变能与弯曲角度关系近似为线性, 此时, 纳米线中无任何缺陷. 当弯曲角度增大至 14.4° 时(对应图3中B点), 第一根引导不全位错夹带着层错从纳米线下表面中部发出(图4). 随着变形的增加, 不断地有不全位错从纳米线的上、下表面处发出. 通过监控整个变形过程, 当弯曲角度很大时, 我们在纳米线中发现了一些五重变形孪晶, 如图5所示.

我们以图5(a)中的五重变形孪晶为例, 阐述其形成过程, 详细的形成过程快照如图6所示.

首先, 一道 Shockley 不全位错 b_1 夹带着层错从纳米线的上表面形核(图6(a)). 紧接着, 通过在相邻的滑移面上连续发射两个 Shockley 不全位错 b_2 和 b_3 形成图6(b)所示的结构. 继续加载, 大量的不全位错在相邻的滑移面上形核. 图6(c)是弯曲角度为 45° 时的构型, 对应应变能曲线图3中的C点.

随着弯曲角度的增大, 外力所做的功增多, 使得

图 4 第一根引导不全位错从纳米线下表面处形核. 为了看清内部缺陷, 图中未显示完好的 fcc 原子以及前表面

Figure 4 The first leading partial dislocation nucleating from the lower surface. To view the inner defects clearly, perfect fcc atoms and the front surface are not shown.

图 5 弯曲角度很大时纳米线中出现的五重变形孪晶

Figure 5 Fivefold DTs appearing in the wire at some large bending angles.

可以为位错滑移、湮灭提供足够的能量. 图6(c)中位于层错上边缘的位错(绿框所示处)通过不断地滑移形成图6(d)中的由配位数为12的其他原子构成的原子面P1. 同样地, 位于层错下边缘的位错(白框所示处)通过滑移形成图6(e)中的原子面P2和P3. 与此同时, 组成这些层错的 hcp 原子转变成了配位数为12的其他原子, 如图6(d)和(e)中蓝色箭头所示. 这个转变是由于在弯曲载荷作用下, 纳米线中局部原子运动受限造成. 另一方面, 由于配位数为12的其他原子与它周围原子的不断运动, 使得这种配位数为12的其他原子类型亦可以向完好的 hcp 或 fcc 类型转变. 如图6(d)和(e)所示, 由配位数为12的其他原子构成的原子面P1转变成了孪晶界T6 (构成孪晶面的原子为 hcp 晶格类型). 同样地, 原子面P2和P3转变成了两个相邻的 hcp 原子面H1和H2(图6(e)和(g))且图6(e)中蓝色箭头所示处的配位数为12的其他原子转变成

图 6 五重变形孪晶的形成过程
Figure 6 The formation of the fivefold DT.

了图 6(h)中完好的 fcc 原子(注:图 6 中所有快照均未显示 fcc 原子).值得注意的是,他们间的这种相互转化只在外界不断为系统提供能量的情况下才能实现.按照同样方式(即先滑移,再从配位数为 12 的其它原子类型转化成 hcp 原子类型),图 6(d)中红框所示处的不全位错通过经历图 6(d)–(h)的过渡阶段形成图 6(h)中的孪晶界 T2.随着弯曲角度的不断增大,系统有足够的能量可用于消亡相邻滑移面上的不全位错而形成孪晶界,基于这种变形机制产生了孪晶界 T7(图 6(g)–(h))和 T3(图 6(g)–(i)).接着,通过从孪晶界 T7 上发射出不全位错 b4 并经历滑移、湮灭而形成孪晶界 T4(图 6(h)和(i)),从 T4 上发出位错 b5 而产生孪晶界 T5(图 6(i)和(j)).最后,通过从孪晶界 T2 上发出位错 b6 而形成最终的五重变形孪晶(图 6(k)和(l)).

由上述分析可知, $\langle 001 \rangle / \{100\}$ 铜纳米线弯曲塑性变形是以孪生为主的变形机制.然而,这种五重变形孪晶只可能在弯曲加载过程中出现,单纯的拉、压加载下是不可能出现的.具体可以参看 Park^[7]或曹阿静^[14]等人的工作.他们指出, $\langle 001 \rangle / \{100\}$ 铜纳米线拉伸、压缩的塑性变形是以在纳米线中分别形成全位错和孪晶(而非多重孪晶)为主的变形机制.

2.2 $\langle 110 \rangle / \{111\}$ Cu 纳米线弯曲的变形机制研究

从纳米线的平衡构型出发,每个加载步给纳米线的两端施加 1.8° 的弯曲角增量.在每次加载后,固定纳米线两端部,让其余所有原子在 300 K 温度下弛豫 30 ps 以达到宏观平衡构型.我们将弛豫阶段最后 5 ps 内,除两端部原子外,其余原子的平均每个原子的应变能作为整个系统的平均应变能.弯曲过程中平均每个原子的应变能与弯曲角度关系如图 7 所示.

在前八个加载步(对应图 7 中 OA 段),纳米线中未出现任何缺陷.当弯曲角度增大至 16.2° 时(对应图 7 中 B 点),第一根引导不全位错从纳米线的上表面发出(图 8(a)),这意味着纳米线开始进入塑性变形阶段.纵观整个变形过程,在纳米线中未发现全位错或变形孪晶的形成.图 8(b)和(c)分别显示的是弯曲角度为 30.4° (对应于图 7 中 C 点)和 41.4° (对应于图 7 中 D 点)时的原子构型图.由此可以看出,对 $\langle 110 \rangle / \{111\}$ 单晶铜纳米线的弯曲来说,相应的塑性变形主要是通过不全位错在不同滑移面上的形核来实现,这一点与 $\langle 001 \rangle / \{100\}$ 铜纳米线的弯曲变形是以孪生方式

图 7 $\langle 110 \rangle / \langle 111 \rangle$ 单晶铜纳米线弯曲加载过程中平均每个原子的应变能与弯曲角度关系

Figure 7 The variation of the strain energy per atom with the bending angle of $\langle 110 \rangle / \langle 111 \rangle$ Cu NW.

图 8 (a) 弯曲角度为 16.2° 时, 第一根引导不全位错从纳米线的上表面发出; (b) 弯曲角度为 30.4° 时的原子构型图; (c) 弯曲角度为 41.4° 时的原子构型图

Figure 8 (a) The first leading partial dislocation appearing in the wire at a bending angle of 16.2° ; (b) configurations corresponding to a bending angle of 30.4° ; (c) configurations corresponding to a bending angle of 41.4° .

为主不同. 事实上, 观察图 7 可以发现, 系统中存储的应变能基本上是随着弯曲角度的增大而增加的, 几乎没有出现能量下降点, 而孪生需要消耗体系的能量^[15], 因此孪生机制在 $\langle 110 \rangle / \langle 111 \rangle$ 单晶铜纳米线

的弯曲变形中不存在.

2.3 $\langle 001 \rangle / \langle 100 \rangle$ Cu 纳米线扭转的变形机制研究

从纳米线的平衡构型出发, 每个加载步给纳米线的两端分别施加 -1° 和 1° 的扭转角增量. 具体可利用 Euler 旋转定理来产生扭矩.

在每次加载后, 固定纳米线两端部, 让其余所有原子在 300 K 温度下弛豫 30 ps 以达到平衡. 我们将弛豫阶段最后 5 ps 内, 除两端部原子外, 其余原子的平均每个原子的应变能作为整个系统的平均应变能. 扭转过程中平均每个原子的应变能与相对扭角关系如图 9 所示.

在相对扭角达到 12° 前(对应图 9 中 OA 段), 纳米线中未出现任何缺陷, 之后纳米线进入塑性变形阶段. 当相对扭角增大至 12° 时(对应图 9 中 B 点), 引导不全位错 LPD1 夹带着层错从纳米线的右表面边角发出, 如图 10(a) 中绿色箭头所指处. 这是由于发生扭转变形时, 塑性应变主要集中在纳米线两端部, 因此有利于位错的形核. 该结果与 Jiang 等人^[10] 的模拟发现完全吻合(他们在对 $\langle 001 \rangle / \langle 100 \rangle$ 中空铜纳米线进行扭转模拟时, 也发现当有不全位错从纳米线的表面边角发出时, 纳米线开始发生塑性变形). 紧接着, 数皮秒后, 跟随不全位错 TPD1 从相同位置处发出并与 LPD1 合并形成全位错(10(b)). 图 10(c) 显示的是在纳米线左端部附近出现的另一个全位错. 由此说明 $\langle 001 \rangle / \langle 100 \rangle$ 单晶铜纳米线扭转塑性变形是以在纳米线两端部附近形成全位错为主导的变形机制. 我们的结论与 Jiang 等人^[10] 的完全一致, 他们在 $\langle 001 \rangle /$

图 9 $\langle 001 \rangle / \langle 100 \rangle$ 单晶铜纳米线扭转加载过程中平均每个原子的应变能与相对扭角的关系

Figure 9 The variation of the strain energy per atom with the relative torsion angle of $\langle 001 \rangle / \langle 100 \rangle$ Cu NW.

图 10 (a), (b) 跟随不全位错 TPD1 从相同位置处发出并与 LPD1 合并形成全位错; (c) 在纳米线左端部附近出现的另一个全位错. 此时, 红框所示处出现了大量的位错, 且具有不同的滑移面

Figure 10 (a)–(b) TPD1 nucleating on the same glide plane and combining with the anterior LPD1 to form a full dislocation; (c) another full dislocations appearing near the left end of the wire. Large dislocations with different glide planes can be found in the NW, as indicated by the red frame.

{100} 中空铜纳米线扭转过程中也发现了多个全位错.

随着变形的加剧, 纳米线中出现越来越多的位错, 导致位错间平均距离减小, 位错运动受阻(参看 10(c) 红框所示处的位错), 因此需要施加更大的力以维持接下来的变形, 这也是低温蠕变^[16–18]通常会出应变硬化现象的主要原因. 最终, 当所施加的力超过晶体的理想强度时, 晶体就会发生破坏. 如图 11 红框所示处, 当相对扭角达到 14° 时(对应于图 9 中 C 点), 材料遭遇破坏.

2.4 $\langle 110 \rangle / \{111\}$ 铜纳米线扭转的变形机制研究

从纳米线的平衡构型出发, 每个加载步给纳米线的两端分别施加 -1° 和 1° 的扭转角增量. 在每

图 11 相对扭角为 14° 时, 材料遭遇破坏(见红框所示处)
Figure 11 A damage occurring in the region encircled by the red frame.

次加载后, 固定纳米线两端部, 并将整个系统在 300 K 温度下弛豫 30 ps. 我们将弛豫阶段最后 5 ps 内, 除两端部原子外, 其余原子的平均每个原子的应变能作为整个系统的平均应变能. 图 12 给出了扭转过程中平均每个原子的应变能与相对扭角的关系.

在前六个加载步中(对应图 12 中 OA 段), 纳米线处于弹性变形阶段. 当相对扭角增大至 14° 时(对应图 12 中 B 点), 开始有跟随位错从纳米线侧表面发出并与先前的引导位错合并形成全位错, 如图 13(a) 和 (b) 所示. 继续加载, 则通过从侧表面及相同滑移面上连续发射 Shockley 不全位错而产生了大量的全位错. 图 13(c) 显示的是相对扭角为 20° 时(对应图 12 中 C 点)的构型图, 此时纳米线中出现了较多的全位错. 而当相对扭角达到 26° 时, 材料遭遇破坏(如图 13(d) 红框所示处). 事实上, 由图 12 也可以看出, 平均每个原子的应变能在 D 点出现下降, 这暗示着材料发生了破坏.

图 12 $\langle 110 \rangle / \{111\}$ 单晶铜纳米线扭转加载过程中平均每个原子的应变能与相对扭角的关系

Figure 12 The variation of the strain energy per atom with the relative torsion angle of $\langle 110 \rangle / \{111\}$ Cu NW.

图 13 (a)–(c) 纳米线中出现大量全位错; (d) 材料遭遇破坏(见红框所示处)

Figure 13 (a)–(c) Large numbers of full dislocations are created in the NW; (d) a damage appearing on the left terminal of the wire, as indicated by the red frame.

纵观所有的变形图, 我们认为, $\langle 110 \rangle / \{111\}$ 单晶铜纳米线扭转塑性变形是以从侧表面发射不全位错而产生全位错为主导的变形机制。

3 结论

本文利用分子动力学方法模拟研究了 $\langle 001 \rangle / \{100\}$ 和 $\langle 110 \rangle / \{111\}$ 单晶铜纳米线在弯曲、扭转载荷作用下的塑性变形机制. 主要得出如下两个结论:

(1) 在 $\langle 001 \rangle / \{100\}$ 单晶铜纳米线的弯曲变形过程中, 当弯曲角度很大时, 我们观察到了多个五重变形孪晶. 它们的形成与两个重要因素有关: 即配位数为 12 的其他原子类型与 hcp 原子类型间的相互转化以及通过消亡两个相邻滑移面上的不全位错而形成孪晶的机制. 基于这个结果, 我们认为, $\langle 001 \rangle / \{100\}$ 单晶铜纳米线的弯曲塑性变形是以孪生方式为主的变形机制. 然而该孪生机制在 $\langle 110 \rangle / \{111\}$ 单晶铜纳米线的弯曲变形中是不存在的.

(2) 对于 $\langle 001 \rangle / \{100\}$ 和 $\langle 110 \rangle / \{111\}$ 单晶铜纳米线来说, 其扭转塑性变形分别是以从纳米线表面边角和侧表面发射全位错为主的变形机制. 并且随着扭转过程的加剧, 纳米线中出现越来越多的位错, 导致位错间平均距离减小, 位错运动受阻, 从而引起材料的破坏.

参考文献

- Rodrigues V, Fuhrer T, Ugarte D. Signature of atomic structure in the quantum conductance of gold nanowires. *Phys Rev Lett*, 2000, 85(19): 4124–4127
- Branicio P S, Rino J P. Large deformation and amorphization of Ni nanowires under uniaxial strain: A molecular dynamics study. *Phys Rev B*, 2000, 62(24): 16950–16955
- Wu H A. Molecular dynamics study of the mechanics of metal nanowires at finite temperature. *Euro J Mech A Solids*, 2006, 25(2): 370–377
- Wu H A. Molecular dynamics study on mechanics of metal nanowire. *Mech Res Commun*, 2006, 33(1): 9–16
- Park H S, Gall K, Zimmerman J A. Shape memory and pseudoelasticity in metal nanowires. *Phys Rev Lett*, 2005, 95(25): 1–4
- Park H S, Zimmerman J A. Modeling inelasticity and failure in gold nanowires. *Phys Rev B*, 2005, 72(5): 1–9
- Park H S, Gall K, Zimmerman J A. Deformation of fcc nanowires by twinning and slip. *J Mech Phys Solid*, 2006, 54(9): 1862–1881
- Yang Z Y, Lu Z X, Zhao Y P. Atomistic simulation on size-dependent yield strength and defects evolution of metal nanowires. *Comput Mater Sci*, 2009, 46(1): 142–150
- Weinberger C R, Cai W. Orientation-dependent plasticity in metal nanowires under torsion: Twist boundary formation and eshelby twist. *Nano Lett*, 2010, 10(1): 139–142
- Jiang S, Zhang H W, Zheng Y G, et al. Atomistic study of the mechanical response of copper nanowires under torsion. *J Phys D-Appl Phys*, 2009, 42(13): 135408

- 11 McDowell M T, Leach A M, Gall K. Bending and tensile deformation of metallic nanowires. *Modelling Simul Mater Sci Eng*, 2008, 16(4): 045003
- 12 Foiles S M, Baskes M I, Daw M S. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt and their alloys. *Phys Rev B*, 1986, 33(12): 7983–7991
- 13 Honeycutt J D, Andersen H C. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters. *J Phys Chem*, 1987, 91(19): 4950–4963
- 14 曹阿静. 金属纳米结构材料力学行为的分子动力学研究. 北京: 博士学位论文, 2007
- 15 Vainchtein A, Rosakis P. Hysteresis and stick-slip motion of phase boundaries in dynamic models of phase transitions. *J Nonlinear Sci*, 1999, 9(6): 697–719
- 16 McLean D. *Mechanical properties of metals*. New York: Wiley, 1962. 286
- 17 Alden T H. Strain hardening during low temperature creep of 304 stainless steel. *Acta Metall*, 1987, 35(11): 2621–2626
- 18 Reed R P, Simon N J, Walsh R P. Creep of Copper: 4 to 295 K. *Adv Cryogenic Eng*, 1990, 36: 1175–1183

Atomistic simulations on the mechanical behavior of single-crystalline Cu nanowires under bending and torsion loads

TIAN Xia^{1*}, CUI JunZhi² & GUAN XiaoFei³

¹ College of Mechanics & Materials, HoHai University, Nanjing 210098, China;

² LSEC, ICMSEC, Academy of Mathematics and System Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;

³ Department of Mathematics, Tongji University, Shanghai 200092, China

Molecular dynamics simulations are used to investigate the mechanical behaviors of $\langle 001 \rangle / \{ 100 \}$ and $\langle 110 \rangle / \{ 111 \}$ single-crystalline Cu nanowires under bending and torsion. In the numerical simulations of $\langle 001 \rangle / \{ 100 \}$ Cu nanowires subjected to bending, some fivefold deformation twins are observed at large bending angles. It is found that a reciprocal phase transformation from atoms of other 12-coordinate lattice to hcp lattice plays an important role in forming the fivefold deformation twins. Therefore, the formation process is distinct from that reported by Cao and Wei [*Appl. Phys. Lett.* 89, 041919 (2006)] in nanocrystalline Cu systems. However, for the $\langle 110 \rangle / \{ 111 \}$ counterparts under bending, fivefold deformation twin can not be observed during the whole deformation process. In addition, we reveal that the emission of full dislocations from the two ends of the wire is the major deformation mechanism for $\langle 001 \rangle / \{ 100 \}$ Cu nanowires to torsion, while for $\langle 110 \rangle / \{ 111 \}$ Cu samples, the nucleation of full dislocations from the side surfaces is responsible for the torsion plastic deformation.

single-crystalline Cu nanowires, bending, torsion, plastic deformation mechanism, deformation twin, dislocation

PACS: 21.10.Jx, 46.90.+s, 46.15.-x

doi: 10.1360/132011-1126