

Negaidīta kovalentu nanovadu plastiska formas maiņa deformācijas izraisītas dubultošanās dēļ

Sergei Vlassov¹, Sven Oras², Annamarija Trausa³, Tauno Tiirats², Edgars Butanovs^{2,3}, Boris Polyakov³,
Veronika Zadin², Andreas Kyritsakis*²

¹*Tartu Universitātes Fizikas institūts, W. Ostwaldi 1, 50411 Tartu, Igaunija*

²*Tartu Universitātes Tehnoloģiju institūts, University of Tartu, Nooruse 1, 50411 Tartu, Igaunija*

³*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts, LV-1063 Rīga, Latvija*

Nanovadi ir vienas no visvairāk pētītajām nanostrukturām, jo tām ir daudz daudzsološu pielietojumu, pateicoties to dažādajām unikālajām īpašībām. Turklāt nanovadu īpašības var pielāgot sintēzes laikā, ieviešot strukturālus defektus, piemēram, nano-dubultniekus, periodiskus politipus un kinkus, t.i., pēkšņas izmaiņas to aksiālajā virzienā. Šajā darbā pirmo reizi tiek ziņots par šādu defektu veidošanos pēc sintēzes, kas panākta, izmantojot īpatnēju plastiskumu, kas var rasties nanoizmēra kovalentos materiālos. Mēs atklājām, ka monokristāliski CuO nanovadi var veidot dubultus kinkus, ja tiek pakļauti ārējai mehāniskai slodzei. Gan mikroskopijas eksperimenti, gan atomistiskā modelēšana liecina, ka deformācijas izraisīta dubultnieku veidošanās gar $(1\bar{1}0)$ plakni ir šī efekta mehānisms. Visbeidzot, mēs sniedzam eksperimentālus un skaitļošanas pierādījumus tam, ka apgrieztais process principā var būt iespējams. Šī parādība sniedz jaunu ieskatu plastiskās deformācijas mehānismos kovalentos nanovados un piedāvā iespējamus veidus, kā izstrādāt metodes, lai pielāgotu nanovadu formu pēc to sintēzes un tiem piešķirtu jaunas funkcijas.

Reshaping covalent nanowires by exploiting an unexpected plasticity mediated by deformation twinning

Sergei Vlassov¹, Sven Oras², Annamarija Trausa³, Tauno Tiirats², Edgars Butanovs^{2,3}, Boris Polyakov³,
Veronika Zadin², Andreas Kyritsakis*²

¹*Institute of Physics, University of Tartu, W. Ostwaldi 1, 50411 Tartu, Estonia*

²*Institute of Technology, University of Tartu, Nooruse 1, 50411 Tartu, Estonia*

³*Institute of Solid State Physics, University of Latvia, LV-1063 Riga, Latvia*

Nanowires are among the most studied nanostructures as they have numerous promising applications thanks to their various unique properties. Furthermore, the properties of nanowires can be tailored during synthesis by introducing structural defects like nano-twins, periodic polytypes, and kinks, i.e., abrupt changes in their axial direction. Here we report for the first time the post-synthesis formation of such defects, achieved by exploiting a peculiar plasticity that may occur in nano-sized covalent materials. Specifically, we find that single-crystal CuO nanowires can form double kinks when subjected to external mechanical loading. Both our microscopy and atomistic modeling suggest that deformation-induced twinning along the $(1\bar{1}0)$ plane is the mechanism behind this effect. Finally, we provide experimental and computational evidence that the reverse process, i.e., un-kinking, can be achievable in principle. The phenomenon provides novel insights into the mechanisms of plastic deformation in covalent nanowires and offers potential avenues for developing techniques to customize the shape of nanowires post-synthesis and introduce new functionalities.