

# TORÇÃO ORIENTADA EM RELAÇÃO A DIREÇÃO SUPER COMPACTO DE MONOCRISTAL DE COBRE\*

Sergio Neves Monteiro<sup>1</sup>  
Fabio Da Costa Garcia Filho<sup>2</sup>  
Fernanda Santos da Luz<sup>3</sup>  
Carlos Luiz Ferreira<sup>4</sup>  
Wagner Anacleto Pinheiro<sup>5</sup>

## Resumo

Resultados experimentais de ensaios de torção em macro mono-cristais de cobre orientados em relação à direção [111] super-compacta foram comparados com simulações por dinâmica molecular (SDM) de nano mono-cristais de cobre (nano-arames) deformados em torção em relação à direção [100]. A comparação permite validar o comportamento típico de curvas de tensão cisalhante em função da deformação cisalhante. Como esperado os níveis de tensão nos nano-arames para um ângulo de torção de 360°, da ordem de 0,17 GPa a 700K até 0,21 GPa a 30K são superiores ao dos macro-cristais que variam de 0,048 GPa a 500k até 0,094 GPa a 77K. Na SDM, após a suposta deformação elástica, discordâncias são geradas e se multiplicam. Imagens por microscopia eletrônica de transmissão mostram a evolução dos arranjos e densidades de discordâncias nos macro-cristais.

**Palavras-chave:** Monocristais de cobre; torção orientada; comparação com dinâmica molecular.

## COPPER MONOCRYSTAL TORSION ORIENTED IN THE SUPER COMPACT DIRECTION

### Abstract

Experimental torsion test results on macro copper single crystals, oriented with respect to the close-packed [111] direction, were compared to molecular dynamics simulation (MDS) of torsion on copper nanowire single crystals, oriented with respect to the [100] direction. This comparison permitted to validate the typical behavior of shear stress as a function of shear strain (or rotation angle). As expected, the nanowire stresslevels for a rotation angle of 360°, around 0.17 GPa at 700K up to 0.21 GPa at 30K are superior to those found in the experimental macro-crystals, varying from 0.48 GPa at 500K up to 0.094 GPa at 77K. In the MDS, after a supposed elastic deformation, dislocations are generated and multiplied. In the macro-crystals, transmission electron microscopy images disclosed the evolution of arrangements and density of dislocations.

**Keywords:** Copper single crystals; oriented torsion; comparison with molecular dynamics.

<sup>1</sup> Engenheiro Metalúrgico, Ph.D em Materials Science and Engineering, Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro/RJ, Brasil.

<sup>2</sup> Engenheiro de Materiais, Mestre em Ciência dos Materiais, Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro/RJ, Brasil.

<sup>3</sup> Engenheiro de Materiais, Doutora em Ciência dos Materiais, Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro/RJ, Brasil.

<sup>4</sup> Físico, Doutor em Engenharia Metalúrgica e de Materiais, Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro/RJ, Brasil.

<sup>5</sup> Engenheiro de Metalúrgico, Doutor em Ciência dos Materiais, Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro/RJ, Brasil.

## 1 INTRODUÇÃO

O cobre talvez tenha sido o primeiro material metálico dominado por nossos ancestrais, no início da chamada Idade dos Metais há cerca de 5000 a.C. Embora já tenham sido suplantados pelo aço e alumínio, o cobre continua tendo grande participação como condutor elétrico na maioria dos equipamentos industriais e domésticos. Além disso devido a suas propriedades mecânicas, particularmente sua grande capacidade de deformação plástica, fios de cobre encontram um amplo grupo de aplicações tecnológicas nas modernas indústrias eletrônica, aeroespacial, de energia solar e muitas outras.

Pesquisas sobre os fundamentos de deformação plástica em monocristais de cobre continuam despertando interesse crescente nos últimos anos [1-23]. Entre estes mais recentes artigos, vale destacar aqueles que investigam as propriedades mecânicas de monocristais de cobre por simulação com programas computacionais dedicando, tanto a “molecular dynamics” (dinâmica molecular) [4, 10, 11, 14, 18, 19, 21, 22] quanto a “dislocation dynamics” (dinâmica de discordâncias) [15, 16].

Em particular o artigo de Yang et al [11] utiliza a simulação dinâmica molecular (SDM) para investigar as propriedades elastoplásticas e desenvolvimento de discordâncias em monocristais de cobre, como arames nanométricos, deformados por torção. Neste artigo simulou-se o comportamento em torção de um cilindro, arames nanométricos contendo até 9671 átomos, como esquematizado na Fig. 1.

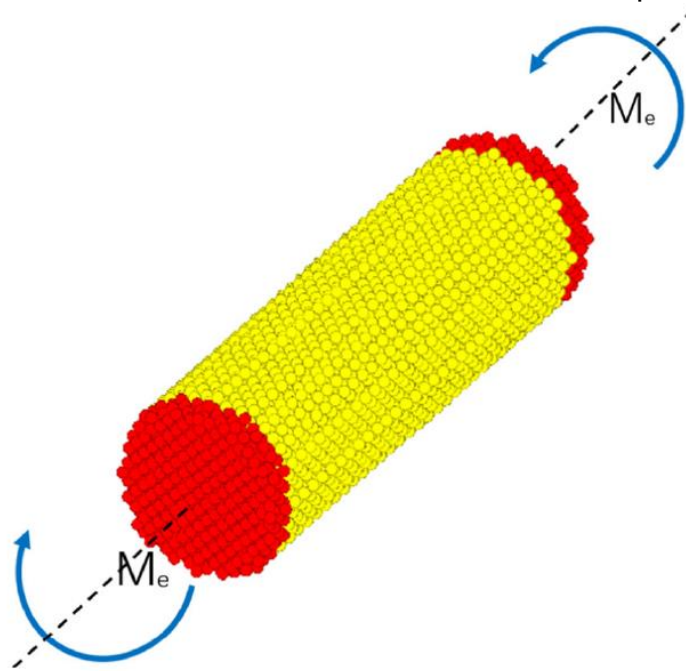


Figura 1 – Esquema da simulação dinâmica molecular de um arame nanométrico de monocristal de cobre deformado por torção. Reproduzido com permissão de [11].

Esses corpos de prova cilíndricos possuíam diâmetro da seção reta de  $5a$  e comprimento variando de  $24a$  a  $48a$ , onde  $a=0,3615\text{nm}$  é o parâmetro da rede de cobre. Ensaio foram simulados para temperaturas entre 30 e 700K, Fig.2. A posição atômica, simulada correspondia à cúbica de face centrada com eixo do cilindro, Fig.1, coincidente com a direção [001]. A torção foi realizada até um ângulo  $\theta=360^\circ$ , ou seja, uma rotação completa em torno do eixo do cilindro na Fig.1. Com base nos resultados de energia potencial e tensão cisalhante, Yang et al [11] indicaram que o regime elástico estende-se até cerca de  $100^\circ$  de rotação sem que fossem criadas discordâncias. No regime plástico tensões cisalhantes máximas de

160 e 220 MPa foram atingidas nas temperaturas de 700 e 30K respectivamente, para uma rotação completa,  $\theta=360^\circ$ .

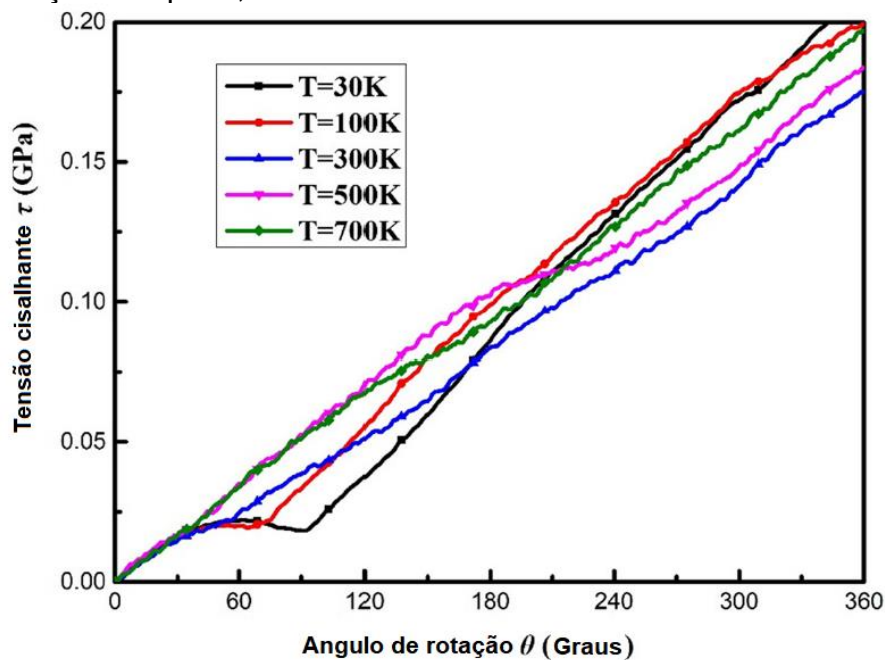


Figura 2 – Resultados de tensão cisalhante versus ângulo de rotação para diferentes temperaturas. Reproduzido com a permissão de [11].

Por se tratar de uma simulação computacional em um monocristal manométrico, existe o interesse científico de comparar os resultados básicos de Yang et al [11] com outros experimentos para monocristais de cobre em escala macrométrica. Os autores do presente trabalho desconhecem resultados de ensaios de torção em monocristais de cobre orientados em relação a seu plano e direções super compactos. Assim sendo, o objetivo deste trabalho foi realizar ensaios experimentais em corpos de prova cilíndricos de monocristal de cobre com diâmetro de 12,7 mm, em sua seção útil reduzida, e comprimento útil de 36,2 mm. O eixo desses corpos de prova coincide com a direção [111], o que ativa um maior número de sistemas primários de deslizamento, permitindo extensa deformação plástica. A deformação cisalhante  $\gamma$  é dada por:

$$\gamma = \frac{r\theta}{L}$$

Onde  $r$  é o raio de seção reta,  $\theta$  o ângulo de rotações e  $L$  o comprimento do corpo de prova.

Enquanto a tensão cisalhante máxima é igual a [24]:

$$\tau = \frac{2T}{\pi r^3}$$

Onde  $T$  é o torque dado pelo produto da força tangencial aplicada, multiplicado pelo diâmetro do corpo de prova. Ensaios de torção foram realizados em temperaturas de 77 até 500K. Arranjos de discordâncias foram analisados por microscopia eletrônica de transmissão.

## 2 MATERIAIS E MÉTODOS

Cobre de alta pureza, 99,99%, foi adquirido da United Mineral and Chemical, EUA na forma de barras policristalinas extrudadas. A Tabela 1 apresenta as principais impurezas (ppm) indicadas pelo fabricante.

Tabela 1 – Impurezas em parte por milhão (ppm) no cobre de alta pureza do UMC

C	S	Fe	Ni	Si	Ag	Gases
25	20	3	3	1	1	5

A partir das barras policristalinas de cobre, foram produzidos monocristais com 33 mm de diâmetro em um molde de grafite, Fig. 3 (a), com ponta cônica contendo um pequeno monocristal “semente” de cobre. Em um forno elétrico, Fig. 3(b), especialmente projetado para ser resfriado com um gradiente programado ao longo do comprimento, todo o cobre policristalino foi inicialmente fundido com temperaturas até 1250°C no topo, com exceção da “semente” monocristalina na ponta cônica. Após resfriamento lento e controlado, formou-se o monocristal com direções cristalinhas aleatórias. Por difração de raios X identificou-se a direção [111], permitindo que fossem retirados, por eletroerosão, cilindros com diâmetro de 19 mm na seção reta coincidente com o plano cristalográfico (111) do monocristal.

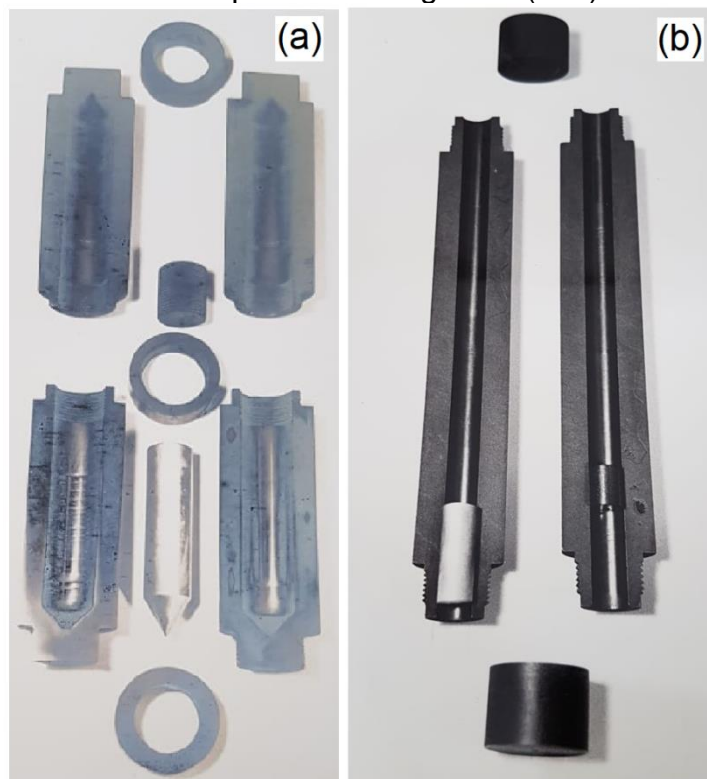


Figura 3 – (a) molde de grafite utilizado para a fabricação dos monocristais de cobre e (b) forno elétrico para evitar gradientes de temperatura.

Esses cilindros orientados tiveram suas seções retas reduzidas por eletroerosão para fabricar corpos de prova de torção com diâmetro útil de 8 mm e comprimento útil de 17 mm. A superfície de todos os corpos de prova, como no exemplo da Fig.4, foi polida eletroliticamente para revelar as marcas de deformação durante a torção.



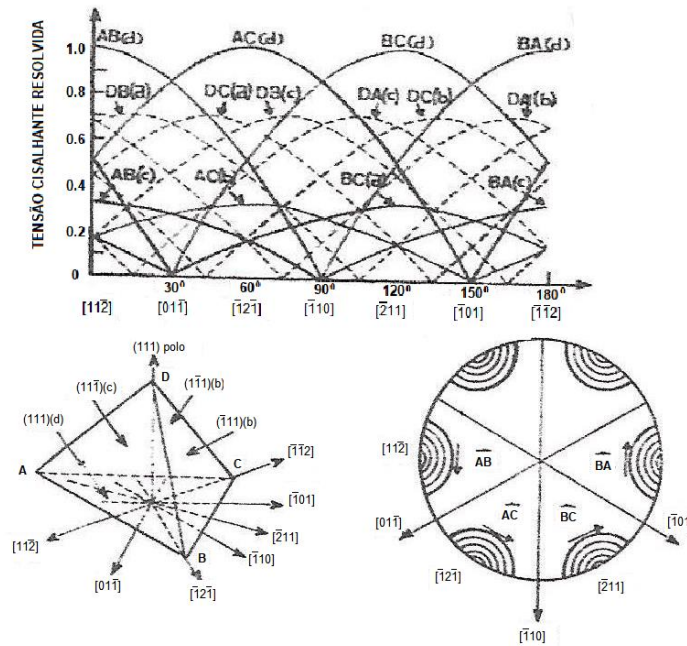
Figura 4 – Corpo de prova de cobre monocristalino retirado por eletroerosão e polido eletroliticamente para ser ensaiado em torção.

Os corpos de prova monocristalinos de cobre com seção reta coincidente com o plano cristalográfico (111), Fig.4, foram ensaiados em torção utilizando dispositivo especial em máquina Instron, EUA, associado a um forno com atmosfera de argônio. Um conjunto de garras apropriadas para submeter o corpo de prova a um torque controlado com velocidade rotacional de  $1,4 \times 10^{-13}$  radianos por milímetros.

Durante o ensaio de torção a superfície dos corpos de prova foi observada por microscopia ótica em equipamentos Leitz. A subestrutura de discordâncias em corpos de prova ensaiados até um nível determinado de deformação ou até a fratura foi observado por microscopia eletrônica de transmissão em um equipamento Philips 200, operando com 100 KV.

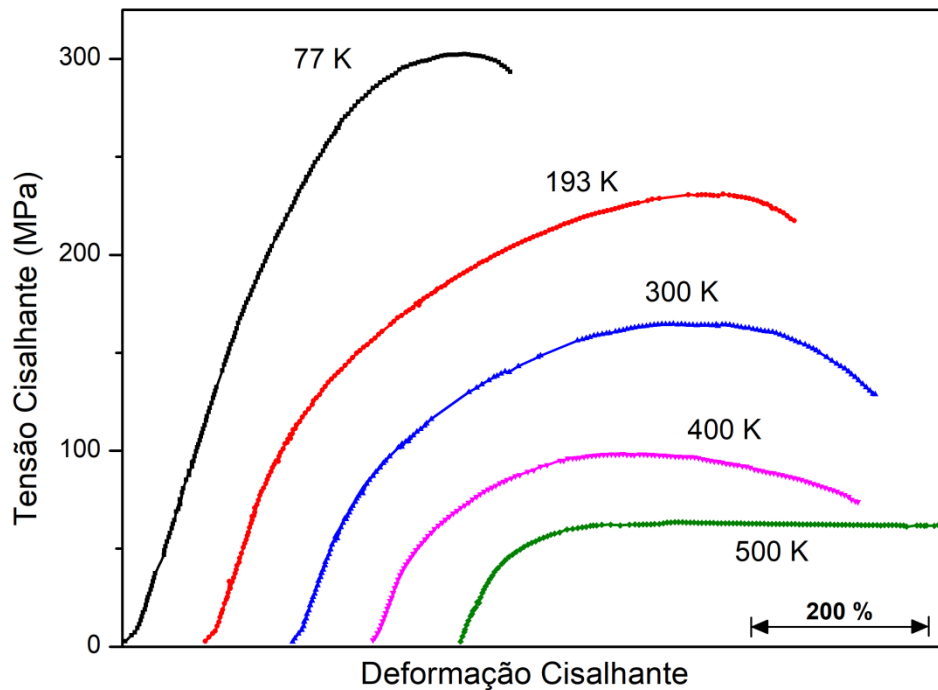
### 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Antes de serem apresentados os resultados experimentais, importante destacar que os corpos de prova, monocristalinos de cobre com eixo orientados segundo a direção cristalográfica [111], ou seja, com plano de seção reta coincidente com (111), são ativados simultaneamente 6 sistemas de deslizamento nas direções  $\langle 1-10 \rangle$ . Como mostrado no esquema da seção reta circular de corpo de prova na Fig. 5, estes sistemas são ativados inicialmente na superfície, onde ocorre a maior tensão cisalhante. Esta configuração é distinta da simulação de Yang et al [11] na qual a seção reta coincide com o plano cristalográfico (100) com menor tensão cisalhante resultante nos possíveis sistemas de deslizamento. Ou seja, é mais fácil ativar o deslizamento no presente caso do que na simulação de Yang et al [11].



**Figura 5 – Esquema das direções de deslizamento  $\langle 110 \rangle$  no plano da seção reta (111) do corpo de prova manocrystalino de cobre.**

A Figura 6 mostra as curvas de torção do cobre mono relacionando a tensão cisalhante,  $\tau$  dada pela Eq. (2), com a deformação cisalhante,  $\gamma$  dada pela Eq. (1). As curvas foram obtidas para as temperaturas 77, 193, 298, 400 e 500K. Nestas curvas a escala horizontal de cada uma está deslocada de 100% de  $\gamma$ , para permitir visualização separada. Devido a grande deformação cisalhante alcançada pela curva de 500K, corresponderia a 8 rotações em torno do eixo do corpo de prova ( $2879^\circ$ ), somente parte está mostrada na Fig.6.



**Figura 6 –** Curvas de tensão cisalhante versus deformação cisalhante para corpos de prova monocristalino de cobre ensaiados em torção à diferentes temperaturas até a ruptura. As curvas estão deslocadas horizontalmente de  $\gamma=100\%$  para permitir visualização individual.

As mesmas curvas da Fig.6 estão apresentadas na Fig. 7, com suas origens coincidentes, mostrando escala vertical em GPa e horizontal em ângulo rotacional Eq.(1) limitada até  $360^\circ$ . Esta formatação é similar à de Fig.2, permitindo assim comparar os resultados do presente trabalho com os de Yang et al [11].

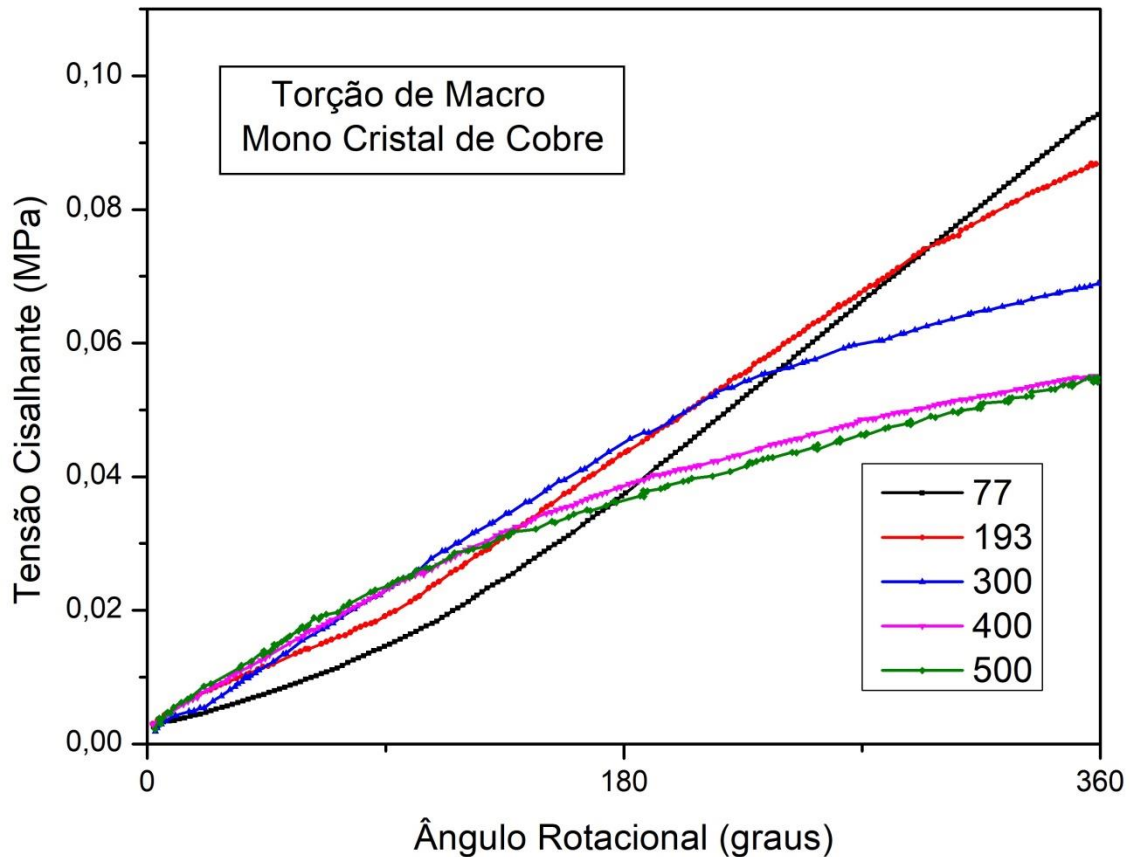


Figura 7 – Curvas de torção idênticas as da Fig.5, todas com origem comum além da escala vertical em GPa e escala horizontal em ângulo rotacional limitado a 360°.

A Figura 8 apresenta um esquema genérico para uma curva de tensão cisalhante ( $\tau$ ) versus deformação cisalhante ( $\gamma$ ) para um monocristal cúbico de face centrada. Esta curva é semelhante a esquematicamente mostrado por Meyers e Chawla [24]. Nesta curva estão colocadas tensões e deformações correspondente a:  $\tau_0$  = limite de escoamento;  $\tau_I$  e  $\gamma_I$  para o final do Estágio I de \* deslizamento;  $\tau_{II}$  e  $\gamma_{II}$  para o final do Estágio II para o estágio linear de encruamento;  $\tau_{MAX}$  e  $\gamma_{MAX}$  para os máximos alcançados na tensão e deformação (fratura do corpo de prova).



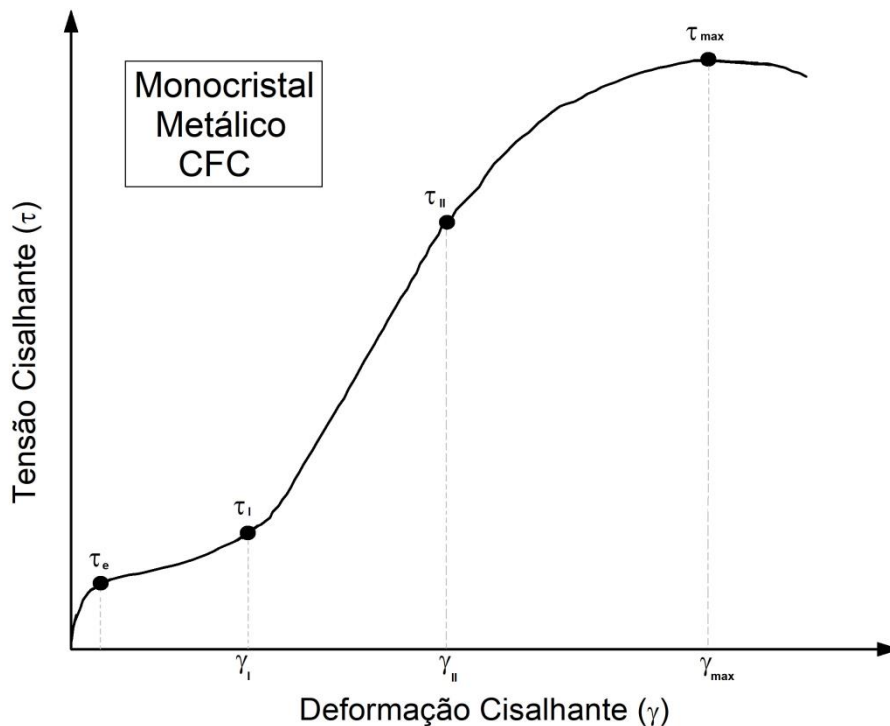


Figura 8 – Curva genérica de  $\tau$  versus  $\gamma$  para um monocristal CFC. Parâmetros rotacionais estão indicados.

Baseada nos parâmetros da Fig.1 a Tabela 2 apresenta os respectivos valores experimentais obtidas nas curvas da Fig. 6 e 7. Pode se considerar que o formato, em todas estas curvas de monocristal de cobre, está coerente com o esperado para curvas de monocristais CFC para diferentes temperaturas [24]. Na verdade, além dos três estágios (I, II e III na Fig.8), típicos dos monocristais também existe, ultimamente, uma primeira região elástica linear com maior inclinação de toda a curva associada ao módulo G de cisalhamento.

Tabela 2 – Parâmetros das curvas de torção dos corpos de prova monocristalinos de cobre para diferentes temperaturas.

Temperatura (K)	$\tau_e$ (GPa)	$\tau_I$ (GPa)	$\gamma_I$ (%) $\theta$ (°)	$\tau_{II}$ (GPa)	$\gamma_{II}$ (%) $\theta$ (°)	$\tau_{max}$ (GPa)	$\gamma_{max}$ (%) $\theta$ (°)
77	0,0023	0,0213	29 (68°)	0,1020	95 (207°)	0,2840	500 (1218°)
193	0,0019	0,0173	17 (41°)	0,0527	45 (109°)	0,2084	715 (1741°)
300	0,0028	0,0087	9 (22°)	0,0313	26 (63°)	0,1186	705 (1717°)
400	0,0019	0,0073	8 (19°)	0,0205	19 (44°)	0,0625	554 (1349°)
500	0,002	0,0053	3 (7°)	0,0112	8 (15°)	0,0573	1182 (2879°)

A região elástica, quase imperceptível nas curvas da Fig. 6 e 7, termina no limite de escoamento, por volta de 0,002 GPa com a primeira movimentação de discordâncias no sistema primário caracterizando o estágio I. Por serem ativados 3 sistemas primários o estágio I das curvas da Fig. 6 e 7 é relativamente curto com encruamento (inclinação) significativo. A curva de 77K apresenta o estágio I mais

extenso (28%) e com maior tensão cisalhante (21,2 MPa). Estes valores, Tabela 2, diminuem sensivelmente com o aumento da temperatura.

Segue-se o estágio II, linear com o maior encruamento plástico de toda a curva e associada à forte interação das discordâncias dos sistemas secundários e até terciários, formando bloqueios para a movimentação das discordâncias do sistema primário [24]. A Tabela 2 revela também que a tensão ( $\tau_{II}$ ) e deformação ( $\gamma_{II}$ ) do término do estágio II decrescem com a temperatura. Na sequência, com o estágio III, tem-se um encruamento decrescente devido a formação de subestruturas organizadas tais como sub-contornos e arranjos poligonizados de baixa energia [24]. Estas subestruturas de discordâncias se ampliam até os máximos na tensão ( $\tau_{max}$ ) e na deformação ( $\gamma_{max}$ ). O valor de  $\tau_{max}$  diminui com temperatura como é esperado nos mecanismos termicamente ativados [24].

Vale aqui destacar três aspectos relevantes nas curvas experimentais, Fig. 6 e 7, do presente trabalho comparativamente com as curvas simuladas por dinâmica molecular em nano-arame monocristalinos de cobre, Fig.2, do artigo de Yang et al [11]. Primeiro, o regime elástico é atribuído por aqueles autores à parte inicial da curva  $\tau \times \theta$  com pouca variação na tensão e sem a formação de discordâncias. Isto é ressaltado no caso de curva a 30K da Fig.2 com tensões quase constante, em torno de 0,02 GPa até um ângulo de rotação de 75°, correspondendo a  $\gamma = 16\%$  para o nano-arame em torção [11]. Esta interpretação é difícil de ser compreendida já que uma região de tensão quase constante não pode ser associada ao regime elástico. Seria provável que esta baixa inclinação, quase horizontal, na Fig.2 correspondesse ao movimento das primeiras discordâncias do sistema primário resultando no Estágio I de fácil deslizamento, como esquematizado na Fig.8. Entretanto, Yang et al [11] indicam que a 30K o nano-arame de cobre monocristalino só inicia a deformação plástica após uma torção correspondente a 75°, ou seja, uma deformação acima de  $\gamma = 16\%$ . Esses autores indicaram também que na simulação por mecânica molecular, ainda não existem discordâncias nesta primeira região quase horizontal da curva de torção. Apesar desta inconsistência nos resultados da Fig.2, adaptada de [11], vai-se imaginar que um nano-cristal de cobre perfeito antes de ser deformado não tenha discordâncias. Entretanto nos macro-cristais do presente trabalho verificou-se que mesmo após terem sido recozidos a 1250°C por uma semana antes de serem ensaiados em torção, ainda permanecia uma densidade de discordâncias de  $\rho = 10^8/m^2$ .

O segundo aspecto diz respeito ao nível de tensão no limite de escoamento do presente trabalho (0,002 GPa) ser bem menor que a tensão inicial, Fig.2, (0,02 GPa) registrada por Yang et al [11]. Considerando a hipótese de que estas tensões estejam associadas ao estágio I, haveria então uma justificativa para esta grande diferença. No presente trabalho, o início da deformação plástica corresponderia à ativação de discordâncias já existentes nos 6 sistemas primários. Isto só necessitaria de uma tensão cisalhante aplicada sobre as discordâncias suficiente para vencer o atrito da malha cristalina. Por outro lado, nos nano-arames perfeitos, sem discordâncias iniciais [11], a tensão para gerar novas discordâncias é bem maior [24]. Assim, sugere-se que as primeiras discordâncias no nano-arame sejam geradas ao se atingir por volta de 0,02 GPa e acarretem o estágio I com nível quase constante de tensão a 30K, Fig.2, até  $\gamma = 16\%$  ( $\theta = 75^\circ$ ).

O terceiro aspecto que ajuda a validar experimentalmente os resultados simulados de dinâmica molecular [11] relaciona-se aos níveis de tensão cisalhante atingidas. Em particular, verificou-se pelas curvas da Fig.7 que as tensões atingidas para um ângulo rotacional de 360° nos macro-cristais de cobre variam de 0,048 GPa a 500K

até 0,094 GPa a 77K. Por outro lado, na simulação por dinâmica molecular as tensões atingidas a 360° nos nano-arames de cobre, Fig.2, variam de 0,17 GPa a 700K até 0,21 GPa a 30K. Estes valores relativamente maiores são compatíveis do que se espera para a resistência mecânica de nano-cristais metálicos, no mesmo nível de deformação [24].

Finalmente, deve ser mencionado a evolução da subestrutura de discordâncias tanto nos nano-arames simulados por dinâmica molecular [11] quanto nos macro-cristais de cobre deformados em torção orientada. Com relação aos nano-arames de cobre, Yang et al [11] mostram conjuntos de pequenas esferas simulando átomos com distorções no interior e degraus nas superfícies atribuídos à discordâncias. Os autores concluem que no regime elástico não aparecem discordâncias tanto na superfície quanto no interior. Somente quando é atingido um ângulo rotacional maior que 60° aparecem discordâncias no modelo simulado [11], ocorre uma contínua interação entre elas o que acarreta grande aumento com maior inclinação na tensão cisalhante. Como já foi discutido, a parte inicial da curva  $\tau \times \theta$  com baixa e constante tensão, a partir de ângulos rotacionais de 30 até 100°, possivelmente corresponderia ao clássico estágio I de fácil deslizamento. Sendo assim, discordâncias já seriam geradas por volta de um ângulo rotacional de 30° em condições não visíveis no modelo simulado de Yang et al [11].

No presente caso de macro-cristais de cobre, observa-se movimentação e interação de discordâncias devido à ativação simultânea de 6 sistemas primários de deslizamento já no início da torção a 300K como mostra a Fig.9.



Figura 9 – Subestrutura de discordâncias para deformação cisalhante de 8% no cobre monocristalino deformado em torção a 300k.

Nesta figura a densidade de discordâncias já é da ordem de  $10^9 - 10^{10}/m^2$  para uma deformação cisalhante  $\gamma = 8\%$  correspondendo a  $\theta = 33^\circ$ . Para deformações cisalhantes no final do estágio II de 40%, correspondente a  $\theta = 165^\circ$  (quase meia torção) tem-se uma densidade de discordâncias da ordem de  $10^{12} - 10^{13}/m^2$  como ilustra a Fig.10.

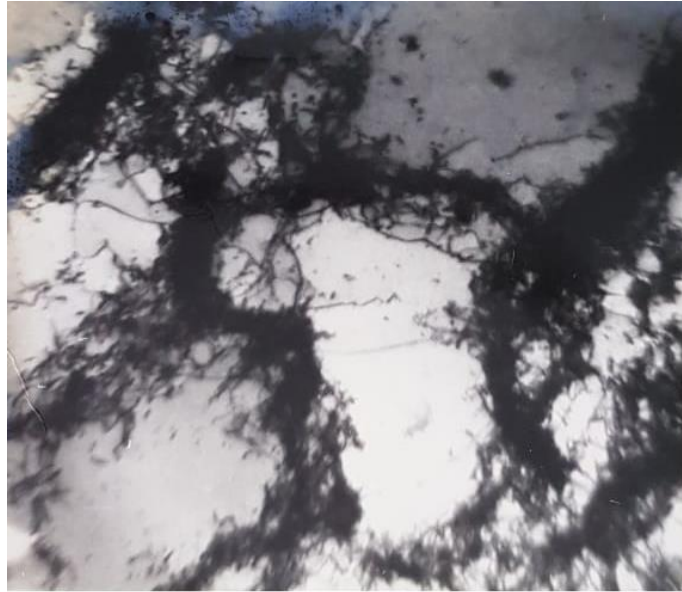


Figura 10 – Subestrutura de discordâncias para deformação cisalhante de 40% no cobre monocristalino deformado em torção a 300K.

Neste nível de deformação as discordâncias já estão formando arranjos celulares que permanecerão, reduzindo o tamanho das células, até a fratura associada à uma deformação cisalhante  $\gamma = 715\%$  ( $\theta = 2941^\circ$ ) ou seja, por volta de 8 rotações em torção.

#### 4 CONCLUSÕES

- Uma comparação entre resultados experimentais de torção em macro monocristais orientados de cobre e simulações por dinâmica molecular (SDM) de nano-arames monocristalinos de cobre, recentemente publicados por Yang et al [11], revelaram aspectos comuns e algumas interpretações conflitantes.
- AS curvas de torção tanto do macro-cristal, experimentalmente obtidas de 77 a 500K, quanto do nano-cristal obtidas por SDM no intervalo de 30 até 700K limitadas até um ângulo rotacional de  $360^\circ$ , apresentam aspectos semelhantes, mas níveis de tensão diferentes.
- Um estágio I inicial, típico dos manocrstais metálicos é observado tanto nos macro quanto nos nano-cristais simulados ( $\sim 0,02\text{GPa}$ ) é bem superior aos macro-cristais experimentais (0,002 GPa).
- A interpretação de Yang et al [11] de que este estágio I inicial corresponde ao regime elástico sem discordâncias na SDM, não parece consistente com os modelos clássicos da literatura.
- Assim como observado por microscopia eletrônica de transmissão nos macro-cristais, sugere-se que já sejam criadas discordâncias na SDM desde o estágio inicial, com tensão quase constante, a 30K, correspondente ao reconhecido estágio I de fácil deslizamento.

#### Agradecimentos

Os autores agradecem ao auxílio dos órgãos Brasileiros CNPq, CAPES e FAPERJ.

## REFERÊNCIAS

- 1 Guo TB, Wang C, Li Q, Wu YB, Tang XC. Texture evolution and strengthening behavior of single Crystal copper during equal channel angular pressing. *Rare Metal Mater. Eng.* 48 (2019) 1065-1073.
- 2 Dekan N, Jonnalagadda KN. Effect of constraint and latente hardening ratio on the plastic flow around a crack tip in a hardening FCC single Crystal. *Int.J.of Plasticity* 115 (2019) 132-153.
- 3 Peng WX, Sun k, Zhang M, Shi JQ, Chen J. Effects of graphene coating on the plastic deformation of single Crystal copper nano-cuboid under different nanoindentation modes. *Mater. Chemistry and Physics* 225 (2019) 1-7.
- 4 Deng L, Lin QT, Wang XY, Li JJ. Load drop and hardnen drop during nanoindentation on single-crystal copper investigated by molecular dynamics. *Appl. Physics A – Mater. Sci. Processing* 124 (2018). DOI:10.1007/s00339-018-2146-8
- 5 Dobromyslov AV, Taluts NI. Deformation behavior of a copper single Crystal upon loading by spherically converging shock waves. *Physics of Metals and Metallography* 119 (2018) 1022-1030.
- 6 Guo TB, Wang C, Li Q, Zhang F, Jia Z. Deformation structure and mechanical properties of single crystal copper deformed by route ECAP/Bi. *Rare Metal Mater. Eng.* 47 (2018) 3096-3103.
- 7 Guo TB, Li Q, Wang C, Jia Z, Hu Y, Tang XC. Texture and mechanical properties of single Crystal copper during equal channel angular pressing by route . *Material wissenschaft und werks toff technik.* 40 (2018) 1170-1180.
- 8 Tarasov SY, Chumaeviski AV, Lychagin DV, Nikonov AY, Dimitriev AI. Subsurface structural evolution and wear lip formation on copper single crystal under unlubricated sluding conditions. *Wear* 410 (2018) 210-221.
- 9 Cai SS, Li XW, Tao NR. Orientation dependence of deformation twinning in Cu single crystals. *J. Mater. Sci. Technol.* 34 (2018) 1364-1370.
- 10 Zadin V, Vesks M, Vigonskis S, Jansson V, Muszinskig J, Parviainen S, Aaklov A, Djurabekoval. Simulations of surfasse stren effects in nanoscale single crystals. *Modelling and Simulation in Mater. Sci. Eng.* 26 (2018). DOI: 10.1088/1361-651X/222928.
- 11 Yang Y, Li Y, Yang ZI, Zhang GW, Wang XZ, Liu J. Molecular dynamics simulation on the elastoplastic properties of copper nanowire under torcion. *J. Nanoparticle Research* 20 (2018). DOI: 10.1007/s11051-018-4155-0
- 12 Fujii T, Kajita T, Miyazawa T, Arai S. Characterization of dislocation microsctructure in cyclically deformed [001] copper single crystals using high voltage scanning transmission eléctron microscopy. *Mater. Characterization* 136 (2018) 206-211.
- 13 Yagudzinskyy Y, Malitckii E, Tuomisto F, Hanninen H. Hydrogen-induced strain localisation in oxygen-free copper in the initial stage of plastic deformation. *Philosophical Magazine* 98 (2018) 727-740.
- 14 Chandra S, Samal MK, Chavan VM, Raghunathan S. Void growth in single crystal copper – Na atomistic modeling and statistical analysis study. *Philosophical Magazine* 98 (2018) 577-604.
- 15 Hu JQ, Chen Z, Liu ZI, Zhuang Z. Pressure sensitivity of dislocation density in copper single crystal at submicron scale. *Mater. Research Express* 5 (2018). DOI: 10.1088/2053-1591/aaa068
- 16 Hu JQ, Lin ZL, Van der Glessen E, Zhuang Z. Strain rate effects on the plastic flow in submicron copper pillars: Considering the influence of sample size and dislocation nucleation. *Extreme Mechanics Letters* 17 (2017) 33-37.
- 17 Guo TB, Li Q, Wang C, Zhang F, Jia Z. Deformation characteristics and mechanical properties of single crystal copper during equal channel angular pressing by route A. *Acta Metallurgica Sinica* 58 (2017) 991-1000.
- 18 Sun K, Shi JQ, Ma LF. Atomistic insights into the effect of residual stress during nanoindentation crystals 7 (2017) DOI:10.3390/cryst7080240

- 19 Fang QH, Li J, Luo H, Du JK, Liu B. Atomic scale investigation of nanocrack evolution in single-crystal and by crystal metals under compression and shear deformation. *J. Alloys and Compounds* 710 (2017) 281-291.
- 20 Kubin L, Sauzay M. Persistent slip bands: The bowing and passing model revisited. *Acta Materials* 132 (2017) 517-524.
- 21 Xu SZ, Su YQ, Chen DK, Li LL. Plastic deformation of single crystals containing an elliptic cylindrical void. *Mater. Letters* 193 (2017) 283-289.
- 22 Zhang I, Lu C, Tieu K, Su LH, Zhao X, Pei LQ. Stacking fault tetrahedron induced plasticity in copper single crystal. *Mater. Sci. Eng. A – Structural Materials Properties Microstructure and Processing* 680 (2017) 27-38
- 23 Demir E. A physically based constitutive model for FCC single crystals with a single state variable per slip system. *Modelling and Simulation in Mater. Sci. Eng* 25 (2017). DOI: 10.1088/1361-651x/25/1/015009.
- 24 Meyers M, Chawla K. *Mechanical behavior of materials*. Cambridge University Press (2009) 2nd Edition, UK.