

分子動力学法と Parallel Replica 法とによる 金ナノワイヤーの引張り変形解析*

Tensile Deformation Analyses of a Gold Nanowire Using Molecular Dynamics and Parallel Replica Method

瀬良 雅也¹, 松本 龍介², 宮崎 則幸²

Masaya SERA, Ryosuke MATSUMOTO and Noriyuki MIYAZAKI

¹ 京都大学大学院 (〒606-8501 京都府京都市左京区吉田本町)

² 京都大学大学院工学研究科 (〒606-8501 京都府京都市左京区吉田本町)

In order to exploit the potential applications of gold nanowires, it is important to reveal their mechanical properties. Although Molecular Dynamics (MD) simulations can treat dynamic conformational modifications in atomic scale, the analysis time scale is strictly limited. In this paper, Parallel Replica (PR) method which can extend the analysis time scale is employed to investigate mechanical properties of a gold nanowire at slower strain rates. We performed tensile-loading simulations at wide strain-rate range ($1.0 \times 10^5 \sim 1.0 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$) using MD and PR method, and revealed that the deformation behavior changes depending on the strain rate. Furthermore, we predict the yield strain at practical strain rate based on the transition state theory.

Key Words: Molecular Dynamics, Parallel Replica Method, Transition State Theory, Nanowire, Gold, Mechanical Property

1. 緒言

金属がナノスケールの形状寸法を持つと、通常のバルク状態とは異なった特性を発現することが知られている。特に、金ナノワイヤーは、金本来の特性である化学的熱不活性、高い電気伝導性、熱伝導性、延性に加え、高い降伏応力を持つようになる⁽¹⁾。また、引張り変形を加えると破断前には原子数個分の太さを持つ原子鎖をつくり^{(2),(3)}、電気伝導性が不連続となる^{(4),(5)}。このように、金ナノワイヤーはバルク状態の金にはない特性を持ち、電気回路や記憶回路の接合材料、複合材料の強化材料、ナノセンサー等への応用が望まれている^{(6),(7)}。このような応用において金ナノワイヤーの基本的な力学特性を知る必要があるが、対象がナノスケールであるために実験的アプローチだけでは限界がある。原子シミュレーションの一つである分子動力学 (Molecular Dynamics; MD) 法は、原子間ポテンシャルを用いることで系内の全原子位置の時間発展を追跡できる手法であり、ナノワイヤー等の動的な変形解析に多く用いられてきた⁽⁸⁾⁻⁽¹²⁾。しかしながら、MD 法で取り扱える解析時間スケールは非常に短いため、変形解析においては単位時間あたりの変形量を非常に大きくしなければならず、解析に

より得られる結果が実際のひずみ速度で生じる現象とは異なる現象を再現している可能性がある。

本論文では、金ナノワイヤーの降伏ひずみ、変形挙動の温度依存性を広いひずみ速度範囲で明らかにする。ひずみ速度が大きい範囲では MD 法を用い、MD 法では解析時間スケールの制限から解析困難な小さいひずみ速度における解析は Parallel Replica (PR) 法^{(13),(14)}を用いる。それに加えて、MD 法の解析結果から、実際のひずみ速度での降伏ひずみの予測を遷移状態理論を用いて行う。また、MD 法の問題点である解析時間スケールを拡大するために用いる PR 法の引張り変形解析における有効性の検討も行う。

2. Parallel Replica (PR) 法

2.1 特徴 MD 法の計算時間を短縮するために、並列計算を行う方法が挙げられる⁽¹⁵⁾。MD 法で並列計算を行う際に一般的に用いられる空間分割法は、解析時間スケールの拡大には向かず、また、原子数の少ない小さい系においては、通信回数・通信時間の関係から、それによって大幅な効率化を期待することはできない。本解析で用いる PR 法では、通信回数・通信時間が非常に少ないために、大規模な並列計算が可能であり、小さい系に対して大幅な解析時間スケールの拡大が可能である。

また、PR 法では、以下で述べる通り、各レプリカ内で全自由度を保持した計算を行うため、自由度の拘束が必要である他の加速 MD 法に比べて未知の現象への適用性が高い。

* 原稿受付 2011 年 11 月 18 日、改訂年月日 2012 年 03 月 27 日、発行年月日 2012 年 05 月 08 日、© 2012 年 日本計算工学会。

Manuscript received, November 18, 2011; final revision, March 27, 2012; published, May 08, 2012. Copyright © 2012 by the Japan Society for Computational Engineering and Science.

2.2 基本概念 熱活性化過程では、原子の運動を大きな変化を伴わないポテンシャルの極小点近傍での振動(待ち状態)と活性化エネルギーを越え、新たなポテンシャル極小点へと移動する運動(遷移)とに分けることができる。そして、遷移がまれにしか生じないならば、原子の移動は比較的ゆっくりとしたものとなり、確率的に扱うことができる。PR 法では、遷移の生じる頻度が小さい熱活性化過程において、並列処理によって遷移を生じやすくさせることで、解析時間スケールの拡大を図る。

2.3 MD 法と PR 法 MD 法では、原子がポテンシャルの底で振動している待ち状態を 1 つだけで観測しているのに対して、PR 法では複数の待ち状態を観測する。 M 個のレプリカを作成すれば、 M 個の状態を同時に観測しているため、各レプリカに対する計算速度が同じであるとする、いずれかのレプリカで最初の遷移を観測するまでの時間が $1/M$ 倍になる。引張変形の解析においては、ひずみ速度を M 倍することで、元のひずみ速度と同じ状態を再現することができる⁽¹⁴⁾。ただし、このような状態が成り立つためには、各レプリカが独立で、さらに、遷移が確率的で現在の状態によってのみ決まる(遷移間に相関関係がない)必要がある。

2.4 PR 法の計算手順 Fig. 1 に PR 法の流れを示す。まず、初期時刻 t_0 において、基本となる原子配置のレプリカをプロセス数分、作成する(Fig.1(a))。この際、単純に基本となる状態のレプリカを作成すると、各レプリカ中の原子配置は同じであるため、レプリカは独立ではない。そこで、各レプリカに独立な運動量を与え、レプリカが独立となるまで τ_{dephase} の間、計算を進める(Fig.1(b))。その後、各レプリカで並行して計算を進める(Fig.1(c))。いずれかのレプリカで遷移を観測すると、それまでの経過時間を足し合わせ、遷移を観測したレプリカのみを残す(Fig.1(d))。遷移直後は元の状態に戻ったり、更なる遷移が生じたりしやすいため、遷移間に相関関係が生じる可能性がある。そこで、 Δt_{corr} の間、遷移の生じた 1 つのプロセスのみ計算を進める(Fig.1(e))。その後、遷移の生じたレプリカの時刻を新たな初期時刻 t_0 、原子位置を基本となる原子配置とし、最初に戻る(Fig.1(a))。

以上の通り、PR 法では、現在の状態が遷移の生じる前なのか、それとも遷移の生じた後なのかを知る必要があり、遷移の判別条件が必要である。また、独立なレプリカを作成するための時間 τ_{dephase} 、遷移間の相関関係をなくすための時間 Δt_{corr} を定める必要がある。なお、 τ_{dephase} は独立なレプリカを作成するために必要な計算であるため、解析時間には加えず、その間に生じた遷移は無視する。

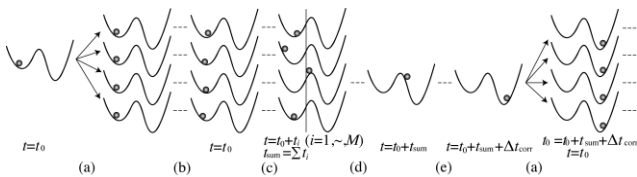


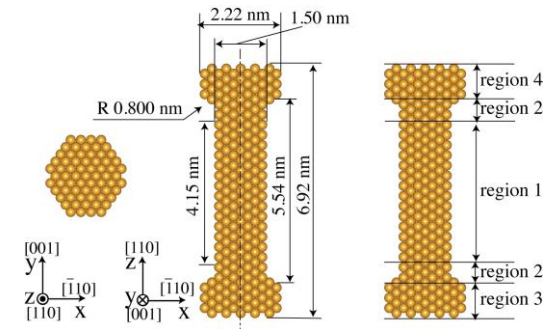
Fig. 1 Schematic illustration of PR method.

3. 解析条件

3.1 解析モデル 本解析では、実験的に得ることができている<110>を軸方向に持つ金ナノワイヤー⁽¹⁶⁾を考え、引張変形におけるひずみ速度依存性と温度依存性を評価する。

結晶方位と寸法を Fig.2(a)に示す。原子の初期配置には、Fig.2(b)中の領域 4 の原子を完全固定した状態で、1.5 ps ごとに解析温度でのボルツマン分布に従う速度を領域 1, 2, 3 内の原子に与え直し、ポテンシャルエネルギーの変化量が十分小さくなるまで構造緩和を行ったものを用いる。変形は領域 4 内の原子を z 軸方向に剛体変位させることで与える。この際、領域 3 中の原子は完全固定とする。また、領域 1 と領域 2 の原子にも、位置により重みをつけて変位を与えることで、一定のひずみ分布を与えている。原子を固定した領域と自由に動ける領域の境界で応力集中が生じないようにするために、領域 2 で曲率をもたせている。また、領域 2 の端の原子が軸方向の表面の影響を受けないようにするために、領域 3 と領域 4 の z 軸方向寸法をカットオフ距離(0.673 nm)以上に行っている。原子数は、1,055 個である。本論文では、応力は領域 1 内の原子の原子応力の平均値であり virial 定理を用いて求めている。

原子間ポテンシャルには、Cai and Ye により提案された金に対する EAM(Embedded-Atom Method)ポテンシャル⁽¹⁷⁾を用いる。



(a) Model size and crystal orientation. (b) Boundary region.

Fig.2 Analysis model.

3.2 解析条件 解析温度は 5 K, 50 K, 100 K, 150 K, 200 K, 250 K, 300 K とし、速度スケールリング法により温度制御を行う。ひずみを与えるための変位は毎ステップ与え、ひずみ速度が $1.0 \times 10^5 \sim 1.0 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ の範囲で解析を行う。ひずみ速度が $1.0 \times 10^8 \sim 1.0 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ では MD 法を、ひずみ速度が $1.0 \times 10^5 \sim 1.0 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ では PR 法を用いる。ただし、ひずみ速度 $1.0 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ は、300 K のみで解析を行う。また、ひずみ速度 $1.0 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$, 150 K では、MD 法による解析も行い、その結果と PR 法の結果とを比較し、PR 法の結果が妥当であることを評価する。PR 法では 32 プロセスを用いて計算を行う。また、タイムステップは 1.0 fs とした。

PR 法で解析する上で必要となる値は、予備検討の結果より、 $\tau_{\text{dephase}} = 2.0 \text{ ps}$, $\Delta t_{\text{corr}} = 15 \text{ ps}$ とした。遷移の判別方法は以下の通りとした。

(i) レプリカを作成する前に 0 K まで温度を下げ、各原子

- まわりで、距離が fcc 金属、0 K における最隣接原子間距離(0.288 nm)の 1.1 倍以内の原子をリストアップする。
- (ii) リストアップされた組み合わせの数が fcc の最隣接原子数である 12 のもののみを遷移の判別を行う際の原子として採用する。
- (iii) 各レプリカで計算を進め、いずれかの組み合わせにおいて、解析温度での 0.5 ps 間の平均距離が fcc 金属、0 K での最隣接原子間距離の 1.4 倍以上となった時、遷移が生じたと判断する。これは、最隣接原子が第 2 隣接原子に移動した時に相当する。遷移の判別は 0.5 ps ごとに行う。

0 K での組み合わせを用いるのは、原子の熱振動の影響を排除するためである。また、遷移の判別の際には、0 K での位置を用いるのではなく、平均位置を用いるのは、計算量を減らすためである。なお、解析温度を 300K よりも高くすると本解析対象では原子振動が大きくなり、間違っ遷移判別される場合があったため、解析の最高温度を 300K にしている。

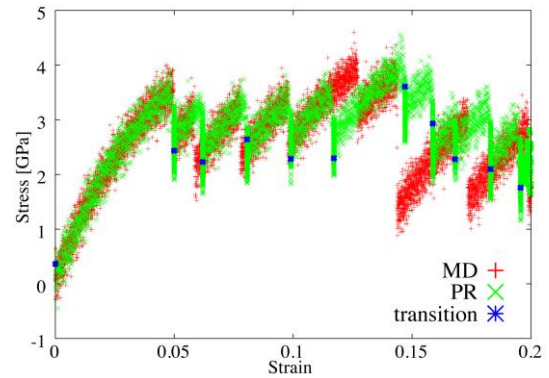
4. 解析結果

4.1 MD 法と PR 法の比較 ひずみ速度 $1.0 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$, 150 K における MD 法と PR 法との結果の比較を Fig.3 に、また、PR 法の計算効率を Fig.4 に示す。Fig.3(a)中の青点は、遷移が判別された時のひずみと応力を示している(後の Fig.7(b), Fig.8(b)中の青点も同様)。Fig.3(b)は、Common Neighbor Analysis⁽¹⁸⁾により構造解析を行った結果であり、ナノワイヤーの中心軸を通る xz 面で切った断面図である。また、図中の矢印は画像間ですべり変形を生じた位置を示している(後の Fig.6(a), Fig.7(a), Fig.8(a)も同様)。Fig.4 中の効率は、(MD 法での計算時間)/(PR 法における計算時間) $\times$ (用いたレプリカ数)である。ただし、ひずみ速度が $1.0 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ 以下での MD 法の計算時間は、計算時間が総ステップ数に比例するとしている。

Fig.3 より、応力-ひずみ曲線、変形挙動の特徴が MD 法と PR 法とで、良く一致しているため、PR 法の結果は妥当であると考えられる。計算効率は、Fig.4 に示すように、低温であるほど、また、ひずみ速度が小さいほど高くなる。これは、遷移の生じる頻度が小さくなるためであると考えられる。遷移の頻度が小さくなると、解析時間に加えない計算(τ_{dephase} , Fig.1(b))や 1 つのプロセスのみでの計算(Δt_{corr} , Fig.1(e))が占める割合が小さくなるため、効率が高くなる。そのため、より低い温度や、小さいひずみ速度では、更に効率が高くなると考えられる。

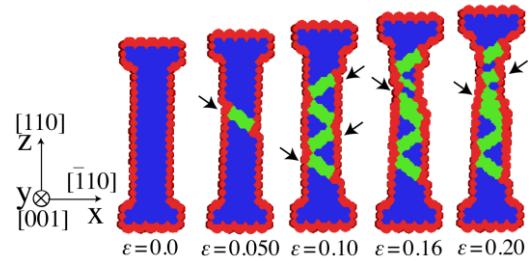
4.2 降伏ひずみのひずみ速度・温度依存性 Fig.5 に降伏ひずみのひずみ速度と温度依存性を示す。また、Fig.6 に $\dot{\epsilon} = 1.0 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$, 150 K, Fig.7 に $\dot{\epsilon} = 1.0 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$, 150 K, Fig.8 に $\dot{\epsilon} = 1.0 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$, 300 K における変形挙動と応力-ひずみ曲線をそれぞれ示す。降伏ひずみは最初に応力がピークを迎えた時のひずみとしている。Fig.5 における降伏ひずみは、MD 法を用いた範囲($\dot{\epsilon} = 1.0 \times 10^8 \sim 1.0 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$)では 5 回の計算結果の平均、PR 法を用いた範囲($\dot{\epsilon} = 1.0 \times 10^5 \sim 1.0 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$)では 3 回の計算結果の平均である。PR 法では、遷移の生じた付近において多くのデータを出力しているため、Fig.7(b), Fig.8(b)では一部プロット

数が多くなっている。



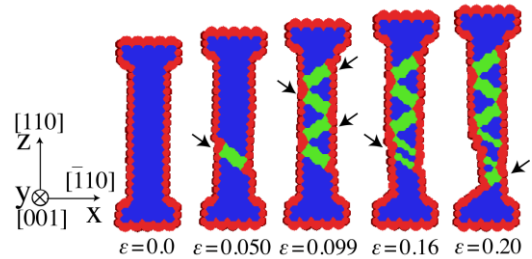
(a) Stress-strain curves.

- fcc
- hcp
- others



(b-1) Structure change during deformation (MD).

- fcc
- hcp
- others



(b-2) Structure change during deformation (PR method).

Fig.3 Comparison between results of MD and PR method at

$$\dot{\epsilon} = 1.0 \times 10^7 \text{ s}^{-1}, T = 150 \text{ K}.$$

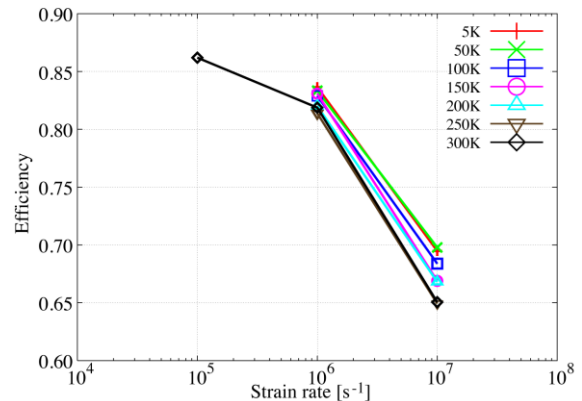


Fig.4 Efficiency of PR method.

Fig.5 より、降伏ひずみはひずみ速度が小さくなるにつれて、また、温度が高くなるにつれて、小さくなる傾向をとっている。変形挙動のひずみ速度依存性に関しては、Fig.6(a)に示すように、ひずみ速度が $1.0 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ 以上と非常に大きい場合には、非晶質化して変形が進行し、すべり変形とは別の機構になっているのがわかる。一方、ひずみ速度が $1.0 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 以下では、Fig.7(a)のような $\{111\}$ 面でのすべり変形を観測することができる。Fig.7(b)中にも、すべり変形に伴う応力の急減が確認できる。また、すべり変形においては、新しいすべり面で半転位を発生して次々と積層欠陥を生じる場合と、積層欠陥面またはそれに沿って優先的にすべり変形が進行する場合とがあるが、ひずみ速度が大きい場合は前者が(Fig.3(b), Fig.7(a))、ひずみ速度が最も小さい $\dot{\epsilon} = 1.0 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ では後者が多く見られ(Fig.8(a))、ひずみ速度によって変形挙動が変化していることがわかる。なお、本報では割愛するが、 $\dot{\epsilon} = 1.0 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ 以上の解析を行った温度範囲では、変形挙動の温度依存性は見られなかった。

4.3 低ひずみ速度における降伏ひずみの予測 本解析では、PR 法を用いることで MD 法では解析困難なひずみ速度範囲での解析を行ったが、まだ実際のひずみ速度とは大きな隔りがある。そこで、より小さいひずみ速度における降伏ひずみを、Wen et al.により提案された遷移状態理論に基づく方法⁽¹⁹⁾により評価する。この方法では、材料内で着目する熱活性化過程(本解析では転位生成)が最初に生じる頻度が最大になるひずみを評価する。一般的に応力駆動熱活性化過程において、ひずみ(応力)が小さい範囲では遷移頻度は非常に小さく、またひずみが大きくなるとそれまでに熱活性化過程を既に生じている確率が高くなるため、最初の熱活性化過程が生じる頻度は低くなり、あるひずみにおいて最大頻度が現れる。

Wen et al.によって与えられた降伏ひずみ ϵ_y を与える式を本解析モデルに適用させた式を次に示す。

$$\epsilon_y = \epsilon_0 - \frac{1}{S} \sqrt{\frac{1}{2} W_0 \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{N\nu}{S\dot{\epsilon}} \right)^2 \exp \left[2 \left(-\frac{Q_0}{kT} + (S\epsilon_0)^2 \right) \right] \right\}} \quad (1)$$

上式中の W_0 はランベルトの W 関数、 Q_0 は応力が負荷されていない状態での活性化エネルギー、 k はボルツマン定数、 T は温度、 $\dot{\epsilon}$ はひずみ速度、 N は着目する熱活性化過程のモード数(活動し得るすべり系の数 $\times 2$)、 ν は熱活性化

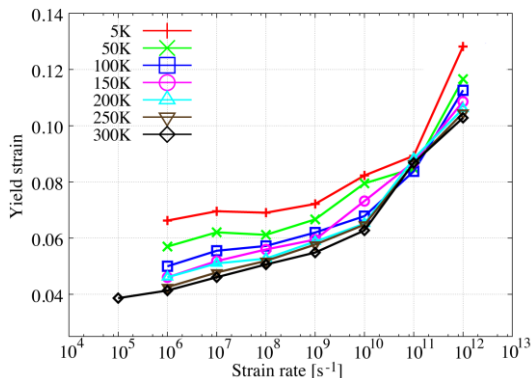
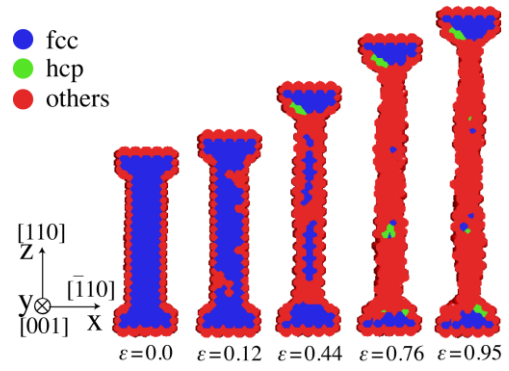
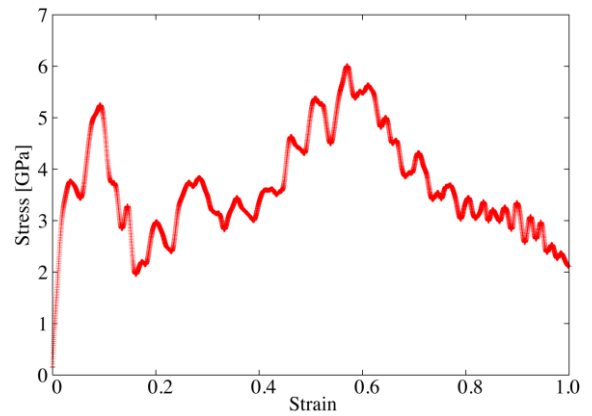


Fig.5 Influence of strain rate and temperature on yield strain.

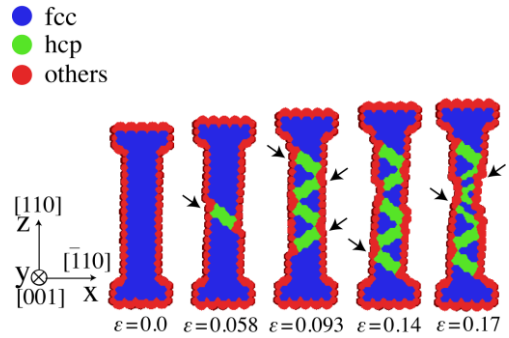


(a) Deformation behavior.

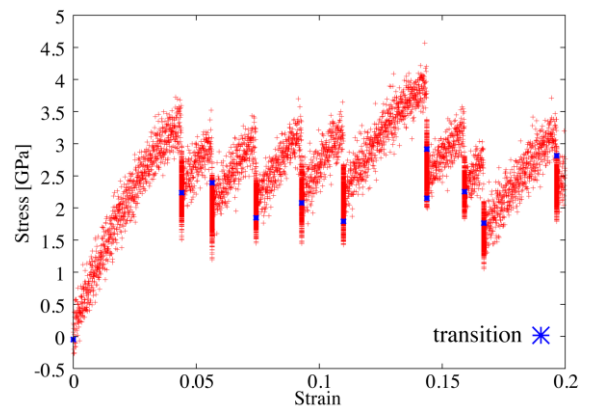


(b) Stress-strain curve.

Fig.6 Analysis results at $\dot{\epsilon} = 1.0 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$, $T = 150 \text{ K}$.

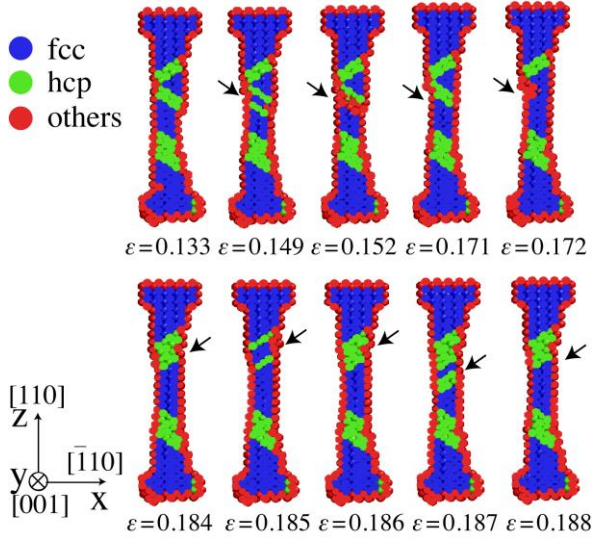


(a) Deformation behavior.

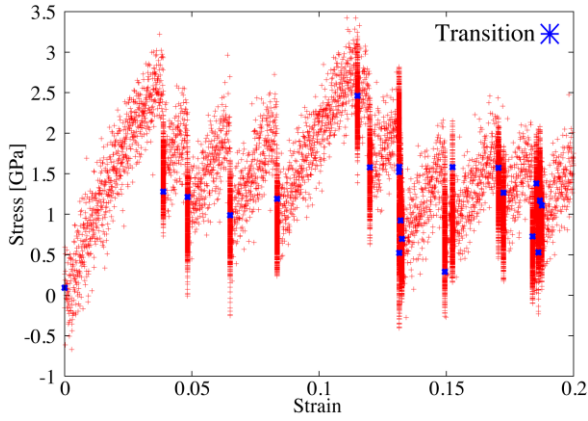


(b) Stress-strain curve.

Fig.7 Analysis results at $\dot{\epsilon} = 1.0 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$, $T = 150 \text{ K}$.



(a) Deformation behavior.



(b) Stress-strain curve.

Fig.8 Analysis results at $\dot{\epsilon}=1.0 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$, $T=300 \text{ K}$.

過程が生じる時の振動数, ε_0 , S は次式(2), (3)で表される温度 T の関数である.

$$\varepsilon_0(T) = \frac{a(T)}{2b(T)} \quad (2)$$

$$S(T) = \sqrt{\frac{b(T)\Omega}{kT}} \quad (3)$$

上式中の a , b は以下の式で表される.

$$\sigma = a(T)\varepsilon - b(T)\varepsilon^2 \quad (4)$$

$$a(T) = a_0 + a_1T + a_2T^2 \quad (5)$$

$$b(T) = b_0 + b_1T + b_2T^2 \quad (6)$$

また, 式(3)中の Ω は活性化体積であり, 温度依存性を次式で表す.

$$\Omega(T) = \alpha_0 + \alpha_1T \quad (7)$$

以上より, $a_0, a_1, a_2, b_0, b_1, b_2, Q_0, \alpha_0, \alpha_1$ が求まれば, 式(1)より, ひずみ速度 $\dot{\epsilon}$, 温度 T の関数として降伏ひずみを予測することができる.

本解析では, ひずみ速度 $1.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$, 温度 $5 \text{ K}, 50 \text{ K}, 100 \text{ K}, 150 \text{ K}, 200 \text{ K}, 250 \text{ K}, 300 \text{ K}$ での MD 法の結果を用いてフィッティングを行う. まず, 解析から得られた降伏までの応力-ひずみ曲線を式(4)によりフィッティングすることで $a_0, a_1, a_2, b_0, b_1, b_2$ を求める. その後, 式(1)を, ひずみ速度 $1.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ で MD 法により求めた降伏ひずみに温度 T の関数としてフィッティングすることで, Q_0, α_0, α_1 を得る. また, $N=68, \nu=1.0 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ を用いる.

フィッティング結果を Table 1, 2 に, 低ひずみ速度での予測曲線を Fig.9 に示す. Fig.9 より, 理論からの多少のずれはあるものの, PR 法により直接求めた結果 ($\dot{\epsilon}=1.0 \times 10^5 \sim 1.0 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$) と良く一致していることから予測結果が妥当であることがわかる. このことから, 初期降伏の機構が変化しないという仮定の下, ひずみ速度 $1.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ の結果より, 低ひずみ速度における降伏ひずみを予測することができていると考えられる. 例えば, 実際のひずみ速度である $1.0 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ では, 300 K での降伏ひずみは 0.018 (降伏応力は 1.4 GPa) 程度であり, MD 法のひずみ速度範囲で求まる値のおよそ 35% しかないことがわかる.

Table 1 Obtained parameters (parameters in Eq.(5), (6)).

a_0 [GPa]	122.1	b_1 [GPa]	861.2
a_1 [GPa/K]	-0.07121	b_2 [GPa/K]	-0.3189
a_2 [GPa/K ²]	-0.0001439	b_3 [GPa/K ²]	-0.002489

Table 2 Obtained parameters (Q_0, α_0, α_1).

Q_0 [$\times 10^{-19} \text{ J}$]	2.036
α_0 [$\times 10^{-29} \text{ m}^3$]	4.700
α_1 [$\times 10^{-32} \text{ m}^3/\text{K}$]	3.150

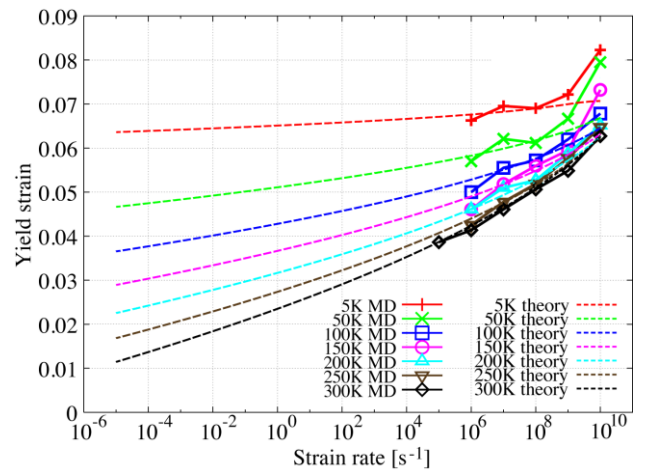


Fig.9 Prediction of yield strain at slower strain rates.

5. 結言

本論文では, MD 法と PR 法を用いて金ナノワイヤーの降伏ひずみ, 変形挙動, および, それらのひずみ速度, 温

度依存性を明らかにした。以下に、得られた結果をまとめる。

- (1) バルク状態の金属と同じように、ひずみ速度が小さく、温度が高くなるほど、降伏ひずみは小さくなった。
- (2) ひずみ速度が $1.0 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ 以上と非常に大きい場合、変形はすべり変形とは異なる非晶質化を伴う別の機構で進行した。ひずみ速度が $1.0 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 以下では、変形は転位運動で進行し、 $\{111\}$ 面でのすべり変形が観測された。また、温度 300K で、ひずみ速度を $1.0 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ まで小さくすると、積層欠陥面、および、それに沿う面でのすべり変形が多く見られるようになり、ひずみ速度によって変形挙動が変化することが確認された。
- (3) MD 法の結果より、初期降伏の機構が変化しないという仮定の下、実際のひずみ速度における降伏ひずみを予測することができた。PR 法で直接評価したひずみ速度範囲での降伏ひずみを精度良く再現していることから、より小さいひずみ速度での値も妥当であると考えられる。

また、PR 法は、低ひずみ速度による引張り変形解析等、遷移の生じる頻度の小さい現象に対して、有効であることがわかった。

参考文献

- (1) Gall, K., Diao, J. and Dunn, M.L., The Strength of Gold Nanowires, *Nano Letters*, **4**-12, 2004, pp. 2431-2436.
- (2) da Silva, E.Z., da Silva, A.J.R. and Fazzio, A., How Do Gold Nanowires Break?, *Physical Review Letters*, **87**-25, 2001, Paper No.256102.
- (3) Rodrigues, V. and Ugarte, D., Real-time imaging of atomic process in one-atom-thick metal junctions, *Physical Review B*, **63**-7, 2001, Paper No.073405.
- (4) Ohnishi, H., Kondo, Y. and Takayanagi, K., Quantized conductance through individual rows of suspended gold atoms, *Nature*, **395**, 1998, pp. 780-783.
- (5) Yanson, A.I., Bolinger, G.R., van den Brom, H.E., Agrait, N., van Ruitenbeek, J.M., Formation and manipulation of a metallic wire of single gold atoms, *Nature*, **395**, 1998, pp. 783-785.
- (6) Lieber, C.M., Nanoscale Science and Technology: Building a Big Future from Small Things, *MRS Bulletin*, **28**, 2003, pp. 486-491.
- (7) Kovtyukhova, N.I. and Mallouk, T.E., Nanowires as Building Blocks for Self-Assembling Logic and Memory Circuits, *Chemistry European Journal*, **8**-19, 2002, pp. 4354-4363.
- (8) Park, H.S. and Zimmerman, J.A., Modeling inelasticity and failure in gold nanowires, *Physical Review B*, **72**-5, 2005, Paper No.054106.
- (9) Bollinger, G.R., Bahn, S.R., Agrait, N., Jacobsen, K.W. and Vieira, S., Mechanical Properties and Formation Mechanisms of a Wire of Single Gold Atoms, *Physical Review Letters*, **87**-2, 2001, Paper No.026101.
- (10) Sørensen, M.R., Brandbyge, M. and Jacobsen, K.W., Mechanical deformation of atomic-scale metallic contacts: Structure and mechanisms, *Physical Review B*, **57**-6, 1998, pp. 3283-3294.
- (11) Liang, W. and Zhou, M., Atomistic simulations reveal shape memory of fcc metal nanowires, *Physical Review B*, **73**-11, 2006, Paper No.115409.
- (12) Wen, Y.H., Wang, Q., Liew, K.M., Zhu, Z.Z., Compressive mechanical behavior of Au nanowires, *Physics Letters A*, **374**, 2010, pp. 2949-2952.
- (13) Voter, A.F., Parallel replica method for dynamics of infrequent events, *Physical Review B*, **57**-22, 1998, pp. 985-988.
- (14) Uberuaga, B.P., Stuart, S.J. and Voter, A.F., Parallel replica dynamics for driven systems: Derivation and application to strained nanotubes, *Physical Review B*, **75**-1, 2007, Paper No.014301.
- (15) Heffelfinger, G.S., Parallel atomistic simulations, *Computer Physics Communications*, **128**, 2000, pp. 219-237.
- (16) Kondo, Y. and Takayanagi, K., Gold Nanobridge Stabilized by Surface Structure, *Physical Review Letters*, **79**-18, 1997, pp. 3455-3458.
- (17) Cai, J. and Ye, Y.Y., Simple analytical embedded atom potential model including a long range force for fcc metals and their alloys, *Physical Review B*, **54**-12, 1996, pp. 8398-8410.
- (18) Honeycutt, J.D. and Andersen, H.C., Molecular Dynamics Study of Melting and Freezing of Small Lennard-Jones Clusters, *Journal of Physical Chemistry*, **91**-19, 1987, pp. 4950-4963.
- (19) Wen, M., An, B., Fukuyuyama, S., Yokogawa, K. and Ngan, A.H.W., Thermally activated model for tensile yielding of pristine single-walled carbon nanotubes with nonlinear elastic deformation, *Carbon*, **47**, 2009, pp. 2070-2076.