

Propiedades Mecánicas de Nanocables de Pd con H

Crespo Eduardo Ariel^{1 2}, Ruda Margarita María³, Ramos Susana Beatriz⁴, Bringa Eduardo Marcial^{5 7 6}

¹ Departamento de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Comahue

² Facultad Regional Neuquén FRN UTN

³ Centro Atómico Bariloche (CNEA)

⁴ Instituto de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Procesos, Biotecnología y Energías Alternativas (CONICET UNCo)

⁵ Facultad de Ingeniería, Universidad de Mendoza

⁶ Centro de Nanotecnología Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad Mayor de Chile

⁷ Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)

A pesar de que existen numerosos estudios sobre el efecto de hidrógeno en las propiedades mecánicas en materiales convencionales, esto es menos conocido en el caso de nanomateriales, en particular nanocables (NCs), que presentan una alta relación superficie/volumen. Por otro lado, la microestructura compleja involucrada en estos casos hace que el entendimiento a nivel fundamental de los mecanismos que intervienen en las propiedades mecánicas en presencia del hidrógeno resulte aún motivo de debate [1]. Los NCs pueden considerarse como estructuras cuasi-unidimensionales con ordenamiento cristalino en forma de cables con diámetros nanométricos. Los NCs metálicos, en particular los de Pd, son de interés en aplicaciones tecnológicas, para el desarrollo de componentes activos en sensores de H₂ en la búsqueda de dispositivos más pequeños que permitan detectar pequeñas cantidades de H a muy bajas presiones. En este trabajo realizamos simulaciones de dinámica molecular sobre NCs de Pd para investigar los efectos del H en el comportamiento mecánico en la nanoescala. En estudios previos, hemos investigado este tema considerando NCs de diámetros de hasta 6 nm. Aquí, continuando ese trabajo, avanzamos y profundizamos dicho estudio, considerando NCs de mayor diámetro, y analizando la influencia de la presencia de H absorbido. Utilizamos el software LAMMPS y potenciales del tipo de átomo embebido (EAM), para realizar ensayos de tensión-deformación, a $T = 300$ K, en NCs de Pd monocristalino de 8 nm de diámetro y para dos orientaciones cristalinas axiales [001] y [111]. La longitud de los NCs es aproximadamente 4 veces el diámetro, pero se consideran condiciones periódicas a lo largo del NC. Repetimos los ensayos agregando H a las muestras en distintas concentraciones, para analizar efectos de segregación, y su influencia en el módulo de Young y punto de fluencia. Para distintas etapas de deformación con y sin H, se identifica la evolución de los defectos presentes, tales como dislocaciones, fallas de apilamiento y maclas. Resultados preliminares indican que para un dado diámetro del NC, tanto el módulo de Young como la tensión de fluencia decrecen con el contenido de H. Además, encontramos que en general estas propiedades mecánicas decrecen su valor con el aumento del diámetro del NC. Esto es similar a lo observado en el caso de membranas nano policristalinas de Pd previamente estudiadas [2]. Para el rango de concentraciones de H estudiado ($H/Pd=0$ a 0.4) se observa una alta concentración de H en la superficie y subsuperficie, sugiriendo una fase hidruro para las concentraciones más altas.

[1] S. Yin, G. Cheng, T-H Chang, G Richter, Y. Zhu, Huajian Gao. Nature Communications 10,2004 (2019).

[2] M.L. Alí, E.A. Crespo, M. Ruda, E.M. Bringa, S.B. Ramos, IJHE 45, 15230 (2020).