

## Propiedades Mecánicas de Nanocables de Zr

Crespo E A<sup>1 2</sup>, González J M<sup>3</sup>, Orozco M A<sup>1 4</sup>, Riveaud L<sup>4</sup>

<sup>1</sup> *Universidad Tecnológica Nacional (UTN), Facultad Regional del Neuquen (FRN)*

<sup>2</sup> *Universidad Nacional del Comahue (UNComa), Facultad de Ingeniería (FI), Dpto. de Física*

<sup>3</sup> *Universidad Nacional de La Plata (UNLP), CONICET CIC Instituto Argentino de Radioastronomía*

<sup>4</sup> *Universidad Nacional del Comahue (UNComa), CONICET Instituto de Investigación en Tecnologías y Ciencias de la Ingeniería IITCI*

Los NCs de Zr resultan de gran interés en aplicaciones nanotecnológicas como por ejemplo en sensores, circuitos, medicina, etc. Se trata de estructuras delgadas de Zr que pueden considerarse cuasi-unidimensionales puesto que dos de sus dimensiones resultan nanométricas. Los NCs de Zr presentan ordenamiento cristalino (hcp) y una alta relación superficie/volumen dando lugar a propiedades físicas y químicas inusuales. En vista a su manipulación resulta de interés conocer sus propiedades. En este trabajo estudiamos las propiedades mecánicas de NCs de Zr. Para ello realizamos simulaciones de dinámica molecular (DM), utilizando el software LAMMPS y potenciales del tipo de átomo embebido (EAM), para realizar ensayos de tensión-deformación a 200, 300, y 400K, en NCs de Zr monocristalino de 2 a 6 nm de diámetro y para dos orientaciones cristalinas axiales. La longitud de los NCs es aproximadamente 4 veces el diámetro. Se determinan módulos de Young y puntos de fluencia. Para distintas etapas de deformación de las curvas de tensión-deformación, se identifica la evolución de los defectos presentes, tales como dislocaciones, fallas de apilamiento y maclas.