



PREDICCIÓN DE LA MICRO DUREZA VICKERS EN MATERIALES SUPERDUROS DIAMANTE Y OTROS COMPARADOS CON LOS OBTENIDOS EN TiO₂ POROSO Y OXIDO DE ZINC

B. Uberti⁽¹⁾, M. A. Caravaca^{(1)*}, J. C. Miño⁽¹⁾, L. Valdez⁽²⁾, R. Barrios D'Ambra⁽¹⁾
y R. A. Casali⁽²⁾

⁽¹⁾Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional del Nordeste. Resistencia. Argentina.

⁽²⁾Facultad de Ciencias Exactas, Naturales y Agrimensura. Universidad Nacional del Nordeste, Corrientes. Argentina.

*Correo Electrónico (autor de contacto): mac@ing.unne.edu.ar

RESUMEN

Los materiales superduros son aquellos con dureza Vickers superior a 40 GPa. Son conocidos como tales el diamante y el nitruro de boro cúbico. Dado que los materiales superduros, tienen muchas propiedades como la resistencia a la compresión, índice de refracción e inercia química superiores junto con la más alta dureza, para predecir esta última se prueba una metodología que combina las propiedades elásticas obtenidas en materiales cristalinos por medio de cálculos mecánico cuánticos con el método de elementos discretos (DEM) utilizado para describir la fractura en materiales frágiles [1]. Nuestra metodología ha mostrado ser eficiente en la predicción de durezas de TiO₂, en la estructura rutilo y ortorrómbica de alta presión, si se compara con los resultados experimentales y de otros métodos [2]. También ha probado ser confiable en materiales frágiles y de baja dureza como el caso de caseterita SnO₂. Los resultados de este trabajo muestran que es posible ampliar el rango de aplicabilidad de esta metodología en la evaluación de la micro-dureza a materiales superduros y al caso de titania porosa y óxido de cinc. Dado que la dureza está relacionada con los módulos de corte y éstos con las propiedades como lubricantes sólidos, esta metodología, en una primera aproximación, se podría usar para el diseño de tales materiales.

ABSTRACT

Superhard materials are those with Vickers hardness greater than 40 GPa. They are known as such diamond and cubic boron nitride. Since the superhard materials, have many superior properties such as compressive strength, refractive index and chemical inertness with the highest hardness, to predict latter we test a methodology which combines the elastic properties in crystalline materials obtained via quantum mechanical calculations with discrete element method (DEM) used to describe the fracture in brittle material [1]. Our methodology has proven to be efficient in predicting hardness of TiO₂ in the rutile structure and orthorhombic high pressure, if compared with the experimental results and other methods. It has proven reliable too, in brittle materials with low hardness as caseterita SnO₂ [2]. The results of our study show that it is possible to extend the range of applicability of this methodology in assessing the micro-hardness of superhard materials. Since hardness is related to the shear modules and these with the properties as solid lubricants, results coming from this kind of calculation could be used as a first approximation to the design of such materials.

REFERENCIAS

1. L. E. Kostaski, I. Iturrioz, R. G. Batista, A. P. Cisilino, "The truss-like discrete element method in fracture and damage mechanics"; Engineering Computations, Vol. 6 (2011) p. 765-787.

2. M. A. Caravaca, L. E. Kostasiki, J. C. Miño, R. Barrios D'Ambra, B. Uberti, R. A. Casali, "Model for Vickers microhardness prediction applied to SnO₂ and TiO₂ in the normal and high pressure phases"; Journal of the European Ceramic Society, Vol. 34 (2014), p. 3791-3800.

TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO: *T18*

PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER): *O (oral)*