



Cálculo por primeros principios del esfuerzo ideal triaxial y dureza de los compuestos XN (X=Pt, Pd)

Juan Carlos Moreno Hernández¹, José Humberto Camacho García¹, María de Lourdes Ruiz¹.

¹FIQ-BUAP, Apdo. Postal J-48, Puebla, Pue. 72570, México
juanmoreno9410@gmail.com

El esfuerzo ideal de un material es el esfuerzo en el cual un cristal perfecto (a T= 0 K) llega a ser mecánicamente inestable, mientras la dureza de un material se define como la resistencia intrínseca a la deformación cuando una fuerza es aplicada. En el presente trabajo, estudiamos el esfuerzo hidrostático (a compresión), inestabilidades elásticas y la dureza de la aleación XN con X =Pt, Pd; en el marco de la Teoría de Funcionales de la Densidad con el código CASTEP [1]. Las condiciones de estabilidad para un sistema cúbico bajo carga hidrostática son [2]:

$$1)C_{11} + 2C_{12} - \sigma > 0$$

$$2)C_{11} - C_{12} + 2\sigma > 0$$

$$3)C_{44} + \sigma > 0,$$

donde C_{ij} representan las constantes elásticas y σ representa el esfuerzo aplicado. La condición (1) corresponde a la desaparición del módulo de compresibilidad B_0 . La segunda condición de estabilidad (2) es propia de una inestabilidad de esfuerzo al corte cuando el sistema reduce su simetría hacia la tetragonal u ortorrómbica. Similarmente, la última condición de estabilidad (3) es propia de otra inestabilidad de esfuerzo al corte relacionado con el módulo C_{44} . Además se ocupará el esquema de Chen [3] para el cálculo de la dureza, mediante la siguiente ecuación:

$$H_v = 2(KG)^{0.585} - 3$$

Donde G es el módulo de corte, K es la relación de Pugh y esta se define como $K=(G/B)$ y B es el módulo de bulto.

Referencias:

[1] Segall, M. D., Lindan, P. J., Probert, M. A., Pickard, C. J., Hasnip, P. J., Clark, S. J., & Payne, M. C. First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code. *J. Phys. Condens. Matter.* **2002**, *14*, 2717.

[2] Černý, M., & Pokluda, J. Stability of fcc crystals under hydrostatic loading. *J. Alloys Compd.* **2004**, *378*.159-162.

[3] Chen, X. Q., Niu, H., Li, D., & Li, Y. Modeling hardness of polycrystalline materials and bulk metallic glasses. *Intermetallics.* **2011**, *19*, 1275-1281.