



ANÁLISIS COMPUTACIONAL DE PELÍCULAS DE TiVN EN UN SISTEMA CRISTALINO FCC

Harold Duque⁽¹⁾, Carlos Rodríguez⁽¹⁾, Fernando Mesa^{(1)*}

⁽¹⁾Departamento de Matemáticas, Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia.

*Correo Electrónico: femesa@utp.edu.co

RESUMEN

En este trabajo se describen las celdas tipo fcc del compuesto TiVN, simuladas en el software Gaussian 98. El parámetro de red fue obtenido de los patrones de difracción mediante el método Rietveld [1]. Para un porcentaje total de Vanadio de 11,11%, de titanio de 37,04% y nitrógeno 51,85%, los átomos de vanadio sustituyen átomos de Titanio en la celda, ubicados de manera aleatoria, con dos distribuciones diferentes [2]. La distribución de carga es coherente con la electronegatividad de los elementos presentes, la superficie de densidad total de electrones es continua a través de toda la celda, la densidad de electrones alfa y beta presenta puntos anómalos debido a la ubicación en las esquinas de la configuración de los átomos de vanadio y al efecto borde.

ABSTRACT

In this paper fcc cells type are described for the TiVN compound, simulated in the Gaussian 98. The lattice parameter was obtained from the diffraction patterns by means of the Rietveld method [1]. For a total percentage of vanadium of 11,11%, of titanium of 37,04% and nitrogen 51,85%, the vanadium atoms substitute atoms of titanium in the cell, located in a randomized way, with two different distributions [2]. The charge distribution, total electron density and the density of alpha and beta electrons were evaluated. The charge distribution is coherent with the electronegativity of the present elements, the surface of total electron density is continuous through the whole cell and the density of alpha and beta electrons shows anomalous points due to location of vanadium atoms in the corners of the configuration and the edge effect.

REFERENCIAS

1. X. Zeng, T. Yamaguchi, K. Nishio, “Characteristics of Ti(C, N)/TiB composite layer on Ti–6Al–4V alloy produced by laser surface melting”, *Optics & Laser Technology*, Vol 80, (2016) p.p. 84–91.
2. C. Montero-Ocampo, E.A. Ramírez-Ceja, J.A. Hidalgo-Badillo, “Effect of codeposition parameters on the hardness and adhesion of TiVN coatings”, *Ceramics International*, Vol 41 (2015) p.p. 11013-11023

TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO: T18

PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER): P (Póster)