

## ESTUDIO TERMO-MECÁNICO DE Ti(C,N) MEDIANTE SIMULACIONES DE DINÁMICA MOLECULAR

Alexander Barrera<sup>1\*</sup>, Griselda García<sup>1</sup>, Isabel Arias<sup>1</sup>, Carlos Espinoza<sup>1</sup>, Esteban Ramos-Moore<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile

\*Correo Electrónico: arbarrera@uc.cl

### Resumen

Dentro del marco del estudio de los recubrimientos empleados en herramientas de corte industrial, y en particular, de las películas delgadas de Ti(C,N), se requieren nuevos conocimientos para estimar y controlar los efectos de tensiones debido a diversos factores [1]. Los principales factores que afectan al desempeño y duración del material en términos de tensiones están asociados a diferencias de las constantes térmicas y elásticas de los distintos materiales que se utilizan en los sistemas de recubrimientos [2]. El Ti(C,N) puede estar compuesto por distintas concentraciones de carbono y nitrógeno, dependiendo de las condiciones de síntesis [3], presentando cambios significativos de sus propiedades térmicas y elásticas en función de las concentraciones relativas. En la literatura existen divergencias sobre los valores de las constantes elásticas y térmicas, tanto entre trabajos experimentales, como teóricos, impidiendo así comparar distintos trabajos y discriminar sobre las verdaderas características de los recubrimientos de Ti(C,N).

Con el fin de comprender el comportamiento termo-mecánico y extraer constantes térmicas y elásticas referenciales del Ti(C,N), este trabajo implementa simulaciones de dinámica molecular mediante el software LAMMPS [4], empleando el potencial MEAM[5] tanto en sistemas de TiC y TiN, como sistemas de mezcla del estilo  $Ti(C_x, N_{1-x})$ , como el representado en la Figura 1. Para ello se desarrollaron nuevos parámetros que permiten simular el sistema Ti(C,N) para cualquier concentración de carbono y nitrógeno. Los resultados de las simulaciones son comparados con datos experimentales medidos con difracción de rayos X en función de la temperatura y otros obtenidos mediante simulaciones de densidad funcional desde la literatura.

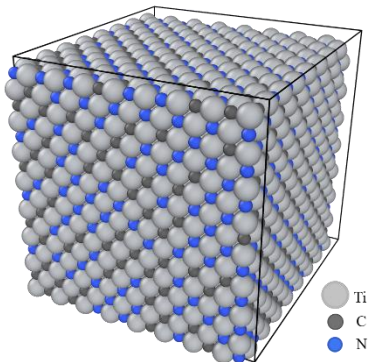


Figura 1: Sistema de bulto de  $Ti(C_{0,5}, N_{0,5})$  de 8x8x8 celdas unitarias

Este trabajo permite comprender de mejor manera el comportamiento térmico y mecánico de sistemas de recubrimientos que utilizan Ti(C,N), ayudando así el desarrollo de nuevo conocimiento relevante para la optimización de herramientas de corte.

Agradecimientos: Se agradece a la infraestructura de supercómputo del NLHPC (ECM-02) de la Universidad de Chile y el clúster computacional del Instituto de Física de la Pontificia Universidad Católica de Chile.

### Referencias

- [1] Abadias, G. *et al.*, Review Article: Stress in thin films and coatings: Current status, challenges, and prospects., *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 36(2), 2018
- [2] Scholl, M., Abrasive wear of titanium nitride coatings. *Wear*, 203-204, 57-64, 1997.
- [3] Ramos-Moore, E. *et al.*, Investigations on Thermal Stresses of a Graded Ti(C,N) Coating Deposited on WC-Co Hardmetal. *Advanced Materials Research*, 996, 848-854, 1997.
- [4] Thompson, A. P. *et al*, LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic meso, and continuum scales. *Comp. Phys. Comm.* 271, 108171, 2022.
- [5] Kim, Y.-M. & Lee, B.-J., Modified embedded-atom method interatomic potentials for the Ti-C and Ti-N binary systems. *Acta Materialia*, 56(14), 3481-3489, 2008.