

Sumario

Anexo A _____	2
A.1. Tabla de parámetros cuánticos de los aleantes _____	2
Anexo B _____	3
B.1. Tabla de patrones de difracción _____	3



Anexo A

A.1. Tabla de parámetros cuánticos de los aleantes

En la siguiente tabla se muestran los parámetros cuánticos fundamentales para el diseño teórico de aleaciones de Ti, según el método de Morinaga y colaboradores, y según el método de Arciniegas, el utilizado en el presente proyecto para el diseño de las nuevas aleaciones de estudio.

Element	Values obtained in the present work		Values obtained by Morinaga and co-workers	
	<i>Bo</i>	<i>OE</i> (hartree)	<i>Bo</i>	<i>Md</i> (eV)
O	0.0864	0.19248	–	–
Al	0.5277	0.16041	2.426	2.200
Si	0.5163	0.14593	2.561	2.200
Ti	0.6041	0.15454	2.790	2.447
V	0.6498	0.15438	2.805	1.872
Cr	0.6299	0.15445	2.779	1.478
Mn	0.5710	0.15305	2.723	1.194
Fe	0.4482	0.15270	2.651	0.969
Co	0.3856	0.15244	2.529	0.807
Ni	0.3368	0.15137	2.412	0.724
Cu	0.3083	0.14949	2.114	0.567
Ga	0.5227	0.11182	–	–
Ge	0.5009	0.15247	–	–
Zr	0.6827	0.17708	3.086	2.934
Nb	0.6207	0.14741	3.099	2.424
Mo	0.5768	0.14729	3.063	1.961
Pd	0.3601	0.14653	2.208	0.347
Ag	0.3288	0.14386	2.094	0.196
Sn	0.5182	0.14086	2.283	2.100
Hf	0.6698	0.14857	3.110	2.975
Ta	0.6229	0.14723	3.144	2.531
Pt	0.3685	0.14787	2.252	0.146
Au	0.2916	0.13708	1.953	0.258
Bi	0.5234	0.14607	–	–

Tabla A.1.1. Tabla de los parámetros cuánticos, *Bo*, *Md*, *BO* y *OE*, correspondientes a cada posible elemento aleante según el método de Morinaga o Arciniegas, respectivamente.



Anexo B

B.1. Tabla de patrones de difracción

En este anexo se muestra la tabla correspondiente a los patrones de difracción obtenidos a través del programa *Carine Crystallography v. 3.0.* y que se han utilizado para indexar las fases presentes en todos los difractogramas.

Estructura α'' (ortorrómbica)				
2 θ (°)	Intensidad (%)	h	k	l
18,39	100,00	0	1	0
19,15	90,32	0	0	1
26,68	75,48	0	1	1
28,49	31,40	1	0	0
34,13	37,11	1	1	0
34,56	35,72	1	0	1
37,28	14,14	0	2	0
38,87	12,39	0	0	2
39,43	47,36	1	1	1
42,24	18,91	0	2	1
43,32	17,38	0	1	2
47,58	12,60	1	2	0
48,89	11,45	1	0	2
51,74	18,70	1	2	1
52,67	17,52	1	1	2
54,95	7,50	0	2	2
57,3	3,21	0	3	0
58,97	2,88	2	0	0
59,88	2,72	0	0	3
60,99	5,07	0	3	1
62,33	4,67	2	1	0
62,6	4,59	2	0	1
63,05	8,93	1	2	2
63,21	4,42	0	1	3
65,22	3,93	1	3	0
65,85	7,57	2	1	1
67,62	3,42	1	0	3
68,67	6,46	1	3	1
70,76	5,77	1	1	3
71,41	2,79	0	3	2
71,87	2,72	2	2	0
72,69	2,61	0	2	3
72,9	2,58	2	0	2
75,18	4,61	2	2	1
75,94	4,45	2	1	2
78,59	3,94	1	3	2
79,47	0,95	0	4	0



79,84	3,73	1	2	3
82,68	1,66	0	4	1
83,44	0,81	0	0	4
84,85	3,06	2	2	2
86,38	1,45	0	1	4
86,47	1,45	1	4	0
86,8	1,43	2	3	0
87,59	1,39	0	3	3
89,01	1,33	2	0	3
89,64	2,61	1	4	1
89,98	2,59	2	3	1
90,39	1,28	1	0	4
91,94	2,45	2	1	3
92,22	1,21	0	4	2
93,32	2,36	1	1	4
94,53	2,29	1	3	3
95,16	1,13	0	2	4
95,17	0,56	3	0	0
98,12	1,06	3	1	0
98,37	1,06	3	0	1
99,2	2,08	1	4	2
99,53	2,07	2	3	2
100,78	2,02	2	2	3
101,34	2,01	3	1	1
102,19	1,98	1	2	4
106,08	0,47	0	5	0
107,12	0,94	3	2	0
107,56	0,93	2	4	0
108,15	0,93	3	0	2
108,39	0,93	0	4	3
109,41	0,92	0	5	1
110,21	0,92	0	3	4
110,48	1,83	3	2	1
110,92	1,82	2	4	1
111,26	1,82	3	1	2
112,58	0,45	0	0	5
113,46	0,90	1	5	0
114,92	1,80	2	1	4
115,78	0,90	0	1	5
115,89	1,80	1	4	3
116,26	1,80	2	3	3
116,96	1,80	1	5	1
117,81	1,81	1	3	4
119,89	0,91	0	5	2

Estructura β (bcc)				
2θ (°)	Intensidad (%)	h	k	l
38,43	100,00	1	1	0
55,48	14,08	2	0	0
69,5	24,00	2	1	1
82,33	6,56	2	2	0
94,77	8,87	3	1	0
107,44	2,42	2	2	2



Estructura α' (hcp)				
2 θ (°)	Intensidad (%)	h	k	l
18,95	100	0	0	1
35,1	55,1	1	0	0
38,44	13,8	0	0	2
40,18	72	1	0	1
53,02	27,6	1	0	2
59,18	3,1	0	0	3
62,96	7,3	2	-1	0
66,4	11,9	2	-1	1
70,7	9,4	1	0	3
74,17	3,9	2	0	0
76,24	7,1	2	-1	2
77,37	6,7	2	0	1
86,79	4,6	2	0	2

Estructura ω (hcp)				
2 θ (°)	Intensidad (%)	h	k	l
22,05	100,00	1	0	0
31,7	12,25	0	0	1
38,7	19,99	2	-1	0
38,96	39,13	1	0	1
44,98	12,17	2	0	0
50,86	15,82	2	-1	1
56,08	11,06	2	0	1
60,81	8,15	3	-1	0
66,23	0,98	0	0	2
70,04	2,38	3	0	0
70,21	9,44	3	-1	1
70,73	4,59	1	0	2
78,92	3,09	3	0	1
79,42	3,02	2	-1	2
83	1,31	4	-2	0
83,66	2,55	2	0	2
87,21	2,24	4	-1	0
91,57	1,97	4	-2	1
95,77	3,54	4	-1	1
96,26	3,50	3	-1	2
99,83	0,82	4	0	0
104,8	1,52	3	0	2
108,66	1,47	4	0	1
110,06	0,24	0	0	3
112,97	1,44	5	-2	0
114,59	1,43	1	0	3
118,36	1,44	4	-2	2

Tabla B.1.1. Tabla global de los patrones de difracción utilizados para la indexación de las fases de las nuevas aleaciones. En cada tipo de fase se detalla el ángulo al que aparece el pico de cada plano, así como su intensidad.

