



## ESTUDIO COMPUTACIONAL DEL COMPORTAMIENTO ELECTROQUÍMICO DE MATERIALES FERROSOS UTILIZANDO GROMACS

**Mariana Bárcenas Castañeda**

*TecNM / Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec  
mbarcenas@tese.edu.mx*

**Francisco Javier Pérez Ramírez**

*TecNM / Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec  
fjpr512@gmail.com*

**María de la Luz Delgadillo Torres**

*TecNM / Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec  
ldelgadillo@tese.edu.mx*

**María de los Ángeles Hernández Vargas**

*TecNM / Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec  
maria\_vargas@tese.edu.mx*

**Víctor Augusto Castellanos Escamilla**

*TecNM / Instituto Tecnológico de Tlalnepantla  
victor.ce@tlalnepantla.tecnm.mx*

### Resumen

*El propósito de este trabajo es presentar un estudio computacional para determinar la resistencia a la corrosión de un acero especial. Se describió a través de simulación molecular, el comportamiento electroquímico y superficial de materiales ferrosos recubiertos por la técnica de borurado por empaquetamiento. Se utilizó la técnica de dinámica molecular con el software GROMACS para realizar los cálculos, para lo cual se desarrolló un modelo del sistema de estudio. Se simuló un acero especial borurado y se evaluó la difusión del boro como indicador de la resistencia a la corrosión.*

*Palabras clave: GROMACS, Dinámica molecular, borurado, tratamiento térmico.*

Durante su uso, en la gran mayoría de los materiales ferrosos la superficie es sin duda la parte más importante. Durante mucho tiempo se han investigado las propiedades de los materiales ferrosos y su desgaste

debido al contacto y su resistencia a la corrosión, lo que ha llevado a desarrollar métodos, técnicas, recubrimientos e inhibidores que reduzcan la pérdida económica por fallas en las partes



mecánicas de maquinaria, herramientas, tuberías, equipos, etc. Los materiales metálicos tradicionales a menudo son insuficientes para cumplir con los requerimientos establecidos para su uso, lo que conduce a la disminución de su vida útil.

El uso de recubrimiento duro para mejorar las propiedades de la capa superficial es un método eficaz para proteger al sustrato de los efectos ambientales y mejorar su resistencia a la corrosión. Este tipo de recubrimientos poseen alta dureza, bajo coeficiente de fricción, baja porosidad, resistencia al desgaste y alta resistencia a la corrosión. Su uso radica en incrementar la durabilidad de la superficie expuesta a través de producir una capa superficial resistente al desgaste por diferentes factores. Algunos revestimientos duros son el nitruro, carburo, boruro y carbonitruro de metal de transición (Sukru y Taktak, 2007). Cuando los materiales ferrosos con revestimientos de boruro se utilizan en entornos corrosivos como las industrias sanitarias y de alimentos.

El borurado es un proceso termoquímico que mejora las propiedades mecánicas de una superficie metálica. El boro es un elemento no metálico que se encuentra en la naturaleza como boratos. Diversas investigaciones se han llevado a cabo para estudiar las propiedades de resistencia a la corrosión de los materiales con revestimiento duro mediante técnicas experimentales como polarización lineal, potencial de densidad de corriente y método de espectroscopia de impedancia electroquímica (Tavakoli *et al.*, 2010; Kariofillis *et al.*, 2006; Campos *et al.*, 2007; Günen, 2020).

La técnica de polarización lineal electroquímica es ampliamente utilizada para describir la eficiencia del recubrimiento, sin embargo, estos métodos no dejan completamente claro cuáles son los factores que rigen la destrucción del revestimiento en condiciones de aplicación específicas. Además, las técnicas de caracterización de las superficies después del ataque requieren de equipos sofisticados de alto costo, al igual que su operación y mantenimiento. Ante ello, se han utilizado técnicas computacionales y desarrollo de modelos para describir la resistencia a la corrosión (Khaled y Amin, 2009; Tavakoli y Khoie, 2010; Xie *et al.*, 2015; Verma *et al.*, 2018). Los trabajos están enfocados mayormente al estudio de la adsorción de moléculas de inhibidor como una medida de la resistencia a la corrosión. En este sentido, el presente trabajo estudia la difusión del boro sobre la superficie metálica como indicativo de la resistencia a la corrosión

### Métodos computacionales

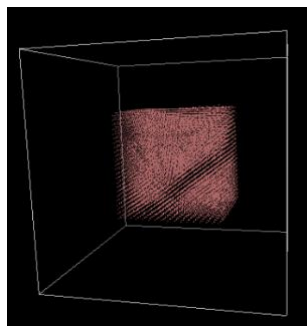
Se utilizó la técnica de dinámica molecular para realizar el estudio computacional y descripción del sistema de estudio. La dinámica molecular es una técnica de simulación molecular que se utiliza para calcular el equilibrio y las propiedades de transporte de sistemas cuyos componentes obedecen las leyes de la mecánica clásica.

Para el desarrollo de las pruebas se construyó un sistema modelo integrado por: superficie metálica (hierro, Fe) + boro.

Para realizar el estudio de la difusión del boro sobre la superficie metálica, se eligió un modelo de Fe-110. En la figura 1, se reporta la superficie construida utilizando la herramienta de CHARMM-GUI (Jo *et al.*, 2008; Brooks *et al.*, 2009; Lee *et al.*, 2016), que consiste en una estructura de Fe-110 rodeada de vacío.

Posteriormente, se incluyó el boro en la caja de simulación.

Se utilizó una caja de simulación cubica con condiciones de frontera en las tres direcciones, en un ensamble NVT a una temperatura de 298.15K. El sistema fue equilibrado con al menos  $1.25 \times 10^5$  pasos de simulación y las propiedades se calcularon sobre 10 ns ( $5 \times 10^6$  pasos de simulación).



**Figura 1.** Superficie metálica de Fe-110 rodeada de vacío..

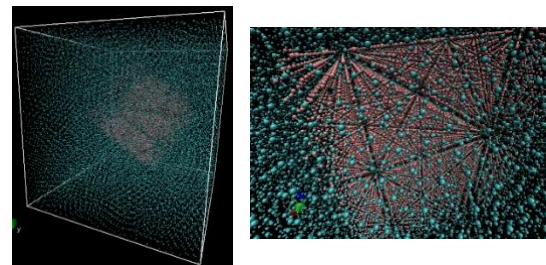
### Cálculos de simulación

Para realizar la dinámica molecular que describe la difusión del boro en la superficie metálica se utilizó el programa GROMACS, para lo que es necesario la construcción de las topologías y archivos de entrada: i) archivo que contiene la estructura molecular del sistema (.gro), ver Figura 2, lado izquierdo; ii) topología (incluye campo de fuerza y sus parámetros, características estructurales del sistema, entre otros); iii) archivo .mdp (contiene parámetros para correr la simulación).

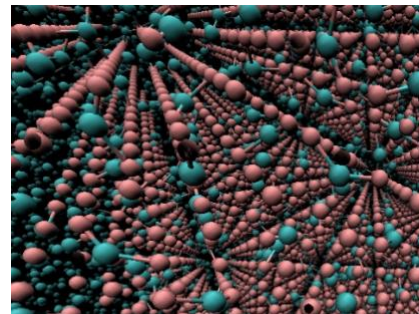
Para la construcción de la topología del boro se utilizó la plataforma Atb (Malkde *et al.*, 2011). Se tomo como base la topología generada en Atb para construir la topología final del sistema, ya que, el boro es un elemento que no se encuentra en la base de datos de GROMACS. Se trabajo con los

archivos fuente para incluir el componente y construir la topología final del sistema.

Con el sistema construido se corrió la dinámica molecular para un tiempo de 10 ns. En la figura 2, lado derecho, se muestra la configuración final, donde se observa la difusión del boro en los espacios intersticiales de la estructura ferrosa. En la figura 3, se reporta un acercamiento de la configuración fina, donde la formación de una capa de  $Fe_2B$  es notoria.



**Figura 2.** Lado izquierdo: Sistema de estudio (Fe-110 + B). Lado derecho: Acercamiento a borde de estructura Fe-110.



**Figura 3.** Acercamiento a caja de simulación de sistema de estudio: Fe-110 + B.

En la figura 4 se reporta la energía del sistema a lo largo de la simulación. En promedio el sistema presenta una energía de  $2.22 \times 10^5$  kJ/mol. Se observa la estabilidad del sistema durante el estudio y por lo tanto la confiabilidad del reporte de propiedades.

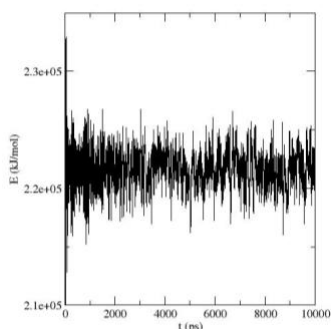


Figura 4. Energía del sistema.

## Conclusiones

Se presenta un estudio de la difusión de boro sobre una superficie metálica, para elucidar la resistencia a la corrosión del material borurado. Se construyó un sistema representativo de hierro con el modelo 110 más moléculas de boro, y se corrió una dinámica molecular. Se demostró que el boro se difunde en los espacios intersticiales de la superficie de Fe, formando una capa del tipo Fe<sub>2</sub>B, por lo tanto, se concluye que el material presentará una adecuada resistencia a la corrosión.

## Referencias

- Brooks, B.R.; Brooks III, C.L.; MacKerell, A.D. Jr.; Nilsson, L.; Petrella, R.J.; Roux, B.; Won, Y.; Archontis, G.; Bartels, C.; Boresch, S.; Caflisch, A.; Caves, L.; Cui, Q.; Dinner, A.R.; Feig, M.; Fischer, S.; Gao, J.; Hodoscek, M.; Im, W.; Kuczera, K.; Lazaridis, T.; Ma, J.; Ovchinnikov, V.; Paci, E.; Pastor, R.W.; Post, C.B.; Pu, J.Z.; Schaefer, M.; Tidor, B.; Venable, R. M.; Woodcock, H. L.; Wu, X.; Yang, W.; York, D.M.; Karplus, M. (2009). CHARMM: The Biomolecular Simulation Program. *J. Comput. Chem.* **30**, 1545-1614.
- Campos, I.; Palomar-Pardavé, M.; Amador, A.; villaVelázquez, C. y Hadad, J. (2007). *App. Surf. Sci.*, 253, 9061-9066.
- Günen, A. (2020). *Properties and corrosion resistance of borided AISI H11 tool steel.* *J. Eng. Mater. Tech.*, 142 (1), 011010.
- Jo, S.; Kim, T.; Iyer, V.G.; Im, W. (2008). CHARMM-GUI: A web-based graphical user interface for CHARMM. *J. Comp. Chem.* **29** (11), 1859-1865. <https://doi.org/10.1002/jcc.20945>
- Kariofillis, G.K.; Kiourtsidis, G.E. y Tsipas, D.N. (2006). *Corrosion behavior of borided AISI H13 hot work steel.* *Suf. Coat. Tech.*, 201 (1-2), 19-24.
- Khaled, K.F. y Amin, M.A. (2009). *Corrosion monitoring of mild steel in sulphuric acid solutions in presence of some thiazole derivatives-Molecular dynamics, chemical and electrochemical studies.* *Corrosion Sci.*, 51, 1964-1975.
- Lee, J.; Cheng, X.; Swails, J.M.; Yeom, M.S.; Eastman, P.K.; Lemkul, J.A.; Wei, S.; Buckner, J.; Jeong, J.C.; Qi, Y.; Jo, S.; Pande, V.S.; Case, D.A.; Brooks III, C.L.; MacKerell Jr, A.D.; Klauda, J.B.; Im, W. (2016). CHARMM-GUI Input Generator for NAMD, GROMACS, AMBER, OpenMM, and CHARMM/OpenMM Simulations using the CHARMM36 Additive Force Field. *J. Chem. Theory Comput.* **12**, 405-413.
- Malde AK, Zuo L, Breeze M, Stroet M, Poger D, Nair PC, Oostenbrink C, Mark AE. (2011). *An Automated force field Topology Builder (ATB) and repository: version 1.0.* *J. Chem. Theory Comput.* **7**, 4026-4037.
- Sukru, T. (2007). *Some mechanical properties of borided AISI H13 and 304 steels.* *Mat. & Des.*, 28, 1836-1843.
- Tavakoli, H. y Khoie, S.M.M. (2010). An electrochemical study of corrosion resistance of boride coating obtained by thermo-reactive diffusion. *Mat. Chem. & Phys.*, 124, 1134-1138.



- Verma, C.; Lgaz, H.; Verma, D.K.; Ebenso, E.E.; Bahadur, I.; Quraishi, M.A. (2018). *Molecular dynamics and Monte Carlo simulations as powerful tools for study of interfacial adsorption behavior of corrosion inhibitors in aqueous phase: A review*. J. Mol. Liq., 260, 99-120.
- Xie, W.W.; Liu, Z.; Han, G.C. Li, W.; Liu, J. Chen, Z.C. (2015). *Molecular dynamics simulation of inhibition mechanism of 3,5-dibromo salicylaldehyde Schiff's base*. Comp. & Theor. Chem., **1063**, 50-62.