



## ESFUERZO DE CORTE EN INTERFACES Fe/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>

Mariano Forti<sup>(1,2)\*</sup>, Paula Alonso<sup>(1,2)</sup>, Pablo Gargano<sup>(1,2)</sup>, Gerardo Rubiolo<sup>(1,2,3)</sup>

<sup>(1)</sup> °Comisión Nacional de Energía Atómica, Gerencia de Área Materiales. Centro Atómico Constituyentes, Avenida General Paz 1499 (1650), SanMartín, BuenosAires, Argentina.

<sup>(2)</sup> Instituto Sabato, Universidad Nacional de General San Martín, Argentina.

<sup>(3)</sup> Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas, CONICET, Argentina.

\*Correo Electrónico (autor de contacto): [mforti@cnea.gov.ar](mailto:mforti@cnea.gov.ar)

La estabilidad mecánica de los óxidos formados sobre las aleaciones de uso industrial, y su adhesión al sustrato metálico es de vital importancia para determinar la susceptibilidad de las aleaciones a los distintos tipos de corrosión. En este contexto, la energía de adhesión es uno de los parámetros principales a determinar. Los métodos atomísticos como la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) se presentan como una herramienta fundamental para calcular este parámetro en interfases Óxido/Metal. En este trabajo se estudia con esta técnica la interfase Fe(BCC)/Magnetita. El interés en este sistema radica en que se ha visto que la magnetita (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) es el óxido en contacto con el metal en condiciones de corrosión generalizada, e incluso las capas de óxido pasivante pueden tener cierta similitud con esta desde el punto de vista estructural. Dado que la magnetita es una espinela inversa de estructura cristalina  $Fd\bar{3}m$  y el hierro posee una estructura BCC, se modela la interfase  $Fe_3O_4[001]-Fe[001]$  teniendo en cuenta que experimentalmente se observa la relación de orientaciones  $Fe_3O_4[100] \parallel Fe[\bar{1}10]$  para la misma. A lo largo de la dirección [001] en el óxido se alternan los planos de composición FeO<sub>2</sub> y Fe, aunque aquí solo se trata la terminación Fe de la magnetita, ya que se ha demostrado que forma la interfaz más estable [1,2]. Se utiliza DFT para calcular el trabajo necesario para deslizar las superficies en relación a las direcciones principales de la interfaz, para luego calcular el potencial interfacial en función de las coordenadas generalizadas de la misma según el modelo de Wei et al [3]. Este potencial puede ser utilizado en modelos de meso escala de la interfaz, por ejemplo para el cálculo de la tenacidad de la misma.

### ABSTRACT

In Industrial applications, the mechanical stability of oxides formed on metallic alloys is a key concern in the determination of component susceptibility to different corrosion mechanisms. In this context, the energy of adhesion is a key parameter. Density functional Theory (DFT) and other atomistic methods are fundamental tools in the determination of this quantity for Metal/Oxide interfaces. In this paper Fe(BCC) / Magnetite interface is assessed within the DFT approach. This system is of general interest, given that magnetite (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) is the oxide in direct contact with the metal under generalized corrosion and for a wide range of conditions. Moreover, it has been demonstrated that passive films on iron alloys exhibit similar structural properties. Magnetite is an inverse spinel with  $Fd\bar{3}m$  structure, while Iron has a BCC crystal structure. The  $Fe_3O_4[001]-Fe[001]$  interface is modeled. The orientation relationship experimentally observed for this interface is  $Fe_3O_4[100] \parallel Fe[\bar{1}10]$ . In the (001) direction, atomic layers with compositions FeO<sub>2</sub> and Fe are alternated. Here only the Fe termination is treated, as it has been proved that it constitutes the most stable interface [1,2]. DFT is used to calculate the work needed to relatively slide the oxide and metal surfaces in reference to the principal directions of the interface. Hence, it is possible to calculate the

*interface potential according to the model by Wei et al [3]. This potential can be used for construction of meso scale models of the interface for a complete study of its properties.*

## **REFERENCIAS**

- 1 M.D. Forti, P.R. Alonso, P.H. Gargano, P.B. Balbuena, G.H. Rubiolo, “A DFT study of atomic structure and adhesion at the Fe(BCC)/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> interfaces”; Surf. Sci. Vol. 647 (2016) p. 55–65.  
doi:10.1016/j.susc.2015.12.013.
- 2 M. Forti, P. Alonso, P. Gargano, G. Rubiolo, “Adhesion Energy of the Fe(BCC)/Magnetite Interface within the DFT Approach”; Procedia Mater. Sci. Vol. 8 (2015) p. 1066–1072.  
doi:10.1016/j.mspro.2015.04.169.
- 3 Y. Wei, J.W. Hutchinson, “Toughness of Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> interfaces as dependent on micron-scale plasticity and atomistic-scale separation”; Philos. Mag. Vol. 88 (2008) p. 3841–3859.  
doi:10.1080/14786430802311092.

**TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO:** *T18*

**PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER):** *O (oral).*