

NUMERICAL SIMULATION OF WC-Co HARDMETAL WITH MICROPLANE APPROACH AND REALISTIC MESHES

¹P. V. Sousa Machado, ¹F. Caner, ¹E. Jimenez Pique, ¹L. Llanes

¹ Centro de Integridad Estructural, Fiabilidad y Micromecánica de los Materiales.
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est. Universitat Politècnica de Catalunya.
Av. Eduard Maristany, 16 08019 Barcelona

* Persona de contacto: pedro.vinicius.sousa@upc.edu

RESUMEN

Se puede utilizar análisis de elementos finitos para modelar el comportamiento de los metales duros a microescala y mejorar el rendimiento de las herramientas y superficies fabricadas con estos materiales. Para ello, se utilizan reconstrucciones tomográficas de la microestructura del WC-Co para construir mallas 3D realistas, que capturan la verdadera naturaleza del material. Luego, se realizan simulaciones numéricas de micropilares en compresión y vigas con flexión de tres puntos con fisura utilizando modelos de microplanos definidos por separado para las fases de partículas y ligantes. El enfoque de microplano impone el equilibrio entre el tensor de tensión macroscópico y los vectores de tensión en diferentes planos de deformación inelástica en la microestructura utilizando el principio del trabajo virtual. Para el ligante cobalto, se utiliza el modelo de plasticidad J_2 de microplano, en el que la integración de los vectores de deformación plástica obtenidos en planos de diferentes orientaciones en la microestructura utilizando la plasticidad J_2 clásica produce el tensor de deformación plástica macroscópica. Para los carburos de tungsteno se emplea el modelo de microplano M7 recalibrado para adaptarse a su comportamiento mecánico. Se compara los resultados con experimentos de compresión de micropilares de muestras con diferentes contenidos de carburo de tungsteno. Además, se compara la energía de fractura obtenida en la simulación de flexión de tres puntos con datos experimentales. Se muestra buena concordancia entre simulaciones y datos experimentales.

PALABRAS CLAVE: Fractura, plasticidad, Micro-ensayos, Elementos finitos, Microplano

ABSTRACT

Finite element analysis can be used to model the behavior of hard metals at microscale and enhance the performance of tools and surfaces made of these materials. To this end, tomography reconstructions of the microstructure of the WC-Co are used to build realistic 3D meshes, which capture the true nature of the material. Then, numerical simulations of micropillars in compression and three-point-bend beams with a crack are carried out using microplane models defined separately for particle and binder phases. The microplane approach impose the equilibrium between the macroscopic stress tensor and the stress vectors on different planes of inelastic deformation in the microstructure using the principle of virtual work. For the cobalt binder, it is used the microplane J_2 -plasticity model, in which the integration of the plastic strain vectors obtained on planes of different orientations in the microstructure using the classical J_2 -plasticity yields the macroscopic plastic strain tensor. For the tungsten carbides the microplane model M7 recalibrated to fit their mechanical behavior is employed. The results are compared with micropillar compression experiments of samples with different tungsten carbide contents. Moreover, the fracture energy obtained in the three-point-bend simulation is compared with experimental data from similar grade. It is shown good agreement between simulations and experimental data.

KEYWORDS: Fracture, Plasticity, Micro-tests, Finite element

INTRODUCCIÓN

En este trabajo se comparan simulaciones y experimentos de compresión de micropilares. Cada micropilar tiene

una malla diferente tomada de las imágenes de tomografía FIB de dos tipos de WC-Co con tamaño de grano distintos, como en los dos ejemplos en la Figura 1. Un grado tiene una microestructura de granos finos y 10,5% en peso de Co (usada típicamente en operaciones

de maquinado) y la otra microestructura de granos grandes y 22,4% en peso de Co (usada típicamente en operaciones mineras). Se presentarán los resultados de seis mallas de micropilares de cada tipo totalizando doce simulaciones.



Figura 1: Microestructura de WC-Co reconstruida: tamaño de grano fino y grueso.

Se utiliza como base la técnica microplano para el modelado del WC-Co, con dos relaciones constitutivas diferentes para cada fase. Para el ligante de Co se utiliza un modelo de plasticidad basado en el invariante J_2 , que, debido a su implementación en el marco del microplano, captura el efecto de vértice [1] importante en regímenes de alta deformación y cargamentos no proporcionales. En cuanto al carburo WC, se utiliza el modelo de microplano M7, ideal para materiales semi frágiles, que utiliza los límites tensión-deformación y la teoría de bandas de grietas para modelar la fractura [2] [3] [4]. El modelo M7 es una poderosa relación constitutiva que se ha utilizado para modelar compuestos de fibra. [5] [6], materiales en régimen de fatiga [7], fluencia [8] y alta tasa de deformación [9].

Los resultados de la simulación se comparan con datos experimentales de tamaño de grano similar producidos por Tarragó et al [10] (granos gruesos) y Sandoval et al [11] (granos finos). Se demostrará que la metodología propuesta produce resultados en concordancia con los datos experimentales, tanto en términos de las curvas de tensión-deformación calculadas como en el comportamiento inelástico observado.

DATOS EXPERIMENTALES

En Sandoval et al [11] se calcula las curvas de tensión-deformación a partir de los datos de carga-desplazamiento medidos, considerando un área por debajo de $1 \mu\text{m}$ desde la parte superior de los micropilares. En Tarragó et al [10] se calcula la curva tensión-deformación también a partir de la curva carga-desplazamiento medida, considerando un área de tres cuartos de la longitud total del micropilar. Las curvas de tensión-deformación para los diferentes tamaños de grano están en la Figura 3.

MODELADO NUMÉRICO

2.1. Model Microplano M7

Para representar cada microplano se utiliza su correspondiente vector normal unitario $\hat{\mathbf{n}}$ y los vectores $\hat{\mathbf{l}}$ y $\hat{\mathbf{m}}$ de corte. Para evitar cualquier sesgo direccional, a $\hat{\mathbf{m}}$ se le da una dirección aleatoria pero paralela a su plano, luego se define $\hat{\mathbf{l}}$ como $\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{m}}$. Por lo tanto, se calcula los componentes de deformación en cada plano como $\varepsilon_N = N_{ij}\varepsilon_{ij}$, $\varepsilon_M = M_{ij}\varepsilon_{ij}$ y $\varepsilon_L = L_{ij}\varepsilon_{ij}$, donde los subíndices van de 1 a 3 y $N_{ij} = n_i n_j$, $M_{ij} = (n_i m_j + n_j m_i)/2$ y $L_{ij} = (n_i l_j + n_j l_i)/2$. Se obtiene las componentes de tensión del microplano σ_N , σ_M y σ_L utilizando la relación constitutiva correspondiente como $\sigma_N = F_N(\varepsilon_N)$, $\sigma_T^2 = \sigma_L^2 + \sigma_M^2 = F_T(\varepsilon_L^2 + \varepsilon_M^2)$ en tensión ($\sigma_N > 0$) [2], [12]. El tensor de tensiones se calcula considerando el principio del trabajo virtual:

$$\frac{2\pi}{3} \boldsymbol{\sigma} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} = \int_{\Omega} (\sigma_N \delta \varepsilon_N + \sigma_M \delta \varepsilon_M + \sigma_L \delta \varepsilon_L) d\Omega \quad (1)$$

lo que lleva a

$$\sigma_{ij} = \int_{\Omega} (\sigma_N N_{ij} + \sigma_L L_{ij} + \sigma_M M_{ij}) d\Omega \quad (2)$$

En compresión ($\sigma_N < 0$), la ecuación de equilibrio de tensión macro-micro se convierte en:

$$\sigma_{ij} = \int_{\Omega} (\sigma_D N_{ij} + \sigma_L L_{ij} + \sigma_M M_{ij}) d\Omega + \sigma_v \delta_{ij} \quad (3)$$

en la que $\sigma_D = F_D(\varepsilon_D)$ y $\sigma_v = F_v(\varepsilon_v)$ son las partes desviadoras y volumétricas de la tensión normal del microplano obtenidas a partir de las funciones constitutivas correspondientes.

Tal enfoque tiene algunas ventajas clave: (i) permite modelar el daño y el agrietamiento, en el régimen de ablandamiento por deformación [12]; (ii) las ecuaciones constitutivas son más intuitivas ya que se utiliza vectores en lugar de invariantes de tensores de segundo orden, (iii) las interacciones entre deformaciones inelásticas en diferentes direcciones se capturan automáticamente; (iv) el tensor de tensión "macro" se calcula a partir de cada componente de tensión del microplano utilizando el principio del trabajo virtual, que conecta la microescala con la escala del tensor. Para los carburos de tungsteno se utiliza como formulación constitutiva el modelo M7. Su algoritmo completo se explica en [2] [3] y no se dará aquí.

2.1. Microplano J_2 -plasticidad

En el modelo de plasticidad basado en el invariante J_2 la superficie de fluencia se expresa en términos de J_2 según

$$J_2 = \frac{1}{6} [(\sigma_I - \sigma_{II})^2 + (\sigma_{II} - \sigma_{III})^2 + (\sigma_{III} - \sigma_I)^2] \quad (4)$$

donde σ_I , σ_{II} y σ_{III} son los esfuerzos principales de σ . La superficie de fluencia se expande en función de la deformación plástica acumulada, ϵ_p^{eff} :

$$J_2 = \tau^2(\epsilon_p^{eff}) \quad (5)$$

Cuando se alcanza el límite elástico, se impone el retorno radial del estado de tensión a la superficie de fluencia. El endurecimiento isotrópico es inapropiado para cargas variables, como lo demuestra el efecto Bauschinger, que se soluciona considerando la suposición de endurecimiento cinemático [13].

Sin embargo, los materiales policristalinos no son ni completamente isotrópicos ni completamente cinemáticos. Tales suposiciones se originaron a partir de observaciones empíricas a escala de ingeniería. En realidad, cuando ocurre la deformación, los granos cristalográficos se reorientan hacia el flujo plástico. El deslizamiento plástico ocurre en planos predefinidos de cada cristal y se desarrolla una tensión residual entre los cristales adyacentes. Macroscópicamente, se espera un cambio en la forma de la superficie de fluencia, llamado efecto vértice [1]. Por lo tanto, los modelos de plasticidad cristalina, desarrollados a partir de observaciones de monocristales, pueden reproducir la mayoría de los mecanismos de deformación observados a nivel macroscópico [14], incluido el efecto de vértice.

En este trabajo, se implementa la plasticidad J_2 dentro del marco del microplano:

$$\sigma_D^2 + \sigma_L^2 + \sigma_M^2 = \tau_\mu(\epsilon_p^{eff}) \quad (6)$$

donde $\sigma_D = \sigma_N - \sigma_V$ es el esfuerzo desviador del microplano, σ_M y σ_L son los esfuerzos cortantes del microplano, $\sigma_N = N_{ij}\sigma_{ij}$ es el esfuerzo normal del microplano, $\sigma_V = \sigma_{ii}/3$ es el esfuerzo volumétrico y $\tau_\mu(\epsilon_p^e)$ es la función de endurecimiento definida en un microplano. Con ello, no solo se predicen el endurecimiento por deformación y el efecto Bauschinger, sino también el efecto de vértice, en el que la carga tangencial a la superficie de fluencia produce una respuesta elastoplástica como en los experimentos (la plasticidad macroscópica clásica J_2 predice la respuesta elástica en este caso).

CALIBRACIÓN Y VERIFICACIÓN

3.1 Microplane J2-plasticidad - cobalto

La calibración se realizó considerando un ensayo de tracción uniaxial simple para obtener los parámetros del material que controlan el endurecimiento por deformación y el límite de fluencia. El módulo elástico y el coeficiente de Poisson fueron los únicos parámetros conocidos al comienzo de este proceso. Al final, se obtuvo los parámetros de la Tabla 1 para el Co.

Tabla 1: Parámetros de plasticidad del microplano J_2 para cobalto

Parámetro	Valor	Significado
E	230 GPa	Módulo de Young
ν	0.33	Coficiente de Poisson
k_1	0.52	Exponente de la ley de endurecimiento
k_2	0.055	Deformación plástica normalizada
k_3	620 MPa	Aproximadamente el límite elástico

3.2 Microplane M7 - carburo de tungsteno

Se optimizaron los parámetros buscando una respuesta similar entre micropilares simulados y los datos experimentales de Sandoval et al [11]. El módulo elástico y el coeficiente de Poisson eran los únicos parámetros conocidos al comienzo del proceso de calibración. Para verificar la validez de los parámetros optimizados en cuanto al comportamiento de agrietamiento modo I, se consideraron tres simulaciones de una viga de flexión de 3 puntos con el WC-Co de tamaño de grano fino. La energía de fractura liberada durante la flexión de 3 puntos fue de $225 \pm 23 \text{ Jm}^{-2}$, en comparación con $246 \pm 5 \text{ Jm}^{-2}$ de tamaño de grano similar encontrado en la literatura [15]. En la Tabla 2 los parámetros utilizados en el Modelo M7 para los carburos de tungsteno.

Tabla 2: Parámetros del material del modelo M7 de Microplane

Parámetro	Valor	Sentido
E	700 GPa	Módulo de Young
ν	0.24	Coficiente de Poisson
k_1	$7.3 \cdot 10^{-7}$	Parámetro de dimensionamiento radial
k_2	950	Controla resistencia máxima bajo cizallamiento
k_3	0.5	Controla la pendiente posterior al pico bajo cizallamiento
k_4	$1.0 \cdot 10^4$	Pendiente posterior al pico bajo controles de compresión uniaxial
k_5	150	Controla resistencia máxima bajo compresión uniaxial
k_6	17	Controla resistencia máxima bajo tensión volumétrica
k_7	420	Controla la forma del límite volumétrico
k_8	0.264	Controla resistencia máxima bajo tracción uniaxial

ANÁLISIS DE ELEMENTOS FINITOS

Los modelos de micropilares tienen altura de 6000 nm, con diámetros superior e inferior de 2090 nm y 2700 nm respectivamente, lo que produce un ángulo cónico de 3 grados, similar a una muestra típica. Se fija la superficie inferior, mientras que se aplica una carga de desplazamiento de 400 μm (6,7 % de la altura total) mediante un indentador rígido en la parte superior, suponiendo contacto con un coeficiente de fricción de 0,2. Después se lleva a cabo un paso de descarga. Se utiliza la fuerza de reacción y el desplazamiento del indentador para calcular las curvas de tensión-deformación. Para el cálculo de la tensión se considera el promedio entre las áreas superior e inferior, tal como se recomienda en [16]. Para la deformación se considera la longitud total del micropilar y el desplazamiento del indentador.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En Figura 2, se puede ver el promedio y el intervalo de confianza del 95% de los experimentos y el promedio de las simulaciones. En los gráficos de los casos experimentales, se representó la deformación axial solo hasta el valor mínimo alcanzado entre todos los experimentos. Con respecto a la gráfica de tamaño de grano fino, el promedio de las simulaciones se encuentra dentro del intervalo de confianza experimental durante el régimen inelástico. En los experimentos del grado más grueso, se observó un intervalo de confianza más pequeño, pero el número de muestras analizadas (4 muestras) fue bajo. Además, la fracción en peso de carburos (85 % en peso) es ligeramente superior a la fracción en peso de carburos en los micropilares simulados.

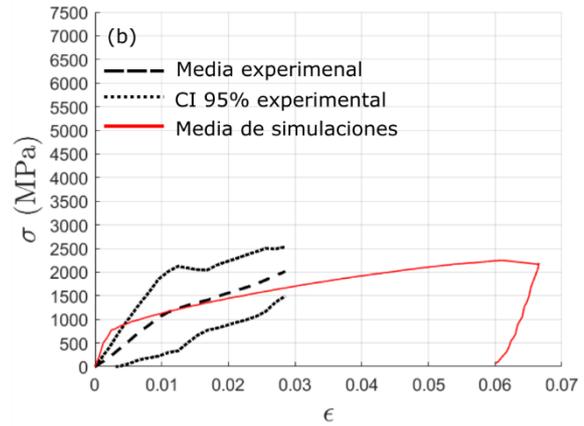
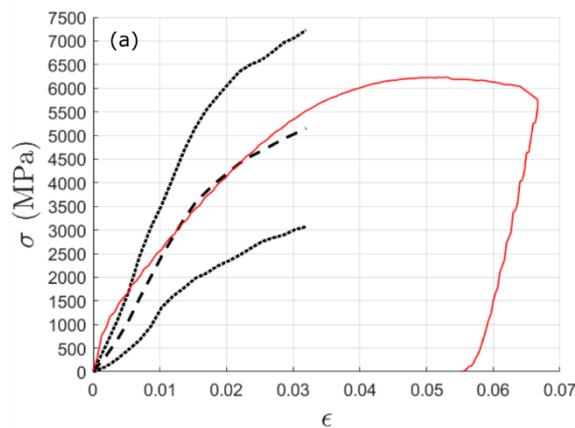


Figura 2: Simulación de compresión de micropilares: microestructura de granos finos (a) y gruesos (b).

Debido a problemas de contacto en los experimentos, la respuesta observada no coincide bien durante el régimen elástico, como se puede ver en la Figura 2. Así, para medir correctamente la rigidez, se suele utilizar la parte de descarga de las curvas experimentales. En la Tabla 3 se muestra la rigidez de descarga experimental reportada por Sandoval et al [11], y calculada a partir de las curvas tensión-deformación de Tarragó et al [10]. La rigidez de micropilares simulados durante el paso de descarga coincide con los valores de la literatura.

Tabla 3: Rigidez calculada a partir de la descarga, valores simulados y experimentales.

	Tamaño de grano fino	Tamaño de grano grueso
Rigidez experimental (GPa)	625±103	270±31
Rigidez de simulación (GPa)	636±27	328±86

Imágenes microscópicas de micropilares después de la compresión en Sandoval et al [11] y Tarragó et al [10] muestran grietas de carburos que se propagan a 45 grados en relación con la carga de compresión y a lo largo de los bordes WC/WC. Esta es la dirección crítica de cizalla bajo compresión uniaxial, por lo tanto, tal comportamiento indica una debilidad al esfuerzo cortante. El modelo M7 podría reproducir dicho proceso de falla, como se muestra en la Figura 3.

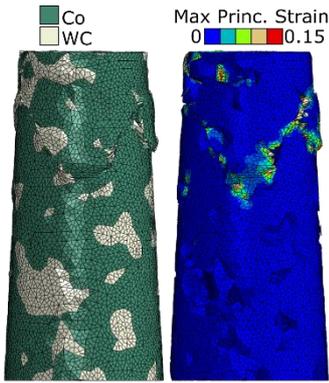


Figura 3: dos ejemplos de grietas de 45 grados a lo largo de la región superior del micropilar.

Además, en las simulaciones, las esquinas afiladas y las ranuras en los carburos fueron el principal origen de las grietas, muchas de las cuales eran interfaces WC/WC en la muestra de la tomografía FIB. Curiosamente, no se utilizaron formulaciones especiales para definir los interfaces ni bordes, lo que sugiere que, al menos parcialmente, los bordes WC/WC son críticos debido a su marcada geometría. Se puede apreciar este efecto en la simulación que se muestra en Figura 4, donde se observa una deformación elevada en estas zonas.

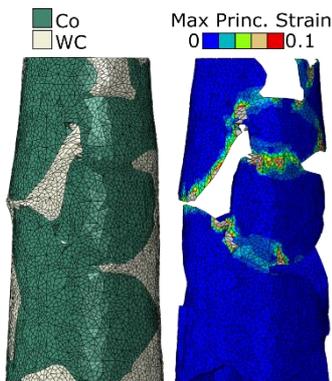


Figura 4: Concentración de tensión en las esquinas, que normalmente se encuentran en los bordes WC/WC.

Microplane J_2 puede reproducir las grandes deformaciones observadas experimentalmente en el ligante de cobalto debido a su formulación de deformación finita. Tal ductilidad mejora la tenacidad en el material compuesto [17], y esto se puede ver en las simulaciones cuando carburos rotos se retuvieron gracias al ligante o cuando los frentes de grietas se detuvieron al alcanzar el ligante, como se ve en la Figura 5.

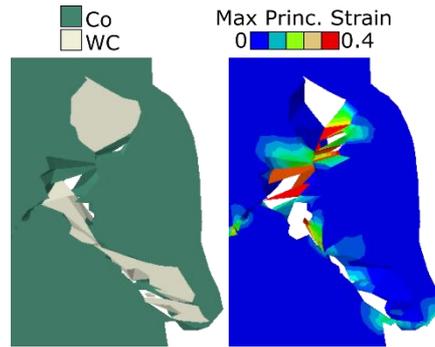


Figura 5: Carburo roto sostenido por el aglutinante.

Se ha observado que las grietas en el ligante tienden a crecer junto a las interfaces WC/Co [17]. En las simulaciones, el ligante, al ser la fase más blanda, está sujeto a grandes tensiones de cizallamiento a medida que los carburos se mueven y giran durante la carga de compresión. Para ejemplificar, en Figura 6, el gran movimiento relativo entre los carburos provocó una fuerte tensión en el ligante adyacente a los carburos.

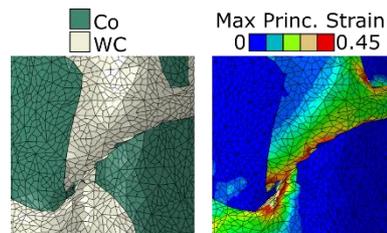


Figura 6: Deformación elevada en la fase Co cerca de los carburos WC.

CONCLUSIONES

En este trabajo se utiliza imágenes de tomografía FIB para generar 6 mallas de micropilares de tamaño de grano fino y 6 mallas de grano grueso de WC-Co, totalizando 12 simulaciones de compresión de micropilares. Se compara las simulaciones con datos de compresión de micropilares de microestructura similar disponibles en la literatura. Se aplica dos relaciones constitutivas distintas durante las simulaciones: el modelo de microplano J_2 en para el ligante Co y el modelo de microplano M7 para el carburo WC. Las conclusiones que se pueden extraer de esta metodología :

- Las curvas de tensión-deformación de micropilares simulados de dos grados diferentes reprodujeron fielmente los datos experimentales.
- La rigidez calculada con la parte de descarga de las curvas de tensión-deformación de las simulaciones coincide con los valores experimentales informados.
- En las simulaciones, la marcada geometría de los carburos fue la principal causa de grietas en esta fase. Su propagación ocurrió a menudo en los planos

críticos de corte bajo compresión (45 grados), de manera similar a lo que se observa experimentalmente.

- El modelo microplano J_2 puede reproducir las grandes deformaciones plásticas que sufre la fase ligante que aumentan la tenacidad del compuesto WC-Co.
- El ligante es susceptible a altas deformaciones a medida que los carburos se mueven durante la compresión de los micropilares. Las observaciones experimentales corroboran que esta región es crítica para la propagación de grietas dentro del ligante.
- El uso de la técnica del microplano para ambas fases junto con una microestructura real predice muy bien la deformación y fractura de micropilares de carburos cementados de WC-Co. Por lo tanto, es posible que el uso de esta metodología pueda extenderse a otras configuraciones de cargas y volúmenes de material mayores necesarios en las aplicaciones de ingeniería de dichos materiales.

REFERENCIAS

- [1] M. Brocca y Z. P. Bazant, «Microplane constitutive model and metal plasticity,» *Appl Mech Rev*, vol. 53, nº 10, pp. 265-281, 2000.
- [2] F. C. Caner y Z. P. Bazant, «Microplane Model M7 for Plain Concrete. I: Formulation,» *J. Eng. Mech.*, vol. 139, nº 12, pp. 1714-1723, 2013.
- [3] F. C. Caner y Z. P. Bazant, «Microplane Model M7 for Plain Concrete. II: Calibration and Verification,» *Journal of Engineering Mechanics*, pp. 1724-1735, 2013.
- [4] Z. P. Bazant y J. Planas, «Crack band models and smeared cracks,» de *Fracture and size effect in concrete and other quasibrittle materials*, CRC, 1998, pp. 213-259.
- [5] F. C. Caner, Z. P. Bazant y R. Wendner, «Microplane model M7f for fiber reinforced concrete,» *Engineering Fracture Mechanics*, pp. 41-57, 2013.
- [6] M. Salviato, S. E. Ashari y G. Cusatis, «Spectral stiffness microplane model for damage and fracture of textile composites,» *Composite Structures*, pp. 170 - 184, 2016.
- [7] K. Kirane y Z. P. Bazant, «Microplane damage model for fatigue of quasibrittle materials: Subcritical crack growth, lifetime and residual strength,» *International Journal of Fatigue*, vol. 70, pp. 93 - 105, 2015.
- [8] Z. P. Bazant, H. MASCE y S. Rahimi-Aghdam, «Diffusion-Controlled and creep-mitigated ASR damage via microplane model,» *Journal of Engineering Mechanics*, vol. 143, nº 2, 2017.
- [9] Z. P. Bazant y F. C. Caner, «Impact comminution of solids due to local kinetic energy of high shear strain rate: I Continuum theory and turbulence analogy,» *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 64, pp. 223 - 235, 2014.
- [10] J. M. Tarragó, J. J. Roa, E. Jiménez-Piqué, E. Keown, J. Fair y L. Llanes, «Mechanical deformation of WC-Co composite micropillars under uniaxial compression,» *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, vol. 54, pp. 70-74, 2016.
- [11] D. A. Sandoval, A. Rinaldi, A. Notargiacomo, O. Ther, E. Tarrés y J. J. Roa, «Influence of specimen size and microstructure on uniaxial compression of WC-Co micropillars,» *Ceramics International*, vol. 45, nº 13, pp. 15934-15941, 2019.
- [12] Z. P. Bazant y P. G. Gambarova, «Crack shear in concrete: crack band microplane model,» *Journal of Structural Engineering*, vol. 110, nº 9, pp. 2015-2035, 1984.
- [13] L. E. Malvern, *Introduction to the mechanics of continuous medium*, Prentice-Halls, 1969.
- [14] E. B. Marin, «On the Formulation of a Crystal Plasticity Model,» Sandia National Laboratories, 2006.
- [15] L. S. Sigl y H. E. Exner, «Experimental Study of the Mechanics of Fracture in WC-Co alloys,» *Metallurgical Transactions A*, vol. 18A, pp. 1299-1308, 1987.
- [16] H. Fei, A. Abraham, N. Chawla y H. Jiang, «Evaluation of micro-pillar compression tests for accurate determination of elastic-plastic constitutive relations,» *Journal of Applied Mechanics, Transactions ASME*, vol. 79, nº 6, pp. 1-9, 2012.
- [17] J. M. Tarragó, E. Jiménez-Piqué, M. Turon-Vinas, L. Rivero, I. Al-Dawery, L. Schneider y L. Llanes, «Fracture and fatigue behavior of cemented carbides: 3D focused ion beam tomography of crack-microstructure interactions,» *International Journal of Powder Metallurgy*, pp. 33-42, 2014.