

# MODELIZACIÓN COMPUTACIONAL DEL METAL DURO WC-Co CONSIDERANDO ORIENTACIÓN DE GRANO Y ANISOTROPÍA A PARTIR DE TOMOGRAFÍA FIB

*Diego Cruaños González<sup>1</sup>, Emilio Jiménez Piqué<sup>1,2</sup>, Pedro Vinícius Sousa Machado<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> Department of Materials Science and Engineering, EEBE – Campus Diagonal Besòs, Universitat Politècnica de Catalunya – BarcelonaTech, 08019 Barcelona, Spain, [diego.cruanes@upc.edu](mailto:diego.cruanes@upc.edu)

<sup>2</sup> Barcelona Research Center in Multiscale Science and Engineering, Campus Diagonal Besòs, Universitat Politècnica de Catalunya – BarcelonaTech, 08019 Barcelona, Spain

**Resumen:** Este estudio busca simular la microestructura del metal duro WC-Co, considerando la orientación de los granos y la anisotropía del WC. Para lograrlo, se crea una malla del material con cada grano identificado y se añade comportamiento anisotrópico al modelo de simulación. Para la reconstrucción del material, se utilizan imágenes obtenidas mediante FIB/SEM y analizadas por EBSD de dos grados diferentes y se verifica su correcta reconstrucción. Para su simulación, a partir del modelo de microplanos M7WC, se implementa anisotropía en sus parámetros y se ajusta a datos experimentales teniendo también control sobre su orientación.

**Palabras clave:** WC-Co, Tomografía 3D, Análisis por elementos finitos, Modelo de microplanos

## 1. INTRODUCCIÓN.

El metal duro carburo de tungsteno-cobalto (WC-Co) es un material ampliamente utilizado en diversas aplicaciones industriales, especialmente en herramientas de corte. Esto se debe a su excepcional dureza, resistencia al desgaste y resistencia mecánica [1]. Estas propiedades son resultado de la combinación de dos fases principales: una fase metálica compuesta de cobalto (Co) y una fase cerámica compuesta de carburo de tungsteno (WC).

El estudio de la microestructura del material proporciona una comprensión tanto de su relación con otras propiedades microestructurales [2, 3, 4, 5] como de sus propiedades mecánicas. Para la caracterización mecánica, se han llevado a cabo diversos ensayos, como la nanoindentación [6], los micropilares [7] y los nanocables [8]. Muchos de estos estudios han explorado el comportamiento anisotrópico del WC.

Este estudio continúa la línea de investigación que, desde hace tiempo, busca simular el material para poder predecir su funcionamiento en un caso real [9, 10]. Sin embargo, en este caso, se busca no solo comprender su comportamiento a nivel macroestructural, sino también a nivel microestructural. Para ello, se necesita tener una geometría y un modelo computacional que representen fielmente al material.

En estudios previos se han logrado generar mallas tridimensionales separando las dos fases utilizando imágenes tomadas por FIB/SEM (Focused Ion Beam/Scanning Electron Microscopy) [11] e incluso analizando por EBSD (Electron Backscatter Diffraction) para poder observar la orientación de grano de WC [12]. Además, se ha desarrollado un modelo funcional de simulación que utiliza microplanos, permitiendo simular de manera conjunta las dos fases del material [13].

En este artículo se persigue continuar con la idea de combinar la obtención de una geometría tridimensional para la caracterización de materiales y, además, se busca

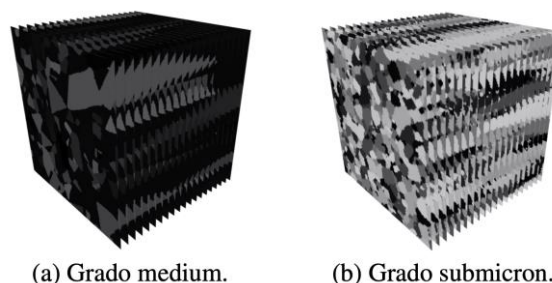
modificar el modelo de simulación M7WC con el objetivo de considerar de forma individual cada uno de los granos e implementar la respuesta anisotrópica del material.

## 2. MATERIALES.

Para este estudio se han utilizado imágenes tomadas en la *Universität des Saarlandes* mediante un FIB/SEM y analizadas por EBSD. Esto resulta en un conjunto de imágenes a lo largo de la profundidad con información sobre la orientación de los granos.

Se analizan dos grados distintos del metal duro WC-Co. Se asigna “Medium” al primer grado y “Submicron” al segundo grado. Estas designaciones se basan en norma ISO/DIS 4499-2, que utiliza el tamaño de grano para diferenciar entre los diferentes grados.

Estas imágenes, a pesar de estar tomadas por EBSD, no tenían un mapa de orientaciones cristalográficas. Únicamente se disponía imágenes en escala de grises (Figura 1). El volumen de estudio de cada grado se muestra en la Tabla 1.



**Figura 1.** Conjunto de imágenes como datos de origen.

Para procesar las imágenes y obtener la geometría en 3D se tiene acceso a una licencia de Avizo. Posteriormente, para realizar las simulaciones, se utilizará el programa Abaqus. Además, se utilizará el programa MATLAB para funciones intermedias o para la obtención de otros resultados.

**Tabla 1.** Dimensiones de los volúmenes utilizados para cada grado.

	Medium	Submicron
Tamaño del voxel (nm)	100x100x100	100x100x100
Tamaño del cubo (µm)	15.0x15.0x19.1	15.0x16.0x14.0

### 3. MÉTODOS.

#### 3.1. Caracterización microestructural.

Para la caracterización de la microestructura del metal duro, se analizarán diversos parámetros con el fin de comparar los dos grados en estudio.

##### I. Volumen relativo de cada fase.

La cantidad de cada fase es crucial para las propiedades finales del material [2].

En este estudio se define este parámetro como el porcentaje en volumen del cobalto (%<sub>v</sub>Co). Este valor se calcula a partir de los volúmenes de cada fase de la tomografía, como se muestra en la Ecuación 1.

$$\%_vCo_{3D} = \frac{V_{Co}}{V_{Co} + V_{WC}} \quad (1)$$

A modo de verificación se estudiará la cantidad de cada fase en cada fotografía FIB (Ecuación 2).

$$\%_vCo_{2D} = \frac{N_{Co}}{N_{Co} + N_{WC}} \quad (2)$$

Para la caracterización de la microestructura del metal duro, se analizarán diversos parámetros con el fin de comparar los dos grados en estudio.

##### II. Tamaño de grano del carburo.

El tamaño de los granos de carburo también afecta a sus propiedades y a la distribución final de los granos [3]. Se suele utilizar para definir este tamaño el diámetro del grano ( $d_{WC}$ ). Para obtener este valor se utilizará el diámetro de las esferas aproximadas de cada grano.

##### III. Contigüidad del carburo.

La contigüidad de los granos de WC ( $C_{WC}$ ) es un parámetro utilizado que relaciona la cantidad de contactos entre granos de WC de la cantidad de contacto entre Co y WC [4].

Se estudiará la contigüidad tridimensional por medio de la Ecuación 3 [5].

$$C_{3D} = \frac{2S_{WC/WC}}{2S_{WC/WC} + S_{WC/Co}} \quad (3)$$

donde  $S_{WC/Co}$  y  $S_{WC/WC}$  son las superficies de contacto entre carburo y metal y entre carburos, respectivamente. Estos datos se obtienen a partir de la superficie tridimensional.

A modo de comparación se estudiará el valor de la contigüidad bidimensional de cada corte de material (Ecuación 4) [5].

$$C_{2D} = \frac{2N_{WC/WC}}{2N_{WC/WC} + N_{WC/Co}} \quad (4)$$

Este parámetro también se va a utilizar para definir el tono de gris perteneciente a la matriz metálica.

#### 3.2. Caracterización mecánica – Nanoindentación.

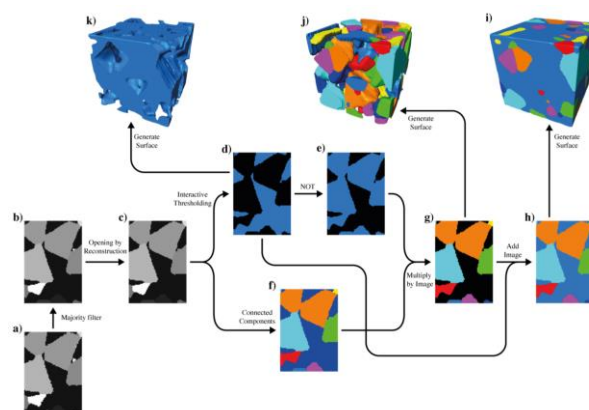
La nanoindentación, o indentación instrumentada, es una técnica utilizada para evaluar las propiedades de un material o recubrimiento. Durante la carga y descarga se registran datos de carga y desplazamiento del indentador en cada instante de tiempo con una alta resolución. Como resultado, se obtiene una curva carga-desplazamiento y la huella final de la indentación de las que se pueden obtener distintas propiedades del material [14].

Durante este estudio se va a utilizar un indentador de tipo Berkovich. En este tipo de indentadores el inicio de la descarga se puede tratar como una descarga elástica [15] y mediante el método de Oliver y Pharr [16] se puede obtener la dureza y el módulo elástico del material.

#### 3.3. Tomografía por FIB/EBSD.

Para obtener la reconstrucción tridimensional del material a partir del conjunto de imágenes, se han procesado mediante el software de análisis de imágenes Avizo [17]. Se ha separado cada una de las fases y, dentro de la fase cerámica, se ha separado cada uno de los granos.

La Figura 2 muestra la metodología seguida en la reconstrucción. Para la caracterización del material se puede examinar cualquiera de los pasos que puedan ser relevantes.



**Figura 2.** Proceso para la obtención de la geometría tridimensional.

Además, para facilitar trabajos futuros similares se ha automatizado el proceso.

#### 3.4. Análisis por elementos finitos – Microplanos.

Para simular todo el material se va a utilizar un modelo de microplanos. Este modelo, en lugar de utilizar

tensores de segundo orden para su cálculo, utiliza vectores. En cada diferencial del material se encuentra un poliedro compuesto por microplanos [18]. Cada microplano tiene un vector normal ( $\hat{n}$ ) y dos vectores cortantes:  $\hat{m}$  y  $\hat{l}$  (Figura 3).

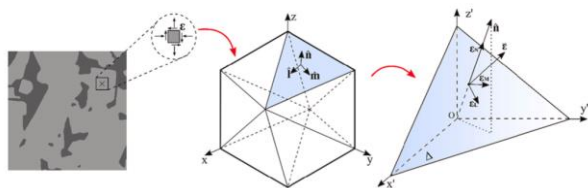


Figura 3. Sistema de microplanos [13].

En un modelo de microplanos el tensor de deformación se proyecta en cada uno de los microplanos y se calculan sus micro-tensiones para, finalmente, obtener el tensor de tensiones. [19, 13]

3.4.1. M7WC y MPJ2.

El modelo M7WC, utilizado para el WC, es un modelo para simular WC adaptado del M7 utilizado para el hormigón. Este modelo se basa en la existencia de bordes que son fronteras de tensión-deformación que cada microplano no puede superar. [19, 20, 13]

El modelo MPJ2, que simula el Co, es más adecuado para materiales dúctiles y se basa en reproducir la transición entre la región elástica y plástica. [13, 21].

3.4.2. Anisotropía en el modelo.

El modo de añadir la anisotropía en el modelo se basa en el estudio realizado por Brocca et al., 2001 [22]. Para ello se debe implementar, a los parámetros con anisotropía, la ecuación de un elipsoide. A modo de ejemplo, se muestra  $E_N$  en la Ecuación 5.

$$E_N = \left\{ \left( \frac{n_1}{E_{Nx}} \right)^2 + \left( \frac{n_2}{E_{Ny}} \right)^2 + \left( \frac{n_3}{E_{Nz}} \right)^2 \right\}^{-\frac{1}{2}} \quad (5)$$

Donde  $n_1$ ,  $n_2$  y  $n_3$  son las componentes del vector normal y  $E_{Nx}$ ,  $E_{Ny}$  y  $E_{Nz}$  son las constantes para cada una de las direcciones. Esta misma idea se ha implementado en otros 7 parámetros.

Para lograr controlar la orientación de la anisotropía se han utilizado matrices de rotación mediante los ángulos de Euler ( $R_y(\alpha)$ ,  $R_z(\beta)$  y  $R_y'(\gamma)$ ) aplicados a los vectores normales de los microplanos [23].

$$\hat{n}_{\mu,rot} = [[\hat{n}_{\mu} \cdot R_y(\alpha)] \cdot R_z(\beta)] \cdot R_y'(\gamma) \quad (6)$$

Para controlar el ángulo se utiliza una matriz de  $m \times 3$  donde cada fila es  $\alpha_m$ ,  $\beta_m$  y  $\gamma_m$ , y  $m$  es el número de grano.

3.4.3. Simulación.

En el programa Abaqus se prepara una simulación de una nanoindentación para posteriormente poder ajustar el modelo con anisotropía (Figura 4). Los parámetros de ensayo son los utilizados por Roa et al. (2015) [5].

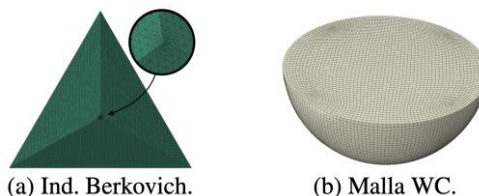


Figura 4. Elementos de la simulación en Abaqus.

De esta simulación se obtienen los datos del desplazamiento y carga del indentador para así poder obtener la curva carga-desplazamiento característica de una nanoindentación.

4. RESULTADOS.

4.1. Generación de la superficie.

La Figura 5 muestra un esquema de la Reconstrucción de cada grado separado por fases.

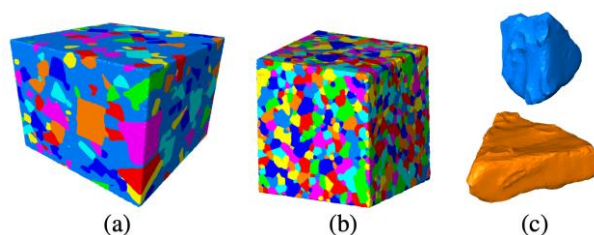


Figura 5. Reconstrucción de cada grado separado por fases (a-Medium y b-Submicron) y visualización de dos granos próximos (c).

4.2. Caracterización.

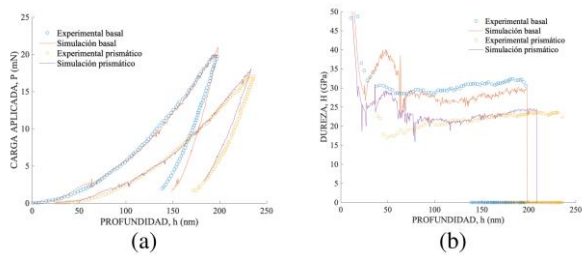
A partir de la reconstrucción y evaluando las imágenes, se obtienen todos los valores para caracterizar cada grado (Tabla 2).

Tabla 2. Resumen de la caracterización de cada grado del WC-Co.

Variables	Medium	Submicron
Color Co	1799	0
%vCO <sub>3D</sub> (%)	49.72	2.15
%vCO <sub>2D</sub> (%)	48.15 ± 3.67	3.30 ± 1.05
Tamaño grano (µm)	2.15 ± 0.89	0.66 ± 0.68
Densidad granos (granos/µm <sup>3</sup> )	49.72	2.15
C <sub>WC,3D</sub>	24.70	95.29
C <sub>WC,2D</sub>	26.06 ± 3.34	93.30 ± 1.89

4.3. Calibración del modelo M7WC con anisotropía.

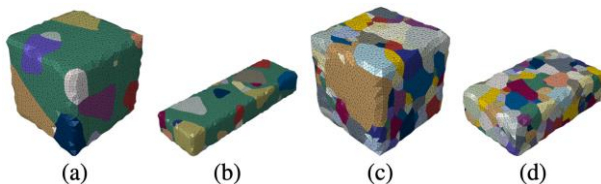
Se ajustan los parámetros para aproximar la simulación a los datos experimentales obtenidos por Roa et al. (2015) [5]. Los datos obtenidos se comparan con los experimentales en la Figura 6.



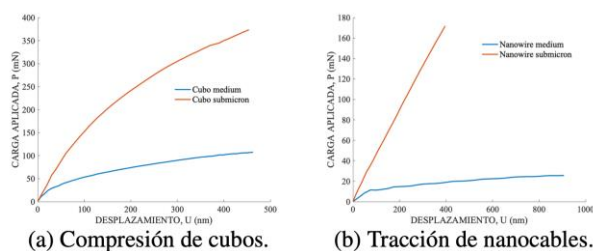
**Figura 6.** Comparación de los datos obtenidos de la simulación y de los experimentales [5] de fuerza (a) y de dureza (b) respecto la profundidad. El plano prismático se ha desplazado 25 nm a la derecha para mejorar su visualización.

#### 4.4. Simulación con microestructura.

Para cada grado se genera una malla con toda la microestructura de un nanocable a traccionar y de un cubo a comprimir (Figura 7). Los resultados de los ensayos de carga-desplazamiento se muestran en la Figura 8.



**Figura 7.** Mallas del grado Medium (a y b) y del Submicron (c y d) para simular en Abaqus.



**Figura 8.** Gráficos de carga-desplazamiento de las microestructuras simuladas.

## 5. CONCLUSIONES.

En cuanto a la reconstrucción a partir de las imágenes FIB:

- Se ha ideado un modo analítico de encontrar el color asociado al ligante del metal duro.
- Se ha creado un modo de obtener la reconstrucción tridimensional con la matriz metálica en un único grupo y con los granos cerámicos en el resto. Además, se ha automatizado el proceso.
- Se ha caracterizado cada uno de los grados de WC-Co dando datos coherentes con lo observado o lo conocido. Además, se ha contrastado la información de distintos modos para, así, tener mayor certeza de la fiabilidad de la reconstrucción.
- Se ha podido observar la forma de los granos y comprobar la orientación de algunos de ellos.

En cuanto a la simulación del material:

- Se ha conseguido añadir anisotropía utilizando la ecuación del elipsoide en los parámetros del modelo M7WC.
- Se ha podido recrear el comportamiento durante un ensayo de nanoindentación mostrado en los datos experimentales.
- Se ha logrado controlar la orientación de la anisotropía en el modelo pudiendo ser independiente para cada grano.
- Se ha logrado simular una microestructura completa obteniendo una malla a partir de la reconstrucción.

## 6. REFERENCIAS.

- [1] L. Prakash, “Fundamentals and general applications of hardmetals,” in *Comprehensive Hard Materials*. Elsevier, 2014, vol. 1, pp. 29–90.
- [2] S. Lay and J.-M. Missiaen, “Microstructure and morphology of hardmetals,” in *Comprehensive Hard Materials*. Elsevier, 2014, vol. 1, pp. 91–120.
- [3] L. Makhele-Lekala, S. Luyckx, and F. Nabarro, “Semi-empirical relationship between the hardness, grain size and mean free path of wc-co,” *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, vol. 19, pp. 245–249, 7 2001.
- [4] S. Luyckx and A. Love, “The dependence of the contiguity of wc on co content and its independence from wc grain size in wc-co alloys,” *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, vol. 24, pp. 75–79, 1 2006.
- [5] B. Roebuck and E. Bennett, “Phase size distribution in wc/co hardmetal,” *Metallography*, vol. 19, pp. 27–47, 2 1986.
- [6] J. Roa, E. Jimenez - Pique, C. Verge, J. Tarragó, A. Mateo, J. Fair, and L. Llanes, “Intrinsic hardness of constitutive phases in wc-co composites: Nanoindentation testing, statistical analysis, wc crystal orientation effects and flow stress for the constrained metallic binder,” *Journal of the European Ceramic Society*, vol. 35, pp. 3419–3425, 11 2015.
- [7] T. Csanádi, M. Bl’anda, A. Duszová, N. Q. Chinh, P. Szommer, and J. Dusza, “Deformation characteristics of wc micropillars,” *Journal of the European Ceramic Society*, vol. 34, pp. 4099–4103, 12 2014.
- [8] T. Namazu, T. Morikaku, H. Akamine, T. Fujii, K. Kuroda, and Y. Takami, “Mechanical reliability of fibfabricated wc-co cemented carbide nanowires evaluated by mems tensile testing,” *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 150, pp. 126–134, 12 2015.
- [9] Z. Liu, C. Yue, X. Li, X. Liu, S. Y. Liang, and L. Wang, “Research on tool wear based on 3d fem simulation for milling process,” *Journal of Manufacturing and Materials Processing*, vol. 4, p. 121, 12 2020.
- [10] S. Faris, S. Salman, and M. Mohamed, “Prediction of cutting tool performance with double rake geometry using finite element technique,” *Journal*

- of Engineering and Applied Sciences, vol. 13, pp. 10 502–10 509, 01 2018.
- [11] E. Jiménez-Piqué, M. Turon-Vinas, H. Chen, T. Trifonov, J. Fair, E. Tarrés, and L. Llanes, “Focused ion beam tomography of wc-co cemented carbides,” *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, vol. 67, pp. 9–17, 9 2017.
- [12] I. Borgh, P. Hedström, J. Odqvist, A. Borgenstam, J. Ågren, A. Gholinia, B. Winiarski, P. J. Withers, G. E. Thompson, K. Mingard, and M. G. Gee, “On the three-dimensional structure of wc grains in cemented carbides,” *Acta Materialia*, vol. 61, pp. 4726–4733, 8 2013.
- [13] P. V. S. Machado, F. C. Caner, L. Llanes, and E. J. Pique, “A computational framework for micromechanical modelling of WC-Co composites,” *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, vol. 111, p. 106053, 2 2023.
- [14] E. Jiménez-Piqué, “Indentation of ceramics” in *Encyclopedia of Materials: Technical Ceramics and Glasses*. Elsevier, 2021, pp. 718–732.
- [15] A. C. Fischer-Cripps, *Nanoindentation*. Springer New York, 2002.
- [16] W. Oliver and G. Pharr, “An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments,” *Journal of Materials Research*, vol. 7, pp. 1564–1583, 6 1992.
- [17] T. Scientific, *Avizo Software 9 User’s Guide*. Thermo Scientific, 2018.
- [18] P. Bažant and B. H. Oh, “Efficient numerical integration on the surface of a sphere,” *ZAMM Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, vol. 66, pp. 37–49, 1986.
- [19] F. C. Caner and Z. P. Bažant, “Microplane model m7 for plain concrete. i: Formulation,” *Journal of Engineering Mechanics*, vol. 139, pp. 1714–1723, 12 2013.
- [20] F. C. Caner, Z. P. Bažant, and R. Wendner, “Microplane model m7f for fiber reinforced concrete,” *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 105, pp. 41–57, 6 2013.
- [21] M. Brocca and Z. P. Bažant, “Microplane constitutive model and metal plasticity,” *Applied Mechanics Reviews*, vol. 53, pp. 265–281, 10 2000.
- [22] M. Brocca, Z. P. Bažant, and I. M. Daniel, “Microplane model for stiff foams and finite element analysis of sandwich failure by core indentation,” *International Journal of Solids and Structures*, vol. 38, no. 44, pp. 8111–8132, 2001.
- [23] T. Csanádi, M. Bl’anda, N. Q. Chinh, P. Hvizdoš, and J. Dusza, “Orientation-dependent hardness and nanoindentation-induced deformation mechanisms of wc crystals,” *Acta Materialia*, vol. 83, pp. 397–407, 1 2015.