

Etude des interfaces prismatiques WC/Co dans les alliages WC-Co

Sabine Lay*, Patricia Donnadieu, Marc Loubradou

SIMAP, INPGrenoble-CNRS-UJF, BP75, 38402, St-Martin d'Hères, France

Résumé – Dans les alliages WC-Co, les grains WC sont facettés, délimités par trois facettes prismatiques et deux facettes basales. Comme WC n'est pas un cristal centrosymétrique, deux familles de plans prismatiques peuvent exister à l'interface avec Co. L'étude du contraste en microscopie électronique en transmission à haute résolution permet de déterminer le type de plans prismatiques qui constituent l'interface entre WC et Co.

1. Introduction

Les alliages WC-Co sont préparés par frittage en phase liquide à partir d'un mélange de poudres de WC et Co. Après élaboration, ils sont constitués d'un squelette de grains WC entourés d'une matrice riche en Co. Les grains WC adoptent une forme de prisme à base triangulaire tronquée délimitée par des facettes prismatiques $\{10\bar{1}0\}$ et basales $\{0001\}$ [1]. Le fait que WC ne soit pas un cristal centrosymétrique entraîne l'existence de deux familles de plans prismatiques non équivalentes. Des expériences de mouillage et des mesures de dureté montrent une différence marquée de propriétés entre les facettes $\{10\bar{1}0\}$ et $\{-10\bar{1}0\}$ [2]. Une des deux familles présente des facettes nettement plus développées à l'interface avec Co. Dans le cristal WC, chaque atome W est lié à six atomes C et vice versa. Les interfaces prismatiques de type I comprennent des atomes pour lesquels deux liaisons W-C sont rompues alors que les interfaces de type II comprennent des atomes pour lesquels quatre liaisons sont rompues (Fig. 1). Les plans d'interface peuvent être terminés par des atomes W ou C.

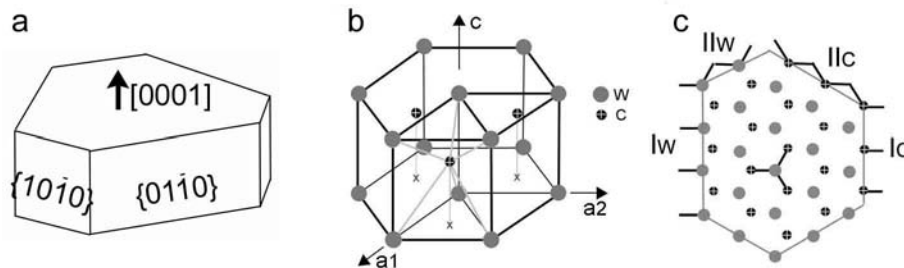


Figure 1 – (a) Forme des cristaux dans les alliages WC-Co. (b) Maille de WC. (c) Projection de WC selon $\langle 0001 \rangle$ montrant les deux types d'interface prismatique I et II.

Des calculs ab-initio ont été réalisés pour déterminer les énergies de ces différentes interfaces [3]. Ces calculs prévoient que les facettes les plus stables sont de type I terminées par des atomes W notées IW. Les facettes les plus développées seraient ainsi de type IW. Dans ce travail, la microscopie électronique en transmission à haute résolution (METHR) est utilisée pour obtenir des données expérimentales sur les interfaces prismatiques WC/Co. Dans un premier temps, il est montré à partir de simulations du réseau de WC que la nature des plans peut être déduite du contraste des images de METHR. Ensuite un exemple d'interface WC/Co est étudié.

2. Résultats

Les cristaux WC ont été observés selon $\langle 0001 \rangle$ afin d'orienter les plans prismatiques parallèles au faisceau d'électrons. L'examen des images simulées de WC montre que dans certaines conditions de défocalisation, les taches noires ou blanches adoptent une forme triangulaire (Fig. 2). La comparaison de l'image et de la boîte d'atomes simulée permet de déduire la position des atomes C et W dans l'image. Cette forme triangulaire est plus marquée pour des épaisseurs faibles de WC mais n'est pas modifiée lorsque l'épaisseur augmente (Fig. 3).

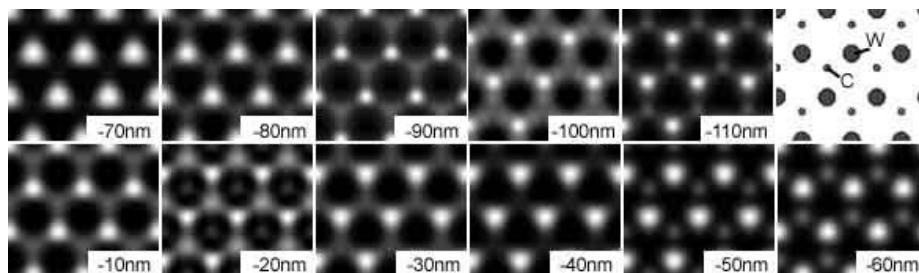


Figure 2 – Images simulées de WC selon $\langle 0001 \rangle$ d'après [4] pour des défocalisations variant de -10nm à -110nm et une épaisseur d'échantillon de 4.5nm (Microscope JEOL 4000EX, Cs=1.05mm, divergence du faisceau=0.8mrd, défocalisation chromatique=9nm).

* Auteur à contacter : sabine.lay@ltpcm.inpg.fr – Tel : 04 76 82 66 28

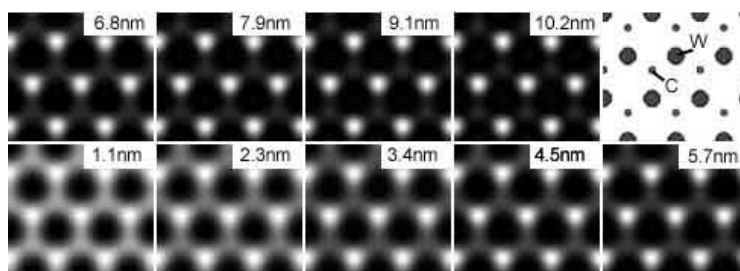


Figure 3 – Images simulées de WC selon $\langle 0001 \rangle$ pour des épaisseurs variant de 1.1nm à 10.2nm et une défocalisation de -30nm.

Une série d'images a été réalisée en METHR avec des défocalisations croissantes dans un alliage WC-Co fritté 2h à 1450°C et contenant un excès de W. La première étape a consisté à déterminer le plus précisément possible les valeurs de défocalisation. Pour cela, la transformée de Fourier de l'amorphe au bord du trou de la lame a été comparée au profil de la fonction de transfert de contraste du microscope. Le pas de défocalisation a ainsi pu être déterminé assez précisément. Il est de l'ordre de -20nm. La comparaison avec les images simulées notamment pour les images proches du minimum de contraste permet d'affiner les valeurs de défocalisation utilisées. Un bon accord est alors obtenu entre la série d'images expérimentales et simulées. L'image réalisée pour -30nm montrant bien le contraste en forme de triangle a été utilisée pour étudier la nature du plan à l'interface (Fig. 4). La position des interfaces prismatiques est en accord avec un plan de type IW ou IIC. Comme la nature des atomes à l'interface ne peut être déduite de ces observations, il n'est pas possible de trancher entre ces deux types de plans.

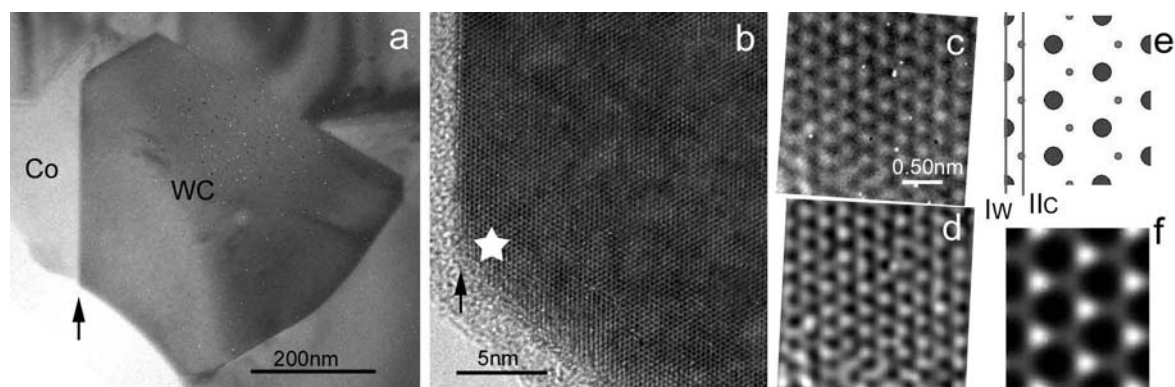


Figure 4 – Exemple de grain WC observé selon $\langle 0001 \rangle$. (a) Vue d'ensemble. L'interface prismatique étudiée est désignée par une flèche. (b) La zone observée en METHR est indiquée par une étoile. (c,d) Image du cristal WC avec une défocalisation égale à -30nm et image filtrée correspondante. La forme triangulaire des taches noires et blanches de l'image est mise en évidence. (e,f) Projection de WC selon $\langle 0001 \rangle$ et image simulée pour une défocalisation de -30nm et une épaisseur de 3.4nm. Un bon accord est observé avec l'image expérimentale.

3. Conclusion

L'observation de grains WC selon $\langle 0001 \rangle$ dans les alliages WC-Co en METHR permet de préciser la nature des plans prismatiques présents aux interfaces avec Co. Il s'agit de plans de type IW contenant des atomes de W pour lesquels deux liaisons W-C ont été rompues ou de plans de type IIC contenant des atomes C pour lesquels quatre liaisons W-C ont été rompues. Ces résultats sont en accord avec les calculs de stabilité des interfaces qui prévoient les interfaces IW comme étant de plus basse énergie.

4. Références

- [1] H.E. Exner, *Physical and Chemical nature of cemented carbides*, Int. Metals Rev 24 (1979) 149-173.
- [2] D.N. French and D.A. Thomas, *Crystallographic polarity of WC*, Anisotropy, Single-Cryst. Refract. Compounds, Proc. Int. Symp., Ohio 1967, Vahldiek Fred W. Ed., 1 (1968) 55-66.
- [3] M. Christensen, G. Wahnstrom, S. Lay and C.H. Allibert, *Morphology of WC grains in WC-Co alloys: Theoretical determination of grain shape*, Acta Mater 55 (2007) 1515-1521.
- [4] P. Stadelmann, *EMS, a Software package for for electron diffraction analysis and HREM simulation in materials science*, Ultramicroscopy 21 (1987) 131-146.