

## SHORT COMMUNICATION

### SC9 - MBS-TEST: SIMULATION OF TITANIUM SOLIDIFICATION AND EXPERIMENTAL VALIDATION BY NEUTRON DIFFRACTION

I. Lopez<sup>1</sup>, P. Millet<sup>1</sup>, A. Lodini<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>LACM-DTI EA4302 LRCCEA 0534, Université de Reims Champagne-Ardenne, France <sup>2</sup>Laboratoire Léon Brillouin, CEA-Saclay, 91191 Gif sur Yvette Cedex, France

#### KEYWORDS

Castability, titanium, finite element, stress, neutron diffraction.

#### INTRODUCTION

The clinical performance of a prosthetic metallic part is affected by the difficulties encountered during casting of alloys, which may provoke the formation of alloy defects. In particular, the thermal factors are often the source of various serious defects such as porosity and incomplete casting (figure 2). The exact reproduction with its finest details of a wax pattern is essential, particularly in dentistry. Many tests have been developed to assess the ability to cast the molten alloy. It must be able to fill sample pattern, which can appear under different forms (grid, spiral, disk...). We selected the MBS-test developed by Meyer and al. (figure 1). Initially, this model will help to determine the castability of different alloys. We modeled this disk in order to visualize the residual stresses by the finite element analysis method. In a second step, in order to determine if the metallurgical structure appears to be homogeneous, fine-grained with a level of internal porosity as low as possible, we used a non-destructive method: the residual stress evaluation by neutron diffraction.



Figure 1: MBS model geometry



Figure 2: Example of incomplete casting

#### MATERIAL AND METHODS

We simulated the solidification of titanium by finite element method, using the software foundry View Cast ®. The resulting thermal field distribution was exported to FEMAP and the residual stress analysis was performed with MSC/NASTRAN.

The sample analyzed represents only a quarter of the MBS model (figures 3 et 4).

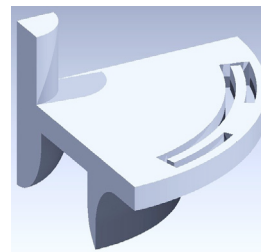


Figure 3: Geometry of the titanium part analysed

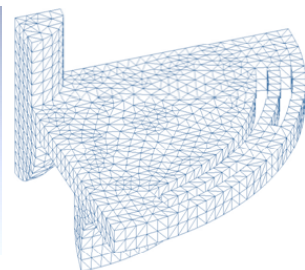


Figure 4: Mesh containing 2836 nodes

We then experimentally validated the simulations, using a non-destructive method: neutron diffraction. The measurements were conducted on line G5.2 at the laboratory Léon Brillouin (Saclay, France), on titanium disks, casting by high axial centrifugation under secondary vacuum.

The conditions of measurements were:

- Wavelength :  $\lambda = 0,332 \text{ nm}$
- Ti {101},  $a = 0,295 \text{ nm}$ ,  $c = 0,4686 \text{ nm}$
- $2\theta = 95,85^\circ$

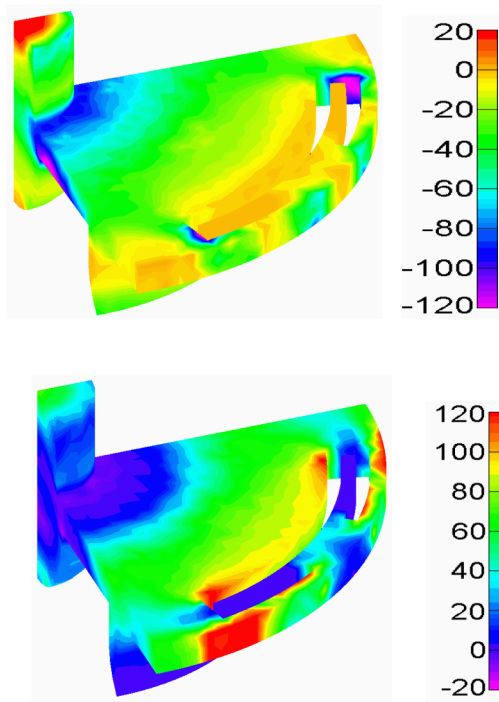
Mechanical conditions:

- $\sigma_{ZZ} = 0$ ,  $\sigma_{XX}$ ,  $\sigma_{YY}$

#### Results

The simulation allowed us to map residual

stresses in the MBS model. The uneven cooling of the solidified titanium part, from different temperatures, down to room temperature (300 K) introduces residual stresses in both radial ( $r$ ) and tangential ( $\theta$ ) direction (figures 5); the residual stresses in axial direction ( $z$ ) is negligible.



Figures 5: left, residual stresses distribution in radial direction,  $\sigma_r$  [MPa] and, right, in tangential direction,  $\sigma_\theta$  [MPa].

As one can observe, the residual stresses in radial direction are mainly compressive, while in tangential direction residual stress are mainly tensile.

### STRESSES EVALUATION BY NEUTRON DIFFRACTION

The level of residual stresses in the experimental MBS disk is particularly low and ge-

nerally uniform, with a maximum of residual stress limited to 50 MPa.

### DISCUSSION AND CONCLUSIONS

The simulation used to display the good casting of titanium shows that, all parts of the MBS mold are met fully and correctly. Simulations can also locate the “hot areas” where faults can concentrate and therefore facilitate the elimination of these risk areas. Based on the results of the simulation, we add the weights of varying sizes and shapes to move the withdrawal zones outside the final part. Finally, we investigated these risk areas by neutron diffraction to determine the real residual stresses. Our results show that the grains are fine, homogeneous and in most cases, the stresses level remain relatively low. MBS-test allows verifying the quality of casting alloys. It is an ideal tool to test the competence of casting machines, this for the various alloys used in dentistry and especially for titanium and titanium alloys, more difficult to cast.

### REFERENCES

1. Meyer J.M. and al (2002) Journal de Biomatériaux Dentaire 19, 7-36.
2. Watanabe I. and al. (2000) Journal of materials science: Materials in medicine 11, 547-553.
3. Atwood R.C. and al (2005) Materials Science and Engineering 25, 255-262.
4. Lu J., (1996) Handbook of Measurement of residual Stresses, 238.

## SHORT COMMUNICATION

### SC9 - TEST-MBS: SIMULATION DE LA SOLIDIFICATION DU TITANE ET VALIDATION EXPÉRIMENTALE PAR DIFFRACTION NEUTRONIQUE

I. Lopez<sup>1</sup>, P. Millet<sup>1</sup>, A. Lodini<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>LACM-DTI EA4302 LRCCEA 0534, Université de Reims Champagne-Ardenne, France <sup>2</sup>Laboratoire Léon Brillouin, CEA-Saclay, 91191 Gif sur Yvette Cedex, France

#### MOTS CLÉS

Test de coulabilité, titane, éléments finis, contrainte, diffraction de neutrons

#### INTRODUCTION

Les performances cliniques d'un élément prothétique métallique sont conditionnées par la qualité de la mise en œuvre des alliages, qui peut parfois subir des échecs de coulée. En particulier, les facteurs thermiques sont souvent à l'origine de défauts plus ou moins graves tels que les porosités et les coulées incomplètes (figure 2). L'exacte reproduction de la maquette en cire dans les détails les plus fins est indispensable, particulièrement en odontologie. De nombreux tests ont été mis au point pour apprécier l'aptitude à la coulabilité de l'alliage en fusion. Il doit être capable de remplir des éprouvettes, dites technologiques spécialisées, pouvant se présenter sous différentes formes (grille, spirale, disque ...). Nous avons sélectionné le test-MBS développé par Meyer et coll. (figure 1). Dans un premier temps, ce modèle permettra de déterminer la coulabilité de l'alliage et de visualiser les contraintes résiduelles par la méthode des éléments finis. Et dans un second temps, de vérifier si la structure métallurgique est bien homogène, à grain fin avec



Figure 1: Géométrie du modèle MBS



Figure 1: Géométrie du modèle MBS

un taux de porosité interne le plus faible possible à l'aide de techniques non destructives (diffraction de neutrons, petits angles, diffraction aux rayons X ...)

#### MATÉRIEL ET MÉTHODES

Nous avons simulé la solidification du titane, par la méthode des éléments finis, à l'aide du logiciel de fonderie View Cast®. La distribution du champ thermique qui en résulte a été exportée vers FEMAP et l'analyse des contraintes résiduelles a été exécutée avec MSC/NASTRAN.

L'échantillon analysé ne représente qu'un quart de la pièce totale (figures 3 et 4).

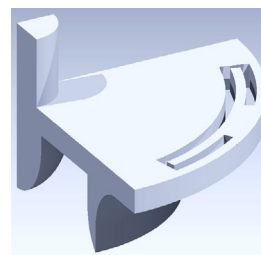


Figure 3: Géométrie de la pièce titane analysée

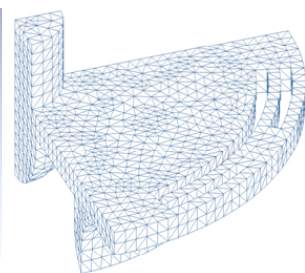


Figure 4: Maillage contenant 2836 noeuds

Nous avons ensuite validé expérimentalement les simulations à l'aide d'une technique non destructive : la diffraction neutronique. Les mesures sont effectuées ligne G5.2 au laboratoire Léon Brillouin (Saclay, France), sur des disques de titane, coulés par centrifugation axiale, sous vide secondaire.

Les conditions de mesures sont:

- longueur d'onde:  $\lambda = 0,332 \text{ nm}$
- Ti {101},  $a = 0,295 \text{ nm}$ ,  $c = 0,4686 \text{ nm}$

-  $2\theta = 95,85^\circ$

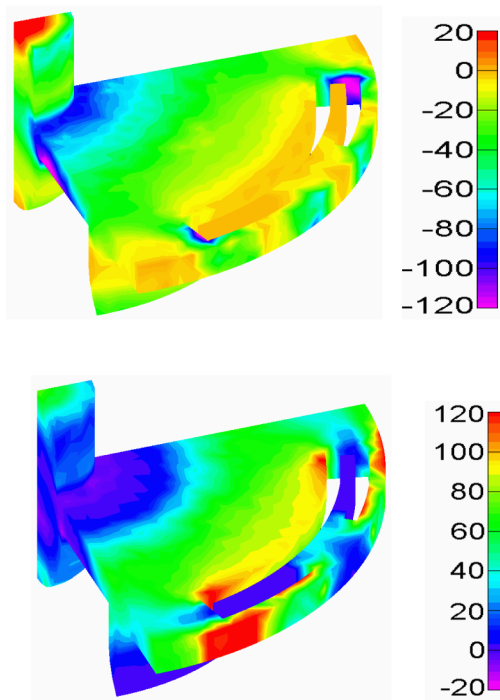
Conditions mécaniques:

-  $\sigma_{ZZ} = 0, \sigma_{XX}, \sigma_{YY}$

Utilisant le pic de diffraction  $\{101\}$  de l'échantillon de titane, nous obtenons la cartographie du niveau de déformation puis de contrainte.

## RÉSULTATS

La simulation nous a permis d'établir la cartographie des contraintes résiduelles au sein du modèle MBS. Le refroidissement inégal de la pièce de titane solidifié, à différentes températures, jusqu'à la température ambiante (300 K) entraîne une contrainte résiduelle dans la direction radiale ( $r$ ) et tangentielle ( $\theta$ ) (figures 5) ; la contrainte résiduelle dans la direction axiale ( $z$ ) est négligeable.



Figures 5: A gauche, contraintes résiduelles dans la direction radiale,  $\sigma_r$  [MPa] et à droite, contraintes dans la direction tangentielle,  $\sigma_\theta$  [MPa].

Nous pouvons constater que les contraintes résiduelles dans la direction radiale sont principalement compressives, alors que dans la

direction tangentielle les contraintes résiduelles sont principalement de traction.

## ETUDE PAR DIFFRACTION NEUTRONIQUE

Le niveau de contrainte résiduelle au sein du disque MBS est particulièrement bas et globalement homogène, avec des valeurs maximales d'environ 50 MPa.

## DISCUSSION ET CONCLUSIONS

La première simulation permet de visualiser la bonne coulée du titane, toutes les parties du moule MBS sont remplies entièrement et correctement. Les simulations permettent également de localiser les zones "chaudes" où peuvent se concentrer les défauts et par conséquent de faciliter l'élimination de ces zones à risques. En fonction des résultats de la simulation, nous ajoutons des masselottes de tailles et de géométries variables afin de déplacer les zones de retrait à l'extérieur de la pièce définitive. Ensuite, nous avons étudié ces zones à risque par diffraction de neutrons afin de déterminer les contraintes résiduelles effectives. Nos résultats prouvent que les grains sont fins, homogènes et que dans la plupart des cas, le niveau de contrainte est relativement faible. Le test-MBS permet de vérifier la qualité de coulée des alliages. Il est un outil idéal pour tester la compétence des machines de coulée, ceci pour les divers alliages employés en odontologie et surtout pour le titane et les alliages de titane encore difficile à couler.

## BIBLIOGRAPHIE

1. Meyer J.M. et coll. (2002) Journal de Biomatériaux Dentaire 19, 7-36.
2. Watanabe I. et coll. (2000) Journal of materials science: Materials in medicine 11, 547-553.
3. Atwood R.C. et coll. (2005) Materials Science and Engineering 25, 255-262.
4. Lu J., (1996) Handbook of Measurement of residual Stresses, 238.