

Cálculo de los Coeficientes Térmicos Efectivos en un Compuesto Cerámico-Cerámico

M.A. BERTINETTI, P.A. TURNER, R.E. BOLMARO Y C.N. TOMÉ¹

INSTITUTO DE FÍSICA ROSARIO (CONICET-UNR) - FAC. DE CIENCIAS EXACTAS, INGENIERIA Y AGRIMENSURA (UNR)
BV. 27 DE FEBRERO 210 BIS - (2000) ROSARIO - ARGENTINA
e-mail: pablo@ifir.edu.ar

El grado de orientación de las fibras en un compuesto cerámico bifásico juega un rol muy importante en la determinación de varias propiedades de estos materiales cerámicos. En el estudio de las propiedades de los mismos interesa la orientación de las fibras y también la distribución isótropa de las mismas en la matriz. Con el objetivo de evaluar los coeficientes térmicos efectivos de un compuesto cerámico-cerámico, se trabaja con una matriz de Al_2O_3 reforzada con fibras de SiC. Estudios anteriores dan lugar a una formulación autoconsistente que permite el cálculo de propiedades elásticas y térmicas de compuestos teniendo en cuenta los efectos de orientación e interacción entre fibras. En el presente trabajo se aplica dicho esquema a estimar las constantes térmicas totales del compuesto, y analizar su dependencia con la fracción de fibras y distribución de las mismas. La formulación desarrollada está basada en la combinación del método de inclusión equivalente de Eshelby y el método de Mori y Tanaka para el cálculo de las tensiones promedio en la matriz.

Introducción

La producción de compuestos cerámicos bifásicos por sinterizado lleva a un estado de altas tensiones internas en el material a temperatura ambiente debido a la diferencia en la contracción térmica entre ambos materiales. Estudios anteriores¹ realizados para el compuesto bifásico Al_2O_3/SiC dan lugar a una formulación autoconsistente que permite el cálculo de propiedades elásticas y térmicas de compuestos. Es de fundamental importancia que esta formulación incluya los efectos de orientación e interacción entre fibras para una determinada Distribución de Direcciones de Fibras (DFD)², pues el grado de orientación de las fibras en un compuesto cerámico-cerámico juega un rol muy importante en la determinación de las propiedades térmicas y elásticas de los mismos. En el presente trabajo se evalúan los coeficientes térmicos efectivos de este compuesto mediante el uso de este método autoconsistente y se analiza la dependencia de los mismos con la distribución de las fibras y con el efecto que una determinada fracción finita de las mismas ejerce sobre el estado de tensiones de cada fibra. Este modelo es aplicable a una distribución totalmente general y arbitraria de inclusiones y a materiales con coeficientes térmicos y constantes elásticas totalmente anisótropos.

Los valores calculados para una determinada concentración de inclusiones son comparados con valores obtenidos experimentalmente³, observándose un excelente acuerdo entre ambos. Para otras fracciones volumétricas se compara con resultados obtenidos a través de la regla de las mezclas y se analizan los factores que determinan la discrepancia entre ambos, enfatizando la alta dependencia de estos valores con el grado de inhomogeneidad entre matriz y fibras.

Formulación

En un trabajo previo² se calcularon las tensiones inducidas térmicamente en una matriz de Al_2O_3 reforzada con fibras de SiC usando el esquema de inclusión equivalente de Eshelby. Las tensiones residuales en las inclusiones se obtienen a través de la resolución de la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned}\sigma_{ij} &= C_{ijkl}^I (\epsilon_{kl}^0 + S_{klmn} \epsilon_{mn}^{**} - \epsilon_{kl}^T) \\ &= C_{ijkl} (\epsilon_{kl}^0 + S_{klmn} \epsilon_{mn}^{**} - \epsilon_{kl}^{**})\end{aligned}\quad (1)$$

donde S es el tensor de Eshelby, ϵ^* es la deformación ficticia que permite tratar la inhomogeneidad como una inclusión con las mismas constantes elásticas que la matriz, ϵ^T es la deformación de transformación dada por los diferentes coeficientes de dilatación térmica,

$\varepsilon^{**} = \varepsilon^* + \varepsilon^T$ es la deformación de transformación efectiva, ε^0 es la deformación uniforme aplicada externamente, C y C^I son las constantes elásticas de la matriz e inclusión respectivamente. Con la resolución de esta ecuación se obtuvieron soluciones analíticas para el caso de una única inclusión embebida en una matriz infinita. Para el caso de una matriz que contiene una concentración finita de inclusiones, es necesario tener en cuenta la interacción entre fibras mediante los campos elásticos que éstas inducen en el medio. Las interacciones han sido tratadas en un modo aproximado a través del cálculo de la tensión promedio en la matriz ejercida por la presencia de las fibras e incorporando esta tensión al problema de una única inclusión como producto de una deformación uniforme aplicada externamente ε^0 , la cual es una incógnita del problema a pesar de ser la misma para todas las inclusiones. La solución requiere una formulación autoconsistente, ya que en la ecuación (1), ε^* y ε^0 son desconocidas¹. Se resuelve la ecuación (1) iterativamente suponiendo que $\varepsilon^0=0$ para la primera iteración, y calculando la deformación ε^* asociada. Se obtiene un valor inicial de tensión en cada inclusión, la cual es utilizada para calcular la deformación promedio en la matriz creada por una concentración finita de inclusiones, todas ellas de igual forma y volumen pero distintas orientaciones. La deformación promedio se calcula a través de la ecuación:

$$\varepsilon_{kl}^0 = - \int_{\phi\theta\omega} R_{kk'} R_{ll'} (S_{k'l'mn}(\Omega) \varepsilon_{mn}^{**} - \varepsilon_{k'l'}^{**}) \rho(\phi, \theta, \omega) \sin\theta \, d\theta \, d\phi \, d\omega \quad (2)$$

donde $R(\phi, \theta, \omega)$ es la matriz que transforma desde ejes de las fibras a ejes de la muestra, $[S(\Omega)\varepsilon^{**} - \varepsilon^{**}]$ es el tensor de deformación elástica en el sistema de las fibras, $\rho(\phi, \theta, \omega)$ es la función densidad de fibras con orientaciones caracterizadas por los ángulos (ϕ, θ, ω) , y $df = \rho(\phi, \theta, \omega) \sin\theta \, d\theta \, d\phi \, d\omega$ es la fracción diferencial de fibras dentro del ángulo sólido definido por ϕ , θ y ω^2 .

El nuevo valor de la deformación promedio ε^0 es introducido en la ecuación (1), la tensión en

cada fibra es recalculada, y una nueva estimación de la deformación promedio en la matriz es obtenida. Este procedimiento se repite hasta que la deformación promedio calculada de este modo coincide con aquella calculada en el paso anterior.

Esta formulación permite el cálculo de las propiedades térmicas y elásticas de los compuestos teniendo en cuenta la interacción entre fibras en una aproximación de primer orden. Este esquema es aplicado para calcular los coeficientes térmicos efectivos α^c y analizar su dependencia con la fracción de fibras presentes y la DFD. Estos coeficientes se definen como el cociente entre la deformación total inducida en el compuesto ε^{tot} por un cambio uniforme de temperatura y el correspondiente incremento ΔT en la temperatura:

$$\alpha_{ij}^c = \frac{\langle \varepsilon_{ij}^{tot} \rangle_v}{\Delta T} = \frac{1}{\Delta T} \left(\frac{1}{V} \int_M \varepsilon_{ij}^{tot} \, dV + \frac{1}{V} \int_\Omega \varepsilon_{ij}^{tot} \, dV \right) \quad (2)$$

donde la integral de volumen se separa en una integral sobre el dominio de la matriz (M) y otra sobre el dominio de las inclusiones (Ω). El primer término es evaluado usando los valores promedio de la deformación sobre el dominio de la matriz. Para evaluar el segundo término se calcula la deformación elástica en cada fibra a partir de la formulación desarrollada mediante el esquema de Eshelby (ecuación 1) y se le adiciona la deformación térmica. La deformación total debe ser expresada en sistema de ejes de la muestra de modo de poder evaluar la integral sobre todo el dominio de las fibras. El desarrollo de esta formulación permite obtener la siguiente expresión para los coeficientes térmicos efectivos¹:

$$\alpha_{ij}^c = (1-f) \alpha_{ij}^M + \int_{\phi\theta\omega} R_{ii'} R_{jj'} \alpha_{i'j'}^I \, df + \frac{1}{\Delta T} \int_{\phi\theta\omega} R_{ii'} R_{jj'} \varepsilon_{i'j'}^* \, df \quad (4)$$

Los primeros dos términos del segundo miembro representan los coeficientes térmicos efectivos dados por la regla de las mezclas, y el

último término es la corrección asociada con el efecto de interacción de inhomogeneidades. Si todas las inclusiones están igualmente orientadas, esta expresión se reduce a:

$$\alpha^c = (1-f)\alpha^M + f\alpha^I + f\epsilon^* / \Delta T \quad (5)$$

y la desviación de la regla de las mezclas se hace evidente.

En Tomé et al.², ϵ^* depende del término que tiene en cuenta la inhomogeneidad $\Delta C = (C^I - C^M)$ y la deformación de origen térmico $\epsilon^T = (\alpha^I - \alpha^M)\Delta T$ asociada con los diferentes coeficientes térmicos de la matriz e

inclusiones, pero el efecto de inhomogeneidad es el responsable de la mayor contribución. Cuando el método autoconsistente que tiene en cuenta los efectos de orientación e interacción entre fibras es aplicado, ϵ^* también depende del campo promedio ϵ^0 asociado con una concentración finita de inclusiones. Las variaciones de la tensión promedio en la matriz están completamente relacionadas con las correspondientes variaciones de ϵ^* , y consecuentemente con los coeficientes efectivos α^c .

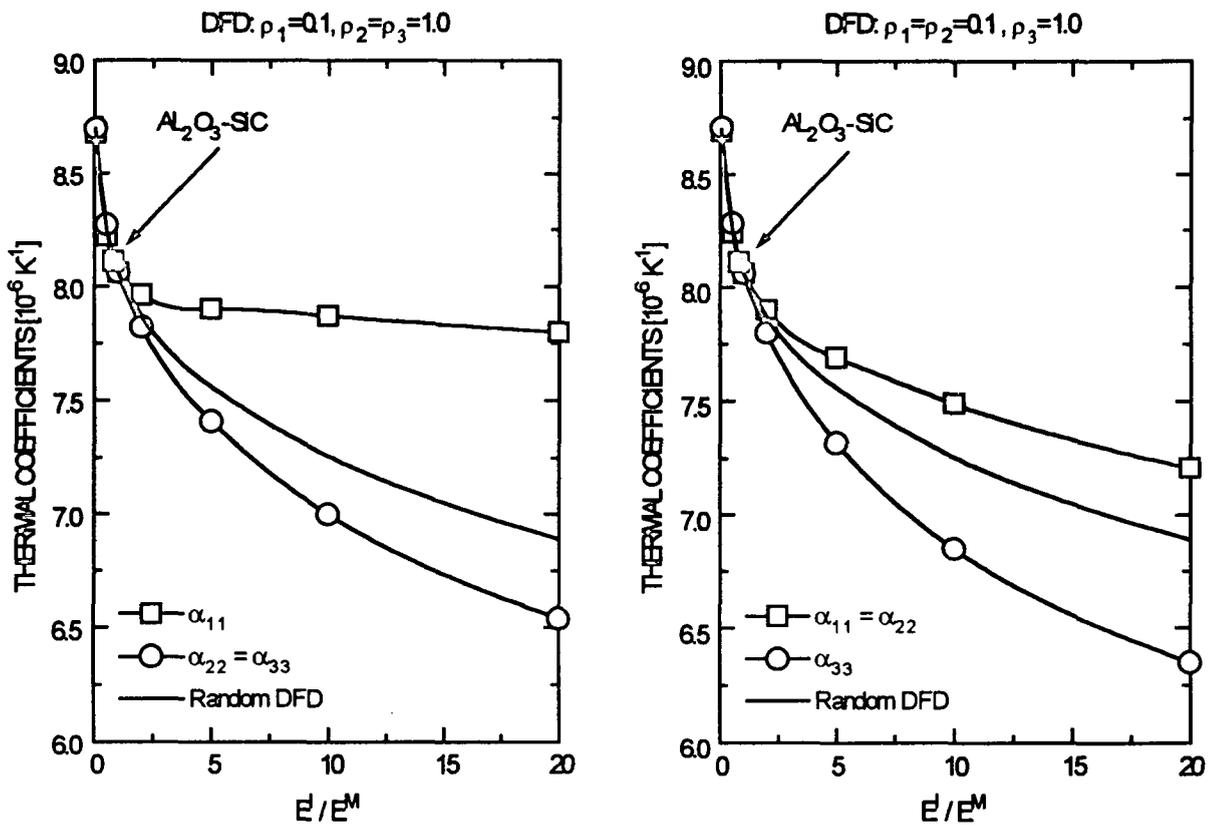


Figura 1. Coeficientes térmicos efectivos. Comparación entre DFD random y, DFDs planar y axial

Resultados y Conclusiones

Los valores obtenidos de los coeficientes térmicos efectivos para el compuesto Al_2O_3/SiC mediante el empleo del método autoconsistente son comparados (para fracciones volumétricas desde $f=0.0$ hasta $f=0.5$) con aquellos predichos por la regla de las mezclas para un decremento de temperatura de $1350^\circ C$ (Tabla I). Para $f=0.18$ el valor experimental es $\alpha_{exp}^I = 8.00 \times 10^{-6} \text{ } ^\circ C^{-1}$.

El desvío de los coeficientes α^c de la regla de las mezclas está dado por los valores adoptados por la autodeformación equivalente ϵ^* . En el compuesto cerámico estudiado, Alúmina reforzada con fibras de SiC, ΔC es pequeño. Los resultados obtenidos difieren sólo ligeramente de los predichos por la regla de las mezclas.

Cuando el efecto de la interacción entre fibras es tomado en cuenta a través de la deformación

promedio en la matriz, la corrección de la deformación se debe a la deformación equivalente y ésta última es diferente de cero cuando la diferencia entre los módulos elásticos entre inclusión y matriz son diferentes. Distintos valores adoptados para la diferencia en los módulos elásticos $\Delta C = (C^I - C^M)$ indican que ϵ^* depende fuertemente de esta diferencia. A medida que ΔC aumenta, los valores predichos de α^c comienzan a modificarse significativamente respecto a los obtenidos por la regla de las mezclas. En la Figura se muestra el efecto que la distribución e interacción de las fibras ejercen a través de la autodeformación ϵ^* sobre α^c . Para diferencias mayores entre las constantes elásticas, las componentes de α^c se separan de la curva correspondiente a distribución aleatoria de fibras. Para el caso

particular en que $\Delta C=0$ (en la figura corresponde a $(C^I/C=1)$), se observa claramente que en el cálculo de estos coeficientes térmicos no interviene el término que representa la interacción a través de ϵ^* y, por lo tanto, los valores predichos por la regla de las mezclas y el esquema autoconsistente coinciden para cualquier DFD². Para el material estudiado en este trabajo el efecto de la DFD y la interacción no implican una corrección importante en comparación con la predicción de los coeficientes calculados por la regla de las mezclas. Cálculos realizados sobre materiales con mayor grado de inhomogeneidad indican que la formulación teórica desarrollada¹ puede ser usada para predecir propiedades térmicas en materiales donde el efecto de interacción entre fibras es importante.

TABLA I: COEFICIENTES TÉRMICOS EFECTIVOS α^c Y REGLA DE LAS MEZCLAS α^{PR} PARA DFD ALEATORIA Y NO ALEATORIA #.

f	DFD							Regla de las mezclas
	$\rho_1 = \rho_2 = \rho_3 = 1$	$\rho_1 = 0.1, \rho_2 = \rho_3 = 1$			$\rho_1 = \rho_2 = 0.01, \rho_3 = 1$			
%	α^c	α_{11}^c	α_{22}^c	α_{33}^c	α_{11}^c	α_{22}^c	α_{33}^c	α^{PR}
0.00	8.80	8.80	8.80	8.80	8.80	8.80	8.80	8.80
0.10	8.42	8.44	8.41	8.41	8.43	8.43	8.41	8.39
0.18	8.11	8.14	8.10	8.10	8.12	8.12	8.09	8.06
0.20	8.03	8.06	8.02	8.02	8.05	8.05	8.01	7.98
0.30	7.64	7.68	7.62	7.62	7.66	7.66	7.61	7.57
0.40	7.24	7.28	7.22	7.22	7.26	7.26	7.20	7.00
0.50	6.84	6.88	6.82	6.82	6.86	6.86	6.80	6.75

(Todos los coeficientes α en unidades de $10^{-6} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$)

Referencias

- 1- M.A.Bertinetti, P.A.Turner, R.E.Bolmaro and C.N.Tomé, J. Am. Ceram. Soc., in press (1994).
- 2- C.N.Tomé, M.A.Bertinetti, and S.Mac Ewen, J. Am. Ceram. Soc., 73 [11] 3428-32 (1990).
- 3- S. Majumdar, D. Kupperman, and J. Singh, J. Am. Ceram. Soc., 71 [10] 858-63 (1988).