

PROPIEDADES EFECTIVAS DE COMPUESTOS CON ALTA FRACCIÓN DE VOLUMEN DE LA FASE DE REFUERZO.

M. Bertinetti, A. Fourty, J. Signorelli, R. Bolmaro

* Instituto de Física Rosario-Fac. Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura. CONICET-UNR. Bv. 27 de febrero 210 bis. 2000. Rosario. Argentina.
e-mail: mageli@ifir.ifir.edu.ar

Los cálculos de propiedades efectivas promedio, basados en modelos micromecánicos, presentan muy buen acuerdo con los datos experimentales cuando se aplican a compuestos con baja fracción de volumen de la fase de refuerzo. Sin embargo, cuando la fracción de volumen de esta fase es mayor que el 50%, la correlación ya no es tan buena. En el presente trabajo, tratando la interacción de partículas según la teoría de campo medio de Mori y Tanaka⁽¹⁾, se realiza el cálculo de propiedades promedio variando la fracción de volumen de la fase de refuerzo entre 0 y 1. El mismo cálculo se efectúa nuevamente invirtiendo el carácter de refuerzo-matriz de las fases e incorporando un parámetro geométrico, denominado fracción de aglomerados, como factor de peso entre los resultados de ambas configuraciones. Estos nuevos valores se comparan con datos experimentales de módulos elásticos promedio, observándose una notable mejora en el ajuste de las curvas teóricas para todo el rango de fracciones de volumen.

Estimates of overall elastic properties of composite materials, obtained by micromechanic models, are in good agreement with experimental values, specially when they are applied to composites with a low volume fraction of the reinforcing phase. When the volume fraction is close to 50% the agreement is rather poor. In the present paper, the average properties are calculated as a function of the volume fraction of the reinforcing phase from 0 to 1, following the mean field approximation of Mori and Tanaka⁽¹⁾. The same estimation is performed by inversion of the matrix-reinforcement character of both phases and incorporating a geometric parameter, known as fraction of clusters, as a weight function. These new values are compared to experimental data for average elastic moduli. We show that a better agreement is obtained for the whole range of volume fractions of the reinforcing phase.

1.- Introducción

Las propiedades macroscópicas de un compuesto bifásico dependen tanto de las propiedades individuales de los elementos constituyentes como de su cantidad relativa, de la manera en que están distribuidos y, en muchos casos, de la forma y tamaño de las partículas. Se han hecho importantes esfuerzos para relacionar la estructura interna con el comportamiento del material. Los parámetros que cuantifican la microestructura de un material bifásico son principalmente: fracción de volumen de las fases, relación de ejes y tamaño medio de las partículas, camino libre medio dentro de una fase, contigüidad y continuidad de las fases.

Se han desarrollado diversos modelos micromecánicos capaces de calcular las propiedades efectivas de compuestos, que presentan un muy buen acuerdo con los datos experimentales cuando se aplican a compuestos con baja fracción de volumen de la fase de refuerzo. En este trabajo el modelo utilizado está basado en una combinación del problema de la inhomogeneidad o problema de Eshelby⁽²⁾ con el método de Mori-Tanaka o aproximación de campo medio⁽¹⁾. Es importante destacar que los valores predichos son ligeramente menores que los valores obtenidos experimentalmente para altas fracciones de volumen de la fase de refuerzo. Esto se debe fundamentalmente a que el modelo empleado considera sólo interacción de primer orden (entre una partícula y un campo medio efectivo), y para altas fracciones de volumen se hace necesario tener en

cuenta correlaciones de mayor orden, por ejemplo interacción entre primeros vecinos, lo cual permitiría una aproximación más realista del comportamiento de estos compuestos. Sin embargo una corrección más sencilla sin recurrir a estos tipos de interacción puede lograrse introduciendo un parámetro que contemple de alguna manera la información de la forma en que las partículas están distribuidas en la matriz para corregir así este pequeño desajuste en la predicción de los módulos efectivos.

2.- Modelo micromecánico

Previamente se han presentado trabajos en donde se ha expuesto en forma detallada el desarrollo de los métodos implementados a fin de predecir las propiedades elásticas y térmicas promedio en materiales compuestos bifásicos⁽³⁻⁵⁾. Se ha demostrado que las mismas pueden ser calculadas haciendo uso del esquema de inhomogeneidad elástica de Eshelby⁽²⁾ y el efecto de la interacción entre fibras fue tenido en cuenta a través del método de Mori y Tanaka⁽¹⁾. La solución del problema se planteó en términos de la tensión y deformación mediante una solución explícita, lo cual permitió obviar los problemas de convergencia presentados por los modelos autoconsistentes o iterativos para altas fracciones de volumen del refuerzo. El método usual para modelizar los compuestos consistió en considerar a las fibras como inclusiones inhomogéneas, elástica y térmicamente anisótropas, embebidas en una matriz, e introducir el efecto de interacción entre fibras mediante

la siguiente expresión:

$$\langle \tilde{\sigma} \rangle_M = -f \langle \tilde{\sigma}^\infty \rangle_\Omega$$

donde f es la fracción de volumen, M y Ω son los dominios de la matriz y de las inhomogeneidades, respectivamente, y $\tilde{\sigma}^\infty$ es la solución de Eshelby del problema de una única inhomogeneidad en una matriz infinita. Cabe destacar que el método desarrollado sólo hace una aproximación de una única partícula embebida en un campo medio representado por la ecuación anterior.

La ecuación a resolver siguiendo lo anteriormente descrito, es:

$$C_f^I (E^0 + \epsilon^{int} + S_f \epsilon_f^* - \alpha_f^I \Delta T) = C^M (E^0 + \epsilon^{int} + (S_f - I) \epsilon_f^* - \alpha^M \Delta T)$$

donde C_f^I , C^M , α_f^I y α^M son las constantes elásticas y coeficientes térmicos de la fibra y matriz respectivamente, S_f y ϵ_f^* son el tensor de Eshelby y la autodeformación equivalente asociados a la inhomogeneidad con orientación $f \equiv (\varphi, \theta, \omega)$, donde φ y θ son los dos ángulos esféricos necesarios para describir la orientación del eje de cada fibra respecto a un marco externo de referencia, mientras que ω representa las rotaciones alrededor del eje de cada fibra. E^0 es la deformación impuesta y ϵ^{int} es la deformación que representa el campo de interacción. El conjunto de ecuaciones que se desarrollan lleva a obtener todas las propiedades térmicas y elásticas del compuesto a través de la expresión que relaciona la deformación promedio del compuesto con las condiciones de borde:

$$\langle \epsilon \rangle_D = E^0 + 2\pi f \iint_{(\varphi, \theta) = f} p_f \epsilon_f^* df = C^{C-1} \Sigma + \alpha^C \Delta T$$

donde $E^0 = C^{M-1} \Sigma + \alpha^M \Delta T$

El método desarrollado y aplicado en este trabajo permite hacer una adecuada descripción de la densidad de orientaciones de las inclusiones cualesquiera sea su forma y orientación, y la misma queda representada por una función de distribución gaussiana, la cual permite describir en forma satisfactoria las principales características de cualquier distribución en particular.

3.-Descripción del parámetro de ponderación

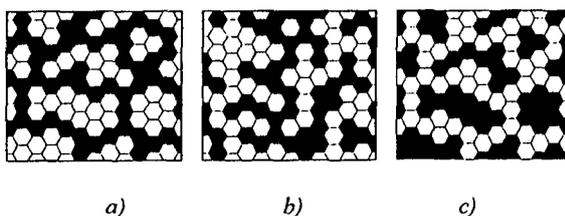


Figura 1. Diferentes configuraciones para la misma fracción de volumen. a) fase α aislada, b) distribución aleatoria de fases, c) fase α formando una estructura de red.

En la figura 1 se muestra una esquematización de un material bifásico en el que las partículas de ambas fases están representadas por hexágonos blancos (fase α) y

negros (fase β). La figura corresponde a diferentes configuraciones de la distribución de las fases para una misma fracción de volumen. Para una distribución aleatoria, a medida que la fracción de volumen de la fase β aumenta, se observa una evolución microestructural desde granos de fase β aislados inmersos en una matriz de fase α , a regiones de fase α rodeadas de matriz β . En el rango de fracciones de volumen intermedias se presenta una transición con ambas fases interpenetrantes. La extensión de esta región dependerá de la tendencia que tengan las partículas de una misma fase a aglutinarse o a distribuirse en la matriz de manera aleatoria.

La contigüidad, parámetro definido por Gurland⁽⁶⁾, ha sido utilizada por numerosos autores^(7,8) para introducir la información microestructural en la predicción de propiedades mecánicas. En el caso de partículas equiaxiales, con igual tamaño de grano y con distribución aleatoria, la contigüidad es lineal con la fracción de volumen por lo que no logra explicar las transiciones en las propiedades mecánicas que presentan una forma sigmoidal. Un parámetro más apropiado a estos efectos es la fracción de 'clusters', introducido por Werner et al.⁽⁹⁾

Un cluster es un conjunto de granos de la fase considerada en contacto entre sí y completamente rodeado por granos de la otra fase. La fracción de clusters se obtiene contando el número de grupos de granos aglutinados de ambas fases rodeados por la otra fase, N^α y N^β . A partir de estos números la fracción de clusters se define como:

$$r^\alpha = \frac{N^\alpha}{N^\alpha + N^\beta} \quad r^\beta = 1 - r^\alpha = \frac{N^\beta}{N^\alpha + N^\beta} \quad (3)$$

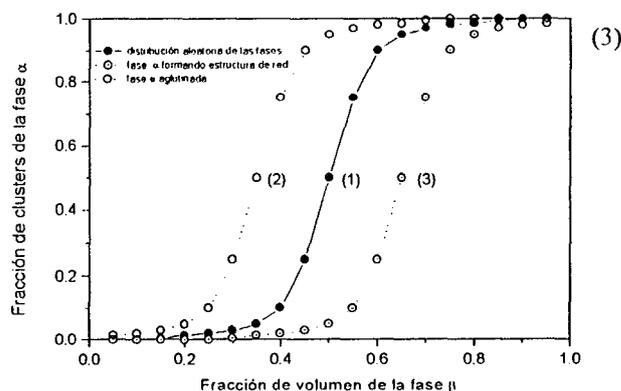


Figura 2. Variación de la fracción de clusters de fase α en función de la fracción de volumen de la fase β para distintas configuraciones de la distribución de las fases.

En la figura 2 se muestra la fracción de clusters de la fase α en función de la fracción de volumen de la fase β , obtenida para una distribución aleatoria de partículas. A baja fracción de volumen de la fase β , $r^\alpha \rightarrow 0$ y para alta fracción de volumen de la fase β , $r^\alpha \rightarrow 1$. En el caso de una distribución aleatoria de partículas, $r^\alpha \rightarrow 0.5$ para $f_{\beta} = 0.5$. Si las partículas α tienen mayor tendencia a aglutinarse, la curva (1) se corre hacia la izquierda (2). Si en cambio, las partículas α tienden a formar una

estructura de red, la curva (1) se corre hacia la derecha (3).

4. Comparación del modelo con datos experimentales

Uno de los compuestos ampliamente estudiados es el WC/Co, material de importancia tecnológica debido a su utilización para herramientas de corte. Como parte de estos estudios se han medido módulos de Young de estas aleaciones en un amplio rango de composición⁽¹⁰⁻¹⁶⁾. Doi et al.⁽¹⁰⁾ han mostrado, por primera vez, que los módulos de Young de las aleaciones no dependen del tamaño de las partículas de WC, sino solamente de su fracción de volumen. Han verificado asimismo esta independencia para los módulos de corte, concluyendo que los módulos elásticos en general no dependen del tamaño de las partículas de WC.

En la figura 3 se muestran datos experimentales de la dependencia del módulo de Young con la fracción de volumen de partículas de WC en un amplio rango, tomando como fuente a diversos autores^(10,13). Los valores reportados de los módulos de Young de la matriz Co sin refuerzo y de WC se dan en la Tabla I. En la matriz Co la variaciones se deben a la presencia de distintas cantidades de elementos aleantes (Al, Cr, Mo, etc.) y en el WC son debidos a la porosidad residual.

Otro compuesto especialmente interesante es el W/Cu, utilizado en la industria aeroespacial debido a su resistencia a las altas temperaturas y a choques térmicos, y tenacidad a baja temperatura. Krock⁽¹⁴⁾ ha medido el módulo de Young de compuestos fabricados infiltrando Cu en una matriz porosa de W. Estos datos se muestran en la figura 4. Los valores reportados para W y Cu puros se dan en la Tabla I.

TABLA I. VALORES REPORTADOS DE LOS MÓDULOS DE YOUNG

Co	WC
179-248 GPa ⁽¹¹⁾	710-722 GPa ⁽¹³⁾
2.19×10^4 kg/mm ² ⁽¹⁰⁾	722×10^4 kg/mm ² ⁽¹⁰⁾
206 GPa ⁽¹²⁾	703 GPa ⁽¹²⁾
Cu	W
103.1 GPa ⁽¹⁵⁾	393.7 GPa ⁽¹⁵⁾

Dado que en la representación esquemática de la microestructura el rol de matriz y refuerzo parece invertirse a altas fracciones de volumen de la segunda fase, se incorpora este efecto en el modelo micromecánico propuesto. En las figuras 3 y 4 se superponen a los puntos experimentales, las curvas provenientes de la simulación obtenidas tomando como matriz alternadamente una y otra fase. Puede observarse que las curvas teóricas definen dos límites, superior e inferior, dentro de los cuales quedan contenidos los puntos experimentales. Si llamamos E_1 al módulo de Young, definido por la curva de mayor concavidad, obtenida con la fase α (blanda) como matriz (Co y Cu, en las figuras 3 y 4 respectivamente) y E_2 al módulo de Young, definido por la curva de menor concavidad,

obtenida con la fase β (dura) como matriz (WC y W, en las figuras 3 y 4 respectivamente), podemos incorporar a la fracción de clusters como una función de peso de la siguiente manera:

$$E_c = r^n * (E_1 - E_2) + E_2$$

En el compuesto WC/Co la curva de E_c ajusta muy bien los datos experimentales, mostrando claramente una transición en la región cercana a fracción de volumen de WC=0.5.

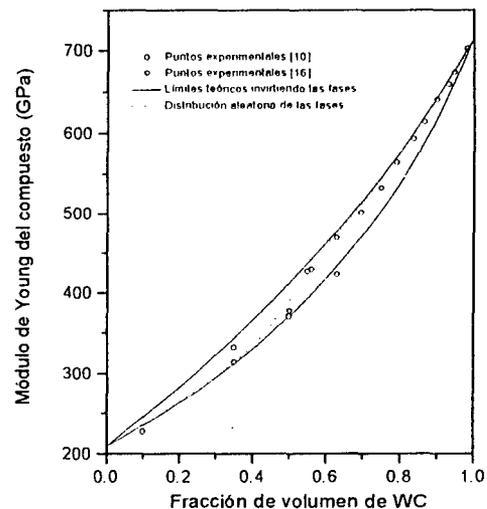


Figura 3. Módulo de Young de compuestos WC/Co en función de la fracción de volumen de la fase WC.

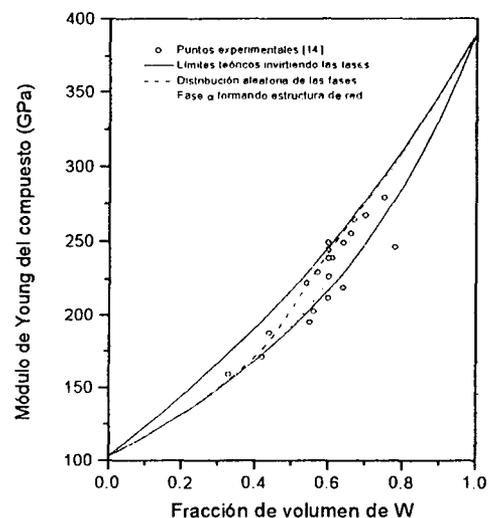


Figura 4. Módulo de Young de compuestos W/Cu en función de la fracción de volumen de la fase W.

En el compuesto W/Cu, introduciendo a curva (1) de fracción de clusters (que supone una distribución aleatoria de partículas) se observa también un buen ajuste de los datos experimentales. No obstante, es claro que la transición se produce a fracciones de volumen del W mayores a 0.5. Esto se atribuye a que, debido al proceso de fabricación del compuesto, la distribución de

partículas deja de ser aleatoria. Krock⁽¹⁴⁾ informa que los estudios metalográficos de las probetas muestran que el tungsteno se presenta como partículas dispersas en una matriz Cu. Por lo tanto es más adecuado el uso de la curva (3) de fracción de clusters. La corrección así realizada se grafica también sobre la figura 4 en línea de puntos, y claramente se observa que el ajuste de las propiedades mecánicas es mejor cuando el parámetro de peso contempla la configuración real de distribución de las partículas en el material.

5.-Conclusiones

Dos compuestos bifásicos con una amplia variación de la fracción de volumen de la fase de refuerzo fueron estudiados, Co/WC y Cu/W. Los módulos de Young efectivos fueron evaluados a través de modelos micromecánicos como el descrito en sección 2, alternando el rol de las fases como matriz y refuerzo. Se ha introducido información sobre la microestructura de materiales compuestos a través del parámetro fracción de clusters. Se ha logrado con esto un mejor ajuste de los datos experimentales. Con esto se concluye que para el estudio de las propiedades mecánicas los parámetros adecuados para relacionar el comportamiento macroscópico con la estructura interna de los materiales son aquellos capaces de describir cuál es el material que está formando una estructura de red que soporte la mayor parte de la deformación.

6.-Referencias

- 1.- Mori, T. and Tanaka, K., Acta Metall. 21, 571, (1973)
2. Eshelby J., Proc.R.Soc.London, A241, 376 (1957)
3. M.Bertinetti, P.Turner, R.Bolmaro y C.Tomé 79° AFA (1994)
4. M.Bertinetti, A.Roatta, P.Turner y R.Bolmaro 80° AFA (1995)
5. J.Signorelli, M.Bertinetti y P.Turner 81° AFA (1996)
6. J. Gurland, Trans. Met. Soc. AIME, 212, 452, (1958)
7. P. Kwon and C. K. H. Dharan, Acta metall. mater., 43, 1141, (1995)
8. Z. Fan, A. P. Miodownik and P. Tsakirooulos, Mat. Sci. and Technology, 9, 1094, (1993)
9. E. Werner, T. Siegmund, H. Weinhandl and F. D. Fischer, Appl Mech Rev, 47, s231, (1994)
10. H. Doi, Y. Fujiwara, K. Miyaka and Y. Oosawa, Metall. Trans., 1, 1417, (1970)
11. R. B. Ross, Metallic Materials Specification Handbook, 4th edn. Chapman & Hall, London, (1992)
12. I. L. Mogford, Metallurgical Reviews, 12, 49, (1967)
13. M. Lee and R. S. Gilmore, J. Mater. Sci., 17, 2657, (1982)
14. R. H. Krock, Proc. Amer. Soc. Test. Mat., 63, 605, (1963)
15. G. Simmons and H. Wang, Handbook, The M.I.T Press, England, (1988)
16. C. Nishimatsu and J. Gurland, Trans. Am. Soc. Metals, 52, 469, (1960)