

ESTUDIO NUMÉRICO DE LA DECOHESIÓN EN MATERIALES COMPUESTOS REFORZADOS CON PARTÍCULAS

J. Segurado, J.Llorca

Departamento de Ciencia de Materiales, E.T.S. de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos
Universidad Politécnica de Madrid, C/ Profesor Aranguren s/n, 28040 Madrid, España.

Resumen

La decohesión entre las partículas y el refuerzo es un mecanismo de nucleación de daño frecuente en materiales compuestos. El efecto de esta decohesión en el comportamiento de materiales compuestos reforzados con partículas esféricas se ha estudiado mediante la simulación por elementos finitos de celdas multipartícula 3D que representan una microestructura típica de estos materiales (estadísticamente homogénea). El proceso de decohesión se ha simulado mediante elementos finitos de intercara con un modelo de fisura cohesiva y situados en las superficies de todas las esferas.

El efecto del daño en algunas propiedades macroscópicas (curva tensión-deformación, resistencia mecánica y ductilidad) y microscópicas (patrones de decohesión) se ha obtenido simulando el comportamiento para diferentes valores de la energía de fractura de la intercara y de su resistencia. La disminución de la energía de fractura de la intercara redujo tanto la ductilidad como la resistencia del compuesto. La reducción de la resistencia a tracción de las intercaras supuso una disminución de la resistencia del material, mientras que la ductilidad del compuesto presentó un mínimo para un valor de la resistencia pero aumentó para resistencias de la intercara mayores y menores.

Abstract

The particle-matrix decohesion is a damage mechanism in composite materials. The effect of the decohesion on the mechanical behavior of sphere reinforced composites was studied by the finite element simulations of 3D multiparticle cells representing a typical microstructure of these materials (statistically homogeneous). The decohesion process was simulated using interface finite elements with cohesive crack behavior and placed on the particle surfaces.

The effect of the damage on some macroscopic (stress-strain curve, strength and ductility) and microscopic (decohesion patterns) properties was obtained by simulating the composite behavior using different values of the interface strength and fracture energy. The reduction of the interface fracture energy produced a reduction of both the ductility and strength of the composite. The reduction of the interface strength reduced the composite strength, while the composite ductility showed a minimum for certain strength value and it grew for higher and lower values of the interface strength.

1. INTRODUCCION

La decohesión entre el refuerzo y la matriz es un modo de daño frecuente en materiales compuestos cuando las partículas de refuerzo son mucho más resistentes que la matriz. El primer estudio riguroso de este fenómeno en el campo de la micromecánica fue realizado por Needleman [1] que propuso un modelo bidimensional de fisura cohesiva para simular la separación progresiva de la matriz y el refuerzo. El modelo cohesivo de Needleman ha sido usado posteriormente para simular mediante elementos finitos y en el contexto de celdas axilimétricas la decohesión de un material compuesto reforzado con partículas. Estos estudios tienen dos limitaciones principales. La primera es que no son capaces de estudiar el efecto de la distribución real del refuerzo en la matriz porque parten de una

disposición regular de las partículas en la matriz. La segunda es que los modelos axilimétricos no son adecuados para estudiar el daño, porque al ser modelos periódicos de una sola partícula, predicen la decohesión conjunta y repentina del refuerzo en toda la microestructura, contrariamente a la localización progresiva que se observa en la realidad.

Estas limitaciones se superan al emplear para las simulaciones por elementos finitos modelos de celda multipartícula tridimensionales para representar la microestructura aleatoria real de estos materiales, [2], [3]. En estos modelos, el daño puede introducirse en las intercara matriz/partícula con un modelo de comportamiento cohesivo en 3D.

El estudio riguroso del problema de la decohesión mediante la micromecánica permite investigar el efecto de las diferentes propiedades de las intercara

(resistencia y ductilidad) en el comportamiento mecánico y en los patrones de daño del material compuesto. Este estudio es importante ya que experimentalmente no es fácil variar sistemáticamente las propiedades de las intercara. Además la investigación proporciona información relevante sobre el tipo de intercara necesaria para mejorar una propiedad dada del material compuesto y permite comprender los procesos micromecánicos que producen el deterioro del material por decohesión.

2. GENERACIÓN DEL MODELO

El comportamiento mecánico del material compuesto se obtuvo mediante el análisis por el método de elementos finitos de un "volumen representativo" de material. Este volumen estaba representado por un cubo de lado L con 35 esferas iguales distribuidas en su interior de forma aleatoria, que denominaremos la celda multipartícula. El número de esferas se eligió a priori, y su idoneidad se determinó después al comprobar que las máximas diferencias en las curvas tensión deformación de dos distribuciones diferentes fue menor a un 5%.

El material que se va a simular tiene una fracción volumétrica $\xi=0.15$ y su microestructura es aleatoria y estadísticamente isotrópica. Las coordenadas de los centros de las partículas se han generado usando el algoritmo de adsorción secuencial aleatoria modificado (AASAM, [2]) para asegurar estas condiciones.

A partir de las distribuciones de centros de partículas creadas mediante el algoritmo AASAM se crearon los modelos de elementos finitos. Se generaron esferas a partir de las posiciones de los centros y de los radios, y aquellas que intersectaban con alguna cara del cubo fueron cortadas en el número de partes necesario y copiadas a las correspondientes caras opuestas del cubo. Tres caras contiguas del cubo se mallaron usando elementos triangulares cuadráticos, y las mallas se copiaron a las caras opuestas de igual geometría para asegurar la posición idéntica de los nodos en caras opuestas. El modelo total (matriz+esferas) se malló con tetraedros modificados de 10 nodos y control de modos espureos. Una malla típica contiene unos 60000 elementos y 90000 nodos, y es lo suficientemente fina para dar resultados precisos en plasticidad [3].

Se aplicaron condiciones de contorno periódicas en cada par de caras opuestas. Si a tres lados concurrentes del cubo les asignamos los ejes de coordenadas x_1, x_2, x_3 las condiciones de contorno periódicas pueden expresarse como función del vector de desplazamientos \mathbf{u} :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(x_1, x_2, 0) - \mathbf{u}_3 &= \mathbf{u}(x_1, x_2, L) \\ \mathbf{u}(x_1, 0, x_3) - \mathbf{u}_2 &= \mathbf{u}(x_1, L, x_3) \\ \mathbf{u}(0, x_2, x_3) - \mathbf{u}_1 &= \mathbf{u}(L, x_2, x_3) \end{aligned} \quad (1)$$

siendo $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3$ los vectores de desplazamiento en cada una de las tres caras.

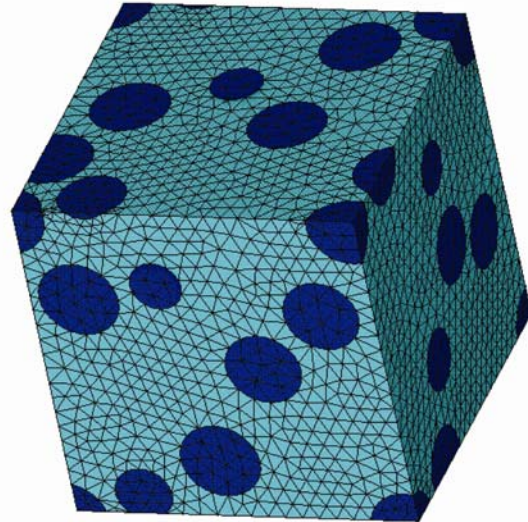


Fig. 1. Modelo de elementos finitos de una celda multipartícula con distribución estadísticamente homogénea, $\xi=0.15$.

La simulación de un estado de tracción uniaxial (en el eje x_3) se consigue con $\mathbf{u}_3=(0,0,u)$, $\mathbf{u}_1=(u_1,0,0)$, $\mathbf{u}_2=(0,u_2,0)$ donde u_1 y u_2 se obtienen de forma natural de aplicar las condiciones de equilibrio:

$$\begin{aligned} \int T_1 d\Omega &= 0 \text{ en } x_1 = 0 \\ \int T_2 d\Omega &= 0 \text{ en } x_2 = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

donde T_1 y T_2 son las tracciones normales que actúan sobre los planos $x_1=0$ y $x_2=0$, respectivamente. La deformación verdadera en el eje x_3 viene dada por $\ln(1+u/L)$ y la tensión de Cauchy correspondiente se obtiene dividiendo la carga total actuando sobre la cara $x_3=0$ por su sección transversal.

Simulación de la decohesión

La decohesión de la intercara matriz/partículas se ha simulado mediante la introducción de elementos finitos de intercara en las superficies de todas las partículas. El elemento de intercara consiste en dos superficies de 6 nodos que inicialmente están superpuestas, y que conectan las caras de los tetraedros cuadráticos adyacentes. El elemento está formulado para grandes desplazamientos y puede incluir cualquier ley cohesiva tracción-apertura, [4].

Las tracciones cohesivas que aparecen entre las superficies de la grieta para una apertura dada se han

simulado mediante el modelo cohesivo de Tvergaard y Hutchinson [5], modificado para tres dimensiones. Este modelo define una apertura generalizada λ , dada por

$$\lambda = \sqrt{\left(\frac{\Delta u_n}{\Delta u_{cn}}\right)^2 + \left(\frac{\Delta u_{t1}}{\Delta u_{ct}}\right)^2 + \left(\frac{\Delta u_{t2}}{\Delta u_{ct}}\right)^2} \quad (3)$$

donde $\Delta u_n, \Delta u_{t1}, \Delta u_{t2}$ son la apertura normal y las aperturas tangenciales en dos direcciones perpendiculares entre sí, respectivamente. $\Delta u_c, \Delta u_{ct}$ son las aperturas máximas normal y tangencial (que normalmente se toman iguales) para las que la intercara está totalmente decohesionada y no se transmiten tensiones. Las tracciones se derivan de un potencial elástico ϕ , cuya derivada respecto de λ es la función $\sigma(\lambda)$, representada en la Fig. 2. El comportamiento mecánico de la intercara viene totalmente determinado por dos parámetros: resistencia a tracción de la intercara t_c y energía de fractura Γ_i . La formulación incluye una rigidez inicial ajustable E_i para evitar la distorsión en las tensiones a ambos lados de la intercara cuando la grieta aun no se ha comenzado a abrir. El modelo se completó incluyendo la degradación de la rigidez de la intercara con la apertura (Fig. 2).

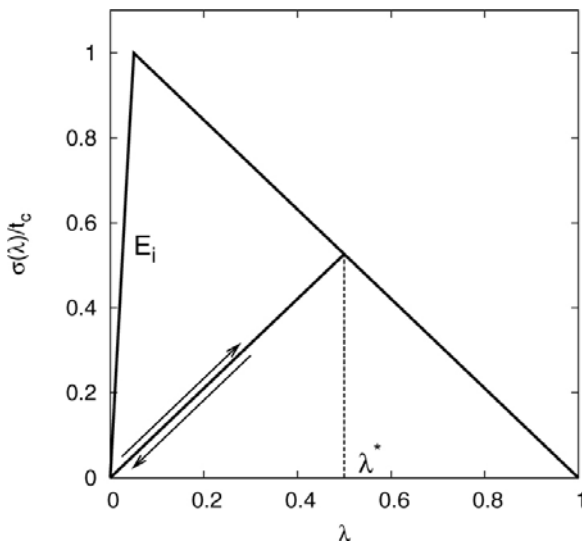


Fig. 2. Función $\sigma(\lambda)$ normalizada por la resistencia a tracción t_c incluyendo la degradación de la rigidez de la fisura en función de la apertura generalizada.

3. RESULTADOS

El material compuesto analizado estaba formado por una matriz reforzada con una fracción volumétrica fija, $\xi=0.15$ de esferas isotropas, elásticas y lineales de constantes elásticas $E_s= 400$ GPa y $\nu_s=0.2$. La matriz se representó como un sólido elasto-plástico con endurecimiento isotrópico y cuya superficie de plastificación venía dada por el criterio de Von Mises. Las constantes elásticas de la matriz fueron $E_m=70$ GPa y $\nu_m=0.33$, y la relación entre la tensión de plastificación σ y la deformación plástica equivalente venía dada por

$$\sigma = A(\epsilon_{pl})^n \quad (4)$$

donde $A=400$ MPa y el coeficiente de endurecimiento por deformación $n=0.15$.

El radio de las partículas –el modelo cohesivo no es adimensional– se eligió igual a 30 μm . Se hicieron dos series de simulaciones. En la primera, la energía de fractura Γ_i fue constante e igual a 400 J/m² mientras que la resistencia media a tracción de las intercaras, t_{c0} , se varió desde 0 hasta una intercara perfecta. En la segunda serie se fijó el valor de la resistencia a tracción ($t_{c0}=500$ MPa) y se varió la energía de fractura en el rango $100 \leq \Gamma_i \leq 800$ J/m². En todos los casos, la tensión particular de la intercara de cada partícula, t_c , se seleccionó de forma aleatoria a partir del valor medio, t_{c0} , siguiendo la estadística de Weibull (con $m=5$).

Se realizaron simulaciones por elementos finitos de un ensayo de tracción uniaxial hasta una deformación $\epsilon=8\%$ y para ello se empleó el código comercial ABAQUS/Standard [6], en las condiciones de no linealidad de tipo geométrico. El elemento finito de intercara se introdujo mediante una subrutina UEL de usuario en ABAQUS.

Previo al estudio paramétrico de las propiedades de la intercara se realizaron cálculos de cuatro distribuciones diferentes con iguales parámetros de intercara, $t_{c0}=500$ MPa y $\Gamma_i=400$ J/m² y se observó que la dispersión obtenida fue menor al 5% [7]. Para los cálculos siguientes se empleó una única celda por propiedad, que se seleccionó como aquella de las cuatro anteriores cuyos resultados fueron más cercanos al valor promedio.

3.1. Efecto macroscópico de la decohesión

Las curvas tensión-deformación uniaxial obtenidas para los diferentes valores de la resistencia a tracción se han representado en la Fig. 3(a). Las curvas obtenidas variando los valores de la energía de fractura de las intercaras se han representado en la Fig. 3(b).

La disminución de la resistencia a tracción de las intercaras en el comportamiento uniaxial produjo una reducción progresiva de la tensión soportada por el compuesto (Fig. 3(a)) hasta alcanzar el comportamiento de un material con huecos cuando $t_{c0}=0$. Esta disminución de la tensión soportada por el material se produjo gracias a un doble efecto: una reducción del límite elástico y una disminución del coeficiente de endurecimiento por deformación. El primer efecto es el más importante aunque solo aparece para intercaras con una resistencia similar o menor al límite elástico de la matriz ($\sigma_y \approx 200$ MPa). La disminución de la capacidad de endurecimiento por deformación del compuesto (pendiente de la curva) fue significativa para materiales con

intercaras resistentes mientras que para intercaras débiles ($t_{c0} < 200$ MPa) apenas fue perceptible.

El efecto principal de la reducción de la energía de fractura de la interfaz en la curva tensión-deformación del material compuesto es una disminución del endurecimiento por deformación (Fig. 3(b)). Esta disminución es muy severa para valores de energía de fractura bajos (intercaras más frágiles) llegando a aparecer un máximo en la curva tensión deformación. No existe efecto de la energía de fractura en el límite elástico del material.

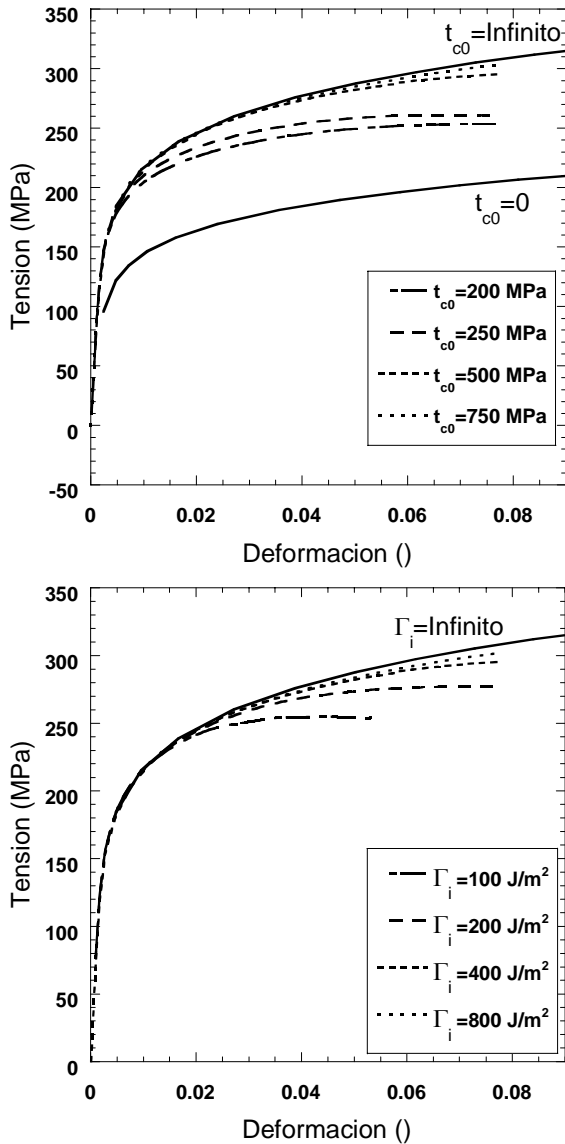


Fig. 3. Curvas tensión deformación del compuesto: (a) variando los valores de la resistencia de las intercaras, (b) variando los valores de la energía de fractura de las intercaras.

La reducción de la capacidad de endurecimiento por deformación observada en las curvas tensión-deformación se traduce en una disminución de la resistencia a tracción y la ductilidad. Existe una amplia evidencia experimental de que la rotura a tracción de materiales compuesto de matriz metálica

se produce inmediatamente después de alcanzarse la inestabilidad plástica [8]. En consecuencia, la ductilidad en tracción, ε_u , y la correspondiente resistencia a tracción, σ_u , pueden aproximarse a partir de la condición de Considère

$$\sigma = \frac{d\sigma}{d\varepsilon} \quad (5)$$

donde σ es la tensión aplicada y $d\sigma/d\varepsilon$ es la capacidad de endurecimiento por deformación. Este criterio también puede aplicarse a materiales compuestos de matriz metálica reforzados con partículas porque la deformación volumétrica producida por la deformación elástica del refuerzo y la generación de huecos es muy pequeña [9].

Los valores de la ductilidad y resistencia a tracción obtenidos con la ecuación (5) para los materiales compuestos simulados se han representado en la Fig. 4.(a) para intercaras con resistencia variable y en la Fig. 4.(b) para intercaras con energías de fractura variable.

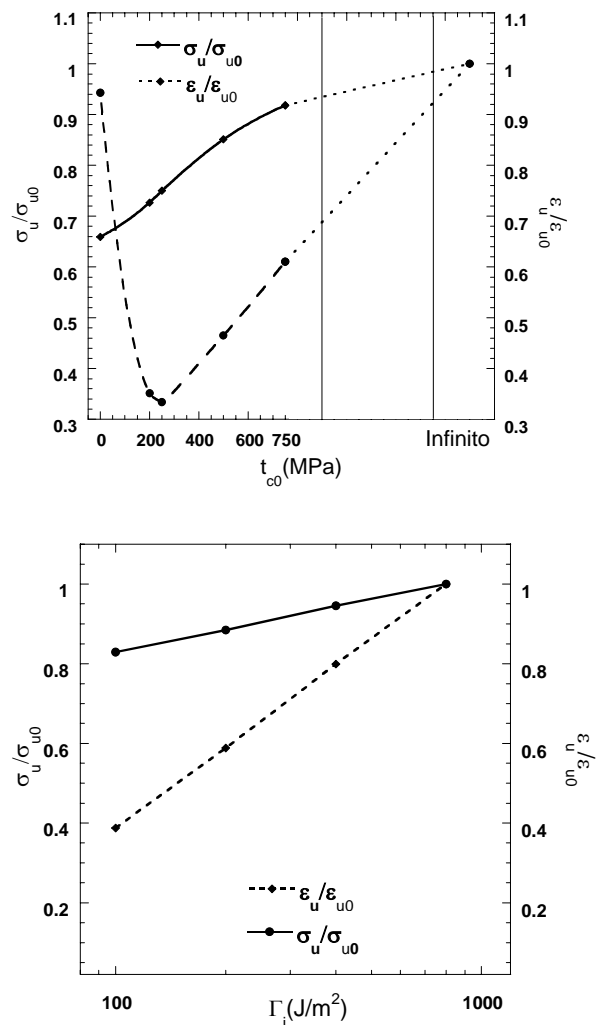


Fig. 4. Valores de la resistencia y ductilidad del compuesto (σ_u) normalizados por los valores de un material con intercaras perfectas (σ_{u0}) en función de

(a) la resistencia de las intercaras, (b) el logaritmo de energía de fractura de las intercaras.

La reducción de la resistencia de las intercaras produjo una disminución progresiva de la resistencia del material compuesto, σ_u , hasta alcanzar un valores del 65% de la resistencia original, σ_{u0} (Fig. 4.(a)). El límite de esa reducción está dado por la resistencia de un material con huecos esféricos en vez de partículas. El efecto de la disminución de la resistencia de las intercaras en la ductilidad es una reducción muy severa de su valor hasta alcanzar un mínimo (0.3 veces el valor máximo, ϵ_{u0}) para un valor dado de la resistencia, volviendo a crecer para resistencias de intercara menores. Este resultado es importante porque muestra que a veces una intercara más débil ($t < 150$ MPa en este caso) entre la matriz y el refuerzo puede mejorar notablemente la ductilidad del compuesto a costa de una pequeña reducción de la resistencia del material. En cualquier caso, la opción óptima (si no se tiene en cuenta la rotura del refuerzo) es una intercara con una tensión de rotura superior al límite elástico de la matriz.

La ductilidad y la resistencia a tracción del material compuesto varían de forma lineal con el logaritmo de la energía de fractura de las intercaras (Fig. 4.(b)) en el rango de energías estudiado. La disminución de la ductilidad llega a ser de un 40% de la ductilidad del material con intercaras perfectas, mientras que la resistencia mecánica del material compuesto se reduce hasta el 60% del valor original. En este caso, los resultados aconsejan la búsqueda de intercaras con alta energía de fractura.

3.1. Patrones microscópicos de decohesión

La ventaja del empleo de modelos micromecánicos es la posibilidad de obtener información sobre el comportamiento efectivo a la vez que una reproducción realista de los micromecanismos de deformación y daño en el material. El efecto que la variación de los parámetros de la intercara tiene en la localización y forma de las decohesiones se estudia a partir de las deformaciones permanentes de los modelos de elementos finitos tras la eliminación de la carga externa aplicada.

El efecto de la disminución de la resistencia de las intercaras puede apreciarse en la Fig.5. donde se ha representado la forma del material compuesto tras una deformación uniaxial de $\epsilon=8\%$ para intercaras con resistencias $t_c=750$ y 250 MPa. El número de partículas decohesionadas es mucho mayor en el segundo caso, ya que los procesos de decohesión se activan para una tensión efectiva menor. Este hecho es la causa de la disminución de la tensión soportada por el material compuesto (Fig. 3(a)) y de su límite elástico porque las partículas decohesionadas no transmiten más tensiones y la fracción de refuerzo efectivo disminuye.

La variación de la energía de fractura de las intercaras no modificó el número de partículas decohesionadas, pero si modificó la forma de las decohesiones. La Fig. 6. representa un detalle de la forma de las decohesiones en una partícula cercana a otras dos en la dirección de carga, para energías de fractura de la intercara $\Gamma_i=800$ y 100 J/m².

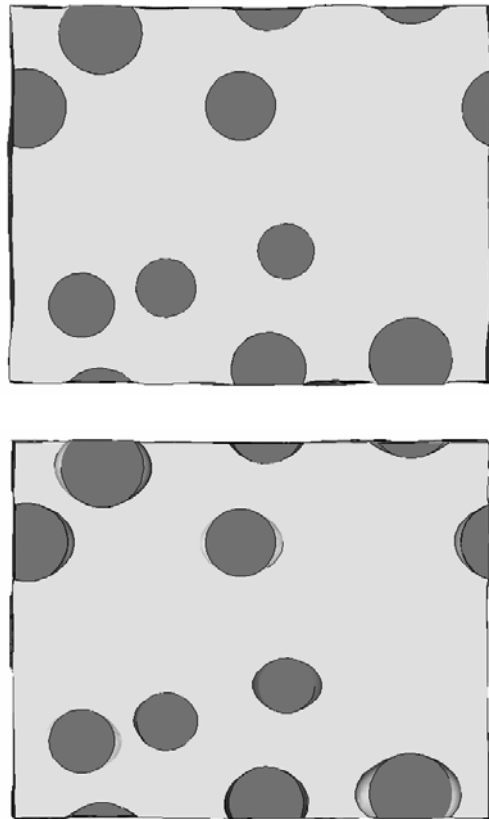


Fig. 5. Deformación permanente del material compuesto: (a) $t_c=750$ MPa. (b) $t_c=250$ MPa.

El material con intercaras con energía de fractura pequeña presentó zonas de decohesión grandes (Fig. 5.(b)), que van de polo a polo de la partícula. La razón de este hecho es que debido a su fragilidad, las zonas de intercara donde se ha alcanzado la tensión de rotura se rompen de forma casi inmediata (no llegan a transmitir tensiones cohesivas prácticamente) y propician así la rotura de las zonas cercanas hasta la rotura de toda la superficie. En el caso de intercaras dúctiles (Fig. 5.(a)) se produce una especie de *burbuja* en el polo de la partícula. La zona afectada por la decohesión es en este caso menor, y la deformación plástica del material en las zonas donde la matriz vuelve a unirse con la partícula es muy alta. La razón de estas formas es la elevada energía que consume la intercara antes de su rotura definitiva que aumenta mucho el valor de la apertura crítica (Δu_c) y hace que la intercara siga transmitiendo tensiones hasta que la grieta alcance esa dimensión.

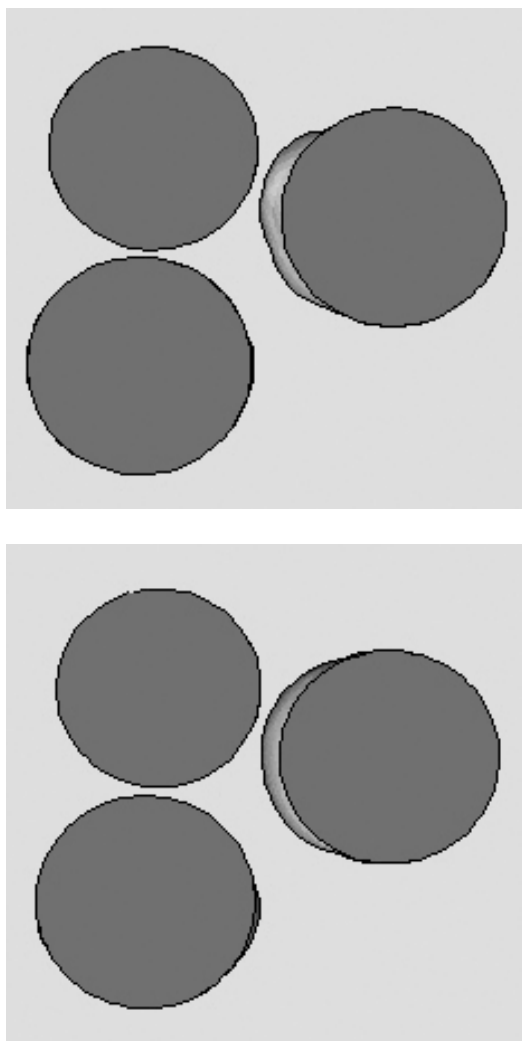


Fig. 6. Detalle de la deformación permanente del material compuesto: (a) $\Gamma_i = 800 \text{ J/m}^2$. (b) $\Gamma_i = 100 \text{ J/m}^2$

4. CONCLUSIONES

Se ha estudiado el efecto de las propiedades de las intercaras matriz/partícula en el comportamiento mecánico de materiales compuestos reforzados con partículas esféricas. El estudio numérico se ha realizado mediante simulaciones por elementos finitos de celdas unitarias tridimensionales que representan la microestructura real del material. La decohesión se ha incluido en los modelos mediante un elemento finito de intercara con comportamiento de fisura cohesiva. Se han realizado simulaciones de deformaciones uniaxiales con diferentes valores de la resistencia de las intercaras, t_{c0} , y de su energía de fractura, Γ_i . El valor de la ductilidad y la resistencia del material se ha obtenido mediante el criterio de Considère.

El efecto macroscópico de la variación de la resistencia o de la energía de las intercaras es diferente. La reducción de la resistencia varió

principalmente la tensión soportada por el material y su límite elástico. La ductilidad también disminuyó con la resistencia de las intercaras, pero presentó un mínimo para valores medios de la resistencia y aumentó de nuevo al disminuir esta. La disminución de la energía de fractura no afectó al límite elástico del material pero produjo una reducción progresiva de la resistencia y ductilidad del material compuesto. Ambas variables presentaron una dependencia lineal con el logaritmo de la energía de las intercaras.

A nivel microscópico, la disminución de la resistencia de las intercaras produjo un mayor número de partículas decohesionadas, lo que explica la pérdida de tensión soportada por el material. La forma de los huecos generados por decohesión no se vio afectada apenas por la variación de la resistencia de las intercaras, pero sí cambió de forma sustancial con la energía de fractura. Así, intercaras más dúctiles produjeron decohesiones más localizadas en los polos con deformaciones plásticas elevadas. Por el contrario, las intercaras frágiles (energía de fractura baja) favorecieron la decohesión total de la partícula en la dirección de la carga aplicada.

REFERENCIAS

- [1] Needleman, A. *J Appl Mech* 1987; 54: 525-531
- [2] Segurado J, LLorca J. *J Mech Phys Solids* 2002; 50:2107-2121
- [3] González C., LLorca J., Segurado J. *J Mech Phys Solids* 2004; 52: 1573-1593
- [4] Segurado J, LLorca J. *J. Int J Solids and Structures* 2004;41: 2977-2993
- [5] Tvergaard, V. Hutchinson, J. *J Mech Phys Solids* 1993; 41:1119-1135
- [6] Abaqus/Standard (2001) Version 6.1, HKS, Inc. Pawtucket, RI.
- [7] Segurado J, LLorca. *Mechanics of Materials*. To be published
- [8] Kiser, M. T., Zok, F.W., Wilkinson, D.S. *Acta Materialia* 1996; 44:3465-3476
- [9] Weber L., Kouzeli, M., San Marchi, C., Mortensen, A, *Scripta Materialia*. 1999;41: 549-551