

CAPÍTULO 6

SIMULACIÓN NUMÉRICA

CAPITULO 6

SIMULACIÓN NUMÉRICA

En este capítulo y mediante el uso de técnicas basadas en la discretización por medio de elementos finitos, se desarrolla un modelo bidimensional que permite estudiar la influencia de las partículas en el comportamiento general de los compuestos poliestireno-microesferas de vidrio.

La modelización es empleada fundamentalmente para investigar la distribución de tensiones originadas por las partículas en el seno de la matriz. Adicionalmente se utiliza para obtener una predicción del módulo, que se compara con los resultados experimentales previos, y del coeficiente de Poisson. Las variables fundamentales del modelo descriptivo son también contrastadas.

El papel de la adhesión entre fases se toma en cuenta través de dos límites extremos, adhesión perfecta y adhesión cero.

6.1.- Introducción.

Cuando una segunda fase es introducida en una matriz originariamente isotrópica se originan tensiones entorno de la segunda fase, sea esta una partícula rígida, elastomérica o un vacío. La deformación plástica de la matriz se inicia a partir de los concentradores de tensión y por ello resulta interesante determinar el nivel y la distribución de las tensiones generadas entorno de las inclusiones.

Para analizar con detalle la distribución de los campos tensionales originados alrededor de las partículas puede emplearse el método numérico de discretización por elementos finitos.

Uno de los primeros trabajos basados en esta técnica fue desarrollado por Broutman y Panizza [1971] que modelizaron el comportamiento de un polímero modificado con caucho mediante un ensamblado de celdas axisimétricas. Su estudio reveló que la tensión principal máxima y cortante se localizaba en el ecuador de la partícula indicando que la fluencia de la matriz se originaría a partir de este punto. En un estudio posterior Sahu y Broutman [1972] aplicaron la simulación a la determinación del módulo elástico y de las tensiones internas en un compuesto

epoxi-microesferas de vidrio encontrando una gran aproximación entre el comportamiento experimental y el simulado.

Más recientemente Guild y Young [1989-a] y [1989-b] desarrollaron un modelo predictivo para determinar la distribución de tensiones entorno de las partículas, rígidas o elastoméricas, en el interior de una matriz termoestable isotrópica. Con partículas de caucho, sus resultados indican que la distribución de las partículas no altera significativamente el estado de tensiones entorno de la partícula si el contenido de las mismas es inferior a 0.3, que es usualmente el límite superior de empleo. Con partículas rígidas, y en consonancia con lo manifestado por Dekkers y Heikens [1985-b], la posición de la máxima tensión de Von Mises en la interfase se produce a 42 grados desde el polo cuando el contenido de esferas es bajo y tiende a evolucionar desplazándose hacia el polo a mayores porcentajes de esferas, aunque el rango de variación es poco importante.

Finalmente el método de discretización ha sido también empleado por Furno y Nauman [1992] para analizar la adhesión entre fases en compuestos modificados con caucho y por Asp y Sjögren [1997] como herramienta para predecir el inicio del fallo en una mezcla de polipropileno y microesferas de vidrio.

6.2.- Análisis por elementos finitos.

6.2.1- Análisis elástico.

La aplicación del método de los elementos finitos al análisis tensional se ha descrito abundantemente en la literatura [Zienkiewicz 1982]. De manera genérica la estructura problema se divide en elementos discretos en cuyos extremos se sitúan los puntos nodales o nodos que interconexionan los diferentes elementos. Cuando la estructura se somete a una serie de condiciones de contorno, los desplazamientos y tensiones en cada nodo o elemento pueden obtenerse por resolución de las ecuaciones de continuidad y equilibrio en cada uno de las divisiones.

El desarrollo del modelo de elementos finitos se muestra en la figura 6.1. El material real se modela como una distribución bidimensional de cilindros que contienen en su interior una partícula de vidrio. Las partículas se suponen distribuidas en forma hexagonal compacta. Debido a su simetría la unidad representativa corresponde a un cuarto de cilindro y matemáticamente es suficiente con modelar una estructura bidimensional plana con simetría axial para representar la citada unidad.

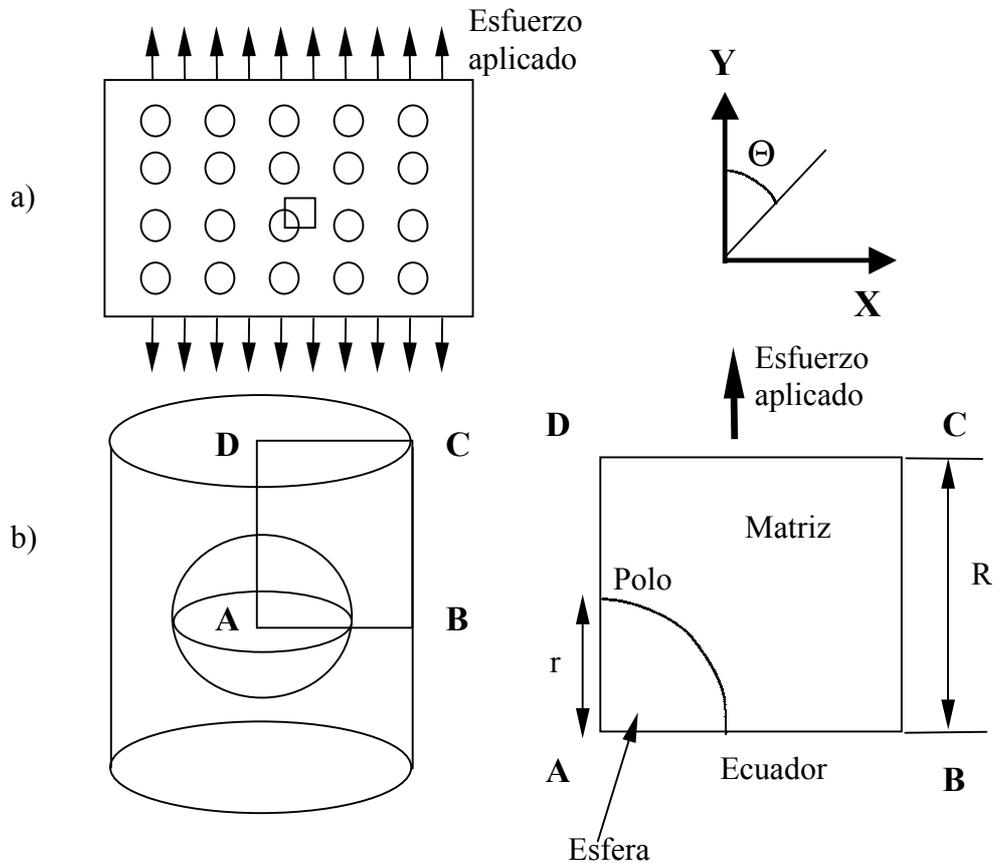


Figura 6.1.- Desarrollo del modelo axisimétrico.
 (a) Empaquetamiento de las partículas.
 (b) Celda unitaria.

Broutman y Panizza [1971] reconocen que el modelo aproxima el empaquetamiento de las partículas (a través de la distancia interparticular) aunque no representa con precisión la unidad repetitiva, sin embargo si que proporciona una descripción ajustada del compuesto con respecto a la fracción de volumen de segunda fase. Posteriormente Agarwal y Broutman [1974] desarrollaron un modelo tridimensional para simular el empaquetamiento de las partículas en un compuesto modificado con caucho. Los resultados obtenidos a través de este modelo fueron coincidentes con los provenientes del análisis axisimétrico. Como el modelo tridimensional es mucho más complejo y costoso en términos de computación, los autores concluyeron que el modelo axisimétrico puede emplearse sin pérdida de precisión de cálculo.

Las condiciones de contorno del modelo empleado vienen dadas por (figura 6.2):

- 1.- Un desplazamiento impuesto aplicado a lo largo de la cara CD
- 2.- Desplazamiento impedido en el eje Y para el lado AB
- 3.- Desplazamiento impedido en el eje X para el lado AD
- 4.- La deformada del lado BC debe ser paralela a su forma original

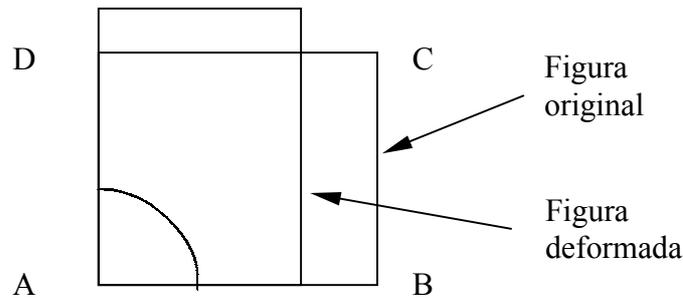


Figura 6.2.- Figura original y deformada.

Las propiedades de los materiales constituyentes (matriz y carga) han sido consideradas como lineales y elásticas y por lo tanto los valores a introducir en el programa son el módulo elástico y el coeficiente de Poisson de cada componente. Como módulo elástico de la matriz se ha elegido el obtenido por tracción por estar afectado de un menor nivel de error. Los valores se reflejan en la tabla 6.1.

Tabla 6.1.- Valores de las propiedades de cada componente

	Módulo Elástico (MPa)	Coefficiente de Poisson
PS	2560	0.32
Microesferas	68930	0.22

Para la resolución del problema planteado se ha utilizado el paquete comercial de elementos finitos COSMOS [1992]. Una de las mallas de elementos empleada en la discretización es la que se muestra en la figura 6.3. que corresponde a la muestra A10. Los elementos seleccionados son cuadriláteros isoparamétricos de 8 nodos/elemento, excepto en la parte más interna de la esfera dónde, como resultado de la geometría, se emplearon elementos triangulares de 6 nodos por elemento.

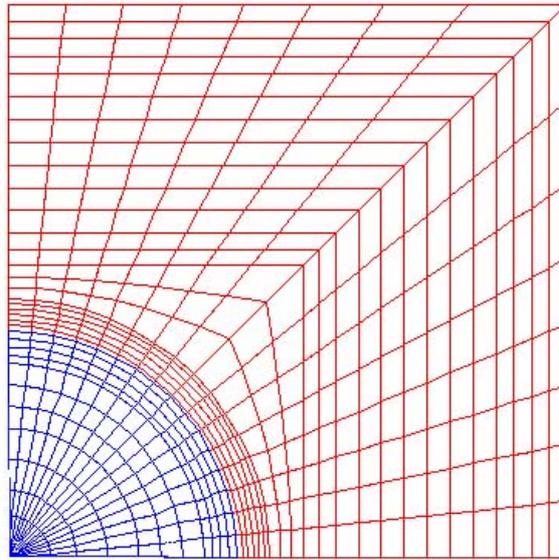


Figura 6.3.- Malla de elementos finitos empleada en el análisis.
Azul.- Microesfera. Rojo- Matriz.

Las diferentes mallas utilizadas para el cálculo de las magnitudes características de los compuestos fueron similares entre si, verificándose su validez a través de la continuidad de tensiones y de la ausencia de tensiones cortantes a lo largo del contorno externo del modelo ABCD. La gráfica de las tensiones cortantes para el modelo se representa en la figura 6.4.

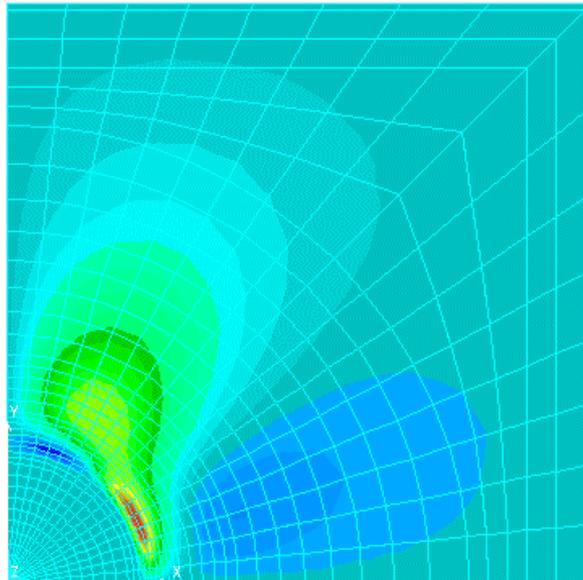


Figura 6.4.- Verificación de la bondad de la discretización. Continuidad de tensiones cortantes en el contorno ABCD.

El tamaño de las partículas de vidrio se mantuvo constante en 70 μm de diámetro que representa un tamaño medio de la distribución de partículas existentes. La fracción en volumen de partículas en la matriz se varió dentro del espectro de composiciones en análisis, cambiando la relación r/R de la figura 6.1.

La fracción en volumen y la distancia interparticular en el modelo vienen dadas por:

$$\text{Fracción en volumen: } \phi = \frac{2}{3}(r/R)^3 \quad (6.1)$$

$$\text{Espaciado interparticular: } d_s = 2(R - r) \quad (6.2)$$

Así pues a partir de la relación r/R es posible obtener los porcentajes introducidos en cada una de las composiciones que son objeto de esta Tesis. Resulta evidente que la variación del porcentaje de carga puede conseguirse bien manteniendo r constante y variando R o bien con R constante y variando r . En nuestro caso se han probado ambas circunstancias alcanzándose resultados coincidentes por lo que por simplicidad, se ha optado por variar R manteniendo r constante. Las magnitudes empleadas en la simulación son las siguientes:

Tabla 6.2.- Magnitudes empleadas en la simulación.

Magnitud	PS	A2	A6	A10	A15	A25	A40
$\phi(\%)$	0	0.82	2.77	4.62	6.91	12.79	22.36
$r(\mu\text{m})$	0	70	70	70	70	70	70
$R(\mu\text{m})$	100	303.25	202.1	170.42	149.02	121.37	100.75
$\epsilon(\%)$	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1

Una dificultad que aparece con respecto de la modelización es la extrapolación de los resultados a las propiedades reales de los materiales empleados. La simulación numérica, para ser efectiva requiere del uso de mallados simétricos, sin embargo en los materiales reales la disposición de las esferas se ha visto que es aleatoria, lo que implicaría mallados irregulares. Para soslayar este problema se han empleado mallados regulares pero de tamaños variables. Subyace sin embargo la cuestión de correlacionar una disposición regular de partículas con la disposición aleatoria de las mismas en el problema real. Este aspecto se ha abordado considerando el modelo estadístico de distribución de partículas propuesto por Davy y Guild [Davy 1988]. El modelo se basa en el cálculo de la distribución de distancias desde el centro de una esfera a la frontera de la celda de Voronoi; la celda de Voronoi es el volumen entorno de una esfera que está más cerca de dicha esfera que de cualquier otra. Las esferas se asumen distribuidas al azar pero no pueden solaparse.

Siguiendo el modelo de Davy y Guild para recombinar los cilindros unitarios de la figura 6.1 y determinar las propiedades globales del material debe aplicarse al cálculo unos factores de dispersión para lo que son necesarias dos mallados adicionales. Así el cálculo del módulo de una mezcla requiere un modelo inicial relacionado con el porcentaje de esferas existentes más dos mallas adicionales, una de tamaño ligeramente mayor y otra ligeramente menor, para el cálculo de los factores de dispersión. Los factores de dispersión tienen en cuenta que en el material real la distancia interparticular es variable.

Se han implementado dos límites de variación de las propiedades (isotensión e isodeformación). En el rango de composiciones en estudio los límites se han encontrado muy próximos entre sí, coincidiendo con lo visto por Davy y Guild [1988] y por Guild y Young [1989].

Como se verá en apartados posteriores la variación entre los dos límites es muy pequeña para el módulo de Young, mientras que el coeficiente de Poisson no cambia, de forma que los resultados que se expondrán hacen referencia a la primera de las magnitudes.

6.2.2.- Bases teóricas.

6.2.2.1.- Cálculo del coeficiente de Poisson

Las condiciones de contorno representadas en la figura 6.2 pueden descomponerse por superposición en dos casos separados de análisis. En el primer caso la malla está sujeta a desplazamiento cero en todos sus lados excepto para el borde superior CD, que está sometido a un desplazamiento unitario positivo en la dirección Y. En el segundo caso el desplazamiento se aplica en el lado BC y en la dirección X, mientras que el resto de los lados permanecen fijos. La representación esquemática de este sistema es como sigue:

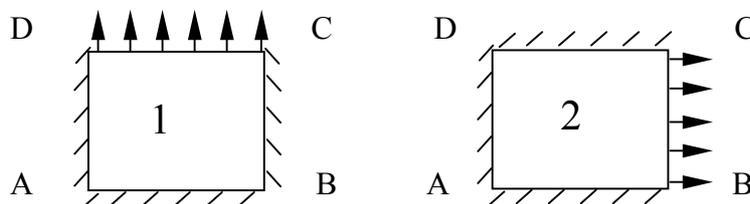


Figura 6.5.- superposición de casos elementales

Las ecuaciones de las tensiones y desplazamientos son entonces:

$$\sigma = \sigma_1 + k\sigma_2 \quad (6.3)$$

$$u = u_1 + ku_2 \quad (6.4)$$

dónde k se evalúa tal que se satisfaga la condición de contorno de la estructura original, en la que al no haber esfuerzo sobre el lado BC se verifica :

$$\int_{BC} (\sigma_{x1} + k\sigma_{x2}) dy = |BC|(\overline{\sigma_{x1}} + k\overline{\sigma_{x2}}) = 0 \quad (6.5)$$

y por lo tanto el coeficiente de Poisson se obtiene de:

$$k = \left(\frac{\overline{\sigma_{x1}}}{\overline{\sigma_{x2}}} \right)_{BC} = \nu \quad (6.6)$$

6.2.2.2.- Cálculo del módulo de elasticidad de los compuestos.

Para calcular la rigidez de los compuestos PS-microesferas se ha hallado la tensión media actuante sobre la cara CD a través de:

$$\sigma_{yy} = \frac{\int_A \sigma_{yy} dA}{A} = (\overline{\sigma_{yy}})_{CD} \quad (6.7)$$

siendo A el área superior del cilindro. La integral de la ecuación anterior puede sustituirse por la siguiente expresión:

$$\int_A \sigma_{yy} dA = 2\pi \int_0^{r1} \sigma_{yy} r dr = \pi \sum_{i=1}^n (r_i^2 - r_{i-1}^2) \sigma_{yy} \quad (6.8)$$

dónde ahora r_i y r_{i-1} son los radios de los círculos nodales que definen los elementos en la discretización de la superficie superior del cilindro, n es el número de nodos o círculos y σ_{yy} es la correspondiente tensión normal en cada nodo, el módulo pues se calculará como:

$$E = \frac{\overline{\sigma_{yy}}}{\epsilon_y} \quad (6.9)$$

y ε_y :

$$\varepsilon_y = \frac{\overline{\Delta BC}}{BC} = \frac{u_y}{BC} \quad (6.10)$$

6.2.2.3.- Distribución de tensiones.

Uno de los aspectos básicos del análisis por elementos finitos es el cálculo de las tensiones internas. El análisis efectuado toma en consideración los efectos de las partículas dando como resultado los valores de concentración de tensión en la matriz o en la interfaz para cualquier porcentaje de carga.

Al objeto de establecer la resistencia del compuesto debe asumirse un criterio de fallo. En nuestro caso se ha supuesto que el compuesto fallará en el lugar de la matriz en que se registre una tensión superior a la admisible del material.

Existen diversos criterios tensionales que pueden ser aplicados al fallo de los materiales poliméricos. En el caso de un material que presenta cedencia, el criterio aceptado [Asp 1997] es el de la tensión equivalente de von Mises (ecuación 6.11) o el de von Mises modificado por efecto de la presión hidrostática [Huang 1992]. El criterio de von Mises representa bien el estado triaxial de tensiones entorno de la partícula y se expresa por:

$$\sigma_{vm}^2 = \frac{1}{2} [(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2] \quad (6.11)$$

dónde σ_1 , σ_2 , y σ_3 son las tensiones principales actuantes en el cuerpo. En un polímero amorfo isotrópico el inicio del crazing aparece en las zonas de máxima dilatación en las que se cumple que la tensión principal es máxima [Dekkers 1985]. En nuestra situación la dirección de la tensión principal es la misma que la del esfuerzo aplicado y coincidiría con el plano perpendicular al de la craze. Además de las magnitudes anteriores es interesante determinar el origen de la eventual separación entre partícula y matriz que vendrá producida por la acción de un esfuerzo de tracción perpendicular a la superficie de la microesfera.

Otro aspecto interesante que puede determinarse es el análisis tensional entorno de una grieta interfacial, sin embargo, este extremo no se aborda porque ha sido ampliamente estudiado por Dekkers y Heikens [1985] para materiales iguales a los aquí tratados encontrando que con buena adhesión la grieta comienza en el polo y discurre hacia el ecuador hasta un ángulo de aproximadamente 68° y que las máximas tensiones se producen siempre en el entorno de la grieta, apareciendo el valor extremo a un ángulo de 45° .

Los factores de concentración de tensión para la tensión principal en el sentido de aplicación del esfuerzo y para la de von Mises se han hallado a través de:

$$K_{yy} = \frac{(\sigma_{yy})_{\max}}{\sigma_{\infty}} \quad (6.12)$$

$$K_{vm} = \frac{(\sigma_{vm})_{\max}}{\sigma_{\infty}} \quad (6.13)$$

siendo σ_{∞} la tensión remota aplicada a lo largo del lado CD.

En nuestro análisis no se ha tenido en cuenta las tensiones residuales producidas entorno a la microesfera como resultado de las diferentes coeficientes de dilatación de las fases.

6.3- RESULTADOS

6.3.1.- Coeficientes de Poisson.

Los coeficientes de Poisson estimados a partir de la simulación y de los coeficientes de los componentes individuales han resultado muy cercanos a los que arroja el límite inferior de la regla de las mezclas (isotensión). En ambos casos se ha asumido que hay una buena adhesión entre fases. Los resultados se muestran en la tabla 6.3.

Tabla 6.3.- Coeficientes de Poisson de los compuestos PS-microesferas.

Muestra	PS	A2	A6	A10	A15	A25	A40	MIC
ν Mezclas	0.32	0.319	0.317	0.315	0.310	0.307	0.298	0.22
ν Simulación	0.32	0.317	0.313	0.310	0.306	0.295	0.273	0.22

La consideración de isotensión o isodeformación no ha afectado al valor simulado para ν .

6.3.2.- Módulo elástico.

Como es bien sabido el módulo elástico se mide a deformaciones bajas y así los resultados de la simulación (deformación 0.1 %) pueden compararse con los experimentales. En este sentido en la tabla 6.4 se incluyen los datos numéricos que muestran la evolución de la simulación tanto en la hipótesis de isotensión como de isodeformación.

Tabla 6.4.- Resultados de la simulación del módulo elástico.

Muestra	PS	A2	A6	A10	A15	A25	A40
E (MPa) Isotensión	2560	2593	2682	2775	2897	3274	4042
E (MPa) Isodeformación	2560	2600	2690	2791	2914	3286	4068
E (MPa) Interfaz	2560	2588	2664	2740	2838	3139	3731
E (MPa) Experimental	2560	2611	2636	2681	2885	3062	3589

El módulo elástico obtenido tanto por métodos experimentales como el procedente de la simulación coinciden razonablemente si bien a altos porcentajes de carga hay una ligera desviación entre ambas medidas. Las diferencias pueden ser debidas a la suposición de adhesión perfecta y a la existencia de zonas en la matriz con déficit de partículas y que no responden exactamente al modelo planteado. Estos dos motivos hacen que los valores del módulo resulten sobreestimados.

A modo de comprobación de la influencia de la interfaz se ha realizado una experiencia consistente en asignar a una delgada capa de 1 μm la rigidez de la interfaz que se ha supuesto mitad de la de la matriz. La aproximación no es ajustada por cuanto se desconocen las propiedades de la misma pero sirve para ver su posible influencia. Los resultados de la tabla anterior indican que la aproximación es buena y que el efecto de la interfaz es más importante a alto número de microesferas.

La mejor aproximación al valor experimental la da el modelo de isotensión.

6.3.3.- Distribución de tensiones con adhesión interfacial perfecta.

6.3.3.1.- Concentración de tensiones principales.

Cuando existe adhesión perfecta entre las fases del compuesto la mayor concentración de tensiones se produce en la fase polimérica y situada en el polo de la partícula $\Theta=0$. El análisis de los contornos de tensiones (figuras 6.6 a 6.11) confirma que estas posiciones son zonas de tensión principal máxima lo que coincide con observaciones y resultados experimentales previos [Sahu 1972], [Spanoudakis 1984]. La posición exacta del máximo concentrador de tensión varía con el porcentaje de microesferas. Cuando hay poca carga está en la interfase mientras que a medida que la carga aumenta se desplaza alejándose de la partícula.

En el máximo de carga (muestra A40) la posición del máximo se encuentra hacia el extremo de la malla es decir cerca del lugar equidistante entre dos partículas. La variación de la posición del máximo de carga se asocia a un efecto de interacción de los campos tensionales que se generan entre partículas vecinas.

En términos absolutos, el mayor concentrador de tensión se ha encontrado para la tensión principal siendo la tensión de von Mises ligeramente inferior a ésta.

En la tabla 6.5 se incluyen la magnitud del concentrador de tensión y su distancia absoluta respecto del centro de la esfera expresada en micras. Teniendo en cuenta las diferentes distancias interparticulares empleadas en función de cada porcentaje de carga, puede calcularse la distancia desde el máximo de tensión a la esfera contigua. Expresándolo en términos porcentuales respecto del radio de la esfera se observa un rápido decremento desde el 660 % en la muestra A2 hasta un 73 % en la muestra A40.

Tabla 6.5.- Concentrador de tensión máximo y distancia del máximo de tensión a la esfera adyacente.

Muestra	A2	A6	A10	A15	A25	A40
Kyy	1.943	1.973	1.982	2.013	2.058	2.220
d(μm)	72	76	77.5	77.5	78.5	80

La tabla anterior sugiere que la incorporación de partículas reduce el nivel de tensión para inicio de crazing en un factor de aproximadamente 2 y que este factor se modifica incrementándose a medida que se añade una mayor cantidad de partículas por efecto de la interacción entre los campos tensionales creados a partir de las mismas.

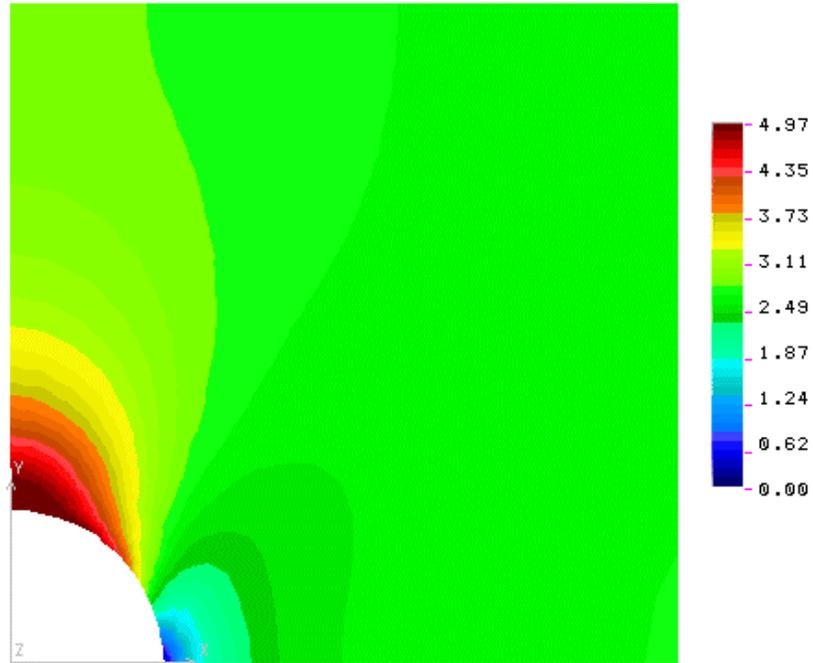


Figura 6.6.- Tensiones principales en la muestra A2. Máxima en el polo y en la interfaz.



Figura 6.7.- Tensiones principales en la muestra A6.

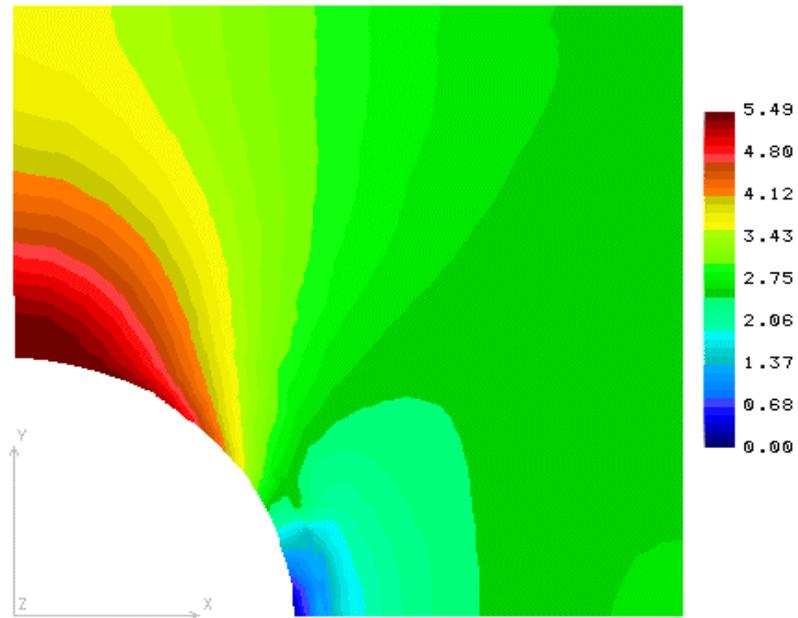


Figura 6.8.- Tensiones principales en la muestra A10. Máxima en el polo. Desplazamiento del máximo en sentido positivo en el eje Y.

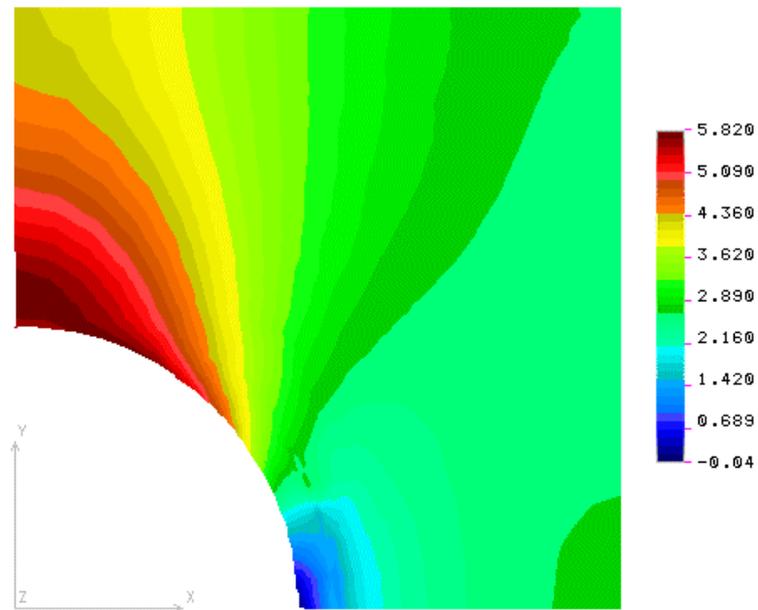


Figura 6.9.- Tensiones principales en la muestra A15. Máxima en el polo. Desplazamiento del máximo en sentido positivo en el eje Y.

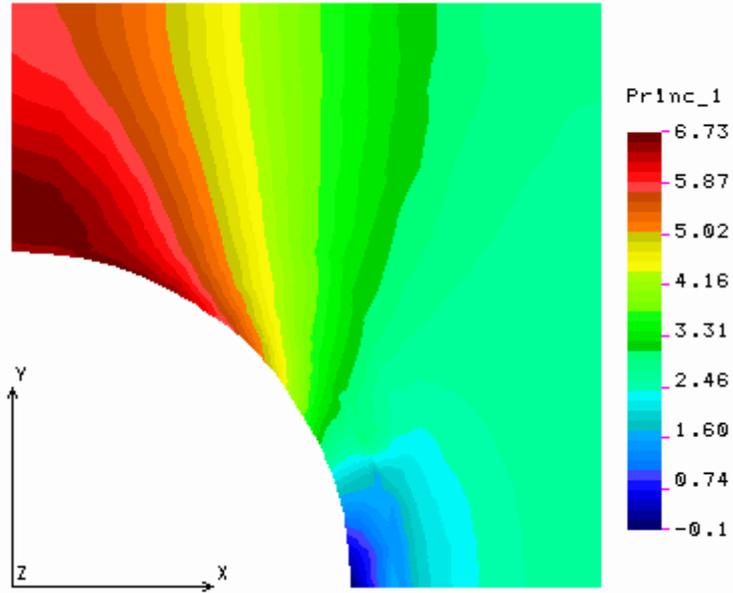


Figura 6.10.- Tensiones principales en la muestra A25. Máximo desplazado de la interfaz.

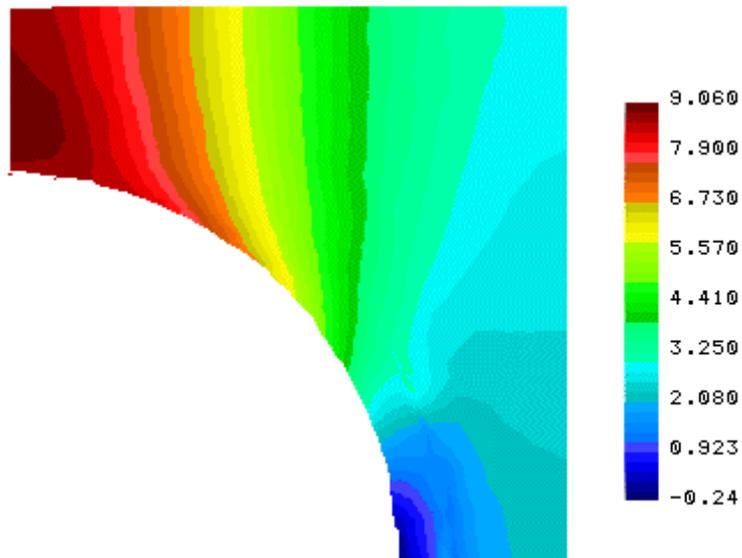


Figura 6.11.- Tensiones principales en la muestra A40. Máximo desplazado de la interfaz.

6.3.3.2.- Tensiones en la interfaz.

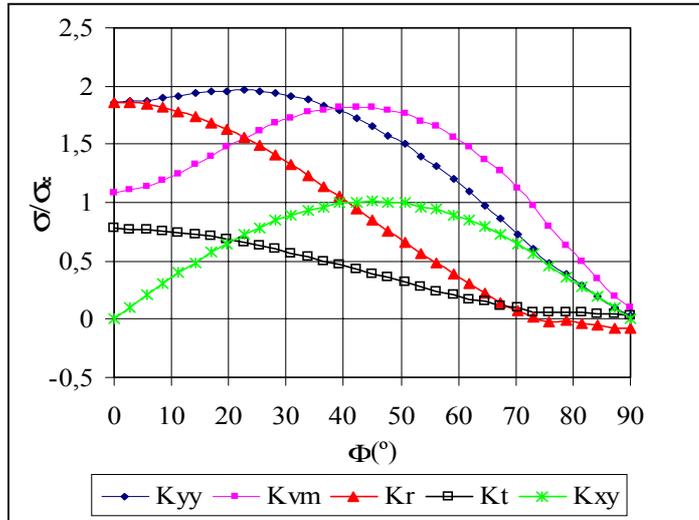
En este apartado se ha analizado fundamentalmente la distribución de tensiones a lo largo de la intersección entre esfera y matriz. Los resultados que se han estudiado incluyen la distribución de tensiones directa o principal (σ_{yy}), la de von Mises (σ_{vm}), las tensiones perpendicular (σ_r) y transversal (σ_t) a la esfera y la tensión de cizalla en el plano XY (τ_{xy}). Para uniformizar los valores se han expresado divididos por la tensión remota aplicada de manera que pueden asimilarse a un factor de concentración de tensión.

Tanto la tensión perpendicular a la esfera (σ_r) como la transversal (σ_t) se han transformado a un sistema de coordenadas polares, con origen en el centro de la microesfera e inicio de ángulo en el polo del sistema. En los diversos gráficos de la figura 6.12 se representan las evoluciones de los concentradores de tensión en función de su posición. Cada punto del gráfico corresponde a un nodo en la discretización. La figura 6.13 muestra los mapas de tensiones más representativos.

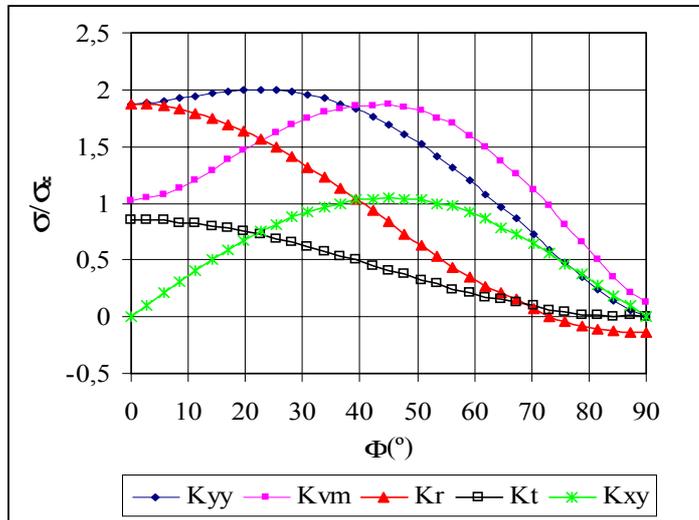
Se ha visto en el apartado anterior que la tensión principal tiene su máximo en el polo pero desplazado de la interfaz en el sentido de acercamiento hacia la esfera contigua. En la interfaz la máxima tensión principal se registra a unos 25 ° del polo. La máxima tensión de von Mises tiene también el máximo absoluto en el polo fuera de la interfaz, el máximo local en ésta, se localiza a 42° ligeramente desplazado del máximo en la tensión de cizalla. Este hecho está de acuerdo con lo expuesto por Dekkers y Heikens [1985-a] que observaron la formación de bandas de cizalla en la interfaz de un policarbonato con microesferas de vidrio en un ángulo de 45°.

Cuando el contenido de esferas es el más elevado la máxima tensión principal se desplaza al polo y coincide en posición con la mayor tensión radial o perpendicular a la esfera. Simultáneamente la tensión de von Mises también muestra el máximo desplazado ligeramente hacia la posición polar. El factor de intensidad de tensión K_{vm} desciende ligeramente al aumentar el contenido de esferas aunque el rango de variación es muy pequeño.

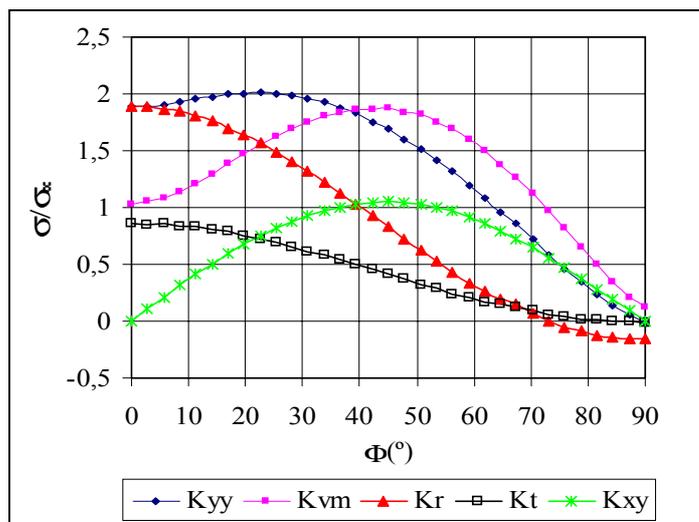
La tensión radial (σ_r) en la interfase provoca la separación de las fases. La magnitud del concentrador de tensiones radial, K_r , es del mismo orden que el del máxima tensión (K_{yy}) y ambos valores alcanzan el máximo cerca del polo, así pues, en un caso de carga en tracción debe esperarse que la separación de fases se inicie a partir del polo. En la zona ecuatorial, y a partir de unos 70 ° la tensión radial cambia de signo y se vuelve compresiva, lo que de acuerdo con Dekkers [1985-b] limitaría la propagación de una grieta interfacial. Por otro lado en una situación de compresión la tensión radial se volvería de tracción en el ecuador, y, aunque su magnitud es pequeña, podría iniciar localmente el despegue esfera-matriz.



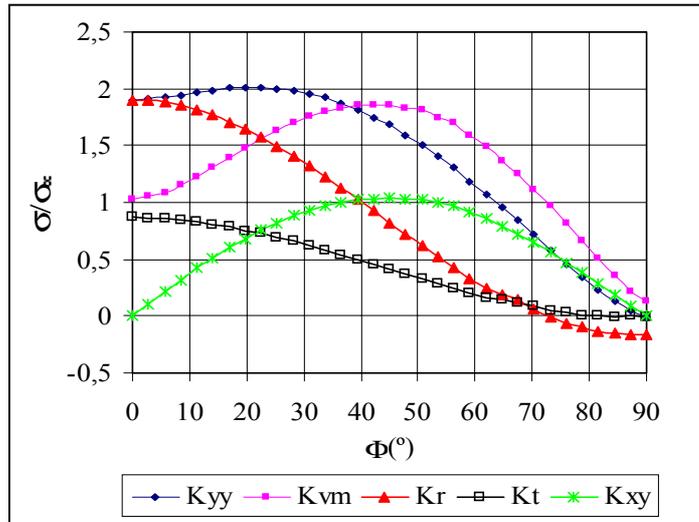
A2



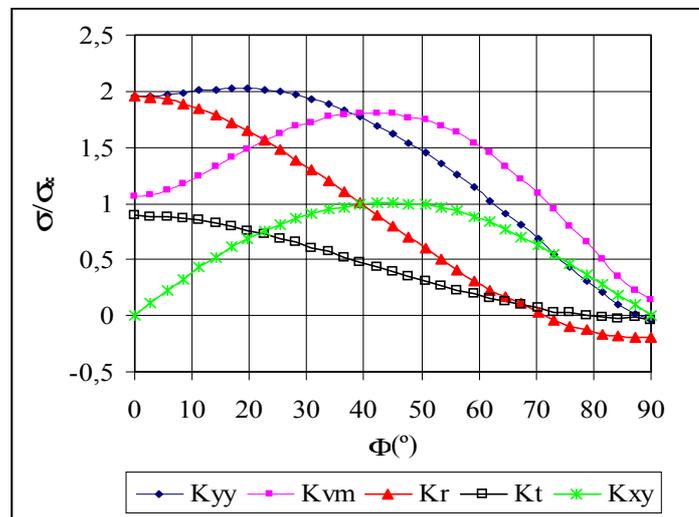
A6



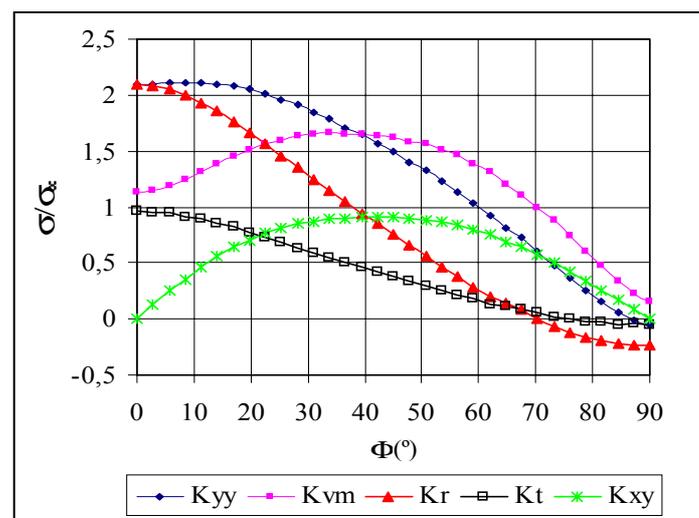
A10



A15

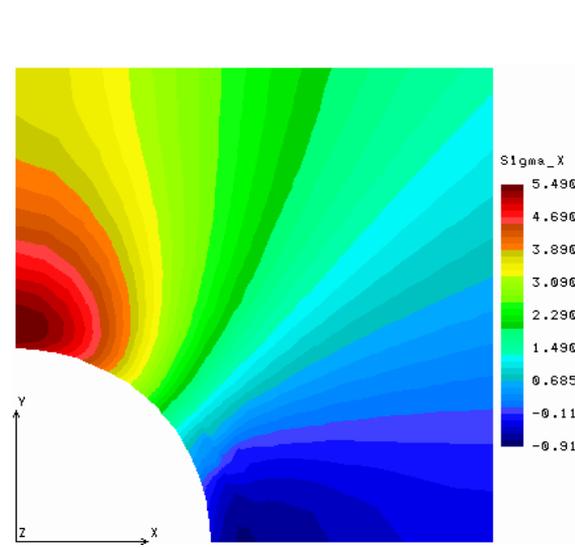
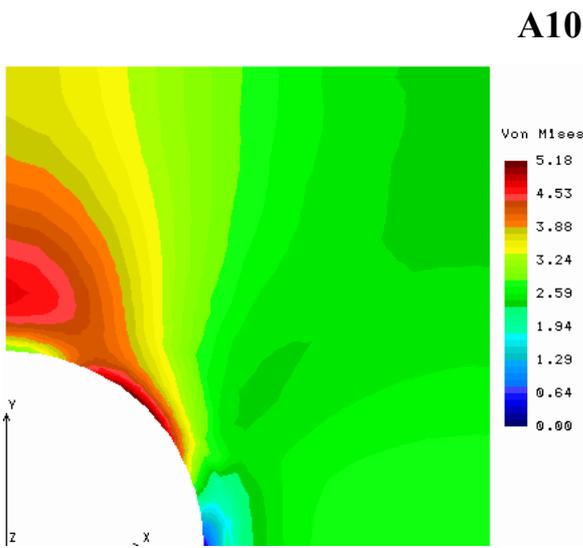
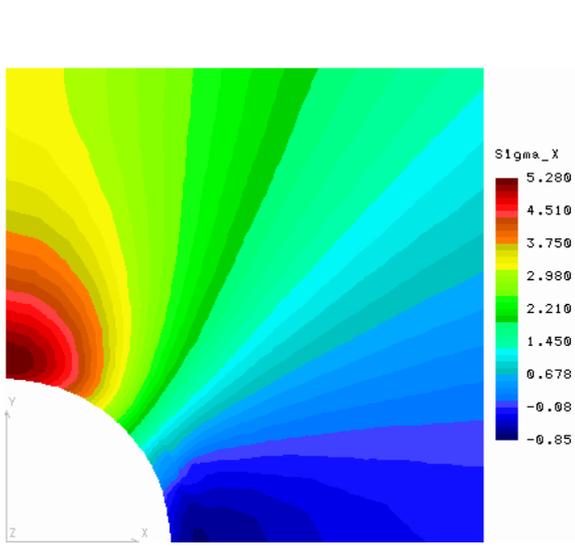
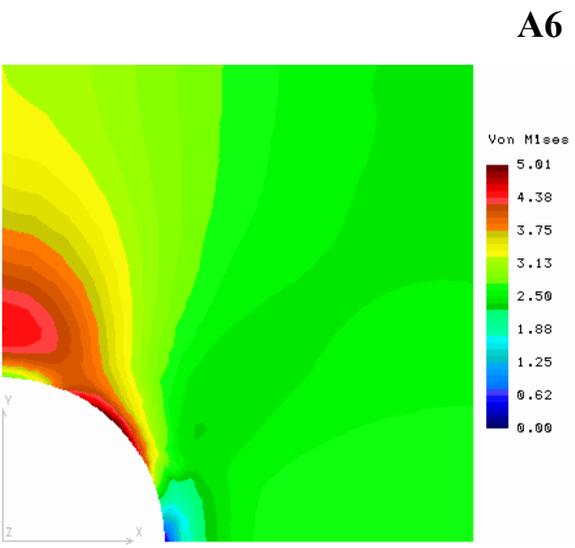
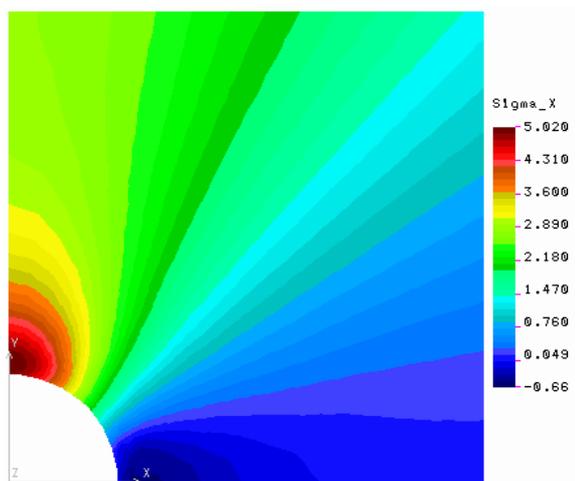
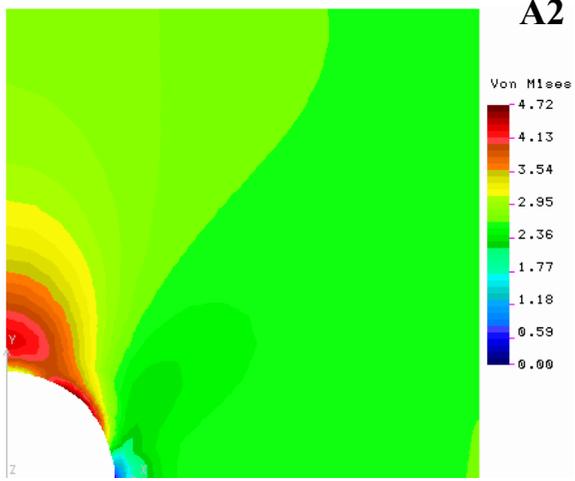


A25



A40

Figura 6.12.- Diagramas de tensiones en la interfaz. 0°=polo; 90°=Ecuador.



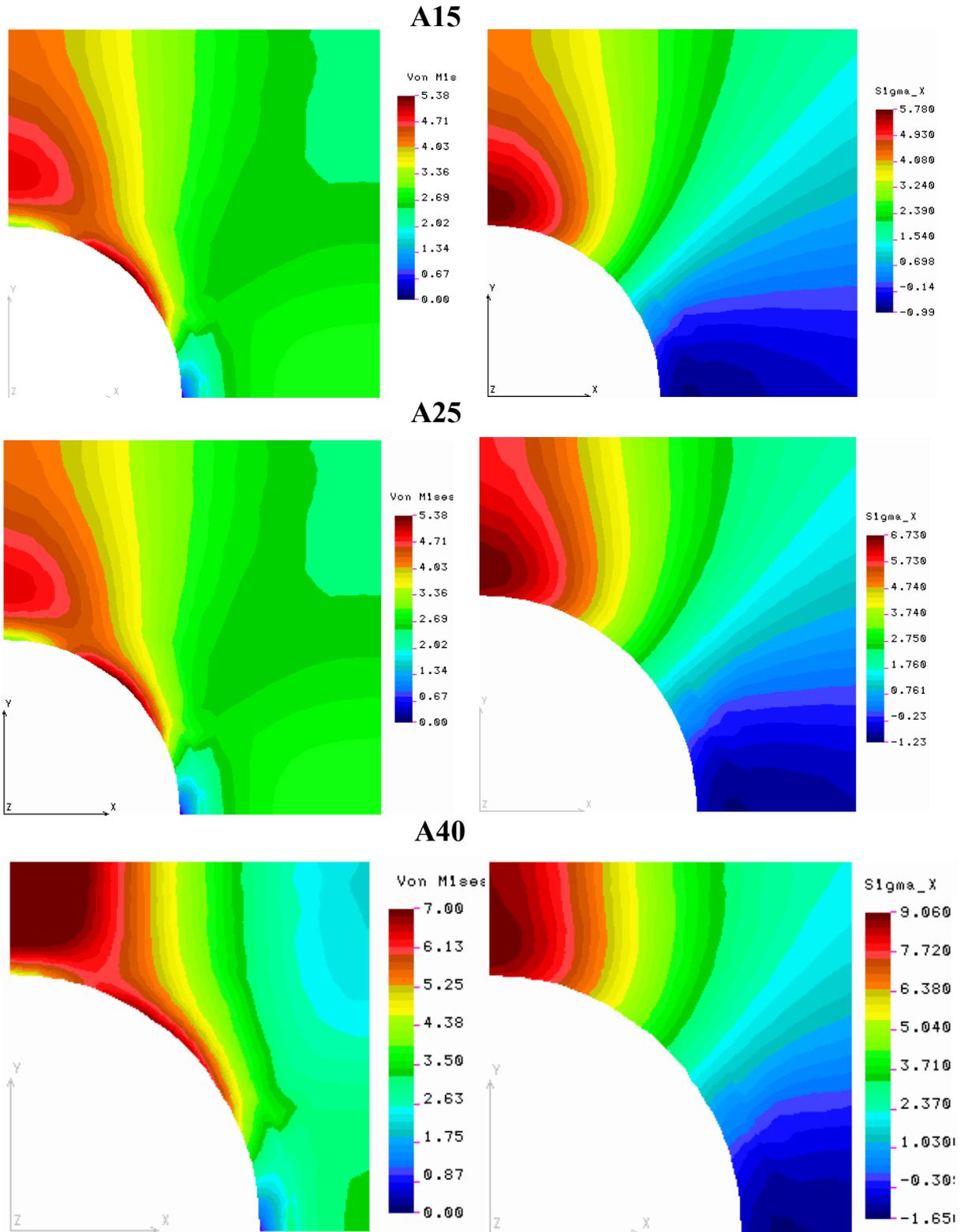
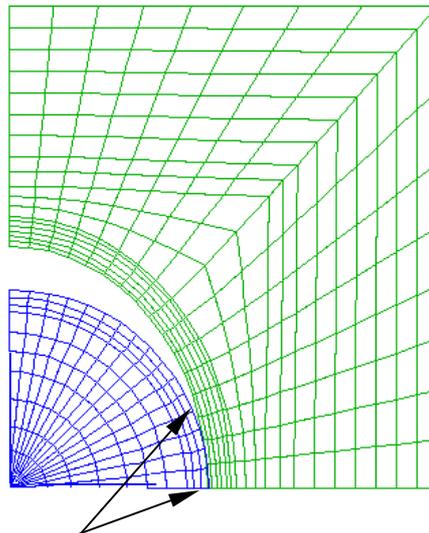


Figura 6.13.- Mapas de tensiones de los compuestos. Caso de adhesión total. Derecha.- Tensiones de Von Mises. Izquierda.- Tensiones radiales.

6.3.4.- Distribución de tensiones sin adhesión interfacial.

Para realizar la simulación de los compuestos poliestireno-microesferas en ausencia de adhesión inicialmente se asignó a la fase vidrio rigidez cero, de manera que el sistema podía asimilarse a una red de vacíos intercalados en la matriz. Sin embargo el estudio de los resultados de desplazamientos de la simulación reveló que la zona ecuatorial tenía un desplazamiento hacia el interior de la esfera (figura 6.14) que no era compatible con el comportamiento real de nuestras mezclas. Aunque no exista adhesión, la presencia de la partícula impide que la matriz pase a ocupar el espacio físico de la microesfera y por lo tanto no puede moverse hacia ella. Ante esta circunstancia se realizaron dos series de análisis. En la primera serie se eliminó la microesfera y se averiguaron los nodos con desplazamiento perpendicular a la esfera y hacia su interior. En la segunda serie se impidieron estos desplazamientos. Los resultados de ambos análisis han sido comparados.

En una situación ideal en la que el compuesto fuera una sucesión de vacíos esféricos intercalados en la matriz, la mayor concentración de tensiones se produce en la zona ecuatorial de la partícula ($\Theta = 90^\circ$) que es además la zona donde se registra la máxima tensión principal y de von Mises en el compuesto. La tensión radial es cero en la interfaz indicando que no hay transferencia de carga entre las fases. La distribución de tensiones a lo largo de la interfaz es similar para cualquier porcentaje de vacíos, su evolución y la del concentrador de tensión puede ser apreciada en los gráficos representativos que se muestran en la figura 6.15.



Zona con desplazamiento hacia el interior de la esfera impedido.

Figura 6.14.- Original y deformada de la matriz con un vacío interno. La deformación de la pieza está voluntariamente ampliada.

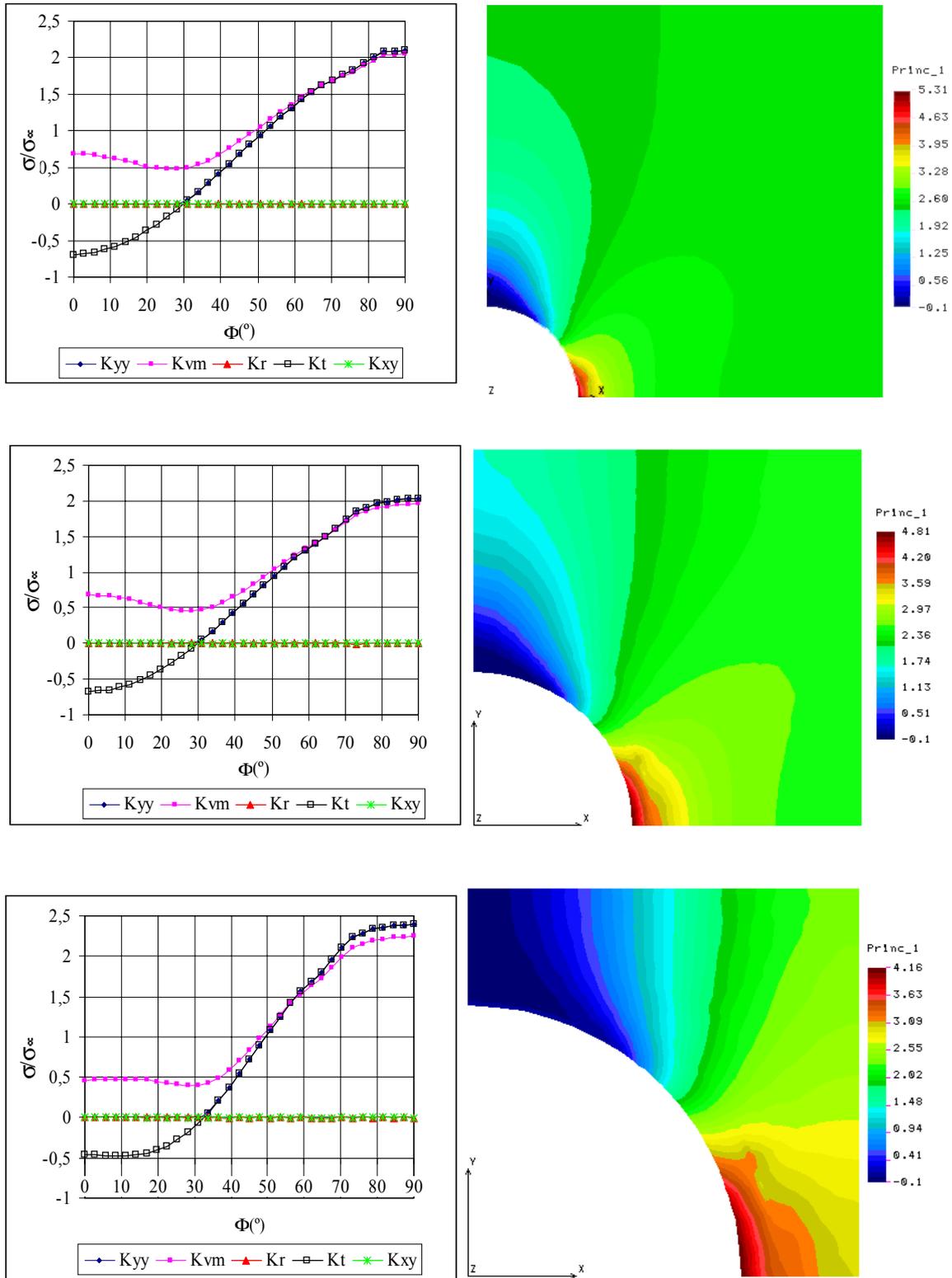


Figura 6.15.- Distribución de tensiones en la interfaz con un vacío interno. 0= polo, 90° = ecuador. Izquierda: Concentradores de tensión,. Derecha: Líneas de isotensiones principales. Muestras A2, A10 y A40.

6.3.4.1.- Concentración de tensiones principales. Vacío modificado.

La restricción a la movilidad de los nodos con desplazamiento hacia el interior de la microesfera no debe hacer variar de manera significativa la distribución de tensiones con respecto de la mostrada para un vacío puesto que la mayor parte del área entre las dos fases está despegada. La diferencia principal radica en que existe un cierto transvase de esfuerzos entre las fases de manera que cambia ligeramente el valor y la distribución de los esfuerzos máximos que ahora se desplazan a la posición ocupada por el último nodo con ligadura efectiva, es decir, la máxima tensión se sitúa a un ángulo de aproximadamente 70° desde el polo en lugar de los 90 ° que se daban con el vacío. Esta posición revela la máxima longitud alcanzable por una grieta interfacial que se generara entre la partícula y la matriz.

Al igual que en el caso anterior las tensiones máximas absolutas se registran para la tensión principal que coincide con la dirección de aplicación del esfuerzo, este hecho indica que una vez se nuclea la craze en la posición de máxima tensión su crecimiento se verá favorecido ya que la dirección del esfuerzo coincide con el sentido de apertura y crecimiento de la misma.

La magnitud del máximo absoluto del concentrador de tensión (K_{yy}) es ligeramente superior en el caso presente que en el del vacío absoluto, si bien la mayor diferencia, producida para la muestra A40 es del 5,2 %, lo que indica la proximidad entre los valores. En cualquiera de los casos el factor de intensidad de tensiones está entorno del valor teórico de 2 para un orificio circular. La tabla 6.6 recoge los concentradores de tensiones para los dos casos comentados.

Tabla 6.6- Comparativa de valores de concentradores de tensión máximos

Muestra	A2	A6	A10	A15	A25	A40
K_{yy}^1	2.04	2.02	2.03	2.05	2.20	2.41
K_{yy}^2	2.06	2.09	2.11	2.11	2.39	2.53

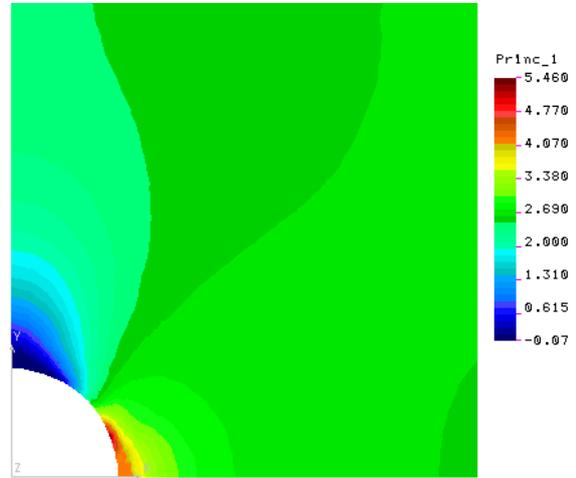
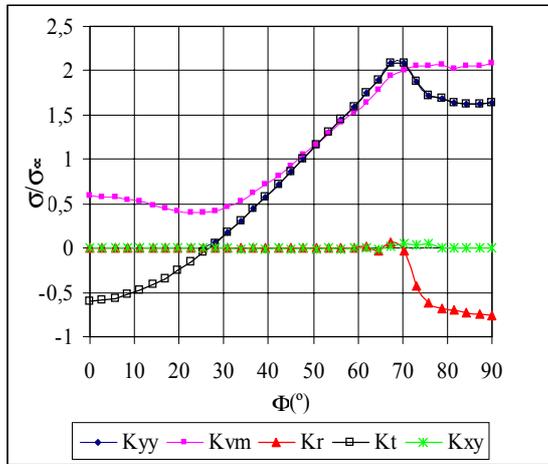
¹ Vacío

² Vacío modificado.

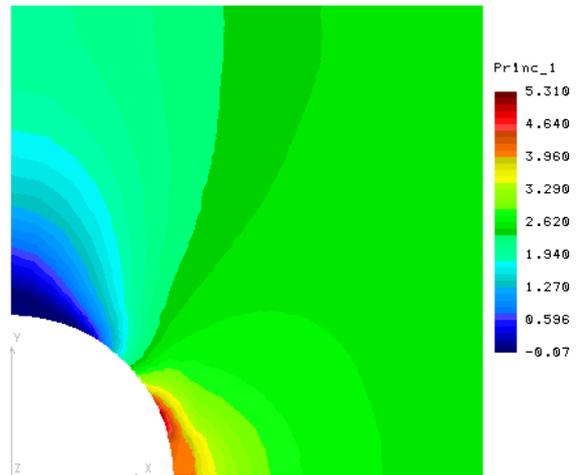
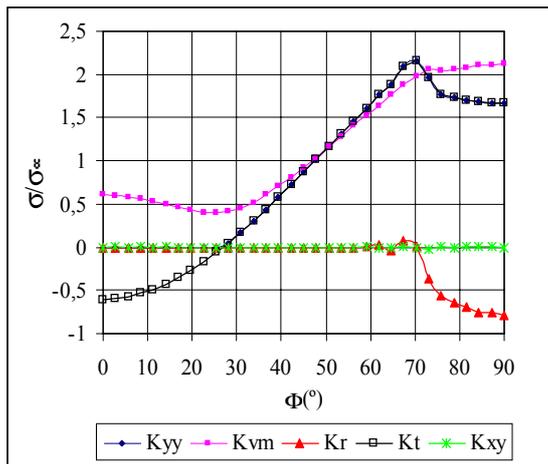
La posición del máximo, tanto para la tensión principal como para la de Von Mises se ha localizado en la interfaz independientemente del porcentaje de vacíos o pseudovacíos existentes, si bien el área afectada por un mayor nivel de intensidad aumenta conforme lo hace la población de huecos.

En la figura 6.16 se muestra la evolución de los diferentes indicadores de tensión junto con el mapa de tensiones principales máximas.

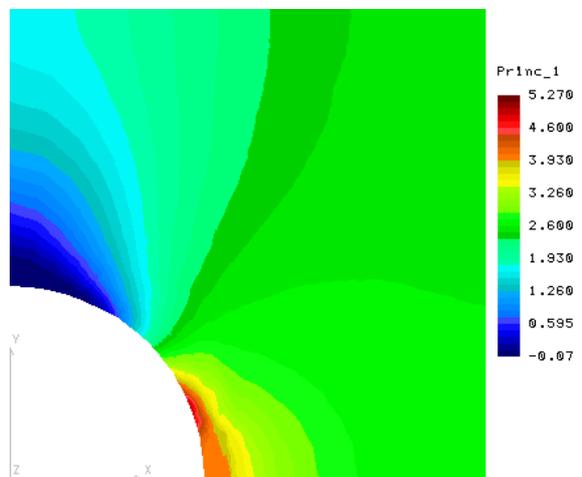
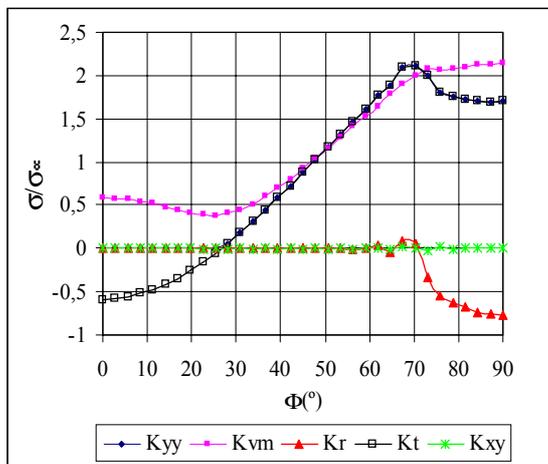
A2



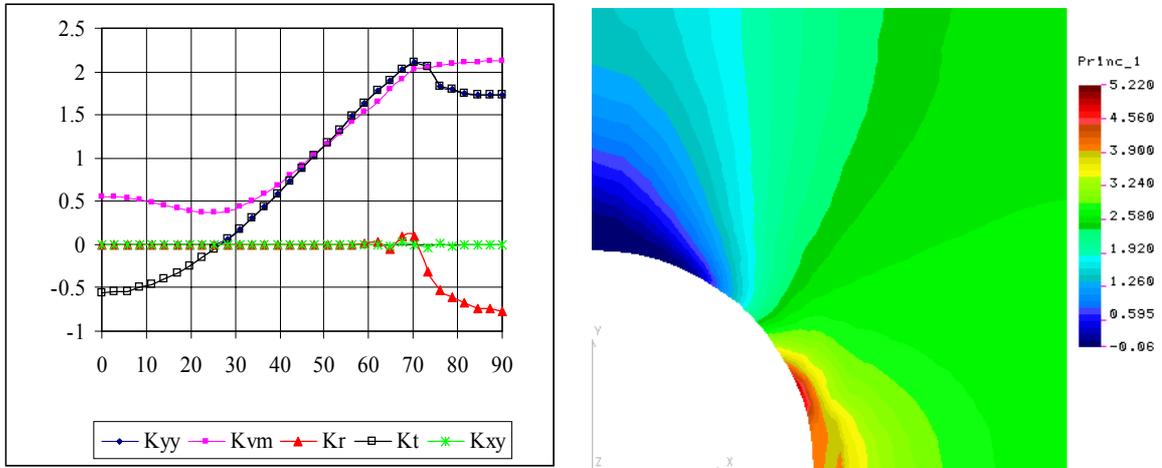
A6



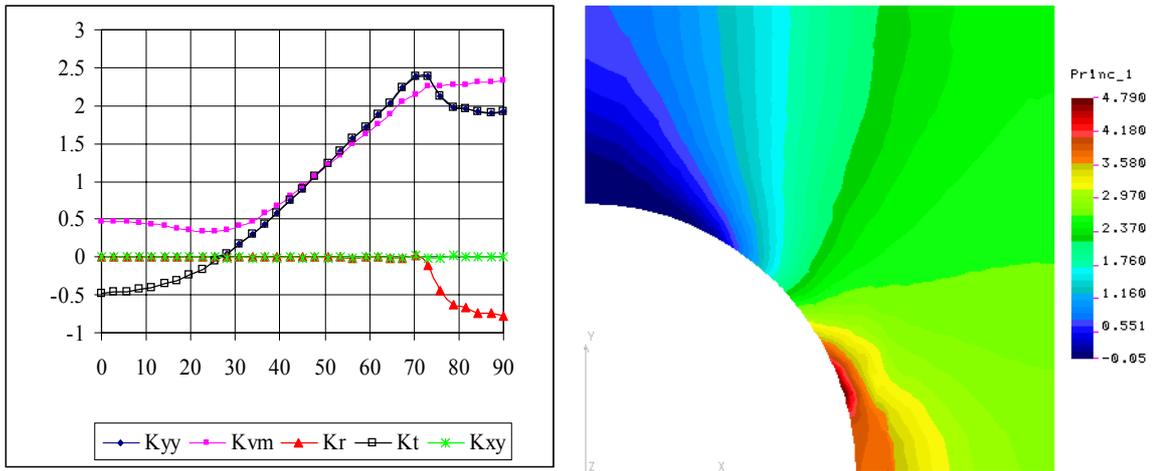
A10



A15



A25



A40

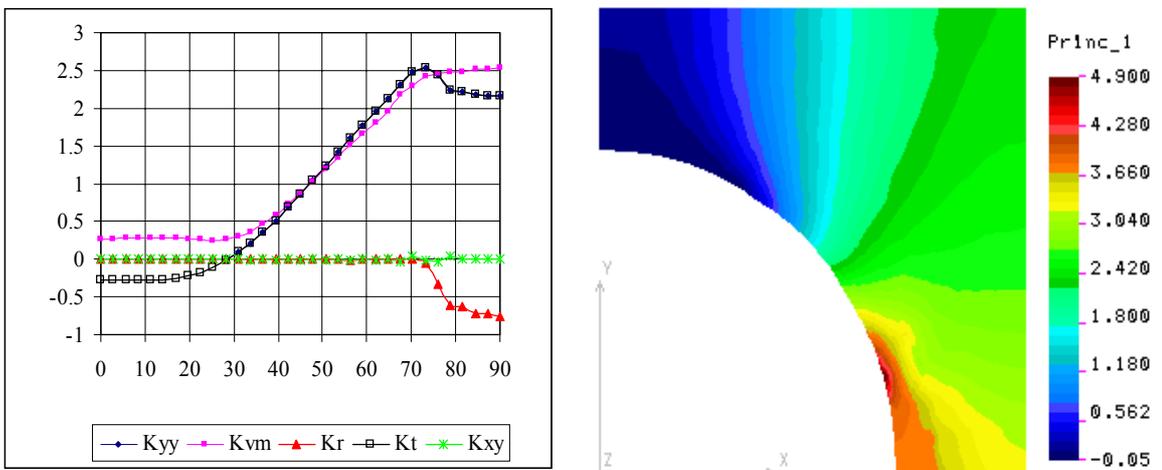


Figura 6.16.- Evolución de los concentradores de tensiones y mapas característicos para (K_{yy}).

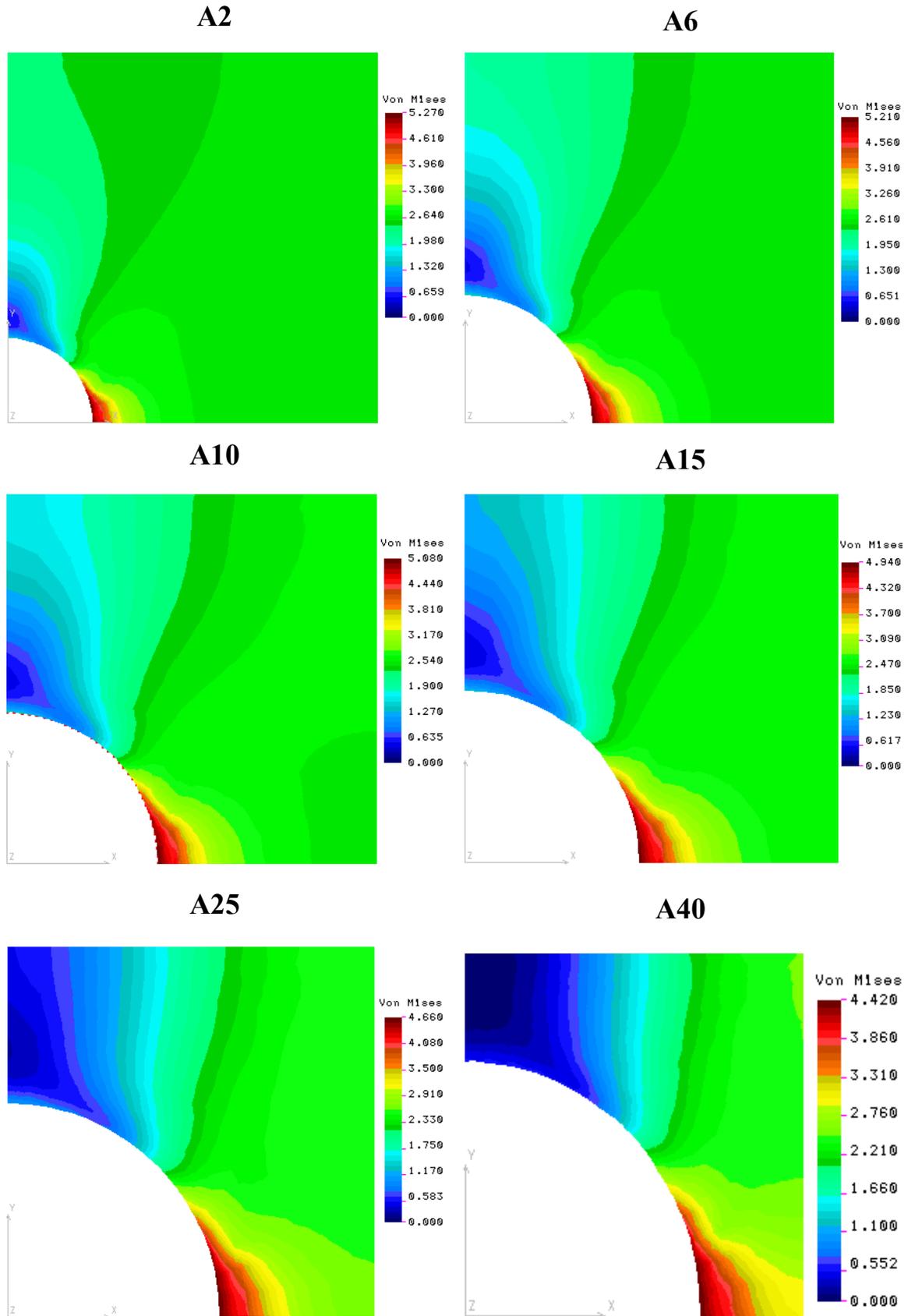


Figura 6.17.- Mapas de distribución de las tensiones de Von Mises.

La tensión de cizalla (T_{xy}) a lo largo de la interfase es igual a cero y para este caso formalmente el sistema coincide con el comportamiento de un orificio. La única tensión elevada además de la principal y la de von Mises es la tangencial que encuentra el máximo del sistema en el punto de fijación, a diferencia del orificio no modificado que tiene el máximo en el ecuador. A modo representativo en la figura 6.18 se muestran los contornos de isotensión para la tensión radial y de cizalla en la matriz para la muestra de menor porcentaje de carga.

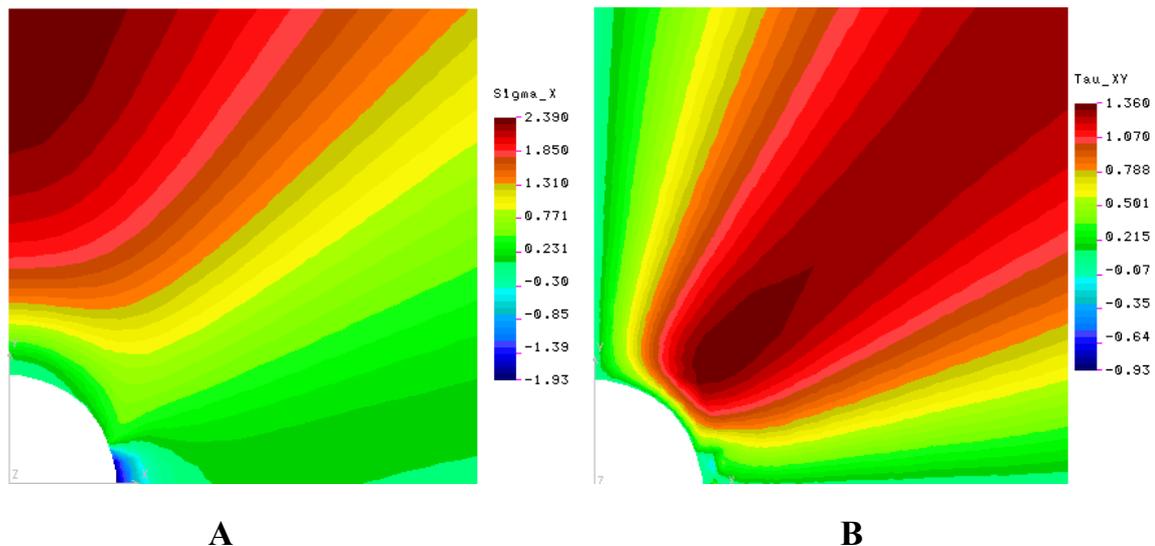


Figura 6.18.- Diagramas de tensiones representativos en coordenadas polares para la muestra A2. **A:** Tensión radial. **B:** Tensión de cizalla.

En el caso de una partícula de módulo muy bajo se ha comprobado que la posición del máximo se mantiene en el ecuador pero sin embargo la tensión radial es en magnitud mucho menor de la encontrada para partículas rígidas, hecho que implica una menor tendencia al despegue de las inclusiones de bajo módulo.

En el caso del vacío modificado encontramos que se traslada muy poco esfuerzo hacia la matriz y que éste es de compresión en la zona comprendida entre 70° y 90° (K_r).

6.3.4.2.- Interpretación del comportamiento a fractura.

A partir de los gráficos obtenidos en las diferentes simulaciones es posible establecer la sucesión de acontecimientos que originan la fractura de los compuestos PS-microesferas considerados en este trabajo.

Inicialmente la esfera de vidrio se encuentra en un estado de compresión hidrostática por la contracción de la matriz sobre ella debida al enfriamiento post-

moldeo. Cuando la tensión aplicada es baja y todavía inferior a la que ejerce la matriz, el sistema PS-microesferas puede asimilarse a un conjunto con excelente adhesión interfacial. En este sistema la tensión máxima se produce en el polo y como la tensión perpendicular a la esfera (σ_r) es también máxima se produce el despegue partícula-matriz. Una vez se ha producido la separación de fases la grieta ve favorecido su crecimiento hasta un ángulo de aproximadamente 70 °. Eventualmente y con la continuación del esfuerzo puede producirse el despegue completo de la partícula permaneciendo sin embargo el contacto entre fases en un área de 20 ° a partir del ecuador

El origen de la craze se considera que aparece en la zona de máxima tensión principal (K_{yy}) que en nuestros sistemas, una vez consumado el despegue, se produce a 70° del polo.

Una vez la craze se ha generado su crecimiento se ve favorecido por la dirección de la tensión principal máxima que coincide en dirección con la del esfuerzo aplicado. Así la craze se estira y crece sobre todo en amplitud. La craze crece y se desarrolla en el plano perpendicular al esfuerzo aplicado ya que entonces ambas caras de la craze se ven traccionadas. Tanto en el caso de adhesión perfecta como en el de no adhesión la craze que crece lo hará en el sentido de conexión entre ambas esferas, en el primer supuesto a partir de los polos y en el segundo a partir del ecuador.

La presencia de un mayor número de esferas hace que aumente el factor de intensidad de tensiones y en consecuencia se necesita un menor esfuerzo para generar crazes. Como éstas se forman en la interfaz con la partícula al existir más partículas hay mayor probabilidad de formación de crazes. El límite se produce cuando la matriz se satura.

6.3.4.3.- Resumen.

Se ha implementado un modelo de cálculo bidimensional y axisimétrico que a partir de las propiedades individuales de cada fase nos ha permitido hallar las propiedades elásticas del sistema. Para obtener las propiedades reales de los sistemas considerados se han aplicado una serie de coeficientes correctores basados en la distribución estadística de la distancia interparticular.

Se han implementado dos límites de variación de propiedades, isotensión e isodeformación encontrando que los límites de variación son estrechos y que los valores del módulo se ajustan razonablemente bien a la evidencia experimental. El margen de variación entre isotensión e isodeformación coincide con los referenciados previamente en la literatura [Guild 1989-a].

El modelo ha sido aplicado considerando adhesión perfecta, adhesión nula e imperfecta entre las fases. En cualquiera de los casos mencionados el coeficiente

concentrador de tensión es superior a 2 y aumenta ligeramente con la proporción de segunda fase indicando que los campos tensionales generados en la vecindad de las partículas se solapan cuando la distancia interparticular es reducida.

Los mapas de tensiones correspondientes a los diferentes análisis muestran que la tensión en la dirección del esfuerzo (principal) es máxima en el polo con buena adhesión, en el ecuador cuando no hay adhesión, y a 70° desde el polo cuando la adhesión es imperfecta. La tensión principal en la dirección del esfuerzo es la responsable del crazing. En el caso de un material que presentara fluencia por cizalla ésta se desarrollaría a 45° desde el polo con buena adhesión y en el ecuador con mala adhesión.

El proceso de fractura de los compuestos se inicia con una separación previa de las fases. La tensión radial perpendicular a la partícula es la responsable del despegue de las fases. La separación se inicia en el polo (tensión radial máxima) y favorece el crecimiento de una grieta interfacial hasta un ángulo de 70° . En compresión el despegue se iniciaría en el ecuador.

El crazing se inicia para nuestras muestras en el entorno del ecuador (70°) y crece aumentando de tamaño en la dirección perpendicular a la tensión aplicada, esto es, hacia el ecuador de la partícula vecina.