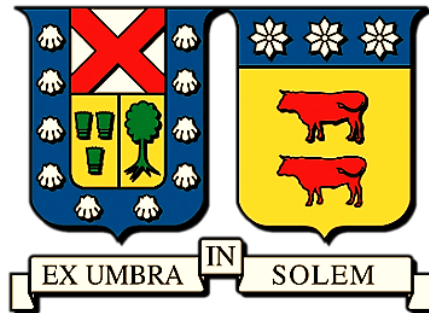


UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARIA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA METALÚRGICA Y DE MATERIALES
VALPARAÍSO—CHILE



**“ANÁLISIS DEL EFECTO DE LA POROSIDAD GRADIENTE SOBRE EL
MÓDULO ELÁSTICO EN ESPUMAS DE ALEACIONES BASE TITANIO
CON ESTRUCTURA FCC MEDIANTE ELEMENTOS FINITOS”**

JAVIER ANDRÉS HENRIQUEZ FIGUEROA

**Memoria de titulación presentada en conformidad a los requisitos y
reglamentos requeridos para obtener el título de Ingeniero Civil en
Metalurgia y Materiales**

Profesor guía: Dr. Ing. Claudio Aguilar R.

DICIEMBRE—2020

Para mi Familia

Por todo el apoyo recibido y compañía brindada en este proceso académico

Para mis amigos y amigas

Por su amistad convertida en momentos inolvidables

Para las nuevas generaciones

Porque lo nuevo siempre será mejor y tendrán toda la historia para aprender

AGRADECIMIENTOS

En esta instancia quisiera agradecer profundamente por el apoyo, ayuda y cooperación recibida en este trabajo de titulación:

A mi madre y padre, Angela y Alejandro y a mis abuelos y abuelas, que siempre estuvieron en todas las situaciones; brindando compañía y paciencia para impulsarme a llegar donde estoy. Todo el amor incondicional que entregaron es impagable.

A mis hermanos y hermana Alejandro, María, Gabriel y Rodrigo, con los cuales compartí momentos de calidad y vivimos aprendiendo juntos. Siempre estaré para apoyarles.

A mis amigos y amigas, Sebastián, Matías, Benjamín, Kaina, Paz y junto a muchos más, quienes me dieron momentos inolvidables, confianza, palabras de afecto y apoyo durante toda mi vida universitaria. Les deseo lo mejor es su vida profesional, y sobre todo en sus vidas personales.

A mis compañeros y compañeras del ámbito académico y profesional, por compartir su conocimiento y crítica constructiva en momentos de duda.

A mis profesores, Claudio, Karem y Flavio quienes siempre estuvieron dispuestos a prestar ayuda y apoyo en este proceso.

RESUMEN

Las espumas metálicas presentan interesantes propiedades físicas y químicas para uso ingenieril, permitiendo nuevas oportunidades en aplicaciones con materiales biomédicos. La porosidad añadida en estos materiales, que en general es homogénea, afecta a sus propiedades físicas tales como su densidad relativa y módulo elástico. Más aún, materiales con un gradiente de porosidad son capaces de balancear propiedades mecánicas con propiedades biocompatibles; ambos requisitos necesarios para ser considerados biomateriales. Este trabajo de título está enmarcado en un proyecto de investigación, FONDECYT 1190797, en el cual se desarrollan espumas metálicas de aleaciones de Titanio. En base a esto, se requieren soluciones robustas y eficientes para evaluar y predecir el módulo elástico de espumas metálicas con distribución de porosidad gradiente; diseñadas con nuevas aleaciones base Ti que poseen estructura cristalina cubica centrada en las caras ("FCC").

En este estudio se desarrollan 4 modelos RVE de espumas con porosidad gradiente, que son simulados a través del método de elementos finitos (MEF). Mediante los resultados de las simulaciones es posible analizar el efecto que produce la porosidad gradiente sobre el módulo elástico de 3 espumas distintas de aleaciones base Titanio (Ti-33Nb-4Mn, Ti-30Nb-13Ta, Ti-13Ta-6Sn), y una de Titanio comercialmente puro. Se diseñan 4 configuraciones de distribución de porosidad gradiente para cada material donde la porosidad promedio varía de 30% a 40%v/v. Estos modelos sirven para analizar la evolución de porosidad y su morfología. Los modelos son transferidos al software de elementos finitos ANSYS Mechanical (2019, R2), donde se aplica el mallado y se determinan las condiciones de contorno para un ensayo de compresión, que consisten en una carga uniaxial con nodos acoplados en la cara superior del modelo. Con la respuesta al estímulo aplicado sobre los modelos es posible simular y obtener el módulo de Young.

Los resultados indican que al aumentar progresivamente la porosidad promedio en los modelos, aumenta la irregularidad y complejidad en su morfología; producto de la coalescencia de los poros, que generan finalmente un tamaño mayor de poro. Se estima que la porosidad mínima para que haya interconexión es de al menos 30%. La aleación que cumple con los valores de hueso humano tanto de módulo elástico (~30 GPa) y porosidad (30-40%) es la aleación Ti-13Ta-6Sn, la cual obtiene un módulo elástico simulado de 30.7 (GPa). Las aleaciones restantes requieren de una porosidad promedio sobre 40% para obtener un módulo elástico cercano a la del hueso cortical. Los valores de módulo de elasticidad simulados a 40% de porosidad promedio son: 43, 35, 30.7 y 67.6 (GPa) para las aleaciones Ti-33Nb-4Mn, Ti-30Nb-13Ta, Ti-13Ta-6Sn y Ti comercial puro respectivamente.

Para analizar el efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo de Young, se relacionaron los valores de módulo elástico en función de la porosidad promedio. La porosidad gradiente produce un cambio en el comportamiento elástico, donde las capas externas de la espuma (de 20% de porosidad) actúan como soportes de la espuma, y donde el ajuste no lineal de la curva, entrega un exponente de 0.87 para todas las aleaciones, el cual se estima que es indicativo del tipo de geometría de porosidad (porosidad gradiente con soportes externos).

ABSTRACT

Metallic foams have interesting physical and chemical properties for engineering use, allowing new opportunities in applications with biomedical materials. The added porosity in these materials, which is generally homogeneous, affects their physical properties such as their relative density and elastic modulus. Furthermore, materials with a porosity gradient are capable of balancing mechanical properties with biocompatible properties; both necessary requirements to be considered biomaterials. This degree work is included in a research project, FONDECYT 1190797, in which metallic foams of Titanium alloys are developed. Based on this, robust and efficient solutions are required to evaluate and predict the elastic modulus of metal foams with gradient porosity distribution; designed with new Ti base alloys that have face-centered cubic crystalline structure ("FCC").

In this study, 4 RVE models of foams with gradient porosity are developed, which are simulated through the finite element method (FEM). Through the results of the simulations, it is possible to analyze the effect that gradient porosity produces on the elastic modulus of 3 different foams of Titanium base alloys (Ti-33Nb-4Mn, Ti-30Nb-13Ta, Ti-13Ta-6Sn), and a of commercially pure Titanium. In this study, 4 RVE models of foams with gradient porosity are developed, which are simulated through the finite element method (FEM). Through the results of the simulations, it is possible to analyze the effect that gradient porosity produces on the elastic modulus of 3 different foams of Titanium base alloys (Ti-33Nb-4Mn, Ti-30Nb-13Ta, Ti-13Ta-6Sn), and a of commercially pure Titanium. 4 gradient porosity distribution configurations are designed for each material where the average porosity ranges from 30% to 40% v / v. These models are used to analyze the evolution of porosity and its morphology. The models are transferred to the finite element software ANSYS Mechanical (2019, R2), where the meshing is applied and the boundary conditions for a compression test are determined, which consist of a uniaxial load with coupled nodes on the upper face of the model. With the response to the stimulus applied on the simulated models, the Young's modulus of the foams is obtained.

The results indicate that by progressively increasing the average porosity in the models, the irregularity and complexity in their morphology increases; product of the coalescence of the pores, which finally generate a larger pore size. The minimum porosity for interconnection is estimated to be at least 30%. The alloy that meets human bone values for both elastic modulus (~ 30 GPa) and porosity (30-40%) is the Ti-13Ta-6Sn alloy, which obtains a simulated elastic modulus of 30.7 (GPa). The remaining alloys require an average porosity over 40% to obtain an elastic modulus close to that of cortical bone. The values of simulated elastic modulus at 40% average porosity are: 43, 35, 30.7 and 67.6 (GPa) for the alloys Ti-33Nb-4Mn, Ti-30Nb-13Ta, Ti-13Ta-6Sn and pure commercial Ti respectively.

To analyze the effect of gradient porosity on Young's modulus, elastic modulus values were related as a function of average porosity. Gradient porosity produces a change in elastic behavior, where the outer layers of the foam (20% porosity) act as foam supports, and where the non-linear adjustment of the curve gives an exponent of 0.87 for all the alloys, which is estimated to be indicative of the type of porosity geometry (gradient porosity with external supports).

ÍNDICE

AGRADECIMIENTOS	3
RESUMEN	4
ABSTRACT	5
ÍNDICE	6
ÍNDICE DE TABLAS	8
Capítulo 1. INTRODUCCIÓN	14
1.1. Contexto	14
1.2. Planteamiento del problema	15
1.3. Hipótesis	15
1.4. Objetivos	15
Capítulo 2. ANTECEDENTES TEORICOS	16
2.1. Biomateriales	16
2.2. Materiales porosos (Espumas sólidas)	18
2.3. Titanio	24
2.4. El Hueso	30
2.5. Método de Elementos Finitos	33
Capítulo 3. DESARROLLO EXPERIMENTAL	43
3.1. Materiales	43
3.2. Diseño de modelos de espumas	43
3.3. Caracterización de modelos y procesamiento de imágenes	49
Capítulo 4. RESULTADOS Y DISCUSION	50
4.1. Caracterización de Modelos	50
4.2. Simulaciones de elemento finito	57
4.3. Efecto de la porosidad sobre el módulo elástico simulado	63
Capítulo 5. CONCLUSIONES	69

Capítulo 6. REFERENCIAS	70
Capítulo 7. ANEXOS	78
7.1. Ansys Workbench – Mechanical: Etapas.....	78
7.2. Caracterización Morfológica ImageJ.....	85
7.3. Memoria de Resultados de Simulación.....	90

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Designación de posibles combinaciones de dispersión entre 2 fases, adaptado de [22].	19
Tabla 2: Clasificación de propiedades de aleaciones de Titanio [4].	25
Tabla 3: Propiedades mecánicas hueso cortical de fémur, valores en paréntesis corresponden a desviación estándar [65].	32
Tabla 4: Propiedades mecánicas hueso esponjoso [65].	32
Tabla 5: Propiedades físicas para modelar materiales.	43
Tabla 6: Parámetros para diseñar fase dispersa en espumas.	45
Tabla 7: Parámetros morfológicos para modelar fase porosa.	46
Tabla 8. Condiciones de fuerza aplicada para cada modelo.	47
Tabla 9: Resultados para densidad relativa y porosidad para modelos. Datos obtenidos de ANSYS.	51
Tabla 10: Datos estadísticos de diámetro equivalente de poro para cada modelo.	56
Tabla 11: Cantidad de elementos y nodos por cada modelo en estudio.	57
Tabla 12: Parámetros de ajuste A y b de ec. (14) con error asociado y ajuste R-cuadrado para resultados de simulación en aleaciones de estudio.	65
Tabla 13: Parámetros de ajuste A y b de ec. (14) con error asociado y ajuste R-cuadrado para resultados ajustados de simulación en aleaciones de estudio	66
Tabla 14: Estadística de diámetro equivalente, circularidad y redondez para modelo 403020	85
Tabla 15: Estadística de diámetro equivalente, circularidad y redondez para modelo 503020	86
Tabla 16: Estadística de diámetro equivalente, circularidad y redondez para modelo 504020	87
Tabla 17: Estadística de diámetro equivalente, circularidad y redondez para modelo 505020	88
Tabla 18: Módulo de Young obtenido por MEF para cada aleacion y modelos de porosidad según densidad relativa	91
Tabla 19: Módulo de Young corregido para cada aleacion y modelos de porosidad según densidad relativa.	91

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Tipos de diseño para biomateriales con porosidad gradiente. (a) capas de diferente porosidad (b) capas adheridas a un bloque compacto (c) discos porosos en forma de capas, (d) capas cilíndricas de distinta porosidad radial, extraído de [27].	17
Figura 2: Collage de espuma metálica con porosidad gradiente (204060) obtenida por método SH (diámetro espaciador de 0.206 (mm), extraído de [26].	20
Figura 3: Micrografías ópticas de a) sección transversal de espumas de titanio con porosidad de 14.7%, b) de 50%, adaptado de [31], c) sección de hueso esponjoso [32].	21
Figura 4: Módulo de Young aparente en función de la porosidad homogénea para (a)Titanio puro y (b) Ti64. Línea continua corresponde al ajuste con la ecuación de Phani y Niyogi [33]......	22
Figura 5: Módulo de Young aparente en función de la porosidad homogénea para (a) titanio puro y (b) Ti64. Línea continua corresponde al ajuste con la ecuación de Pabst y Gregorová [34].	23
Figura 6: Estructuras cristalinas del Titanio.....	24
Figura 7: Algunas vías de procesamiento pulvimetalúrgicas según porosidad deseada [23].	28
Figura 8: Diagrama jerárquico multi-escala del hueso. Imagen traducida de [62]......	31
Figura 9: Curvas de diámetro promedio de poro en función del número de poros, para distintos porcentajes de porosidad (curvas de nivel), y volumen de matriz constante (1 mm ³). Figura derecha en escala logarítmica. Porosidades de 50% y 10% mostrada con línea continua para delimitar zona de trabajo.....	36
Figura 10: Curvas de diámetro de poro en función del porcentaje de porosidad, para distintos valores de N (curvas de nivel), y volumen de matriz 1(mm ³).	37
Figura 11: Diagrama de superficie del diámetro de poro en función de la porosidad P y el número de poros (N), para un volumen de matriz constante de 1 (mm ³). Escala progresiva de colores representa cambio en la altura, es decir aumento de diámetro (D)	38
Figura 12: Factor de escala “a/D” en función de la porosidad (%v/v) existente, a diferente número de poros N. Área encerrada por cuadrilátero indica la región factible de trabajo para este estudio.....	39

Figura 13. Diagrama de factor de escala a/D en función del factor de dispersión N/P para distintos conjuntos de variables (D y P), hacia la derecha puede aumentar N , o bien disminuir P . Línea punteada corresponde a región de factible de estudio.	40
Figura 14: Esquema general de módulo “Static Structural”.....	41
Figura 15: Modelo de porosidad gradiente diseñado con las condiciones 504020. Las zonas corresponden a (1) capas internas, (2) capas intermedias y (3) capas externas. Mostrando con poros de color las siguientes características: capa interna (verde) de 50% de porosidad, capa intermedia (amarillo) de 40% y capa externa (rojo) de 20%	44
Figura 16. Condición de soporte fijo para modelo 505020, con nodos acoplados en la zona inferior coloreada.....	48
Figura 17. Condición de fuerza aplicada para modelo 505020, con nodos acoplados en toda la superficie coloreada.....	48
Figura 18: (a) Corte transversal para modelo 403020, y (b) secciones transversales de cada corte para medición de área.....	49
Figura 19: Modelos representativos de espuma con notación designada para: (a) 403020, (b) 503020, (c) 504020 y (d) 505020.....	50
Figura 20. Distribución superficial de poros (vista superior y considerando todos los niveles), para modelo (a) 403020, (b) 503020, (c) 504020 y (d) 505020.	51
Figura 21. Esquema demostrando el concepto de distancia mínima d_{min} para poros de diámetro D . En (a) poros están aislados sin contacto, (b) se contactan en un solo punto y (c) existe unión y coalescencia de poros, se genera un poro nuevo de mayor tamaño.	52
Figura 22: Distribución y curva log-normal de la frecuencia de poros en función de la distancia mínima entre poros vecinos para (a) capa de porosidad 20% y (b) capa de porosidad 30%, (c) capa de 40% y (d) capa de 50% de porosidad. Distancia inferior a 200 micrómetros implica que hay interconexión.....	53
Figura 23: Distribución con ajuste (Log-Normal) de diámetro equivalente de poro y porcentaje acumulado para modelo (a) 403020, (b) 503020, (c) 504020, (d) 505020. ..	55
Figura 24: Distribución Log-Normal de diámetro equivalente de poro para los 4 modelos estudiados.....	55
Figura 25: (a) Mallado realizado a modelo 505020 y (b) distribución de la fracción volumétrica en función de “skewness” u oblicuidad de los elementos en el mallado.	57

Figura 26: Simulación de la distribución de esfuerzo normal resultante (MPa) para modelo 505020 de aleación Ti-13Ta-6Sn. Es posible notar la concentración de esfuerzos (rojo) alrededor de los poros y las zonas libres de compresión (celeste).	58
Figura 27: Proyecciones isométricas en 2D de simulación de esfuerzo normal para modelo 505020 y aleación Ti-13Ta-6Sn. (S) para vista superior (plano y-z), (F) frontal (plano x-z) y (L) lateral (plano x-y) respectivamente.	60
Figura 28: Distribución de los esfuerzos normales percibidos en función del porcentaje acumulado de elementos en cada modelo.	61
Figura 29: Simulación del desplazamiento percibido (en micrómetros) de modelo 505020 de aleación Ti-13Ta-6Sn. Se aplica factor de deformación para apreciar cambio de forma.	63
Figura 30: Módulo elástico de Young obtenido por software de elementos finitos, en función de la densidad relativa.	64
Figura 31: Modulo elástico corregido a modelo Gibson-Ashby en función de la densidad relativa.	67
Figura 32: Estimación del módulo de Young en función de la porosidad con distintos modelos empíricos, similares a GA, extraído de [39].	67
Figura 33: Componentes para crear materiales. Esquema general (sup.) y “toolbox” de propiedades (inf.).	78
Figura 34: Panel principal editor Design Modeler, pestañas “File” y “Create” son utilizadas.	79
Figura 35: Esquema del editor (Tree Outline) para modelar cuerpos, importar geometrías (capas) y operar con los sólidos (boolean).	79
Figura 36: Esquema de operaciones módulo Mechanical.	80
Figura 37: (sup.) Modelo ejemplar 505020 (gradiente de porosidad en eje Z), luego de ser importado. (inf.) Modelo luego de ser mallado con resolución máxima y 467.000 elementos.	81
Figura 38: Número de elementos tetraédricos en función de la métrica “skewness” para modelo 505020. Oblicuidad ideal entre valores 0 y 0.5.	81
Figura 39: Parámetros de detalle para desplazamiento, eje X corresponde al eje axial. Componentes Y-Z permanecen fijas.	82
Figura 40: Esquema principal para obtener resultados post-procesamiento.	83

Figura 41: Panel con detalles para especificar resultados post-procesamiento (esfuerzo normal). “Scope” y “Definition” son relevantes para el estudio.	84
Figura 42: Visualización de simulación sin malla del desplazamiento (sup.) y esfuerzo normal (inf.) para modelo 504020, aleación Ti-30Nb-13Ta.	84
Figura 43: (izq.) Muestras transversales de modelo 403020 con ajuste de contraste para destacar poros. (der.) Transformación digital para análisis y recuento de poros.	85
Figura 44: (izq.) Muestras transversales de modelo 503020 con ajuste de contraste para destacar poros. (der.) Transformación digital para análisis y recuento de poros.	86
Figura 45: (izq.) Muestras transversales de modelo 504020 con ajuste de contraste para destacar poros. (der.) Transformación digital para análisis y recuento de poros.	87
Figura 46: (izq.) Muestras transversales de modelo 505020 con ajuste de contraste para destacar poros. (der.) Transformación digital para análisis y recuento de poros.	88
Figura 47: Diagramas de distribución para a) circularidad y b) redondez versus porcentaje acumulado de poros, considerando todos los modelos y sus cortes transversales	89
Figura 48: Mallado generado de los modelos de estudio, (a) 403020, (b) 503020, (c) 504020 y (d) 505020.	90
Figura 49: Curvas de carga-desplazamiento obtenidas por MEF para cada aleación y sus respectivos modelos de porosidad. (a) Ti c.p., (b) Ti-33Nb-4Mn, (c) Ti-30nb-13Ta y (d) Ti-13Ta-6Sn.....	90
Figura 50: Simulación del desplazamiento percibido para las 4 aleaciones con modelo 403020.	91
Figura 51: Simulación del desplazamiento percibido para las 4 aleaciones con modelo 503020.	92
Figura 52: Simulación del desplazamiento percibido para las 4 aleaciones con modelo 504020.	92
Figura 53: Simulación del desplazamiento percibido para las 4 aleaciones con modelo 505020.	93
Figura 54: Simulación de esfuerzo normal solicitado para modelo 403020, similar en todas las aleaciones.....	93
Figura 55: Simulación de esfuerzo normal solicitado para modelo 503020, similar en todas las aleaciones.....	94

Figura 56: Simulación de esfuerzo normal solicitado para modelo 504020, similar en todas las aleaciones.....94

Figura 57: Simulación de esfuerzo normal solicitado para modelo 505020, similar en todas las aleaciones.....95

Capítulo 1. INTRODUCCIÓN

1.1. Contexto

La mayoría de los materiales para ingeniería existen en su forma densa y compacta. No obstante, la industria moderna utiliza materiales porosos, como las espumas metálicas, para fines específicos en áreas de la industria automotriz y carrera espacial, donde se focalizan tanto en el procesamiento como en la caracterización de sus propiedades [1]. En virtud de las interesantes propiedades que poseen, las espumas metálicas son objeto de estudio en muchas disciplinas ligadas a la ciencia de los materiales; encargada de estudiar la relación proceso-estructura-propiedades que existe en cada tipo de material.

En este contexto, las espumas de aleaciones metálicas tienen un uso significativo en la medicina y biomecánica, como biomateriales funcionales para el remplazo o implante de órganos duros (huesos, dientes, vertebras) [2], con la capacidad de incrementar la salud y mejorar la calidad de vida de las personas [3]. Más aún, las espumas de aleaciones base Titanio son una de las más utilizadas como implantes de hueso humano, dado que cumple con los requisitos específicos de diseño, biocompatibilidad, alta porosidad, bajo módulo elástico y resistencia a la corrosión [4,5]. La porosidad existente en la espuma metálica, afecta directamente a su módulo elástico [6], y con el fin de imitar la morfología de porosidad de un hueso humano, es necesario considerar que existe un gradiente desde el exterior del hueso compacto hacia el interior de este, donde hay mayor porosidad. Esta porosidad interna es requerida para generar interconexión con el entorno y promover el transporte de fluidos o células óseas al interior del hueso, así como también optimizar la transferencia de cargas [7]. Estas propiedades nativas del hueso humano pueden ser conseguidas mediante adición de porosidad gradiente en la espuma durante su procesamiento, que balancea propiedades biológicas y mecánicas.

Por esta razón es importante el estudio de la influencia de la porosidad sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base Titanio fabricadas por métodos de pulvimetalurgia denominados aleado mecánico (AM) [8] y “space-holder” (SH) o espaciador [9–11]. Respecto a los procesos anteriores, reportes actuales [12,13], han descubierto que mediante aleado mecánico es posible obtener fases metaestables en aleaciones de Ti que poseen estructura cristalina FCC (del inglés, “Face Centered Cubic”) y tamaño de grano nanométrico. Estas características otorgan a la aleación mejores

propiedades mecánicas que las aleaciones con tamaño de grano grueso (micrométrico), que son procesadas mediante vías convencionales [14].

Para analizar el efecto que produce la compleja distribución de los poros en el módulo elástico de la espuma, surge como alternativa utilizar métodos numéricos de simulación con elementos finitos, que son capaces de representar la estructura porosa de la espuma de Titanio y evaluar sus propiedades y respuestas macroscópicas en base a las interacciones a nivel microscópico [15]. Incluso para aleaciones nuevas base Titanio, como las diseñadas por AM y SH, la simulación de propiedades presenta la ventaja de predecir el comportamiento previo a su fabricación, con el fin de optimizar parámetros de diseño y procesamiento.

1.2. Planteamiento del problema

Se desconoce la influencia de la porosidad gradiente y su distribución volumétrica sobre el módulo elástico de compresión uniaxial en espumas metálicas de Titanio con estructura cristalina FCC. Como respuesta a esta incógnita surge de solución el modelamiento y simulación de espumas de porosidad gradiente para aleaciones base Titanio.

1.3. Hipótesis

“Mediante modelación y simulación de elementos finitos, es posible predecir y evaluar el efecto de la porosidad con distribución gradiente sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base Titanio con estructura cristalina FCC”.

1.4. Objetivos

- **Objetivo General**
 - Analizar el efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base Titanio con estructura FCC mediante elementos finitos.
- **Objetivos Específicos**
 - Desarrollar 4 modelos representativos de elementos finitos considerando los gradientes y morfología de porosidad.
 - Simular el efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en modelos de espumas de aleaciones base Titanio.
 - Analizar el efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en modelos de espumas de aleación base Titanio.

Capítulo 2. ANTECEDENTES TEORICOS

2.1. Biomateriales

Un biomaterial, según el diccionario de Cambridge [16] se define como “Aquel material o sustancia que puede ser usada dentro del cuerpo humano, pudiendo ayudar en alguna patología, lesión u otra condición médica”. Buscando una definición más precisa, se encuentra la emitida en la Conferencia de Chester, celebrada en Reino Unido en 1991, y declara que un biomaterial es: “*material que se pretende que actúe interfacialmente con sistemas biológicos, con el fin de evaluar, tratar, reemplazar, aumentar, disminuir un tejido, órgano o función del sistema vivo*” [17], donde la característica más importante de los biomateriales es que se compatibiliza con el medio donde se injerta, denominada biocompatibilidad.

Sin embargo, el concepto quedó sin una definición clara, debido a que la biocompatibilidad no es una propiedad intrínseca del material, sino que depende del entorno donde se utiliza o injerta. Con esto nace una mejor definición de biocompatibilidad: “*capacidad de un material de ser utilizado con una respuesta apropiada del tejido receptor en una aplicación específica*”, que se ajusta adecuadamente a lo establecido por la norma ISO 10993-1 de evaluación de prótesis biomédicas *in vivo* [18].

Existen muchos tipos de biomateriales dependiendo de su naturaleza:

- Poliméricos: matriz polimérica HAPEX [19]
- Cerámicos: hidroxiapatita (HA) activa [20]
- Metálicos: acero inoxidable. 316L, aleaciones base Cobalto, aleaciones base Titanio [21]
- Espumas metálicas (sólidos porosos): Espumas con porosidad homogénea o gradiente [1,22–24]

Las ventajas de las espumas porosas, en específico las de aleaciones de Titanio, son su combinación de mediana-baja densidad, alta área superficial, resistencia a la corrosión, su biocompatibilidad con el cuerpo humano y su capacidad de unirse interfacialmente (fijación) con el hueso, en tanto no produce inflamación o toxicidad para las células biológicas [25]. Además, al existir un gradiente de la porosidad, es posible balancear las

propiedades mecánicas de rigidez y resistencia con las propiedades biocompatibles como generar interconexión de la porosidad y la nucleación de nuevas celular óseas, o permitir el libre transporte de fluidos biológicos, satisfaciendo tanto las necesidades biológicas como las solicitaciones mecánicas.

Estos materiales con porosidad, ya sea homogénea o gradiente, pueden ser diseñados de distinta manera según el requerimiento que se solicite. En la Figura 1 se presenta un esquema de diferentes diseños iniciales para biomateriales (o materiales en general) con gradiente poroso, ya que actualmente no sólo se utilizan como biomaterial sino que también están siendo aplicados en áreas como: mecanismos y rodamientos auto lubricantes, sistemas de captura o catálisis, y también como dispositivos para transferencia de calor [26].

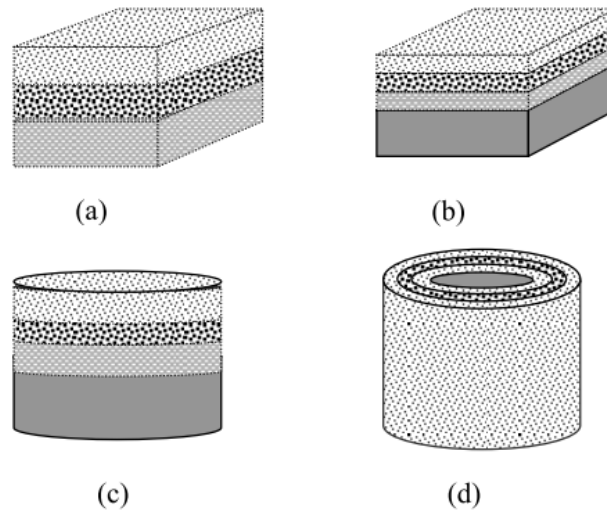


Figura 1: Tipos de diseño para biomateriales con porosidad gradiente. (a) capas de diferente porosidad (b) capas adheridas a un bloque compacto (c) discos porosos en forma de capas, (d) capas cilíndricas de distinta porosidad radial, extraído de [27].

2.2. Materiales porosos (Espumas sólidas)

Materiales porosos (porosidad menor a 30%) y espumas sólidas o celulares (mayor a 30%) son conocidos por tener una interesante combinación de propiedades físicas como baja densidad y alta superficie de área. Es en la naturaleza donde se encuentran diversos materiales con una morfología porosa, la que se utiliza para fines específicos como sustento mecánico y/o transporte de fluidos (materiales como huesos, dientes, madera, “honeycombs” de abejas). Esta relación de estructura y propiedades en los sólidos porosos y espumas celulares se detalla con profundidad por Gibson y Ashby en su libro “Cellular Solids” [6].

Materiales porosos son utilizados ampliamente en campos como: ingeniería de procesos, bioquímica, medicina, absorción de energía, transferencia de calor, entre otros. Cada material presenta diferente morfología de poros, i.e., tamaño, forma y distribución de la porosidad existente. Dichas características afectan inevitablemente al módulo elástico y resistencia del material, comprometiendo el uso y las aplicaciones posibles. Debido a esto, es importante entender por completo la influencia de los poros y la morfología estructural en las propiedades de la espuma, para así modelar cuantitativamente los efectos que produce y evaluar nuevas estructuras considerando los requisitos de diseño y durabilidad.

Para entender lo que es una espuma, y utilizar la palabra correctamente, es necesario definirla con anterioridad. Primero se define que un material es la sustancia que posee las propiedades físicas específicas (densidad, temperatura de fusión, etc.), mientras que la estructura es el cuerpo en sí mismo, que utiliza un volumen finito y posee fronteras o contornos definidos (cuerpo compacto o poroso). Ambas definiciones afectan en las propiedades elásticas del componente. Entonces en una espuma metálica base Titanio, el material es una aleación base Titanio y la estructura es la espuma porosa. Ésta última se describe a continuación.

De acuerdo con la Tabla 1, que representa todas las configuraciones de dispersión de una primera fase dentro de una segunda fase (cada una puede estar en los 3 estados de la materia), las espumas se consideran como una dispersión de fase gaseosa en un sólido, o bien un líquido. Si bien el término espuma se refiere comúnmente a un gas

disperso en un líquido (espuma líquida), la estructura solidificada puede denominarse espuma sólida (espumas metálicas y poliméricas principalmente).

No necesariamente las espumas sólidas se fabrican a partir de las líquidas, dado que existen muchos métodos de procesamiento en estado sólido [5,28]. Cada uno de los cuales produce un efecto distinto en la estructura y morfología de la espuma. El tipo de procesamiento que se estudia más adelante es el método pulvimetalúrgico en estado sólido de “space holder” (SH) [29], el cual otorga la porosidad deseada en un amplio rango de valores, incluso cercano a las porosidades del hueso humano.

En este estudio se analiza una distribución gradiente de porosidad, la que mediante este proceso (SH) puede ser controlada y ajustada “a la medida” según el grado de compactación que se le aplique, o bien con la cantidad y tamaño del espaciador que se suministre en la pieza. Trueba et al. [26] desarrolla e implementa una compactación secuencial para fabricar mediante space holder (SH), espumas de Titanio con porosidad gradiente radial, con capas de 0-30-60% (gradiente fuerte) y 20-40-60% (gradiente suave), donde en la Figura 2 se muestra la sección longitudinal gradiente suave de la espuma 20-40-60. Si bien es un gradiente radial, en el corte longitudinal es posible observar un gradiente lineal en el eje horizontal.

La característica que define a modo general los materiales porosos (y espumas metálicas), es su densidad relativa, de la cual depende la resistencia y el módulo elástico [6]. No obstante, la densidad no es la única propiedad medible y, por ende, para entender cómo la influencia de los poros afecta al módulo elástico del material, es necesario estudiar la morfología y distribución volumétrica de estos; que son propiedades estructurales de la espuma metálica.

Tabla 1: Designación de posibles combinaciones de dispersión entre 2 fases, adaptado de [22].

Dispersión de Fases		Fase 2		
		Gas	Líquido	Sólido
Fase 1	Gas disperso en	Mezcla de gases	Espuma líquida	<i>Espuma sólida (celular)</i>
	Líquido disperso en	Niebla (gotas suspendidas)	Emulsión	Gel
	Sólido disperso en	Humo particulado	Pulpa o sólidos en suspensión	Partículas embebidas

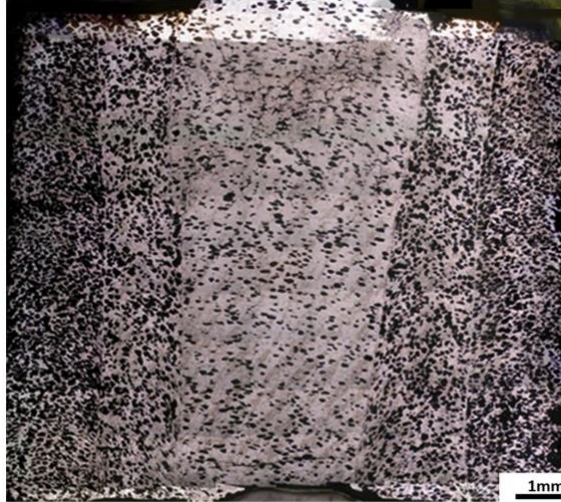


Figura 2: Collage de espuma metálica con porosidad gradiente (204060) obtenida por método SH (diámetro espaciador de 0.206 (mm), extraído de [26]).

A nivel macroscópico (mm-cm) no es posible distinguir la heterogeneidad de la espuma, por lo que debe ser analizada en una escala más reducida. A nivel microscópico (μm), como en la Figura 3, es posible evidenciar la heterogeneidad de los poros en la espuma o el hueso (donde en ambos la fase gaseosa es caracterizada por su fracción volumétrica, el tamaño característico de poro, el nivel de interconexión, etc.). Cuando se observa a un nivel intermedio (meso escala), el material exhibe una estructura discreta y continua, la cual se denomina celda unidad y tiene un tamaño que va desde 200 a 2000 micrómetros (μm) [30]. Esta celda se compone de un “esqueleto” o armazón metálico que está rodeado de poros, y su morfología (forma y distribución) es la responsable del comportamiento elástico con que reacciona frente a un estímulo externo. Por regla general, una menor densidad relativa (de la espuma), tiende a disminuir las propiedades mecánicas como resistencia y rigidez.

Hasta ahora la forma de determinar el efecto de los poros en las propiedades elásticas del material es por la vía experimental, ya sea por ensayo mecánico o bien por métodos de resonancia acústica. Sin embargo, la realización de ensayos tiene un costo muy alto tanto monetario como de tiempo, además de que los resultados que se obtienen pueden presentar discrepancias según las condiciones de procesamiento metalúrgico en los distintos métodos de fabricación. Es por esta razón que utilizar métodos numéricos de elementos finitos surge como solución para enfrentar la dificultad de realizar de múltiples ensayos y a bajo costo.

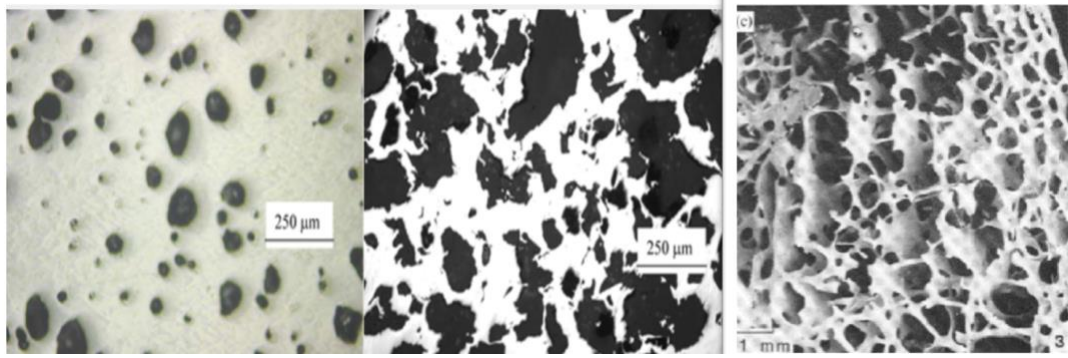


Figura 3: Micrografías ópticas de a) sección transversal de espumas de titanio con porosidad de 14.7%, b) de 50%, adaptado de [31], c) sección de hueso esponjoso [32].

2.2.1. Módulo elástico de espumas metálicas

En general para los materiales porosos, el módulo de Young de la espuma (E^*) se define con relación a la ecuación (1), y al módulo de Young del sólido denso y homogéneo (E_0), utilizando el cociente entre ellos como el módulo elástico aparente (E_{ap}):

$$E_{ap} = \frac{E^*}{E_0} \quad (1)$$

La densidad aparente (ρ_{ap}), es una propiedad que se mide en las espumas a nivel macroscópico, también se define en función del cociente entre la densidad de la espuma (ρ^*) y la densidad del sólido compacto (ρ_0), que depende de su naturaleza elemental, expresada en la ecuación (2):

$$\rho_{ap} = \frac{\rho^*}{\rho_0} \quad (2)$$

Para predecir la relación entre propiedades mecánicas y fracción de porosidad, algunos modelos empíricos se han establecido para determinar el módulo en función de la porosidad, como la ecuación de Gibson-Ashby (3), donde C y n son constantes del material y de la geometría de porosidad respectivamente. En general C varía entre 0.4 y 4, y n entre 1.8 y 2,2 [6].

$$E_{ap} = \frac{E^*}{E_0} = C \left(\frac{\rho^*}{\rho_s} \right)^n \quad (3)$$

Otros modelos empíricos se han establecido, como la relación de Phani y Niyogi [33] en la ecuación (4), con P la porosidad existente y P_c la porosidad crítica. El valor de porosidad crítica indica que el módulo elástico tiende a 0 y por ende se pierden las propiedades estructurales. El parámetro m depende de la geometría y forma de los poros existentes.

$$E_{ap} = \frac{E^*}{E_0} = \left(1 - \frac{P}{P_c}\right)^m \quad (4)$$

Pabst y Gregorová [34] establecieron un tipo de relación, incluyendo un factor de forma “ a ”, el cual depende de la morfología del poro ($a=1$ para poros esféricos), en la ecuación (5):

$$E_{ap} = \frac{E^*}{E_0} = (1 - aP) \left(1 - \frac{P}{P_c}\right) \quad (5)$$

Zhu et al. [35], realizó un estudio para determinar el módulo de Young de espumas porosas de Titanio puro y Ti-6Al-4V con técnicas acústicas de resonancia magnética y verificar el ajuste de las ecuaciones anteriormente mencionadas (4) y (5) con los datos obtenidos, en donde los parámetros ajustables (P_c , n , a) dependen fuertemente del rango de porosidad seleccionado. Los especímenes fueron fabricados vía pulvimetalurgia (mezcla de polvos metálicos, compactación y sinterización). Los poros fueron generados con el método del espaciador (“space holder”) usando urea como espaciadores. Muestras con porosidad entre 30% y 66% se producen para Titanio y Ti64 (Ti-6Al-4V).

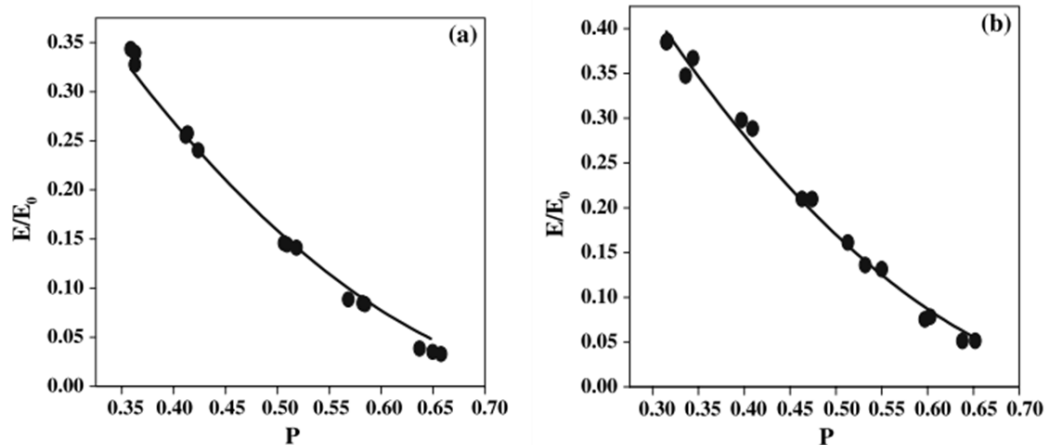


Figura 4: Módulo de Young aparente en función de la porosidad homogénea para (a)Titanio puro y (b) Ti64. Línea continua corresponde al ajuste con la ecuación de Phani y Niyogi [33].

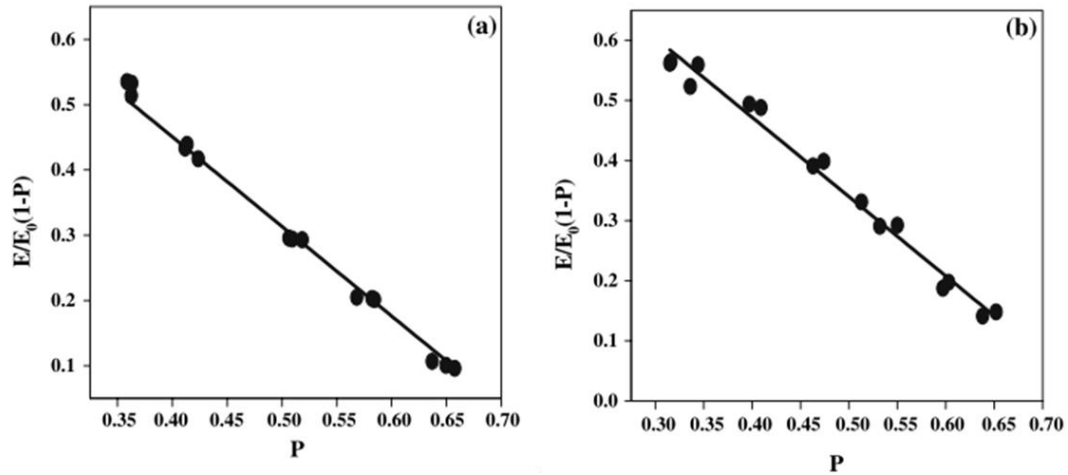


Figura 5: Módulo de Young aparente en función de la porosidad homogénea para (a) titanio puro y (b) Ti64. Línea continua corresponde al ajuste con la ecuación de Pabst y Gregorová [34].

Con los resultados, el investigador afirma que el valor de P_c (porosidad crítica) está influenciado por el tamaño del espaciador, donde una mayor razón de tamaño entre el espaciador y el polvo metálico produce un aumento en el valor de P_c . Sin embargo, no es posible determinar el valor real de P_c para materiales porosos no idealizados. Es por esto que el investigador decide mantener fijos los parámetros ajustables de “n” y “a” en las ecuaciones (4) y (5), para así obtener P_c a partir del ajuste de curvas. Usando $n=2$ y $a=1$, se grafica el módulo de Young aparente en función de la porosidad relativa, para ambas ecuaciones mencionadas. En la Figura 4 se muestra el ajuste con la ecuación de Phani y Niyogi, y en la Figura 5 se observa el ajuste con la relación de Pabst y Gregorová; ambas ecuaciones poseen una correlación adecuada para ser aplicada en materiales porosos.

2.3. Titanio

2.3.1. Reseña del Titanio

El Titanio es un elemento metálico de transición ubicado en el periodo 4, grupo IV de la tabla periódica. Es el noveno elemento más abundante en la tierra, aunque rara vez se encuentra en estado puro. Fue descubierto en 1791 por el químico y mineralogista británico William Gregor. No fue hasta 1946, después de la segunda guerra mundial, que el luxemburgués Wilhelm J. Kroll, reconocido como el padre de la industria del Titanio, desarrolló el método de Kroll, que permite obtener titanio de alto grado de pureza. Con esto se comenzó a considerar al Titanio como un material clave para la industria, principalmente la aeroespacial. Actualmente es usado en el área de la medicina, arquitectura, industria química, generación de energía, en deportes y está ganando más aceptación debido a sus excelentes propiedades físicas [36].

2.3.2. Metalurgia del Titanio

El Titanio posee una estructura electrónica tal que su última capa está incompleta; esta característica le permite formar soluciones sólidas con muchos elementos aleantes. Tales elementos (en general, metales de transición) aumentan la densidad de electrones en la estructura, pudiendo con ello alterar la estructura cristalina original y el enlace metálico [37]. Debido a esto, es que el Titanio y sus aleaciones tienen una gran variedad de propiedades funcionales, que dependen de las interacciones tanto físicas y químicas de los elementos que la constituyen. Las aleaciones de ingeniería base Titanio se clasifican según la composición de elementos aleantes y las fases constituyentes a temperatura ambiente. Cada tipo de aleación cumple un rol o trabajo determinado. Estos tipos incluyen aleaciones con fase " α " (alfa) predominante, aleaciones con fase " β " (beta) predominante y aleaciones con ambas fases, i.e., " $\alpha+\beta$ " [36–38].

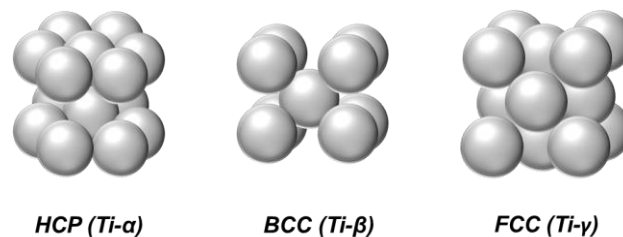


Figura 6: Estructuras cristalinas del Titanio.

Sin perjuicio de lo anterior, reportes actuales han descubierto y reconocido una nueva fase de Titanio con elementos aleantes a través de métodos pulvimetalúrgicos de no-equilibrio. Esta nueva y particular fase es metaestable y posee un módulo de Young cercano al del hueso cortical, denominada fase " γ " (gamma) [39,40]. La naturaleza del enlace metálico, entre los átomos de Titanio con los elementos aleantes, le confiere a la aleación una menor rigidez (~50 GPa), debido a que este enlace atómico es más deformable que fases alfa y beta [36,41].

Como se aprecia en la Figura 6, la fase Ti- α posee estructura HCP (del inglés, "Hexagonal Closed Packed") y corresponde a la estructura cristalina hexagonal compacta de Titanio puro comercial a temperatura ambiente. En cambio, a altas temperaturas, existe la fase Ti- β , que posee estructura cubica centrada en el cuerpo, BCC (del inglés, "Body Centered Cubic") y es estable sobre la temperatura β -transus, que para el titanio puro es 882 °C. Esta temperatura puede variar según la presencia de elementos aleantes, los que se clasifican en neutrales (Sn), estabilizadores de fase β , que son principalmente metales de transición (Mo, Nb, Ta, Zr, etc.), y estabilizadores de fase α (Al, V, O, N, etc.), que tienden a mantener la fase original. Si bien puede existir superposición de estas familias de aleaciones, las propiedades mecánicas y estructurales dependerán de la composición química y microestructura de cada aleación. Algunas aleaciones alfa, alfa-beta y beta están clasificadas en la Tabla 2.

Tabla 2: Clasificación de propiedades de aleaciones de Titanio [4].

Aleaciones De Titanio	Tipo De Fase	Composición Química [Wt. %]	Módulo De Young [Gpa]
Ti Alta Pureza	α	99.98 Ti	100-145
Ti C.P. Grado I	α	Ti, 0.2Fe, 0.18O	100
Ti C.P. Grado IV	α	Ti, 0.5Fe, 0.4O	120
Ti64	$\alpha+\beta$	Ti, 6Al, 4V	112
Ti-5Al-2.5Fe	$\alpha+\beta$	Ti, 5Al, 2.5Fe	110
Ti-13Nb-13Zr	β	Ti, 13Nb, 13Zr	80
TMZF	β	Ti, 12Mo, 6Zr, 2Fe	74

2.3.3. Aleaciones porosas base Titanio

Titanio puro y sus aleaciones, exhiben excelentes propiedades tanto mecánicas como de biocompatibilidad [3,42–44], y las aleaciones porosas base Ti se proponen como alternativa plausible para resolver el problema de apantallamiento de cargas que genera el rígido implante, gracias a que la porosidad disminuye la rigidez (imitando al hueso) y emulan la micro arquitectura interna del hueso, mejorando la osteointegración y fijación interfacial del implante.

Para que una espuma de titanio sea considerada como implante biomaterial, estudios recientes [2,27] indican que se deben cumplir ciertas condiciones específicas: (i) poseer una porosidad interconectada, (ii) con alta porosidad (30-60%v/v), (iii) tamaño de poro entre 200 y 600 micrómetros, (iv) no presentar efectos cito-tóxicos [4] y (v) tener un módulo elástico similar al hueso (3-30 GPa). Tales espumas y sus poros pueden generarse mediante diversas metodologías de fabricación o procesamiento [1,22,45–47]. Cada tipo de proceso afecta directamente y de manera particular a la calidad y morfología de la estructura porosa. Algunos procesos se pueden clasificar según la porosidad a obtener, la cual puede ser homogénea o gradiente, como lo ilustra la Figura 7.

En este sentido, la pulvimetalurgia (PM) es reconocida como la ruta de manufactura por excelencia de las aleaciones porosas [9,48]. Estos métodos tienen la capacidad de controlar la porosidad deseada en un amplio rango de valores. El método del espaciador o “space holder” (SH) destaca por su bajo costo y buena reproducibilidad. Otras vías similares de PM son, inyección de gas, sinterización convencional, y algunas de mayor coste, manufactura aditiva (impresión 3D) , fusión selectiva por láser (“SLM”) [2].

En la síntesis o fabricación a partir de polvos metálicos de nuevas aleaciones (soluciones sólidas, intermetálicos, amorfas, cuasi cristales), existen nuevos métodos de no-equilibrio, uno de los cuales se denomina aleado mecánico. Este proceso consiste en someter a los polvos a una molienda en frío, y producir la unión metalúrgica de los polvos a través de deformación plástica severa de la red atómica y fusión fría producto del impacto con las bolas de molino, con el fin “energizar” el sistema y llevarlo a un estado metaestable. Estudios recientes [12] demuestran que las aleaciones de Titanio como la aleación Ti-33Nb-4Mn, fabricada por aleado mecánico puede deformar y modificar la estructura atómica y “amorfizarla” a tiempos largos (60-80 horas), consiguiendo un

tamaño de grano nanométrico y estructura cristalina FCC. El aleado mecánico posee ventajas y atributos interesantes: (i) afinamiento de grano a nivel nanoestructurado, (ii) puede extender el límite de solubilidad y aumentar la homogeneidad y (iii) puede sintetizar nuevas fases cristalinas de que no aparecen en diagramas de fases tradicionales [49], dado que lleva al sistema metálico lejos del equilibrio.

Es por estas razones que, en específico para el Titanio, el aleado mecánico permite la fabricación de aleaciones avanzadas con composiciones homogéneas y con propiedades microestructurales muy superiores a las que se consiguen vía tradicional moldeo, forja o conformado [12]. En combinación con el aleado mecánico, la técnica de pulvimetalurgia usando espaciadores (“space-holder”) se estudia ampliamente, pues otorga uniformidad a la pieza, porosidad ajustable y una distribución de poro adecuada.

Esta técnica, que es la base para modelar las muestras virtuales, es conocida como la técnica del espaciador [50,51]. Para obtener la porosidad deseada, esta técnica utiliza sustancias específicas (NaCl, KCl) denominadas espaciadores, que se mezclan con los polvos metálicos para someterse a aleado mecánico, que incrementa la homogenización y la fusión fría de los polvos [29]. Luego son compactados de forma convencional en un punzón hidráulico, donde la presión de compactación influye en el resultado final del compacto. Posteriormente se realiza un tratamiento térmico para eliminar el espaciador y se sinteriza a altas temperaturas, donde la temperatura fijada también afecta directamente a las propiedades físicas y estructurales de la espuma. Este tipo de metodología y el ajuste de sus parámetros han sido altamente estudiados [10,52].

Según un reporte [29], la porosidad resultante mediante esta vía se clasifica en dos tipos: macroporos y microporos. Los primeros son producto de la eliminación del espaciador, y el segundo es resultado de la parcial compactación y sinterización [53]. La microestructura existente posee las siguientes características: (i) macroporos poseen contornos redondeados que reducen la concentración de esfuerzos, (ii) la superficie de las paredes es rugosa, lo que permite el crecimiento celular y (iii) los microporos favorecen la interconexión de los macroporos [23,53,54]. Con estas características es posible cumplir con los requerimientos que debe tener para ser considerado implante de biomaterial.

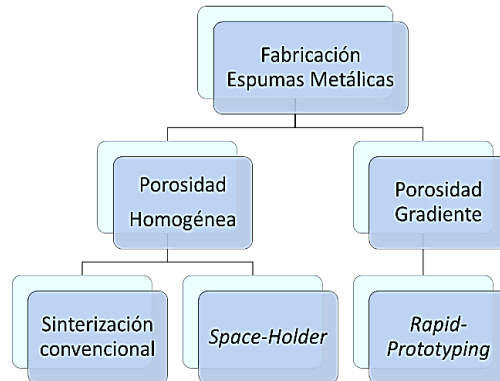


Figura 7: Algunas vías de procesamiento pulvimetalúrgicas según porosidad deseada [23].

2.3.4. Módulo Elástico Espumas de Titanio (SH)

En literatura se detallan variadas relaciones utilizadas para obtener el módulo Young axial en función de los porcentajes de porosidad homogénea producto de los espaciadores. Para validar los modelos, se requiere de ensayos previos para formular la expresión genérica para todo el rango de porosidad [46,53]. Como se mencionó anteriormente, módulo elástico depende de la densidad aparente y geometría interna basada en la porosidad, por lo que diversos estudios analizan el efecto del tamaño del espaciador, su forma y fracción volumétrica sobre las propiedades físicas de las espumas de aleaciones base Titanio.

Un estudio realizado por Tuncer et al. [55], analiza el efecto del tamaño del espaciador sobre la arquitectura y propiedades mecánicas en espumas de Titanio c.p. El investigador observa que la conducta de la compactación y sinterizado cambia en función del tamaño de espaciador y fracción volumétrica, donde una mayor presencia de espaciadores mejora la compactación. Durante la sinterización, Tuncer afirma que hay una mayor densificación de la matriz metálica, cuando el tamaño de espaciador disminuye, o bien, si la fracción en volumen aumenta. Por otro lado, al aumentar el tamaño del espaciador, produce una disminución en la densidad de la matriz. Además, un mayor tamaño de espaciador produce un aumento de la rigidez y resistencia mecánica del material, donde los parámetros que afectan en mayor proporción son el espesor y la rugosidad de las

paredes internas de la matriz. Además, el grado de interconexión (tamaño de la abertura) debe ser a lo menos 100 (μm) y la rugosidad debe ser irregular, a modo de mejorar la adhesión de células óseas en la espuma. Con la data obtenida, el investigador construye la ecuación (6) mediante estadística y regresión numérica, la que caracteriza el módulo en función de la densidad y el diámetro de poro generado, de la forma:

$$\frac{E^*}{E_0} = 0.2845 \left(\frac{\rho^*}{\rho_0} \right)^2 + 0.0178 D + 0.0017, R^2 = 0.949 \quad (6)$$

En esta relación es posible evidenciar el efecto no sólo de la densidad relativa, sino que también la contribución del diámetro característico del poro existente. De la misma manera se puede evaluar la resistencia mecánica en función de la densidad relativa y del tamaño promedio de poro, o bien de la geometría de interconexión de poros con el exterior

2.4. El Hueso

El hueso es un tejido óseo conectivo que se caracteriza por su rigidez y resistencia mecánica tanto de tracción como compresión. Se considera un biomaterial natural y compuesto (biocompósito o “biocomposite”) [56], el cual es anisotrópico y viscoelástico [57], que está hecho de un tejido vivo que, al igual que todos los sistemas u órganos del cuerpo, debe alimentarse para estar en buenas condiciones. En el tejido óseo, se desarrollan células diferenciadas del cuerpo, que se encargan de regenerar nuevos tejidos, y también de reabsorber los viejos. El hueso posee funciones vitales del cuerpo, tales como el sustento mecánico y la protección de órganos internos, o el metabolismo del calcio y la hematopoyesis [58].

2.4.1. Composición Química

La composición de este tejido dependerá del tipo de hueso, edad, localización, contenido de agua, traumas anteriores, etc. Este tejido se compone básicamente de una estructura inorgánica (cerámico) de calcio en su mayoría y una estructura orgánica de colágeno (polímero), además que contiene entre un 25 a 30% de agua [58] .

Desde el punto de vista microscópico se distingue que:

- El componente inorgánico corresponde a biocristales nanométricos de hidroxiapatita no estequiométrica de calcio (y fosfatos de calcio), que otorgan al hueso su resistencia a la compresión y dureza característica. Estos cristales presentan estructura hexagonal [59].
- El componente orgánico es una matriz polimérica de colágeno tipo I viscoelástico, el cual otorga resistencia a la tracción y rigidez.

Ambos materiales combinan sus propiedades y conformar un nuevo material compuesto, que se describe como una matriz polimérica de fibras de colágeno con cristales de cerámico embebidos en esta.

2.4.2. Estructura Ósea

Según la localización del hueso y su función en el sistema esquelético presentan diferentes formas y tamaños. Desde el punto de vista macroscópico se distingue el hueso tipo esponjoso y el hueso cortical [60]. La estructura del hueso cortical es densa y compacta, la cual recubre la mayoría de los huesos humanos y otros animales vertebrados. Por otro lado, el hueso esponjoso o trabecular, es altamente poroso, con una fracción volumétrica de poros superior a 0.45 y tamaño de poro entre 0.2 y 0.4 (mm) [61] y se encuentra en la parte interna de los huesos. Tales poros permiten una interconectividad en el sentido biológico (transporte de fluidos y células óseas), y además permite la distribución de cargas externas gracias a la morfología nativa del hueso esponjoso, que es del tipo reticular (celular), la cual se encuentra a menudo en la naturaleza [56].

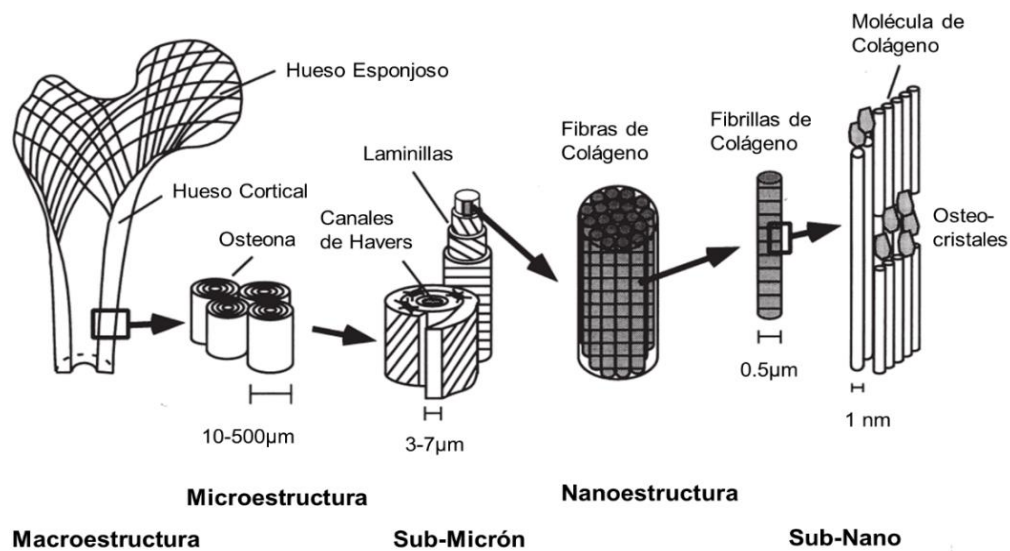


Figura 8: Diagrama jerárquico multi-escala del hueso. Imagen traducida de [62].

Existen diferentes niveles o escalas para analizar la estructura jerárquica del hueso [62,63]. Según la Figura 8, el hueso a nivel macroscópico se observa como un material globalmente “homogéneo”. A nivel microscópico, se encuentran las osteonas, que son la unidad básica para la formación y nutrición del hueso; su tamaño es de 30 a 500 micrómetros. En el nivel más pequeño (nanoscópico), se revelan los componentes fundamentales del biocompósito que corresponde al hueso: cristales nanométricos de HA mineralizados en la superficie de fibrillas de colágeno tipo I. los que le confieren tanto flexibilidad como resistencia mecánica.

2.4.3. Propiedades Mecánicas

Con la edad, el hueso va perdiendo sus propiedades, tales como densidad relativa (aumento de porosidad), resistencia mecánica, elasticidad, y con ello aumentando el riesgo de fractura. Estas propiedades dependen fuertemente de la localización y funcionalidad de cada hueso. Mientras más poroso el hueso, la rigidez y la densidad disminuyen, como en el caso de las vértebras que son principalmente hueso esponjoso (90% porosas) o bien el acetábulo de fémur que son una combinación de hueso cortical y esponjoso (30-50% de porosidad) [64]. La Tabla 3 y Tabla 4 detallan las propiedades mecánicas del hueso cortical y esponjoso respectivamente.

Tabla 3: Propiedades mecánicas hueso cortical de fémur, valores en paréntesis corresponden a desviación estándar [65].

	Módulo de Elasticidad [GPa]	Coefficiente de Poisson [-]	Resistencia a la Tracción [MPa]	Resistencia a la Compresión [Mpa]
Longitudinal	27.9 (3.9)	0.4 (0.16)	135 (15.6)	205 (17.3)
Transversal	10.1 (2.4)	0.62 (0.26)	53 (10.7)	131 (20.7)
Cizalle	3.3 (0.4)	-	65 (4.0)	-

Tabla 4: Propiedades mecánicas hueso esponjoso [65].

Módulo de Elasticidad [MPa]	Resistencia a la tracción [MPa]	Resistencia a la compresión [MPa]
10-3000	0.1-30	50

2.5. Método de Elementos Finitos

Uno de los objetivos de este trabajo es crear un Modelo de Elementos Finitos (MEF) que sea capaz de representar la estructura porosa de la aleación de titanio y evaluar sus propiedades y respuestas macroscópicas en base a las interacciones a nivel microscópico. Para comprender de mejor manera este modelo, es necesario realizar una breve reseña al método de elementos finitos.

2.5.1. Introducción

Como se puede observar en la naturaleza, en general, la mayor parte de los fenómenos físicos y químicos se pueden modelar cuantitativamente a través de ecuaciones algebraicas, diferenciales o integrales, que relacionan magnitudes asociadas a una observación en particular. Esto nos permite comprender el efecto de ciertas variables sobre la respuesta final del objetivo, no obstante, al tener múltiples dependencias de factores, la ecuación matemática se vuelve más complicada y difícil de resolver.

Al considerar los fenómenos de un sólido deformable, el análisis de elementos finitos es ampliamente utilizado, ya que las complejidades de geometría, restricciones de borde y aplicación de cargas, no permiten obtener fácilmente una solución analítica directa. Con el desarrollo de computadoras, los métodos numéricos de elementos finitos permiten llegar a una solución del problema real, la cual, si bien es aproximada, genera la relación entre las fuerzas y los desplazamientos que existen en todo el material, resolviendo las ecuaciones mediante métodos aproximativos de manera simultánea. Debido a su gran versatilidad y diversidad como herramienta de análisis, además de la mecánica de sólidos deformables su uso está extendido en la industria e investigación de disciplinas como: mecánica de fluidos, magnetismo, transferencia de calor, análisis vibracional, electrónica, acústica, entre otros usos.

Lo que es verdaderamente atractivo y seductivo para el ojo humano es la visualización, en escala de colores, del comportamiento elástico del material, donde es posible generar una animación visual del fenómeno de compresión. Puede ajustarse el factor de deformación, para clarificar las zonas críticas y también pueden generarse cortes transversales o bien longitudinales del cuerpo para analizar las tensiones y deformación al interior del sólido poroso.

2.5.2. Modelación de espumas

Actualmente se utiliza el modelo denominado RVE (de la sigla en inglés “Representative Volume Element”), en combinación con análisis de elementos finitos para estudiar materiales con alta porosidad [66]. Este modelo representativo es utilizado ampliamente en la mecánica computacional, y se define como “el elemento volumétrico más pequeño de material que puede ser usado como modelo, en el cual la representación de la propiedad macroscópica medida es estadísticamente precisa y considera todas las posibles configuraciones morfológicas” [66,67]. Para un material perfectamente homogéneo, el tamaño de RVE es infinitamente pequeño, mientras que para un material real, el tamaño mínimo de este modelo dependerá del tamaño y características de cada fase, su distribución y geometría morfológica [68]. A fin de capturar la esencia de la estructura que compone el cuerpo, para materiales porosos el tamaño de arista del elemento de volumen representativo debe ser a lo menos 4 a 5 veces mayor que el diámetro del poro. Si la porosidad es superior a 30% la interconexión es inevitable, y se comienza a considerar al sólido como espuma abierta y existe coalescencia de poros, generando cavidades irregulares y de contornos complejos.

Dado que la porosidad tiene una influencia directa sobre el módulo elástico, algunos métodos idealizados se utilizan para modelar materiales de baja porosidad, menor al 30% (análisis de micromecánica, de materiales compuestos, análisis numérico); y se han presentado como solución para modelar la relación estructura-propiedades de estos materiales, en base a simplificación de condiciones de contorno [66,69–72]. En cambio, la modelación y simulación en elementos finitos son capaces de considerar estructuras más realistas [73,74] y de mayor porosidad, como las obtenidas por el método “space holder”. Una tecnología superior para modelar espumas de mayor complejidad geométrica, es a partir de imágenes de sección transversal obtenidas con tomografía de rayos X computarizada [74–76] para obtener resultados congruentes con la realidad, que utiliza proyecciones de plano 2D para reconstruir la estructura completa original.

Niu [72], realizó un estudio para modelar las propiedades elásticas de titanio poroso fabricado mediante “space holder”; el investigador genera 2 modelos con tamaño de poro diferentes, uno con macroporos y otro microporos, esto justificado por la porosidad que existe en el método del espaciador. Niu propone que las contribuciones al módulo elástico

de la macroporosidad y microporosidad se pueden multiplicar entre sí para determinar el módulo elástico promedio. El ajuste del modelo de microporos se condice con las predicciones experimentales y el modelo de macroporos, tiende a sobre estimar el valor del módulo. Esto último, consecuencia de la tortuosa morfología generada por los espaciadores y del tamaño final de macroporos producto de la interconexión, el cual es comparable al tamaño de la muestra.

2.5.3. Formulación y Generación de la geometría

Para poder generar y caracterizar el modelo denominado RVE, el procedimiento computacional requiere de 4 parámetros de diseño, los cuales se relacionan entre sí. Estos son (i) el volumen de la matriz cúbica (V_M) de arista “a”, (ii) la fracción de porosidad volumétrica (P), que puede estar en porcentaje %v/v o fracción decimal, (iii) el diámetro inicial de poro (D) y (iv) el número de poros (N). Además, considerando el volumen de poro como una esfera ideal, el volumen de poro (V_p) es igual a $\frac{\pi}{6} D^3$ y el volumen total de poros (VT_p) es igual a N veces V_p . Reordenando los parámetros; se utiliza la ecuación (7) para relacionar el volumen de matriz para diseñar un modelo en base a D, N y P:

$$V_M = a^3 = \frac{NV_p}{P} = \frac{\pi}{6} D^3 \frac{N}{P} \quad (7)$$

Estas variables se relacionan de manera grupal y por separado. Por ejemplo, como lo muestra la Figura 9, para un volumen de matriz determinado (1 mm^3) y una fracción de porosidad constante, el aumento en el número de poros N, produce una disminución en el diámetro de poros existente con una relación empírica decreciente de carácter potencial de la forma $D=D_1(N)^{-1/3}$ ($R^2=0.999$), donde D_1 es el diámetro cuando existe un único poro ($N=1$) y depende del porcentaje de porosidad y del volumen de matriz fijados previamente. El exponente negativo (-1/3) es un indicativo de que existe una relación multiescalar y decreciente con un factor de 1000, o bien con 3 órdenes de magnitud (10^3). Es decir, al aumentar 1000 veces el número de poros, el diámetro disminuye 10 veces respecto de su tamaño original (esto consecuencia del logaritmo base 10 aplicado en un espacio tridimensional). El número de poros a estudiar es importante dado que existe un límite según las capacidades y recursos computacionales, con lo que no es posible

superar un cierto número de poros, que para este estudio no debe ser mayor a 1200 en el total de poros.

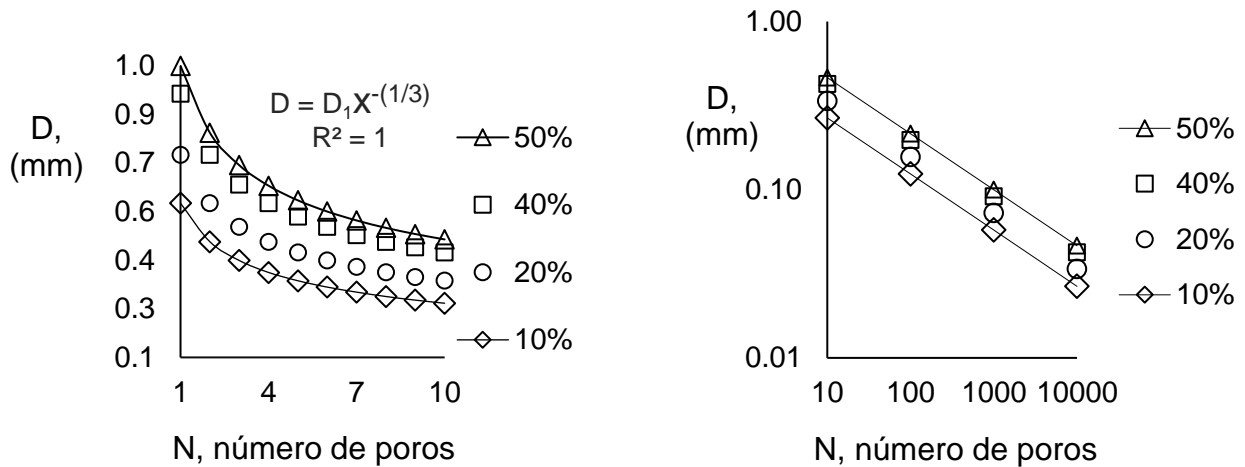


Figura 9: Curvas de diámetro promedio de poro en función del número de poros, para distintos porcentajes de porosidad (curvas de nivel), y volumen de matriz constante (1 mm^3). Figura derecha en escala logarítmica. Porosidades de 50% y 10% mostrada con línea continua para delimitar porosidades de trabajo.

Si ahora se mantiene constante el volumen de matriz y N como curvas de nivel, la Figura 10 muestra que un aumento en la fracción de porosidad ($\%v/v$), produce un aumento en el diámetro de poro. Dicho aumento está fuertemente influenciado por el número de poros fijado. Esta relación existente se genera gracias al cambio de orientación de los ejes coordenados del diagrama de la Figura 9. En este caso el diámetro de poro está en función de la fracción de porosidad, con una relación empírica de la forma $D = D_{100}(P)^{1/3}$ ($R^2 = 0.999$) donde D_{100} es el diámetro cuando existe una porosidad del 100%, es decir, el diámetro necesario para llenar el volumen total de la matriz con poros (extrapolando las curvas hasta $P = 100\%$). Con este cambio de orientación de ejes coordenados es posible observar otra perspectiva de cómo se relacionan las variables y poder diseñar un modelo representativo que encuentre el óptimo entre ellas.

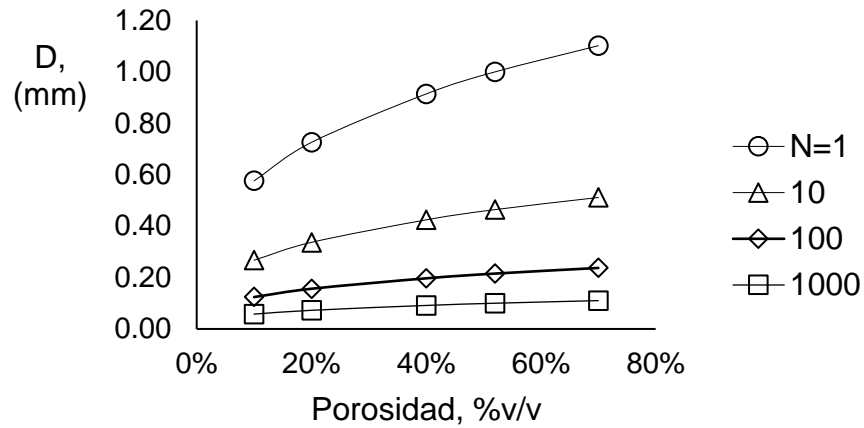


Figura 10: Curvas de diámetro de poro en función del porcentaje de porosidad, para distintos valores de N (curvas de nivel), y volumen de matriz 1(mm³).

Con esto es posible determinar que el diámetro de poro es una función de dos variables, en este caso del número de poros y el porcentaje de porosidad (%v/v), siempre y cuando se mantenga constante el volumen de la matriz dado que, si este valor no es constante, se convierte en una relación en función de 3 variables, es decir, no es posible generar un gráfico en 4 dimensiones que represente el efecto de dichas variables por completo. Es necesario dejar un parámetro constante para evaluar los 3 restantes. Dicho esto, se genera la superficie 3D, de la Figura 11, para representar el efecto que produce aumentar tanto la porosidad como el número de poros en el diámetro promedio de poro para un volumen de matriz constante de 1 (mm³). El efecto de aumentar la arista del cubo tiene un factor de proporción asociado a la escala que se utiliza, que no es visualizado en la superficie generada. Con esta superficie es posible observar los efectos combinados de ambas variables (N y P) sobre el diámetro de poro

Análisis del efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base titanio con estructura FCC mediante elementos finitos

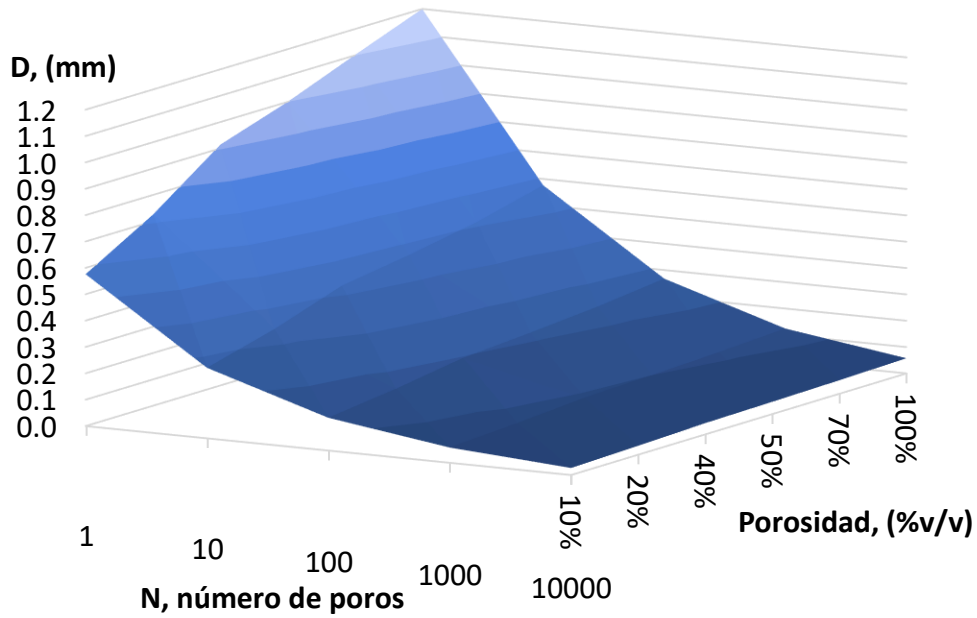


Figura 11: Diagrama de superficie del diámetro de poro en función de la porosidad P y el número de poros (N), para un volumen de matriz constante de 1 (mm³). Escala progresiva de colores representa cambio en la altura, es decir aumento de diámetro (D)

Ahora bien, existe la posibilidad de que el diámetro de poro sea mayor al tamaño de arista del cubo matriz (N muy bajo o P muy alto), por lo que es necesario normalizar esta razón, de modo que el diámetro de poro no supere al tamaño de arista del cubo unidad. Entonces se considera el cociente a/D en función de N y P (%v/v). Con esta operación, es posible representar un nuevo factor de escala como la razón entre el tamaño mayor (a) y el tamaño menor característico del modelo (D), como se observa en la relación existente de la Figura 12. Para que exista una buena representación de la porosidad, el cociente “ a/D ” debe ser mayor o igual a 4 pero no puede ser muy grande debido al coste computacional que se requiere para ese tamaño, por lo que el máximo debe ser hasta 10 [77]. Considerando estas restricciones de borde se genera un contorno de trabajo para este estudio, indicado como un cuadrilátero en la Figura 12.

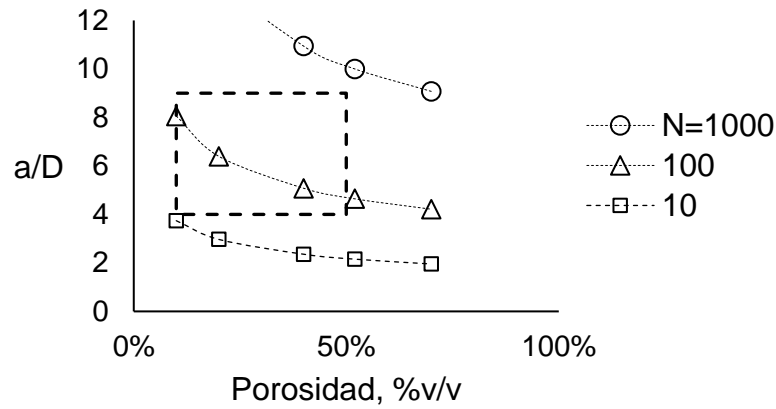


Figura 12: Factor de escala “a/D” en función de la porosidad (%v/v) existente, a diferente número de poros N. Área encerrada por cuadrilátero indica la región factible de trabajo para este estudio.

Al existir 4 grados de libertad (V_M , N , P , D), es necesario representar las variables como combinación entre ellas. Es por esta razón que se utiliza el cociente a/D en función del cociente N/P . Reordenando la ecuación (7), el cociente “a/D” está en función del factor de dispersión normalizado “N/P”; este último da un indicio de cómo está distribuida la porosidad según la cantidad de poros, e indica cuántas esferas o poros se utilizan para llenar el volumen completo con cavidades. Luego se obtiene la ecuación (8), que relaciona las dos variables auxiliares mencionadas: el factor de escala y el factor de dispersión:

$$\frac{a}{D} = \left(\frac{\pi}{6}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{N}{P}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (8)$$

Graficando la ecuación (8) para distintos valores de D , N y P se obtiene la curva empírica normalizada de la Figura 13, que es de la forma potencial con ajuste $R^2=1$. Esta relaciona de manera simultánea el tamaño de poro, porcentaje de porosidad, número de poros y volumen de matriz, que será útil para este trabajo y posteriores. Esta expresión, que incluye al número pi y también que es del tipo potencial, facilita el diseño y la modelación de espumas, que son revisados en el Capítulo 3.

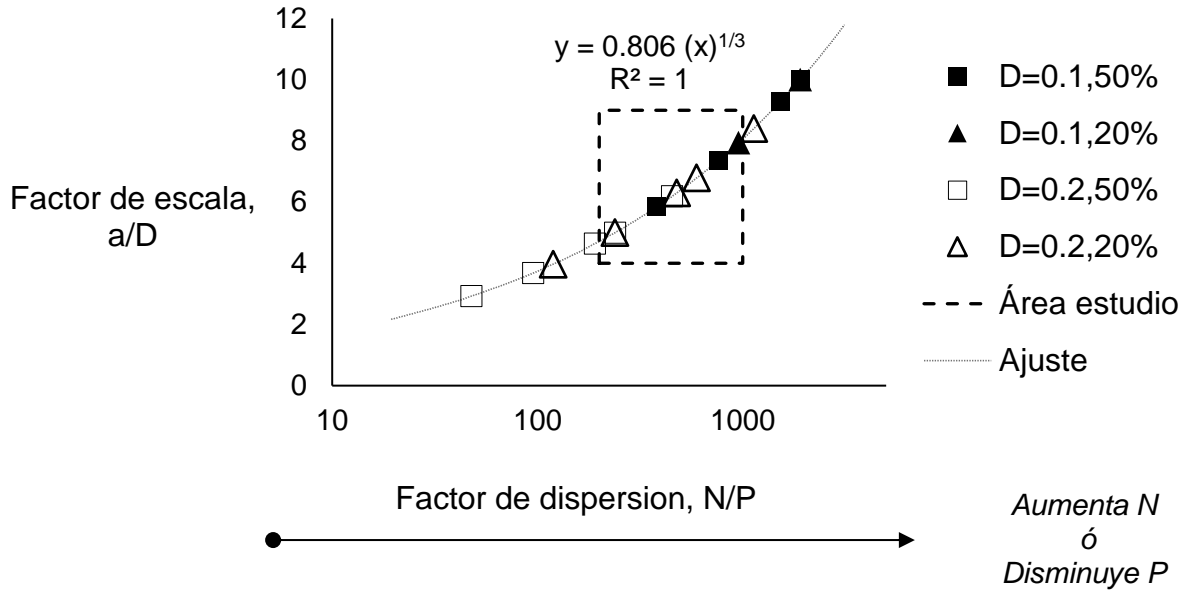


Figura 13. Diagrama de factor de escala a/D en función del factor de dispersión N/P para distintos conjuntos de variables (D y P), hacia la derecha puede aumentar N , o bien disminuir P . Línea punteada corresponde a región de factible de estudio.

2.5.4. Simulación en elementos finitos

Con el rápido desarrollo de computadoras, las simulaciones con análisis numérico se convierten en poderosas herramientas para abordar problemas de ingeniería estructural con defectos como agujeros (poros), grietas, o cualquier otra imperfección en sólidos que pueda ser observada. Sin embargo, y pese a las ventajas que posee el titanio poroso sobre el titanio sólido, la modelación de estas espumas presenta una dificultad, que es la de crear un modelo que represente de manera confiable todas las posibles configuraciones de poros existentes, minimizando los recursos computacionales utilizados; lo que supone un desafío.

Para determinar las propiedades elásticas de materiales heterogéneos, es necesario aplicar un método de homogenización [68,71,78]. Hoy en día existen métodos computacionales de homogenización, que consisten en simular modelos digitales de las muestras físicas; donde el modelo de elemento de volumen representativo RVE (“Representative Volume Element) [79], es utilizado junto con análisis de elementos finitos para predecir el módulo elástico de materiales porosos. Este método se define como la aproximación del comportamiento de un fenómeno de medio continuo mediante la división de este en elementos finitos, a fin de conocer el comportamiento local de cada elemento y poder reconstruir el sistema original. El software con que se trabaja es Ansys Workbench, que cuenta con diversas herramientas de análisis, que para efectos de este trabajo de título se emplea Estática Estructural (Static Structural). En la Figura 14 se observa el esquema general, que posee las categorías de: Data Ingenieril (Engineering Data), Geometría (Geometry) y Modelo (Model & Setup), que son abordadas de manera sistemática en el Capítulo 3.

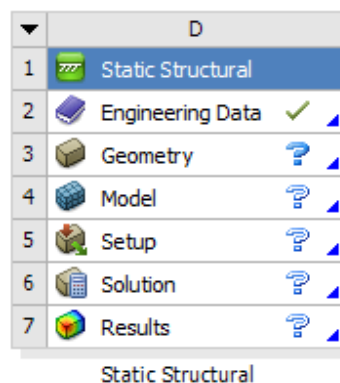


Figura 14: Esquema general de módulo “Static Structural”.

Para que la conducta estática pueda conocerse sin dificultad en el estudio, es necesario entender la serie de pasos con que el programa opera. El proceso comienza con la importación de un archivo de geometría, el cual puede sufrir modificaciones, luego le sigue la asignación del material a utilizar. En la parte del modelo se genera el mallado que es la división y discretización de los elementos, para luego asignar las condiciones de borde de los soportes, y desplazamientos aplicados. Finalmente se genera el procesamiento de la información y la entrega posterior de resultados. La forma en que opera la simulación es la siguiente:

- Subdividir el medio continuo (sólido poroso), mediante una red o superficies imaginarias en un número de elementos finitos controlados por el programa.
- Asumir que los elementos finitos están interconectados mediante nodos o uniones (grados de libertad).
- Definir magnitud para el campo de desplazamiento de cada elemento finito, a partir de los desplazamientos locales en cada nodo.
- Determinar un sistema de fuerzas concentradas en los nodos, tal que haya un equilibrio entre tensiones en el contorno y cualquier carga repartida, resultando así una relación entre fuerzas y desplazamiento.

Capítulo 3. DESARROLLO EXPERIMENTAL

El objetivo principal de este estudio es analizar a través del método de elementos finitos el efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico de espumas metálicas de aleaciones base Ti. Para esto se propone un proceso de modelación simulación y análisis en elementos finitos, el cual utiliza modelos representativos de espuma metálica que son sometidas a un ensayo virtual de compresión uniaxial para obtener la respuesta mecánica.

3.1. Materiales

Para evaluar el módulo elástico se utilizan los valores experimentales de las aleaciones de Titanio en su estado consolidado, es decir, sin porosidad (ρ_0 , E_0). En el presente trabajo se estudian cuatro materiales, (i) Ti-30Nb-13Ta, (ii) Ti-33Nb-4Mn, (iii) Ti-13Ta-6Sn (valores en % at.) y (iv) Ti c.p. En la Tabla 5 se detallan propiedades de cada aleación que son utilizadas en la modelación y simulación [80]. A temperatura ambiente, las aleaciones reportadas Ti-30Nb-13Ta, Ti-33Nb-4Mn, Ti-13Ta-6Sn presentan una estructura cristalina FCC y la aleación Ti c.p. estructura HCP.

Tabla 5: Propiedades físicas para modelar materiales [80].

Aleación (at. %)	Densidad (g/cm ³)	Módulo Elástico (GPa)	Módulo de Poisson
Ti-30Nb-13Ta	7.30	57	0.34
Ti-33Nb-4Mn	5.97	70	0.34
Ti-13Ta-6Sn	6.25	50	0.34
Ti c.p.	4.51	110	0.34

3.2. Diseño de modelos de espumas

Para este trabajo se desarrollan 4 modelos con distribución gradiente de porosidad en cada material, cuya notación utiliza los valores de porosidad para cada nivel de capa (desde la zona interna 1 hasta zona externa 3) como se muestra en la Figura 15 y el diseño de la configuración de porosidad gradiente se detalla en la Tabla 6.

Las variables para la modelación de espumas metálicas son (i) fracción volumétrica de poros (en porcentaje o decimal), (ii) diámetro equivalente de poro (D) y (iii) distribución gradiente de porosidad. El diseño experimental tendrá como objetivo reproducir la morfología porosa del hueso humano (cortical y esponjoso). Los parámetros de diseño utilizados, que se muestran en la Tabla 6, son:

- (a) Diámetro equivalente (D) igual a 0.2 (mm) o 200 (μm)
- (b) Modelo de 6 capas donde se definen 3 zonas con diferente porosidad para generar el gradiente de porosidad, como se muestra en Figura 15.
- (c) Los valores de porosidad de 20, 30, 40 y 50%v/v para los diferentes modelos detallados en la Tabla 6. La porosidad de capa externa se fija a 20% en todos los modelos.
- (d) La porosidad equivalente (P_{eq}) se obtiene promediando las porosidades locales en cada modelo de la forma $P_{eq} = \frac{\sum P_i}{n}$, con $i = 1, 2, 3$.
- (e) La notación descrita para los modelos corresponde a los valores de cada zona de porosidad. Para el modelo 403020, significa que en su capa interna presenta 40% de porosidad, la intermedia 30% y la externa 20%

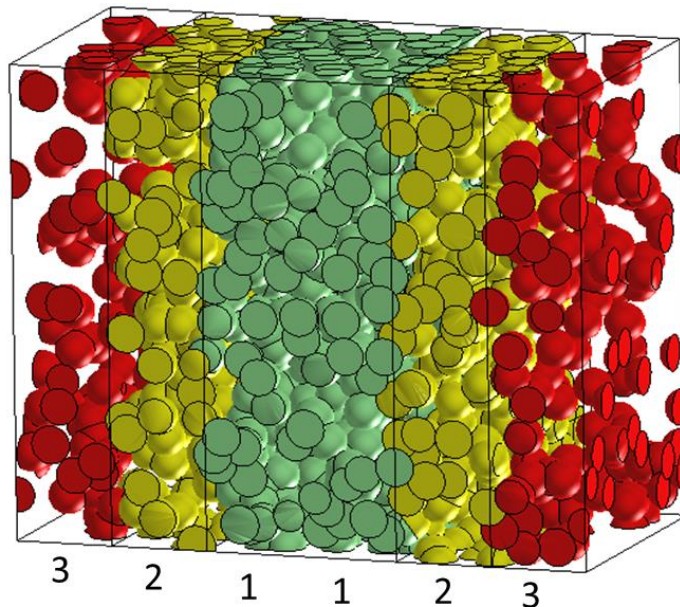


Figura 15: Modelo de porosidad gradiente diseñado con las condiciones 504020. Las zonas corresponden a (1) capas internas, (2) capas intermedias y (3) capas externas. Mostrando con poros de color las siguientes características: capa interna (verde) de 50% de porosidad, capa intermedia (amarillo) de 40% y capa externa (rojo) de 20%

Tabla 6: Parámetros para diseñar fase dispersa en espumas.

Notación	Porosidad Equivalente %v/v	Porosidad Local %v/v	Diámetro de poro, D mm
403020	30	40	0.2
		30	
		20	
503020	33.3	50	0.2
		30	
		20	
504020	36.7	50	0.2
		40	
		20	
505020	40	50	0.2
		50	
		20	

3.2.1. Descripción del modelo computacional

En este trabajo se considera un modelo descrito por análisis de multicapas, donde cada capa de igual espesor está unida continuamente a la otra (sin delimitaciones), y cada una posee diferente porosidad relativa. Todo se basa en la generación de un cubo de arista de tamaño “a” que se divide en el número de capas, donde la distribución aleatoria de poros se controla con la fracción volumétrica, el tamaño y forma de poro.

Para generar el modelo, se ajustan los parámetros mencionados de la Tabla 6 y Tabla 7 en el programa de diseño de materiales Digimat (e-Xstream, Luxemburgo) [81]. La operación computacional consiste en insertar periódicamente y de manera aleatoria volúmenes generados de poros dentro del volumen total del cubo (matriz) hasta llegar a la porosidad ajustada. Con esto se obtiene la fase dispersa y embebida en la matriz metálica. La Figura 15 muestra un ejemplo de modelo obtenido según la designación 504020.

Finalizada la generación del cuerpo, se procede a exportar desde Digimat hacia ANSYS (Swanson Analysis Systems, EE. UU.) en formato “Parasolid” (.x_t), cada uno de los modelos. Para visualizar la geometría, se utilizan los editores (i) Space Claim (SC) o en

su defecto (ii) Design Modeler (DM). Dentro de los editores es posible corregir algunos errores de topología como fragmentos aislados y seleccionar operaciones que simplifiquen el sólido; donde a mayor porosidad de la muestra, mayor número de cuerpos aislados se producen (de 1 a 2 para 20-30% y de 7 a 9 para 40-50%). La operación Combinar (“Unite”) permite unir interfacialmente las caras de los cuerpos adyacentes para así generar un cuerpo sólido y continuo.

Tabla 7: Parámetros morfológicos para modelar fase porosa.

Tipo de Porosidad	Gradiente con Interconexión
Razón de Aspecto (eje menor/eje mayor)	1.0
Forma de Poro	Esférica
Distribución	Aleatoria
Número de capas	Seis, de igual espesor

3.2.2. Mallado, condiciones de borde y simulación

Se considera una simetría isotrópica en los elementos finitos del modelo basado en la ley de Hooke para materiales elásticos (zona plástica excluida de estudio), que viene integrada en el software de elementos finitos. Como se detalla en el anexo 7.1 Ansys Workbench – Mechanical: Etapas, el modelo generado será exportado desde el editor de geometría hacia la herramienta modular “Mechanical”. El mallado del cuerpo, el cual es configurable, se aplicará a la matriz sin poros, con el fin de reducir recursos computacionales. Si bien el aire dentro de la espuma puede generar un efecto de amortiguación en la respuesta mecánica, en este estudio se utiliza una espuma abierta con interconexión, la que permite al aire que escape cuando es comprimido.

Se utilizan elementos tetraédricos para la generación de la malla, que se adapta de mejor manera a los bordes irregulares (propios de la espuma) que los elementos cúbicos [82]. La calidad de los elementos afecta directamente a los resultados obtenidos. Como parámetro de calidad se considera la oblicuidad o asimetría (Skewness), que para valores cercanos a 0 es lo ideal, donde los tetraedros son equiláteros. Parámetros de

refinamiento se asignan por defecto (“Default”), y de ser necesario, se mejora la refinación hasta conseguir convergencia de elementos

En todos los modelos mallados se consideran condiciones de contorno para simular un ensayo de compresión, que consisten en:

- (i) Restringir el movimiento de la cara basal inferior con soporte fijo (Fixed Support), mostrado en la Figura 16.
- (ii) La cara superior es donde se aplica una carga (Force) proporcional al área transversal, cuya respuesta sea dentro de la región elástico-lineal (-10 MPa) y un desplazamiento de nodos acoplados (Coupled Remote Displacement), mostrado en la Figura 17.
- (iii) Las caras laterales, frontal y trasera estarán condicionadas a permanecer libres al eje coordenado correspondiente para permitir el fenómeno de compresión uniaxial (abultamiento).

Concretamente, los modelos son sometidos mediante una fuerza axial, a un desplazamiento de la cara superior en el eje longitudinal o vertical del modelo, con el fin de obtener la respuesta o sollicitación mecánica y evaluar consigo el módulo elástico. La información de las condiciones de fuerza axial aplicada es mostrada en la Tabla 8. Con el sistema resuelto, es posible obtener el desplazamiento producido y el esfuerzo normal promedio para el modelo simulado; necesarios para determinar el módulo elástico en compresión. Se analiza la concentración de esfuerzos normales, la deformación localizada, y el efecto que provoca la porosidad sobre la respuesta de la rigidez frente a deformaciones producidas.

Tabla 8. Condiciones de fuerza aplicada para cada modelo.

		Modelos			
		403020	503020	504020	505020
Carga	N	-29.3	-27.1	-27.15	-25.93
Área de carga	mm ²	2.932	2.709	2.716	2.593
Esfuerzo aplicado	MPa	-10.0	-10.0	-10.0	-10.0

Análisis del efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base titanio con estructura FCC mediante elementos finitos

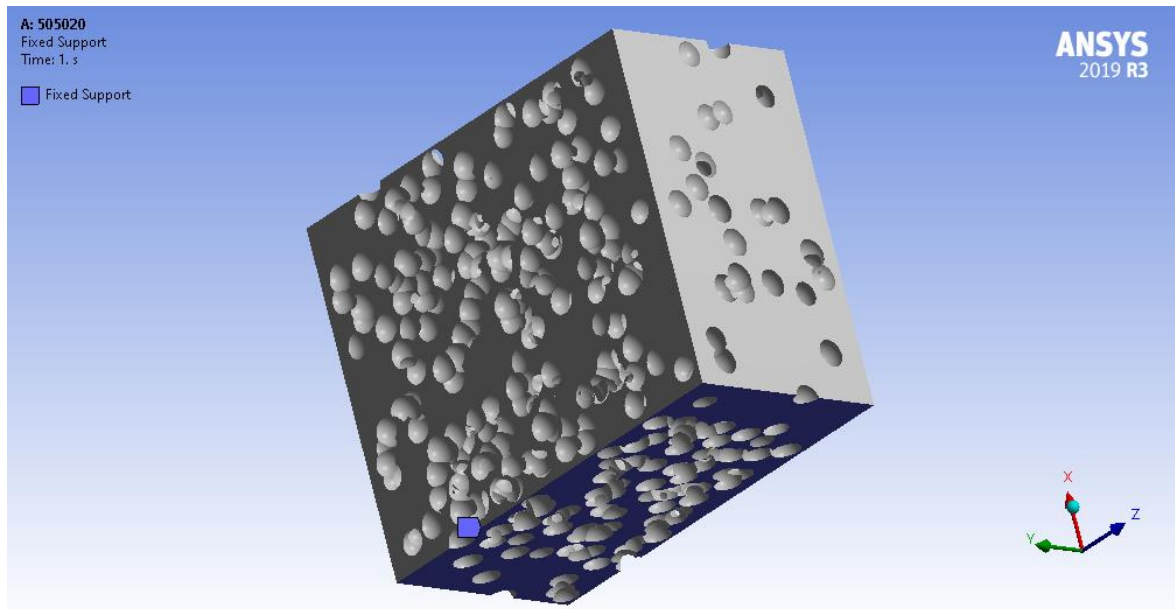


Figura 16. Condición de soporte fijo para modelo 505020, con nodos acoplados en la zona inferior coloreada.

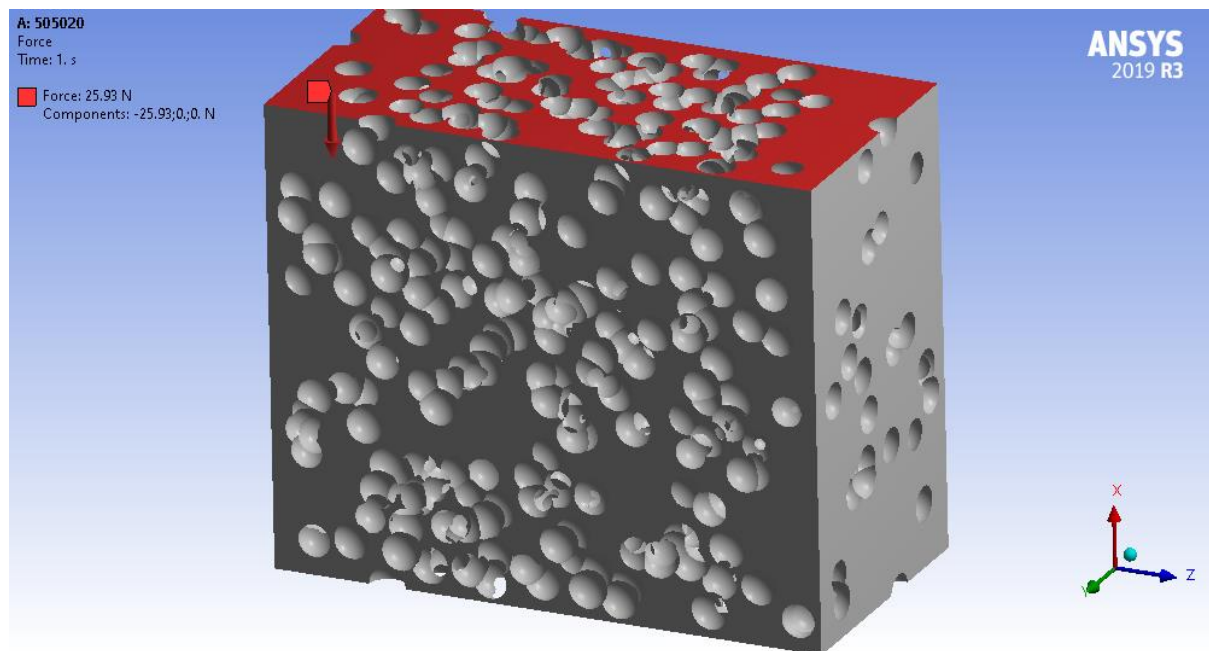


Figura 17. Condición de fuerza aplicada para modelo 505020, con nodos acoplados en toda la superficie coloreada

3.3. Caracterización de modelos y procesamiento de imágenes

Se caracterizan los modelos por su porosidad promedio e interconexión. Para obtener la porosidad volumétrica promedio (P), se determina la densidad relativa a partir de la razón entre volumen de la espuma (obtenido de ANSYS) y volumen total de la matriz, según la ecuación (9) [83]. Para caracterizar los modelos porosos y comprobar su topología superficial, en primer lugar, se producen 4 secciones o cortes transversales para un espécimen (403020, Figura 18), con el fin de corroborar que la porosidad se mantiene constante en función de la altura (eje x) y comprobar el valor de porosidad teórico. El software permite medir la superficie de manera exacta y precisa para todos los cortes.

$$P = 1 - \rho_{app} = 1 - \frac{V_{espuma}}{V_{total}} \quad (9)$$

Para el procesamiento y caracterización morfológica se utiliza la herramienta "ImageJ" (EEUU) [84], que permite analizar el tamaño y forma de la fase dispersa, la cual puede o no tener poros aglomerados, aumentando su tamaño final. Para cada modelo se tomaron 4 fotografías de secciones transversales y transformadas a formato 8-bit (ver Anexo 7.2), Se ajustó el contraste para resaltar los poros y analizar parámetros y medidas como: área de poro, diámetro equivalente, perímetro circularidad y redondez. En base al área obtenida por el software, se calcula el diámetro equivalente a la superficie que utiliza, para analizar el tamaño final de poro.

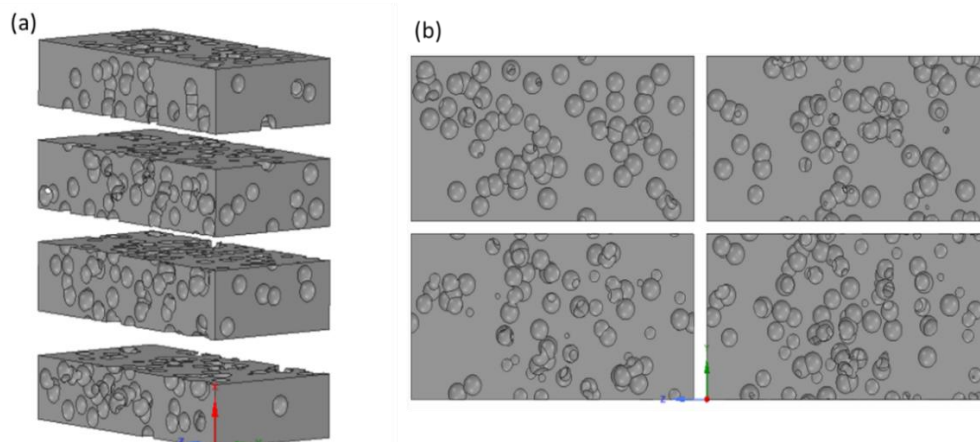


Figura 18: (a) Corte transversal para modelo 403020, y (b) secciones transversales de cada corte para medición de área.

Capítulo 4. RESULTADOS Y DISCUSION

4.1. Caracterización de Modelos

Los 4 modelos de espuma sólida con diferentes gradientes de porosidad se muestran en la Figura 19. El volumen geométrico de matriz utilizado es de 2.5 (mm) de alto, 1.5 (mm) de profundidad o espesor, y 3 (mm) de ancho, con coordenadas x, y, z respectivamente para todos los modelos. Luego la morfología de las espumas es caracterizada por (i) su porosidad promedio tanto volumétrica y superficial, (ii) grado de interconexión, (iii) distribución espacial y de tamaño de poro.

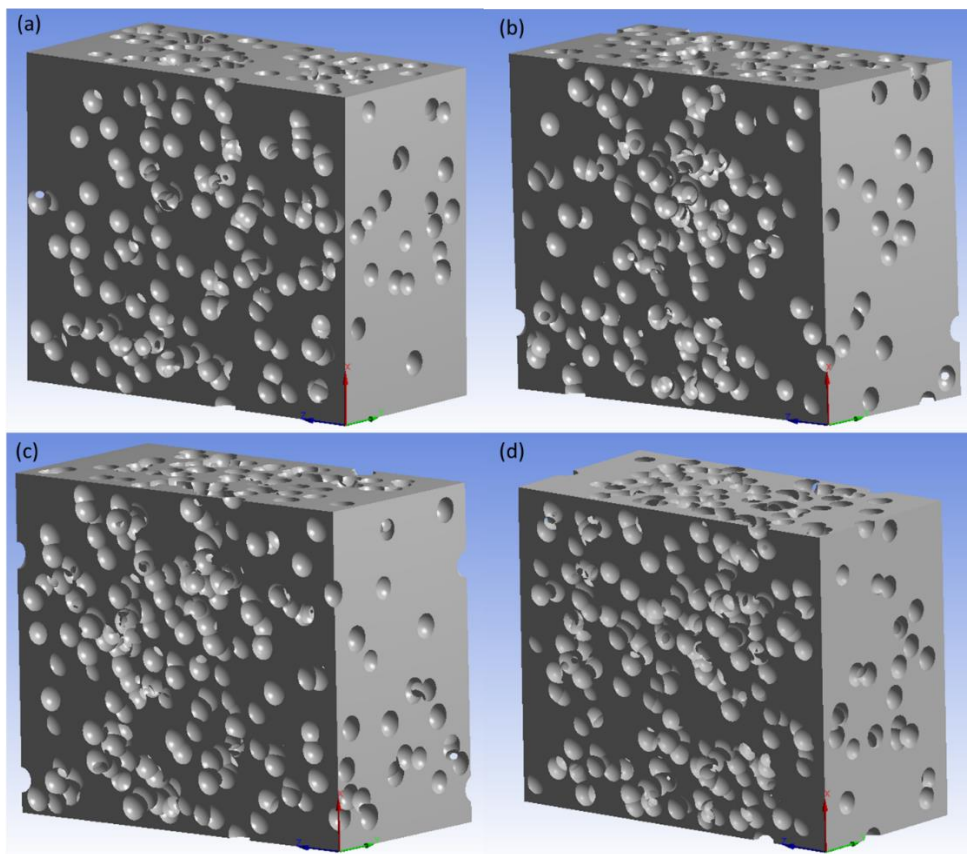


Figura 19: Modelos representativos de espuma con notación designada para: (a) 403020, (b) 503020, (c) 504020 y (d) 505020.

Los valores de volumen, porosidad y densidad relativa para cada modelo son mostrados en la Tabla 9. La densidad superficial relativa $\left(\frac{A_{espuma}}{A_{total}}\right)$ entregó un promedio de 68.5% y desviación estándar de 0.161 entre los 4 cortes transversales (área promedio de 3.08 mm², teórico de 3.15 mm²). La densidad relativa teórica es de 70%, mostrando un error de 3.57%. Esta diferencia, mínima pero justificada, se debe mayormente a que la

porosidad de la sección transversal en 2 dimensiones no captura completamente la esencia de la morfología de porosidad en 3 dimensiones, al no considerar la interconexión y tampoco la distribución espacial en todos los niveles; midiendo mayor porosidad, o bien, menor densidad relativa. Es posible obtener mejores resultados al aumentar el número de muestras transversales, con el fin de disminuir el error de topología, que permitiría homogenizar la muestra y tener mediciones más representativas.

Tabla 9: Resultados para densidad relativa y porosidad para modelos. Datos obtenidos de ANSYS.

Parámetro	Unidad	Modelos			
		403020	503020	504020	505020
Volumen Espuma	mm ³	7.878	7.514	7.12	6.748
Volumen Total	mm ³	11.25			
Porosidad teórica	%	30%	33.3%	36.7%	40%
Porosidad obtenida	%	30%	33.2%	36.7%	40%

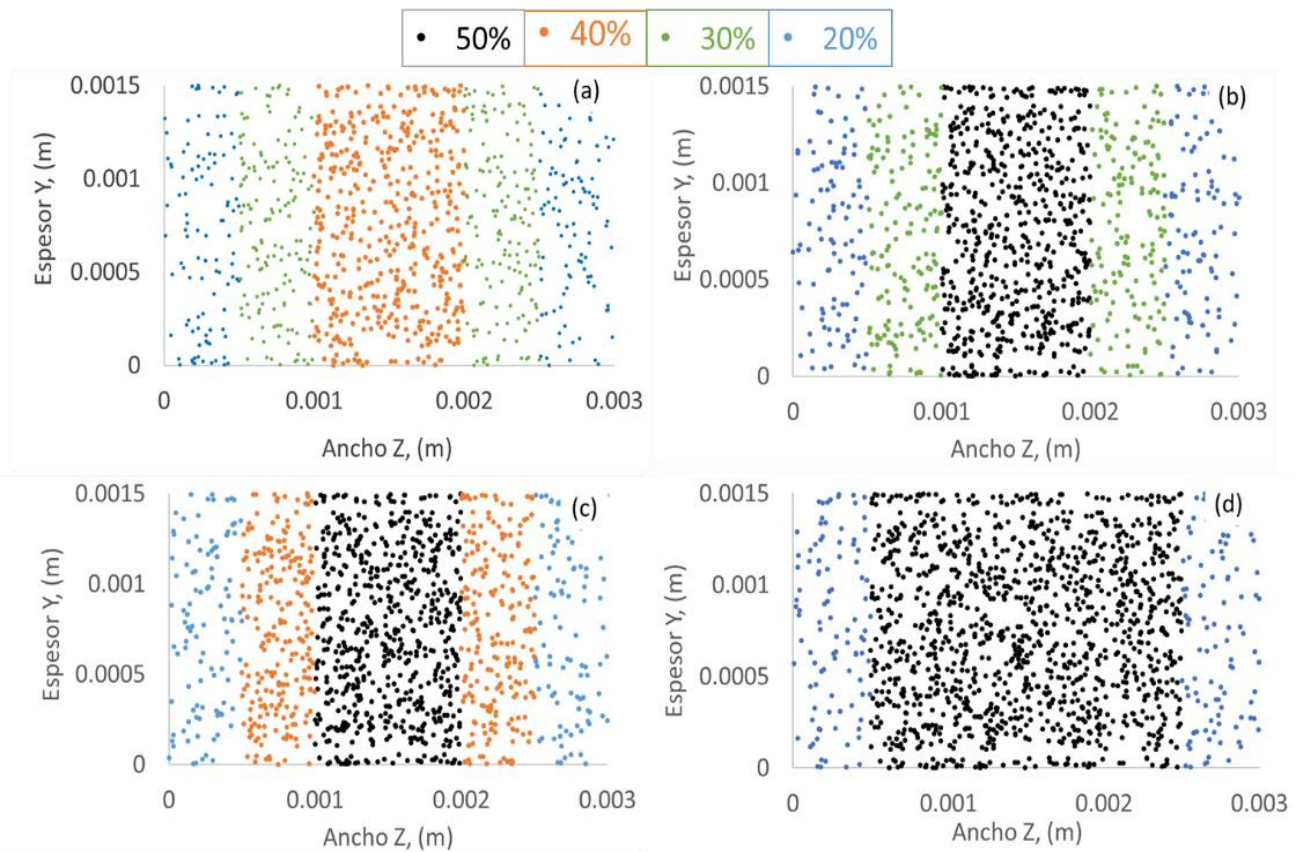


Figura 20. Distribución superficial de poros (vista superior y considerando todos los niveles), para modelo (a) 403020, (b) 503020, (c) 504020 y (d) 505020.

Con la comprobación de la porosidad en las secciones transversales, es posible procesar y graficar la información de la distribución de poros de los modelos, tanto de posición espacial e interconexión. La Figura 20 muestra una imagen con la distribución de poros para los 4 modelos donde cada poro se simboliza con puntos en el plano de espesor vs ancho (considerando todos los niveles de altura). Se observa la aleatoriedad con se generan los poros, producto de la operación computacional y que, al aumentar el porcentaje de porosidad aumenta la densidad de puntos y con ello la interconexión. Se observa que en el límite entre capas hay conexión entre los poros. Además, esta visualización enseña en colores el gradiente existente en los modelos, donde la porosidad aumenta hacia el centro de los modelos. Las capas externas de 20% de porosidad actúan como soportes del modelo, al igual que el hueso cortical actúa como soporte y el hueso esponjoso es más poroso al interior.

Para analizar la interconexión entre los poros que están cercanos entre sí, se utiliza la definición entregada por el software Digimat donde se mide la distancia que hay entre los centroides de los poros que están más cercanos entre todos los del modelo [85]. De este conjunto se determina la distancia que es mínima entre todas las posibles. Para ejemplificar esta situación, la Figura 21 entrega una visualización del concepto de distancia mínima entre poros cercanos (d_{\min}) y la coalescencia.

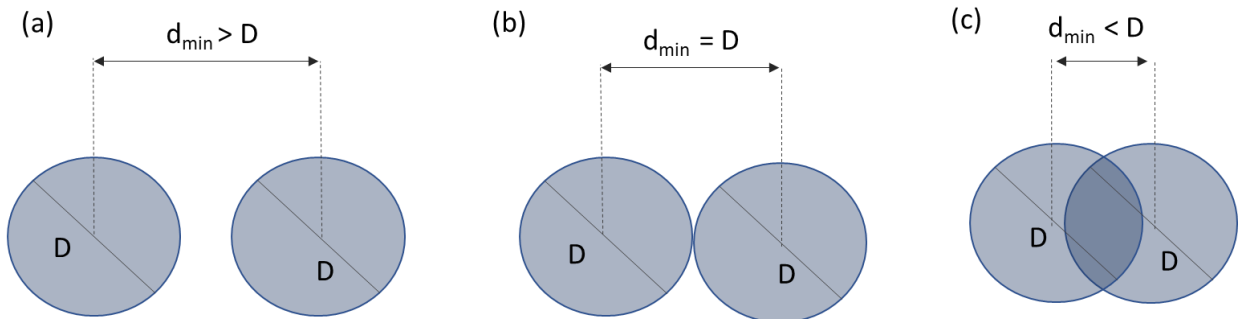


Figura 21. Esquema demostrando el concepto de distancia mínima d_{\min} para poros de diámetro D . En (a) poros están aislados sin contacto, (b) se contactan en un solo punto y (c) existe unión y coalescencia de poros, se genera un poro nuevo de mayor tamaño.

El software calcula la distancia mediante la posición espacial (x , y , z) de cada poro respecto al poro más próximo de todos. Esta definición se basa en determinar la distancia mínima de cada poro con su poro vecino más cercano, la cual corresponde a la mínima distancia entre poros vecinos. Este valor es útil para determinar si los poros están en

contacto directo o están aislados. Para poros que no están en contacto, el valor d_{\min} será mayor que el diámetro de poro D . Si los poros comienzan a ponerse en contacto mínimo ocurre que el valor d_{\min} se iguala a D . En cambio, si el valor d_{\min} es menor a D significa que hay contacto estrecho entre los poros, produciendo la unión y coalescencia de estos.

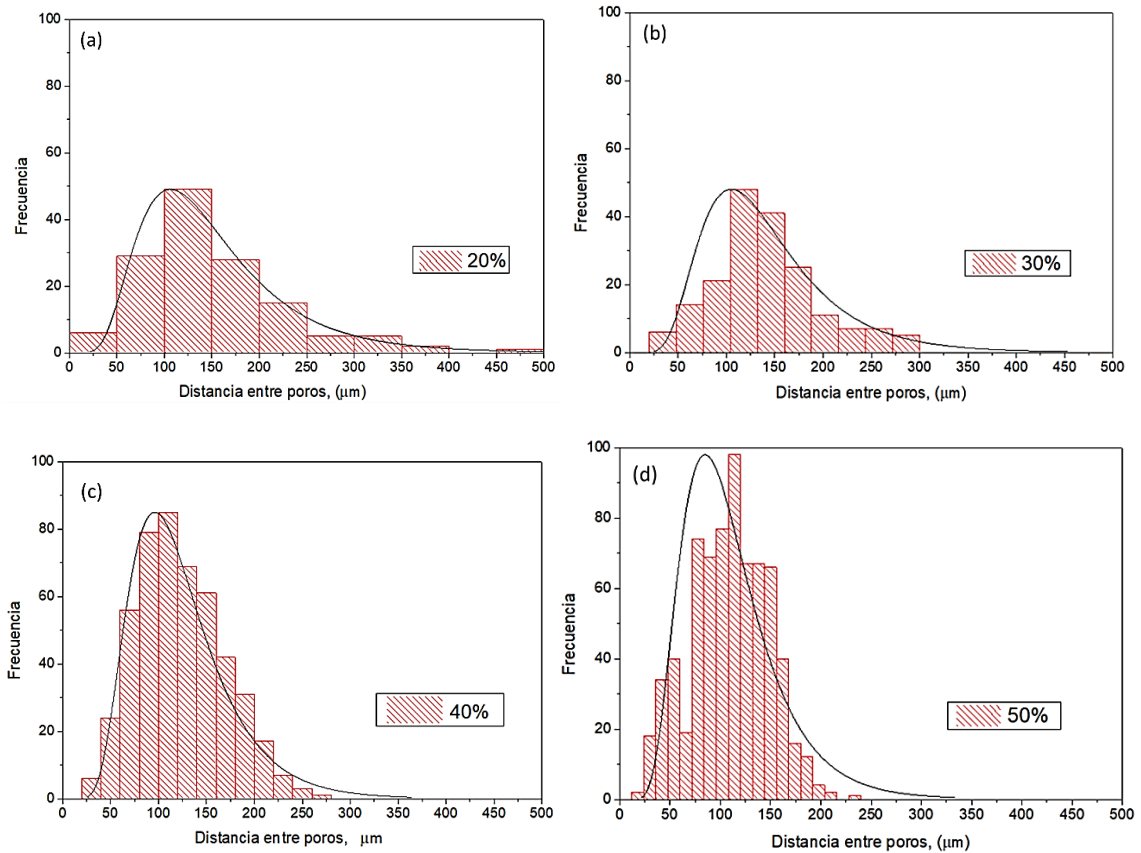


Figura 22: Distribución y curva log-normal de la frecuencia de poros en función de la distancia mínima entre poros vecinos para (a) capa de porosidad 20% y (b) capa de porosidad 30%, (c) capa de 40% y (d) capa de 50% de porosidad. Distancia inferior a 200 micrómetros implica que hay interconexión.

En este sentido, se genera la Figura 22, donde se representa la distribución de frecuencia de poros en función de la distancia mínima entre poros vecinos para una capa de 20%, 30%, 40% y 50% de porosidad. Es posible afirmar que dicha distribución demuestra el grado de interconexión existente; en donde para un tamaño igual o inferior al diámetro de poro ($D=200 \mu\text{m}$), significa que tales poros están en contacto, es decir, hay coalescencia entre ellos y se convierte en un único poro continuo de mayor tamaño. Como se mencionó anteriormente, aumentar la porosidad también aumenta el grado de interconexión ya que, al existir mayor fracción volumétrica de poros, la distancia entre estos es menor y por ende hay mayor probabilidad de contacto, produciendo una coalescencia de las

cavidades. El número de poros también aumenta con la porosidad, sin embargo y debido a la coalescencia, el tamaño final de poro aumenta y el número final de poros decrece. Para analizar el efecto de la coalescencia en función de la fracción de porosidad se debe analizar y cuantificar el tamaño y morfología final del conjunto de poros.

Con el análisis de imagen (Image J) es posible analizar y cuantificar el tamaño y forma final del conjunto de poros. La Figura 23, entrega un diagrama que muestra la frecuencia de poros en función del diámetro equivalente de poro final, el porcentaje acumulado (pasante) señalado de rojo y el ajuste de curva “Log-Normal” con valores de R^2 de 0.95, 0.97, 0.99 y 0.97 para los modelos 403020, 503020, 504020 y 505020 respectivamente. La función utilizada para el ajuste de distribución viene dada por la ecuación (10), con parámetros de ajuste y_0 , A , w , x_c y la variable x como diámetro equivalente de poro El ajuste de curva fue ejecutado con la ayuda de la herramienta Origin (OriginLabs, EE. UU.) [86].

$$y = y_0 + \frac{A}{\sqrt{2\pi wx}} * \exp\left(\frac{-(\ln(x/x_c))^2}{2w^2}\right) \quad (10)$$

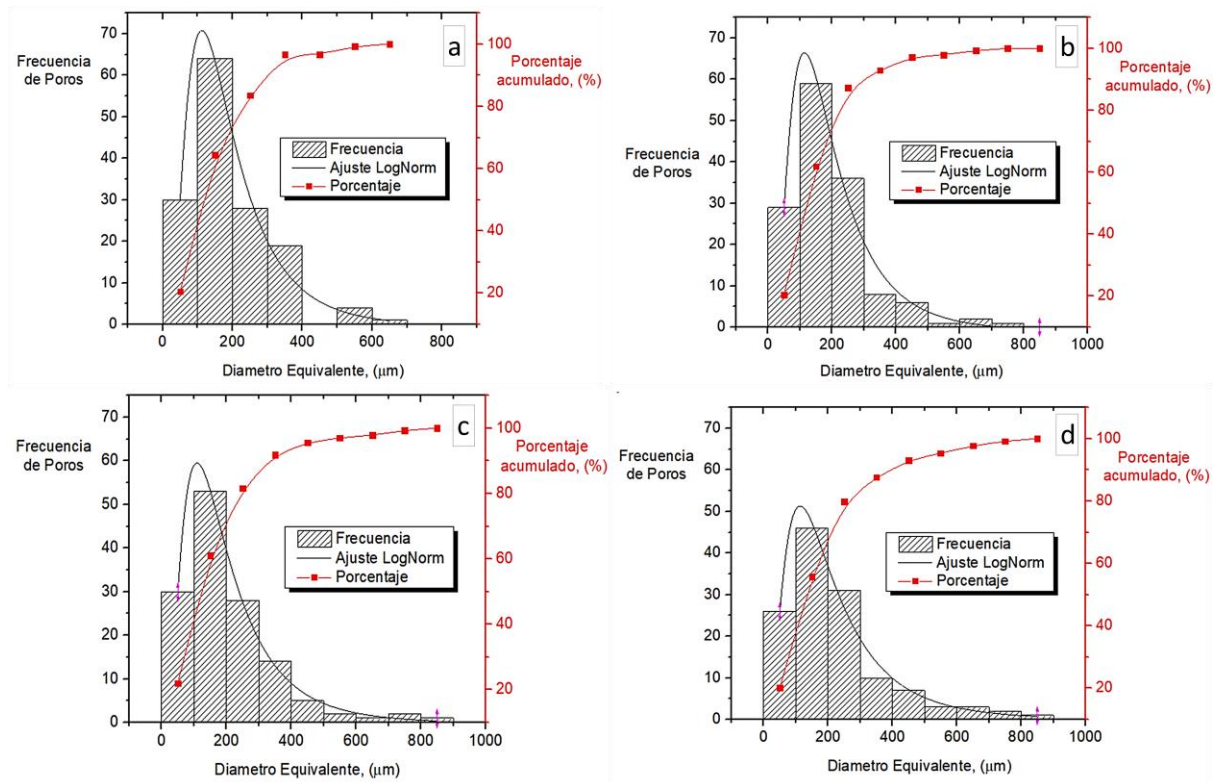


Figura 23: Distribución con ajuste (Log-Normal) de diámetro equivalente de poro y porcentaje acumulado para modelo (a) 403020, (b) 503020, (c) 504020, (d) 505020.

El parámetro morfológico de estudio es el diámetro equivalente del poro final, el cual aumenta su tamaño máximo en medida de un aumento en la fracción de porosidad de los modelos. Además, la frecuencia (cantidad) de poros se ve reducida con el aumento de porosidad, consecuencia de la mayor interconexión y coalescencia de los poros. Se observa en los modelos la existencia de una distribución con un peak principal y un decaimiento hacia diámetros mayores. El peak se sitúa en el rango de 150-200 micrómetros, y para los modelos 403020 y 503020, presentan un segundo peak de menor intensidad, que corresponde al peak de poro aglomerado sobre los 600 micrómetros.

Una comparación de las curvas de distribución Log-Normal para los 4 modelos se muestra la Figura 24, donde se puede apreciar que al aumentar la porosidad se producen 2 situaciones, (i) ocurre una disminución de la frecuencia máxima de poros debido a la coalescencia y (ii) el diámetro en el que ocurre dicho máximo es de 112 (μm), el cual es menor al diámetro inicial de poro. Lo último debido mayormente a que, en el software de análisis de imagen, los poros que se ubican al borde del modelo fueron considerados como semi circunferencia, y por consecuencia disminuyen su área, afectando al tamaño promedio de poro.

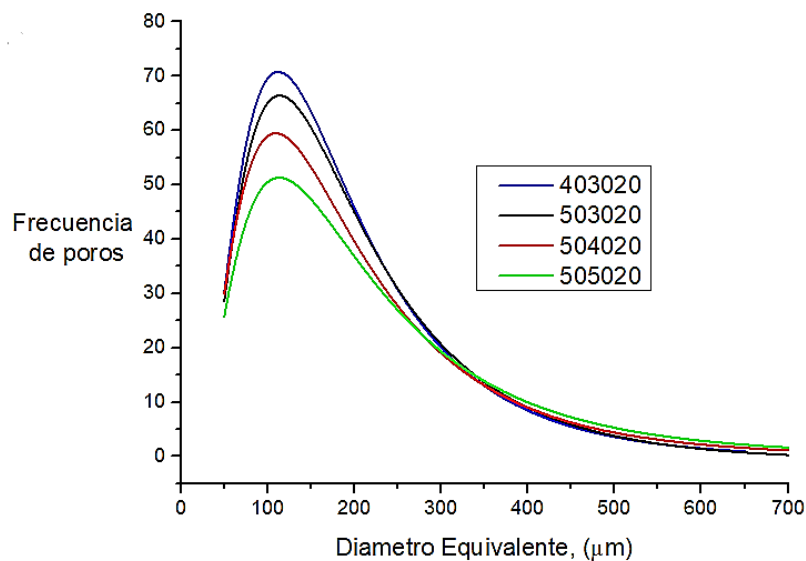


Figura 24: Distribución Log-Normal de diámetro equivalente de poro para los 4 modelos estudiados.

La Tabla 10 muestra que los valores de diámetro promedio, desviación estándar, diámetro máximo y mínimo de poro aumentan producto de una mayor porosidad volumétrica. Se puede observar que, con un incremento de la porosidad, es posible conseguir diámetros equivalentes mayores, esto producto de la coalescencia inevitable de poros, generando tamaños aún más grandes, llegando incluso a más de 800 (μm) de diámetro en los modelos 504020 y 505020. En el modelo de menor porosidad 403020, el valor máximo que alcanza de poro es de 673 (μm).

Tabla 10: Datos estadísticos de diámetro equivalente de poro para cada modelo.

	403020	503020	504020	505020
Promedio, μm	192.9	201.2	210.2	222.7
Desviación Estándar, μm	116.0	126.7	142.7	156.9
Min, μm	7.9	29.9	22.6	40.7
Max, μm	673.0	796.4	804.7	824.5

4.2. Simulaciones de elemento finito

La Tabla 11 muestra los resultados del número de elementos y nodos que se generaron en cada modelo. El modelo 505020 fue el que obtuvo mayor cantidad de elementos por unidad de volumen, debido a la compleja distribución generada por la coalescencia de poros, que obliga a utilizar un refinamiento mayor. En la Figura 25 se observa el modelo mallado con la distribución de la oblicuidad o “skewness” la cual con un promedio de 0.32 y desviación estándar de 0.17 está dentro del rango aceptable-óptimo (<0.5). Se ajustó el parámetro de refinamiento para lograr que las caras del sólido coincidan alrededor del poro, obteniendo aproximadamente 467.000 elementos y 780.000 nodos.

Para el análisis cualitativo y cuantitativo, se considera una simulación para obtener la distribución de esfuerzos normales al plano de carga y una para el desplazamiento, con el fin de evaluar el módulo de Young axial (E_x). La Figura 26 muestra la simulación de la distribución de esfuerzos normales dentro de la espuma sólida 505020. Los detalles de los modelos restantes se pueden revisar en el Anexo 7.3. Para este modelo y los demás, se observa la escala progresiva de diferentes colores que muestran el esfuerzo resultante, donde el rojo corresponde a los elementos específicos donde se solicita un mayor esfuerzo máximo de compresión (el cual es negativo) y en azul los elementos que sufren un esfuerzo de tracción (positivos).

Tabla 11: Cantidad de elementos y nodos por cada modelo en estudio.

Notación	403020	503020	504020	505020
Elementos	206.393	106.946	157.873	467.672
Nodos	338.335	190.725	271.554	780.925

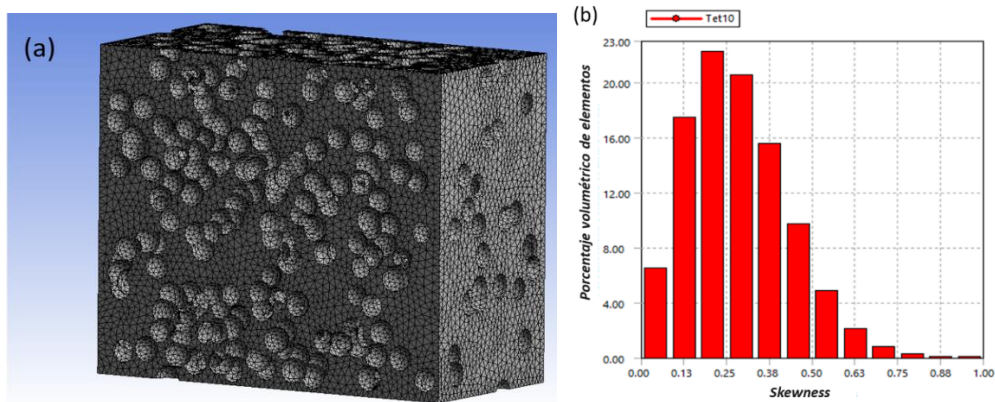


Figura 25: (a) Mallado realizado a modelo 505020 y (b) distribución de la fracción volumétrica en función de “skewness” u oblicuidad de los elementos en el mallado.

Análisis del efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base titanio con estructura FCC mediante elementos finitos

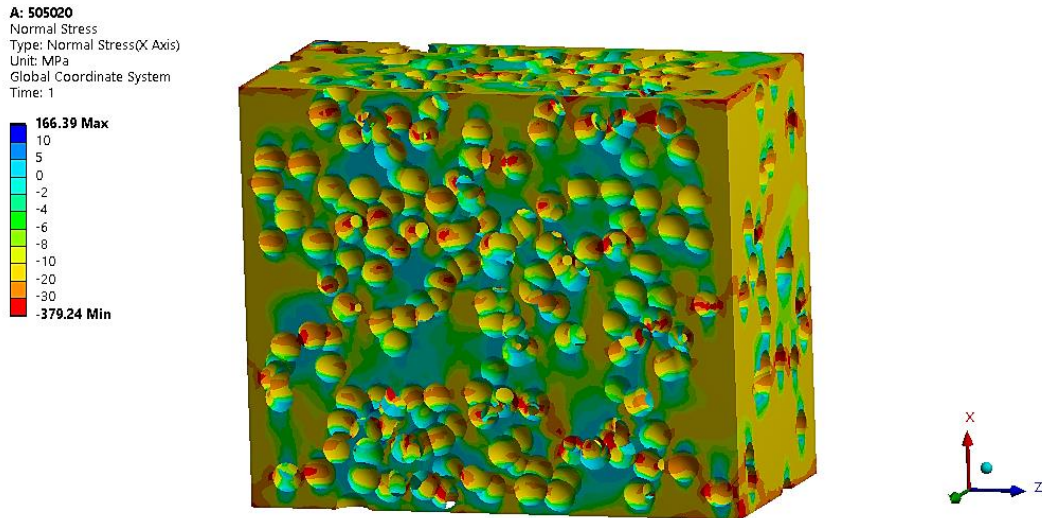


Figura 26: Simulación de la distribución de esfuerzo normal resultante (MPa) para modelo 505020 de aleación Ti-13Ta-6Sn. Es posible notar la concentración de esfuerzos (rojo) alrededor de los poros y las zonas libres de compresión (celeste).

Se observa que los poros actúan como concentradores de esfuerzo, aumentando la acumulación en las paredes más delgadas y verticales de la espuma. Es posible notar cómo fluctúa la distribución de cargas en las zonas internas del modelo (con interconexión abierta) en comparación a la zonas continuas y compactas del exterior, generando las líneas de carga o tensión. Los esfuerzos muestran una preferencia por las zonas con mayor facilidad de transmisión o distribución de este (zonas con sólido continuo); en las capas externas del modelo existe una porosidad de 20%, actuando como soporte del modelo y otorgando rigidez, mientras que en la zona interna de mayor porosidad, disminuyen los esfuerzos y existe la interconexión. Tanto la zona externa como la interna contribuyen con sus propiedades locales e individuales para balancear a nivel global las propiedades mecánicas y de porosidad interconectada.

En el análisis cuantitativo para calcular el esfuerzo normal aplicado, se utiliza en primera instancia la ecuación (11), que divide la fuerza (N) sobre el área de carga (mm^2) obtenida por el software. Además, el software entrega el valor de esfuerzo promedio percibido, el cual se obtiene sumando el valor de esfuerzo de los “n” elementos, dividido por el total “n” de elementos, que es útil para comprobar que el esfuerzo teórico y el esfuerzo resultante sean similares. El esfuerzo normal promedio calculado por el software para el modelo 505020 fue de -9.48 (MPa), ligeramente menor al teórico, con un error del 5%. Esto se genera por una distribución no homogénea de los esfuerzos en el área de carga

(tanto de compresión como de tracción), causada por la porosidad superficial de la cara superior, que tiende a disminuir el esfuerzo promedio percibido. Es posible que el valor de esfuerzo normal promedio sea incluso menor debido a que es altamente sensible a los concentradores de esfuerzo, que tienden a aumentar el promedio. Dicho esto, en el modelo 505020 se obtuvo una sollicitación de esfuerzo máximo de -379 (MPa), producto de las concentraciones de esfuerzos en las paredes de la espuma donde el espesor tiende a un valor mínimo. Se observa también que, al reducir la porosidad en los modelos, el esfuerzo máximo percibido también mostró una disminución.

$$\sigma_x = \frac{F_x}{A_x} \quad (11)$$

Como se mostró anteriormente, el área transversal (A_x) si bien no es constante, se puede aproximar, el cual depende de la porosidad, por lo que aplicar la misma fuerza en un área diferente y sin considerar la porosidad puede conducir a resultados erróneos. Entonces el área de aplicación debe considerar el factor de densidad relativa, para así limitar la distribución de esfuerzos únicamente a través del sólido. En estos modelos, la porosidad aumenta hacia el interior, donde la zona externa actúa como soporte, lo cual queda ejemplificado con la tendencia de colores amarillo-naranja-rojo en comparación al interior donde se observan colores como celeste y verde, indicativo de que existen esfuerzos menores al aplicado.

Por otro lado, se realiza un análisis cualitativo de diferentes proyecciones en 2D para los planos x-y, x-z, z-y según la distribución de esfuerzos existente. La Figura 27 muestra 3 proyecciones en 3 vistas isométricas diferentes para el modelo 505020. En la vista superior (S) es posible observar la distribución de cargas en la cara normal al esfuerzo, donde se aprecia con los colores que existe una tendencia o preferencia de distribución por las zonas donde hay más continuidad del sólido, que facilita la transmisión de esfuerzos. Esto ocurre en los soportes exteriores del modelo, donde la porosidad no supera el 20%. En la vista frontal (F) se observan de mejor manera cómo los soportes compensan y acumulan las cargas que se distribuyen hacia el exterior del sólido poroso. Las zonas de color azul, principalmente al interior del sólido, son zonas donde existe una transmisión esfuerzos de tensión. Esto genera regiones de color celeste con esfuerzo

normal cercano a 0, que están libres de esfuerzo. Si bien se puede observar en la escala un esfuerzo de tracción máximo de 166.4 (MPa) este solo se solicita en regiones donde el espesor de la pared es mínimo. En la vista lateral se observa un fenómeno similar, donde se muestran las zonas sin esfuerzo.

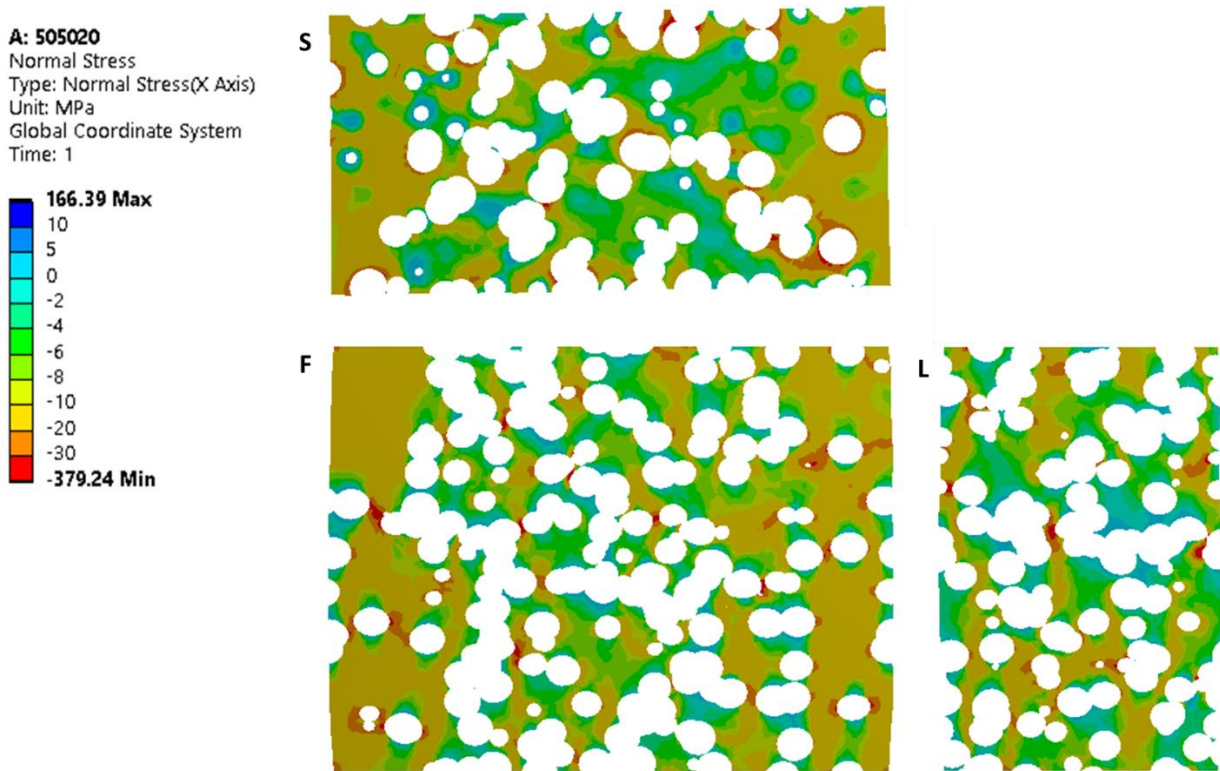


Figura 27: Proyecciones isométricas en 2D de simulación de esfuerzo normal para modelo 505020 y aleación Ti-13Ta-6Sn. (S) para vista superior (plano y-z), (F) frontal (plano x-z) y (L) lateral (plano x-y) respectivamente.

La Figura 28 corresponde al diagrama de distribución de esfuerzos normales de compresión (para este único caso en valor positivo) percibidos en función del porcentaje acumulado de elementos en los modelos. Cabe mencionar que el valor promedio de esfuerzo aplicado es 10 [MPa], valor alcanzado entre el 50 y 60% acumulado de elementos, y que es indicativo de una distribución homogénea de esfuerzos en torno a este valor (distribución en zona elástica). Líneas punteadas indican ajuste lineal y potencial según se indica cada modelo. Para generar el gráfico, los datos de esfuerzo normal para cada elemento se ordenan de menor a mayor junto con el valor respectivo

de porcentaje relativo. Se muestra que entre 50 y 60% existe un punto de inflexión donde las curvas se entrecruzan.

En este sentido, para porcentajes menores a 50% acumulado de elementos, los modelos de porosidad gradiente tiene una distribución similar, donde el modelo de menor porosidad (403020) percibe mayores esfuerzos normales que el modelo de mayor porosidad (505020) presentando una mayor rigidez a priori el modelo de menor porosidad. Por otro lado, para porcentajes mayores a 50% acumulado de elementos, ocurre una inflexión de los valores, donde el modelo de mayor porosidad percibe mayores esfuerzos normales, y el de menor porosidad percibe un esfuerzo menor. Esto último producto del aumento de porosidad, el cual disminuye el área efectiva de carga y espesor de pared, generando una concentración y aumento en el valor de esfuerzo que es percibido por los elementos del modelo.

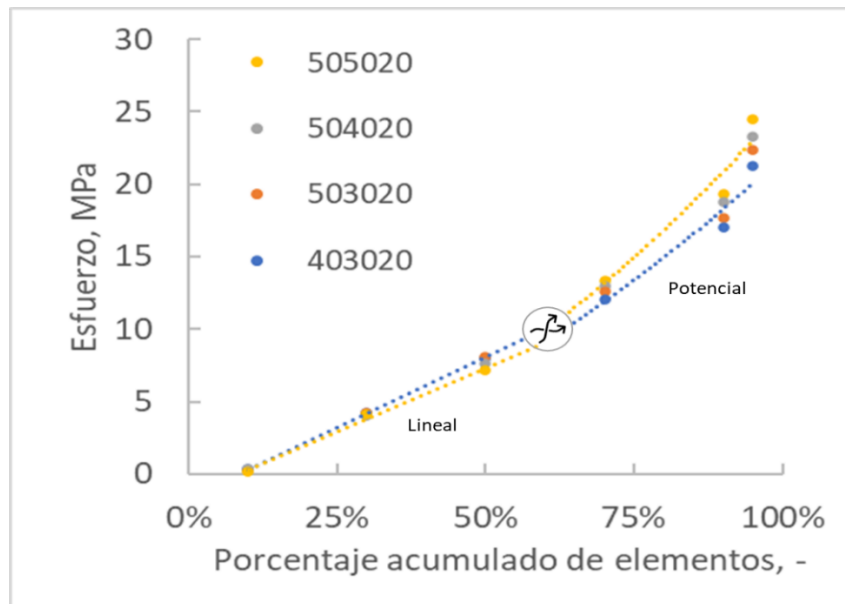


Figura 28: Distribución de los esfuerzos normales percibidos en función del porcentaje acumulado de elementos en cada modelo. Ajuste lineal y potencial según corresponde para modelos 403020 y 505020. Símbolo de entrecruzamiento situado a 10 (MPa) y entre 50-60% de porosidad.

Realizando los análisis respectivos (cualitativos y cuantitativos) del valor de esfuerzo normal de compresión para los 4 modelos y 4 aleaciones se procede a analizar el desplazamiento. Según la simulación del desplazamiento percibido para el modelo 505020 que es mostrada en la Figura 29, se produce adecuadamente la compresión uniaxial pura. Esto se confirma observando la escala progresiva de diferentes colores que

muestran el desplazamiento producido, donde el rojo corresponde a la cara donde los elementos sufren un mayor desplazamiento (el cual es el máximo negativo) y en azul la cara donde está el soporte fijo, mostrando un desplazamiento despreciable (que es mínimo). Es así como se genera un espectro de cromático en función de la altura del modelo, en tanto no se producen anomalías del tipo geométrica, como nodos fragmentados o desfigurados.

Los distintos niveles de desplazamiento sufren alteraciones producto de las cavidades existentes. El desplazamiento aumenta en las zonas donde los poros se aglomeran de manera horizontal (eje z), aumentado de tamaño y disminuyendo el área efectiva de carga, provocando mayor distorsión. Para calcular analíticamente la deformación longitudinal, se utiliza la ecuación (12) con el valor de desplazamiento máximo calculado por el software dividido por la longitud total (altura) equivalente a 2.5 (mm), la cual no considera la porosidad lineal.

$$\varepsilon_x = \frac{\Delta L}{L_x} \quad (12)$$

Teniendo el esfuerzo normal promedio y el desplazamiento normal calculados, es posible determinar el módulo de Young de compresión uniaxial para todos los modelos y aleaciones, obteniendo 16 valores distintos (4 aleaciones con 4 modelos cada una), gracias a la ecuación (13), que relaciona el esfuerzo normal promedio con la deformación normal promedio en el modelo. Luego los resultados serán analizados en función del efecto de la porosidad gradiente presente en el modelo.

$$E_x = \frac{\sigma_x}{\varepsilon_x} \quad (13)$$

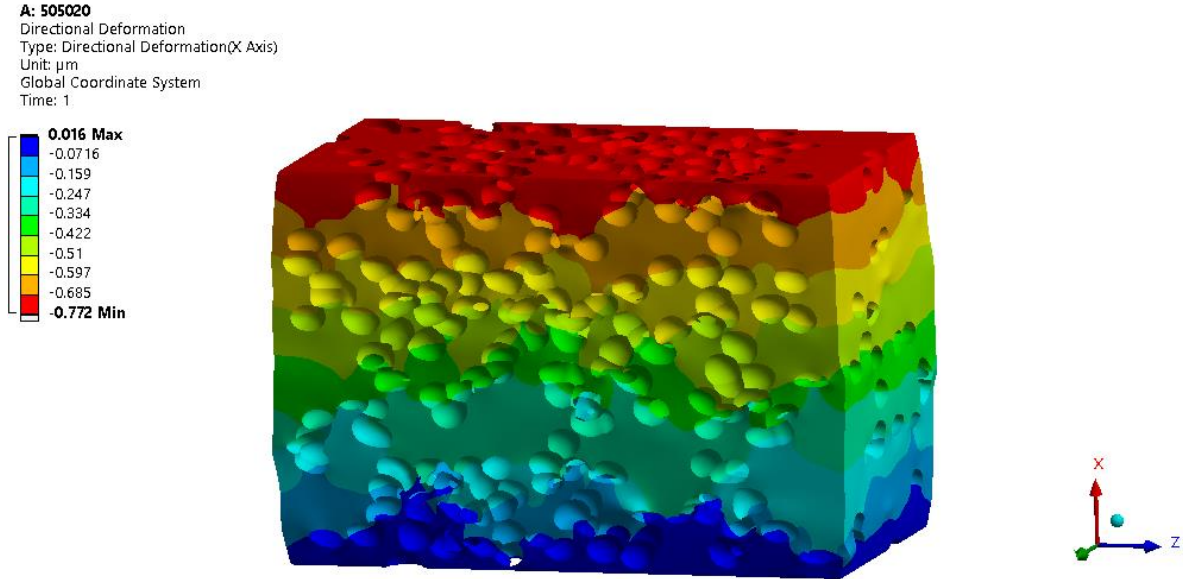


Figura 29: Simulación del desplazamiento percibido (en micrómetros) de modelo 505020 de aleación Ti-13Ta-6Sn. Se aplica factor de deformación para apreciar cambio de forma.

4.3. Efecto de la porosidad sobre el módulo elástico simulado

Realizadas todas las simulaciones, se procede a recopilar la información y graficar los valores obtenidos de módulo elástico de Young de compresión uniaxial en función de la densidad relativa promedio (denominada $1-P$, donde P es la porosidad promedio en valor decimal) de los modelos de porosidad gradiente para cada aleación estudiada. Como se muestra en la Figura 30, el valor de módulo elástico cercano al hueso humano se obtiene para la aleación Ti-13Ta-6Sn. Por otro lado, para las 3 aleaciones de Ti restantes, es necesario aumentar la porosidad de las capas del modelo, para así disminuir el módulo y lograr el mismo objetivo.

La aleación Ti-13Ta-6Sn es la aleación que cumple con los requisitos tanto mecánicos ($E \sim 30$ GPa) y de porosidad entre 30 y 40% presentados en este trabajo. Para esta aleación, el valor estimado de módulo elástico al 40% de porosidad es de 30.7 (GPa), que es adecuado para imitar la rigidez del hueso cortical. Esta buena estimación es importante debido a las contribuciones para el avance en la optimización de las propiedades biomecánicas del material y la fijación entre el implante y el tejido óseo. Con esto es posible reducir el fenómeno de apantallamiento de cargas que sufren

indeseablemente los implantes rígidos y además permite combinar y balancear propiedades de sustento mecánico con propiedades biológicas como porosidad abierta e interconexión.

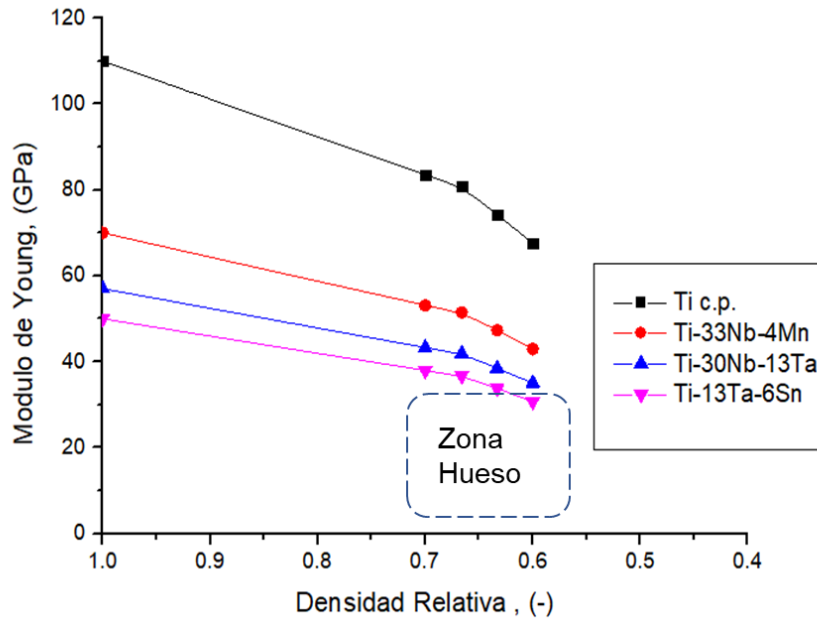


Figura 30: Módulo elástico de Young obtenido por software de elementos finitos, en función de la densidad relativa. Zona hueso equivale a la región factible para emular las propiedades mecánicas y biológicas del hueso

Analizando el efecto de la porosidad, según los modelos de Gibson-Ashby [6], Zhu [35], y Phani-Niyogi [33], se reporta que existe una relación empírica del tipo decaimiento potencial de la forma genérica $y = Ax^b$ para el módulo elástico en función de la densidad relativa $(1-P)$. Es por esto, que los puntos de cada curva se le efectúa un ajuste potencial de dos parámetros, utilizando la ecuación (14), donde A y b corresponden al factor de proporcionalidad y al exponente de la ecuación respectivamente, los cuales se muestran en la Tabla 12, junto con el error asociado y el coeficiente de R^2 para cada aleación. El parámetro A corresponde a una propiedad del material (E_0) y el exponente b indica una propiedad geométrica de la espuma; su morfología y grado de interconexión principalmente, el cual se estima que abarque el tipo de gradiente y la variación de porosidad en el sólido.

$$y = A * x^b \rightarrow E^* = E_0 * (1 - P)^b \quad (14)$$

Tabla 12: Parámetros de ajuste A y b de ec. (14) con error asociado y ajuste R-cuadrado para resultados de simulación en aleaciones de estudio.

Aleación	A		b		Ajuste R ²
	Valor (GPa)	Error (%)	Valor (-)	Error (%)	
Ti c.p.	110.8	2.93	0.864	0.076	0.9661
Ti-33Nb-4Mn	70.5	1.88	0.864	0.076	0.9656
Ti-30Nb-13Ta	57.4	1.52	0.864	0.076	0.9662
Ti-13Ta-6Sn	50.4	1.32	0.864	0.075	0.9665

En este sentido, el módulo de Young de la muestra “bulk” corresponde al máximo que pueden alcanzar las aleaciones, y tiene una influencia directa sobre los valores de rigidez que se pueden obtener a partir de una porosidad deseada. Por ejemplo, la aleación Ti c.p. tiene un módulo elástico bulk de 110 (GPa), y al 30% de porosidad el valor simulado obtuvo un módulo elástico de 83 (GPa), disminuyendo así en 27 (GPa). En cambio, para una aleación de Ti- γ como la Ti-13Ta-6Sn, que tiene un módulo bulk de 50 (GPa), al mismo 30% de porosidad se logra un módulo de 37 (GPa), disminuyendo 13 (GPa). El efecto del módulo elástico “bulk” (que es intrínseco del material) tiene una influencia directa sobre la pendiente o tasa de cambio del módulo elástico en función de la porosidad, la que depende de A y b para la expresión matemática del ajuste potencial. Esta tasa de cambio es mayor para aleaciones más rígidas. donde una misma variación de porosidad tiene un efecto superior en la variación del módulo. Tal magnitud del módulo elástico en estado bulk acota las posibilidades para aleaciones rígidas como Ti c.p. de obtener una cercanía al módulo del hueso cortical (30 GPa) con porosidades cercanas a 30-40%. Es por aquello que se buscan materiales con una rigidez menor a 50-70 (GPa) adecuada para manipular la porosidad y alcanzar el valor deseado de rigidez.

Por otro lado, es posible observar que las curvas siguen una tendencia del tipo potencial en función del aumento de porosidad promedio, donde el módulo elástico es influenciado por la distribución de porosidad y su morfología, que afectan directamente al tipo de decaimiento que posee la curva (curvatura). Para este caso se obtuvo un exponente de 0.864 para todos los modelos con error de 0.076% y el valor de A en las ecuaciones corresponde al valor del módulo bulk, con errores inferiores a 3%. Este valor de exponente es debido principalmente al tipo de gradiente utilizado y a la geometría de porosidad, donde las capas externas que poseen una porosidad de 20%, actúan como

soporte, aumentando la rigidez final y cambiando las propiedades geométricas de distribución de esfuerzos.

Debido a que los modelos son una representación virtual de la realidad, es necesario realizar simplificaciones a dichos modelos, como la anisotropía o la deformación plástica, que no son consideradas en este estudio. Es por lo anterior que para comparar los resultados obtenidos con modelos empíricos como el de Gibson-Ashby (GA), el cual considera porosidad homogénea y constante, es necesario aplicar un factor de corrección, el cual no modifique el tipo expresión matemática pero que incluya la densidad relativa. Este factor se justifica por las simplificaciones realizadas con el fin de ajustar el exponente a un valor fijo que propone el modelo GA, que utiliza una porosidad continua y homogénea. Por lo que al módulo elástico obtenido por el método de elementos finitos (E_{MEF}) se aplica un factor proporcional a la densidad relativa del modelo, obteniendo un módulo corregido (E_{CORR}), el cual es comparable a los modelos de GA, esta expresión es de la forma de la ecuación (15):

$$E_{CORR} = E_{MEF} * \rho^N \quad (15)$$

Donde la densidad relativa posee un exponente que se ajusta para lograr un exponente cuadrático, en este caso el valor de N corresponde a 1.1. Este valor se utiliza con el fin de ajustar la influencia de esta variable sobre el valor de módulo elástico. Con esto se genera una nueva tendencia con los valores de modulo corregidos, mostrada en la Figura 31, además de la Tabla 13, con los parámetros A y b de ajuste, donde se obtiene ahora un exponente de 1.94, el cual es comparable al modelo de GA. El comportamiento de la tendencia adopta una curvatura o decaimiento distinto a la Figura 30, debido al factor de corrección que tiene influencia directa sobre la rigidez.

Tabla 13: Parámetros de ajuste A y b de ec. (14) con error asociado y ajuste R-cuadrado para resultados ajustados de simulación en aleaciones de estudio

Material	A		b		Ajuste R ²
	Valor (GPa)	Error (%)	Valor	Error (%)	
Ti c.p.	110.3	1.84	1.940	0.060	0.9958
Ti-33Nb-4Mn	70.2	1.18	1.940	0.060	0.9957
Ti-30Nb-13Ta	57.2	0.95	1.940	0.060	0.9958
Ti-13Ta-6Sn	50.1	0.83	1.940	0.059	0.9958

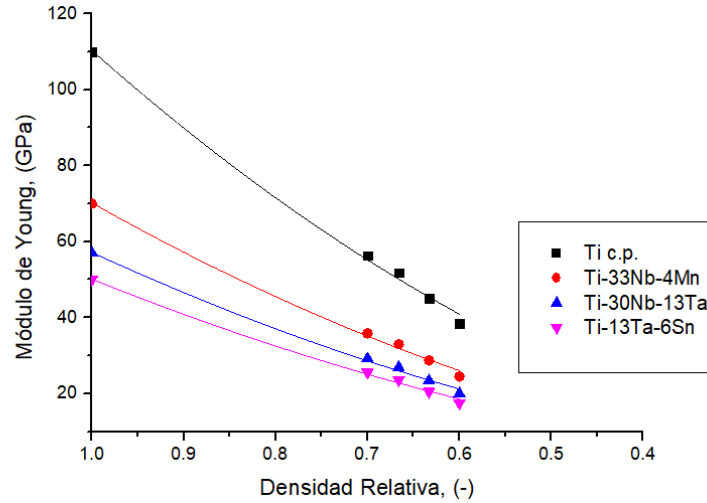


Figura 31: Modulo elástico corregido a modelo Gibson-Ashby en función de la densidad relativa

Contrastando este estudio con resultados de literatura, se utilizan los análisis de [39], donde los investigadores fabrican una aleación de Titanio con estructura cristalina FCC mediante pulvimetalurgia y AM, y realizan una modelación matemática del efecto de la porosidad homogénea sobre el módulo elástico de Young, con modelos empíricos similares (decaimiento potencial). Se observa en la Figura 32, que para una porosidad de 30%, los modelos estiman un valor de módulo de Young entre 25 y 5 (GPa) para la aleación estudiada que posee un módulo de 50 (GPa), con igual valor a la aleación de este estudio Ti-13Ta-6Sn. El valor obtenido del módulo corregido para esta aleación con 30% de porosidad gradiente es de 25 (GPa) y para 40% de 17 (GPa), los cuales están dentro del rango que presentan los investigadores en su publicación, aproximación que puede servir para otros modelos matemáticos.

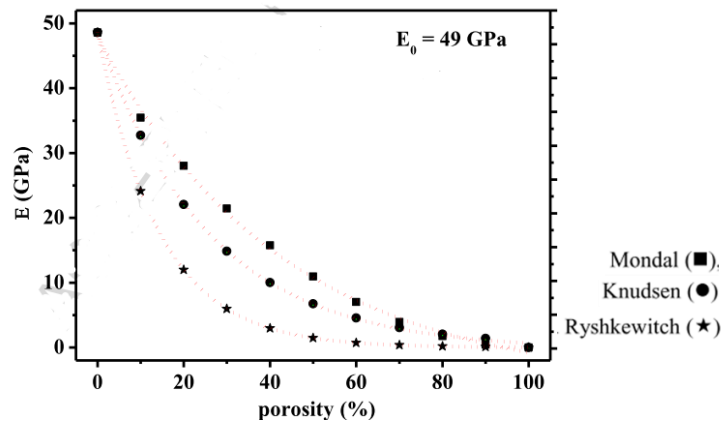


Figura 32: Estimación del módulo de Young en función de la porosidad con distintos modelos empíricos, similares a GA, extraído de [39].

En una investigación de Trueba et al. [87], se caracterizó el módulo de Young mediante ensayo de compresión y ultra sonido en espumas metálicas de Titanio c.p. de porosidad gradiente en 3 capas radiales de 20, 40 y 60% de porosidad respectivamente (204060 según notación de este estudio). Estas fueron fabricadas por pulvimetalurgia mediante SH con cloruro de sodio (NaCl) y bicarbonato de amonio ($\text{NH}_4(\text{HCO}_3)$) como espaciadores. Se estima que cada capa posee porosidad local y modulo elástico local, lo que da una combinación o ponderación de propiedades entre las capas en función de su espesor, condiciones de operación (SH) y geometría de porosidad de cada capa.

En cuanto al valor del módulo elástico, se determinó mediante ensayo de compresión un módulo elástico de 8.3 ± 1.3 (GPa) usando NaCl y 11.5 ± 2.6 (GPa) usando $\text{NH}_4(\text{HCO}_3)$. Por otro lado, mediante ultrasonido el valor de módulo fue de 26 ± 1.4 y 32 ± 1.7 (GPa), usando NaCl y $\text{NH}_4(\text{HCO}_3)$ respectivamente. La porosidad promedio de las espumas fue de 42.7 ± 1.8 para NaCl y 39.6 ± 1.6 $\text{NH}_4(\text{HCO}_3)$. Comparando estas condiciones de porosidad y módulo con el modelo de este trabajo para la aleación Ti c.p. y 40% de porosidad promedio, se obtiene un módulo de 38.5 (GPa), que está cercano al valor de los investigadores, aproximación que puede ajustarse si se aumenta la porosidad en los modelos.

Otra investigación relacionada es la de Torres et al.[88], quienes desarrollan mediante pulvimetalurgia (SH) espumas de porosidad radial de 3 capas cilíndricas de 20, 40 y 60% (204060), fabricadas a partir de polvo de Ti c.p. y NaCl como espaciador (tamaño promedio 154 ± 30 (μm)). Estas poseen más porosidad en la capa externa (60%) y menos porosidad en la interna (20%) obteniendo especímenes con porosidad promedio de 42.7 ± 1.8 % y módulo elástico de 26 ± 1.4 (GPa) (valor obtenido por ultrasonido). las cuales tienen buena correlación con el valor de módulo elásticos de los modelos simulados por el método de elementos finitos de este trabajo.

Estos resultados son una contribución a la investigación y entendimiento del efecto de la porosidad gradiente y su morfología sobre el módulo elástico de espumas porosas de aleaciones base Titanio, donde el balance entre porosidad y rigidez permite desarrollar biomateriales avanzados para uso médico. Este trabajo puede ser generalizado a diferentes aleaciones fabricadas por pulvimetalurgia e incluso por otras vías de procesamiento metalúrgico.

Capítulo 5. CONCLUSIONES

Se generaron 4 modelos de porosidad gradiente, los cuales cumplen adecuadamente con porosidad inicial de diseño, interconexión abierta, densidad superficial y tamaño de poro. Al realizar 4 mediciones de área superficial es posible reducir el error de topología a menos de 5%. Un aumento en la porosidad volumétrica produce un incremento tanto en el tamaño máximo y el tamaño de poro final, junto a una disminución en el número de poros debido a la coalescencia.

Se determinaron adecuadamente las condiciones de borde de un ensayo de compresión uniaxial, que corresponden al mallado de un único sólido con una calidad y cantidad de elementos óptima-aceptable, junto a una carga axial con nodos acoplados en la cara superior y un soporte fijo en la cara inferior, reproduciendo una configuración ensayo de compresión. El valor inicial de esfuerzo normal aplicado (-10 MPa) se condice con el valor simulado obtenido en los modelos (-9.48 MPa) presentando leves variaciones según la porosidad.

Se determinó el módulo elástico mediante la modelación y simulación de espumas con porosidad gradiente de aleaciones base Titanio con estructura FCC, donde la aleación Ti-13Ta-6Sn se evalúa que posee un módulo de Young a la medida del hueso humano (~30 GPa), obteniendo con una porosidad promedio de 40% un módulo elástico de 30.7 (GPa). Para el caso de las aleaciones Ti-30Nb-13Ta, Ti-33Nb-4Mn y Ti c.p., es necesario agregar una porosidad promedio mayor a 40% para obtener un módulo elástico cercano al hueso cortical. Gracias a la adición de porosidad gradiente, es posible combinar sinérgicamente propiedades mecánicas (E) con las propiedades biológicas del hueso (alta porosidad).

El efecto de la porosidad gradiente está fuertemente influenciado por (i) las porosidades locales de cada capa en el modelo y su interconexión, donde la densidad relativa local y la distribución en que se presentan los poros pueden modificar el tipo de decaimiento exponencial (curvatura), y (ii) el efecto señalado es proporcional al módulo elástico del material en su estado consolidado (bulk). Este efecto obedece un comportamiento empírico de naturaleza potencial con orden entre 1 y 2. Este último depende de la geometría de porosidad, su interconexión con el exterior y la topología resultante (bordes agudos o suaves).

Capítulo 6. REFERENCIAS

- [1] L.P. Lefebvre, J. Banhart, D.C. Dunand, Porous metals and metallic foams: Current status and recent developments, *Adv. Eng. Mater.* 10 (2008) 775–787.
- [2] Y. Li, C. Yang, H. Zhao, S. Qu, X. Li, Y. Li, New developments of ti-based alloys for biomedical applications, *Materials (Basel)*. 7 (2014) 1709–1800.
- [3] M. Geetha, A.K. Singh, R. Asokamani, A.K. Gogia, Ti based biomaterials, the ultimate choice for orthopaedic implants - A review, *Prog. Mater. Sci.* 54 (2009) 397–425.
- [4] L.C. Zhang, L.Y. Chen, A Review on Biomedical Titanium Alloys: Recent Progress and Prospect, *Adv. Eng. Mater.* 21 (2019) 1–29.
- [5] R. Singh, P.D. Lee, R.J. Dashwood, T.C. Lindley, Titanium foams for biomedical applications: A review, *Mater. Technol.* 25 (2010) 127–136.
- [6] L.J. Gibson, M.F. Ashby, *Cellular solids*, 2nd ed., Cambridge University Press, 1999.
- [7] R. Oftadeh, M. Perez-Viloria, J.C. Villa-Camacho, A. Vaziri, A. Nazarian, Biomechanics and Mechanobiology of Trabecular Bone: A Review, *J. Biomech. Eng.* 137 (2015) 1–15.
- [8] C. Aguilar, P. Guzman, S. Lascano, C. Parra, L. Bejar, A. Medina, D. Guzman, Solid solution and amorphous phase in Ti–Nb–Ta–Mn systems synthesized by mechanical alloying, *J. Alloys Compd.* 670 (2016) 346–355.
- [9] D.C. Dunand, Processing of titanium foams, *Adv. Eng. Mater.* 6 (2004) 369–376.
- [10] N. Jha, D.P. Mondal, J. Dutta Majumdar, A. Badkul, A.K. Jha, A.K. Khare, Highly porous open cell Ti-foam using NaCl as temporary space holder through powder metallurgy route, *Mater. Des.* 47 (2013) 810–819.
- [11] C. Guerra, M. Sancy, M. Walczak, C. Martínez, A. Ringuedé, M. Cassir, J. Han, K. Ogle, H.G. de Melo, V. Salinas, C. Aguilar, Effect of added porosity on a novel porous Ti-Nb-Ta-Fe-Mn alloy exposed to simulated body fluid, *Mater. Sci. Eng. C.* 111 (2020).

- [12] E. Chicardi, C. García-Garrido, M.J. Sayagués, Y. Torres, V. Amigó, C. Aguilar, Development of a novel fcc structure for an amorphous-nanocrystalline Ti-33Nb-4Mn (at.%) ternary alloy, *Mater. Charact.* 135 (2018) 46–56.
- [13] C. Aguilar, E. Pio, A. Medina, C. Martínez, M. Sancy, D. Guzman, Evolution of synthesis of FCC nanocrystalline solid solution and amorphous phase in the Ti-Ta based alloy by high milling energy, *J. Alloys Compd.* (2020) 155980.
- [14] E. Chicardi, C.F. Gutiérrez-González, M.J. Sayagués, C. García-Garrido, Development of a novel TiNbTa material potentially suitable for bone replacement implants, *Mater. Des.* 145 (2018) 88–96.
- [15] H. Shen, L.C. Brinson, Finite element modeling of porous titanium, *Int. J. Solids Struct.* 44 (2007) 320–335.
- [16] Cambridge Institution, Cambridge Dictionary, (n.d.). <https://dictionary.cambridge.org/es-LA/dictionary/english/biomaterial>.
- [17] S.M. Castillo, J. Jose, P. Palacio, COMPORTAMIENTO MICRO-MECÁNICO Y SIMULACIÓN NUMÉRICA DE TITANIO CON POROSIDAD GRADIENTE PARA APLICACIONES BIOMEDICAS, *An. Mec. La Fract.* 32 (2015).
- [18] ISO, ISO 10993-1:2018(en) Biological evaluation of medical devices — Part 1: Evaluation and testing within a risk management process, (n.d.).
- [19] R. Langer, *Biomaterials and biomedical engineering*, 1995.
- [20] M. Shbeh, Z.J. Wally, M. Elbadawi, M. Mosalagae, H. Al-Alak, G.C. Reilly, R. Goodall, Incorporation of HA into porous titanium to form Ti-HA biocomposite foams, *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* 96 (2019) 193–203.
- [21] Q. Chen, G.A. Thouas, Metallic implant biomaterials, *Mater. Sci. Eng. R Reports.* 87 (2015) 1–57.
- [22] J. Banhart, Manufacture, characterisation and application of cellular metals and metal foams, *Prog. Mater. Sci.* 46 (2001) 559–632.
- [23] G. Ryan, A. Pandit, D.P. Apatsidis, Fabrication methods of porous metals for use in orthopaedic applications, *Biomaterials.* 27 (2006) 2651–2670.

- [24] H.P. Degischer, B. Kriszt, Handbook of Cellular Metals - Production, Processing, Applications, 2002.
- [25] C. PETROFF, Recent Titanium R&D for Biomedical Applications in Japan, JOM. 3 (1999) 229–245.
- [26] P. Trueba, E. Chicardi, J.A. Rodríguez-Ortiz, Y. Torres, Development and implementation of a sequential compaction device to obtain radial graded porosity cylinders, J. Manuf. Process. 50 (2020) 142–153.
- [27] X. Miao, D. Sun, Graded/gradient porous biomaterials, Materials (Basel). 3 (2010) 26–47.
- [28] P. Patel, P.P. Bhingole, D. Makwana, Manufacturing, characterization and applications of lightweight metallic foams for structural applications: Review, Mater. Today Proc. 5 (2018) 20391–20402.
- [29] C. Aguilar, C. Guerra, S. Lascano, D. Guzman, P.A. Rojas, M. Thirumurugan, L. Bejar, A. Medina, Synthesis and characterization of Ti-Ta-Nb-Mn foams, Mater. Sci. Eng. C. 58 (2016) 420–431.
- [30] T. Daxner, Finite Element Modeling on Celullar Materials, (2010).
- [31] H. Shen, L.C. Brinson, A NUMERICAL INVESTIGATION OF THE EFFECT OF BOUNDARY CONDITIONS AND REPRESENTATIVE VOLUME ELEMENT SIZE FOR POROUS TITANIUM, J. Mech. Mater. Struct. 1 (2006) 1179–1204.
- [32] L.C. Gerhardt, A.R. Boccaccini, Bioactive glass and glass-ceramic scaffolds for bone tissue engineering, Materials (Basel). 3 (2010) 3867–3910.
- [33] K.K. Phani, S.K. Niyogi, Young's modulus of porous brittle solids, J. Mater. Sci. 22 (1987) 257–263.
- [34] W. Pabst, New relation for the porosity dependence of the effective tensile, J. Mater. Sci. 39 (2004) 3501–3503.
- [35] K. Zhu, C. Li, Z. Zhu, C.S. Liu, Measurement of the dynamic Young's modulus of porous titanium and Ti6Al4V, J. Mater. Sci. 42 (2007) 7348–7353.

- [36] M. Peters, J. Hemptenmacher, J. Kumpfert, C. Leyens, *Structure and Properties of Titanium and Titanium Alloys*, 2005.
- [37] H. Jones, *Metallurgy and physics of titanium alloys volume 2. Applications*, 1986.
- [38] F.H. (Ed. . Froes, *Titanium: Physical Metallurgy Processing and Application*, ASM International, 2015.
- [39] E. Chicardi, C.F. Gutiérrez-González, M.J. Sayagués, C. García-Garrido, Development of a novel TiNbTa material potentially suitable for bone replacement implants, *Mater. Des.* 145 (2018) 88–96.
- [40] E. Chicardi, C. Aguilar, M.J. Sayagués, C. García-Garrido, Influence of the Mn content on the TiNbxMn alloys with a novel fcc structure, *J. Alloys Compd.* 746 (2018) 601–610.
- [41] A.M. Russell, K.L. Lee, Russell, *Structure Property Relations in Nonferrous Metals.pdf*, Wiley, 2005.
- [42] A.M. Khorasani, M. Goldberg, E.H. Doeven, G. Littlefair, Titanium in biomedical applications—properties and fabrication: A review, *J. Biomater. Tissue Eng.* 5 (2015) 593–619.
- [43] M. Long, H.J. Rack, Titanium alloys in total joint replacement—a materials science perspective, *Biomaterials.* 19 (1998) 1621–1639.
- [44] M. Abdel-Hady Gepreel, M. Niinomi, Biocompatibility of Ti-alloys for long-term implantation, *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* 20 (2013) 407–415.
- [45] T.L. Kivell, A review of trabecular bone functional adaptation: What have we learned from trabecular analyses in extant hominoids and what can we apply to fossils?, *J. Anat.* 228 (2016) 569–594.
- [46] K. Pałka, R. Pokrowiecki, Porous Titanium Implants: A Review, *Adv. Eng. Mater.* 20 (2018) 1–18.
- [47] A. Kulshreshtha, S.K. Dhakad, Preparation of metal foam by different methods: A review, *Mater. Today Proc.* (2020).

- [48] Y. Torres, S. Lascano, J. Bris, J. Pavón, J.A. Rodríguez, Development of porous titanium for biomedical applications: A comparison between loose sintering and space-holder techniques, *Mater. Sci. Eng. C.* 37 (2014) 148–155.
- [49] C. Suryanarayana, *Mechanical Alloying and Milling*, Marcel Dek, New York, 2004.
- [50] Y. Torres, J.J. Pavón, J.A. Rodríguez, Processing and characterization of porous titanium for implants by using NaCl as space holder, *J. Mater. Process. Technol.* 212 (2012) 1061–1069.
- [51] Z. Esen, Ş. Bor, Characterization of Ti-6Al-4V alloy foams synthesized by space holder technique, *Mater. Sci. Eng. A.* 528 (2011) 3200–3209.
- [52] J. Rivard, V. Brailovski, S. Dubinskiy, S. Prokoshkin, Fabrication, morphology and mechanical properties of Ti and metastable Ti-based alloy foams for biomedical applications, *Mater. Sci. Eng. C.* 45 (2014) 421–433.
- [53] C. Aguilar, M. Arancibia, I. Alfonso, M. Sancy, K. Tello, V. Salinas, F. De Las Cuevas, Influence of porosity on the elastic modulus of Ti-Zr-Ta-Nb foams with a low Nb content, *Metals (Basel)*. 9 (2019) 1–15.
- [54] H. Li, S.M. Oppenheimer, S.I. Stupp, D.C. Dunand, L.C. Brinson, Effects of pore morphology and bone ingrowth on mechanical properties of microporous titanium as an orthopaedic implant material, *Mater. Trans.* 45 (2004) 1124–1131.
- [55] N. Tuncer, G. Arslan, E. Maire, L. Salvo, Investigation of spacer size effect on architecture and mechanical properties of porous titanium, *Mater. Sci. Eng. A.* 530 (2011) 633–642.
- [56] P.Y. Chen, J. McKittrick, M.A. Meyers, Biological materials: Functional adaptations and bioinspired designs, *Prog. Mater. Sci.* 57 (2012) 1492–1704.
- [57] A. Dalla, P. Bankoff, *Biomechanical Characteristics of the Bone, Human Musculoskeletal Biomechanics*, (2012).
- [58] PUC, Depto. de Traumatología y Ortopedia, Docencia Traumatología, Escuela de Medicina PUC, (n.d.). <http://www.docenciatraumatologia.uc.cl>.
- [59] M.V. García, J. Reyes, LA HIDROXIAPATITA, SU IMPORTANCIA EN LOS

TEJIDOS MINERALIZADOS Y SU APLICACIÓN BIOMÉDICA, *Tip Rev. Espec. En Ciencias Químico-Biológicas*. 9 (2006) 90–95.

- [60] M.J. Olszta, X. Cheng, S.S. Jee, R. Kumar, Y.Y. Kim, M.J. Kaufman, E.P. Douglas, L.B. Gower, Bone structure and formation: A new perspective, *Mater. Sci. Eng. R Reports*. 58 (2007) 77–116.
- [61] A.M.H. da Silva, J.M. Alves, O.L. da Silva, N.F. da Silva Junior, Two and three-dimensional morphometric analysis of trabecular bone using X-ray microtomography (μ CT), *Rev. Bras. Eng. Biomed*. 30 (2014) 93–101.
- [62] J.Y. Rho, L. Kuhn-Spearing, P. Zioupos, Mechanical properties and the hierarchical structure of bone, *Med. Eng. Phys.* 20 (1998) 92–102.
- [63] J.R. Caeiro, P. González, D. Guede, Biomechanics and bone (& II): trials in different hierarchical levels of bone and alternative tools for the determination of bone strength, *Rev. Osteoporos. y Metab. Miner.* 5 (2013) 99–108.
- [64] C. Greenwood, J. Clement, A. Dicken, P. Evans, I. Lyburn, R.M. Martin, N. Stone, P. Zioupos, K. Rogers, Age-related changes in femoral head trabecular microarchitecture, *Aging Dis.* 9 (2018) 976–987.
- [65] T.M. Keaveny, E.F. Morgan, O.C. Yeh, C. Material, C. Bone, T. Bone, Bone Mechanics, *Lancet*. 240 (1942) 43.
- [66] C. Simoneau, P. Terriault, J. Rivard, V. Brailovski, Modeling of metallic foam morphology using the Representative Volume Element approach: Development and experimental validation, *Int. J. Solids Struct.* 51 (2014) 3633–3641.
- [67] H. Shen, S.M. Oppenheimer, D.C. Dunand, L.C. Brinson, Numerical modeling of pore size and distribution in foamed titanium, *Mech. Mater.* 38 (2006) 933–944.
- [68] J. Aboudi, S.M. Arnold, B.A. Bednarczyk, *Micromechanics of Composite Materials - A Generalized Multiscale Analysis Approach*, n.d.
- [69] A.P. Roberts, E.J. Garboczi, Elastic properties of model random three-dimensional open-cell solids, *J. Mech. Phys. Solids*. 50 (2002) 33–55.
- [70] A.P. Roberts, E.J. Garboczi, Computation of the linear elastic properties of random

- porous materials with a wide variety of microstructure, Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci. 458 (2002) 1033–1054.
- [71] P. Kanouté, D.P. Boso, J.L. Chaboche, B.A. Schrefler, Multiscale methods for composites: A review, Arch. Comput. Methods Eng. 16 (2009) 31–75.
- [72] W. Niu, S. Gill, H. Dong, C. Bai, A two-scale model for predicting elastic properties of porous titanium formed with space-holders, Comput. Mater. Sci. 50 (2010) 172–178.
- [73] R. Bostanabad, Y. Zhang, X. Li, T. Kearney, L.C. Brinson, D.W. Apley, W.K. Liu, W. Chen, Computational microstructure characterization and reconstruction: Review of the state-of-the-art techniques, Prog. Mater. Sci. 95 (2018) 1–41.
- [74] A. Düster, H.G. Sehlhorst, E. Rank, Numerical homogenization of heterogeneous and cellular materials utilizing the finite cell method, Comput. Mech. 50 (2012) 413–431.
- [75] P.K. Zysset, E. Dall'Ara, P. Varga, D.H. Pahr, Finite element analysis for prediction of bone strength, Bonekey Rep. 2 (2013) 1–9.
- [76] J.F. Ramírez, M. Cardona, J.A. Velez, I. Mariaka, J.A. Isaza, E. Mendoza, S. Betancourt, P. Fernández-Morales, Numerical Modeling and Simulation of Uniaxial Compression of Aluminum Foams Using FEM and 3D-CT Images, Procedia Mater. Sci. 4 (2014) 227–231.
- [77] A. Öchsner, K. Lamprecht, On the uniaxial compression behavior of regular shaped cellular metals, Mech. Res. Commun. 30 (2003) 573–579.
- [78] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, D. Jeulin, Determination of the size of the representative volume element for random composites: Statistical and numerical approach, Int. J. Solids Struct. 40 (2003) 3647–3679.
- [79] H. Elminor, I. Bahraoui, E. Hilali, H. Elminor, The Effective Elastic Properties And The RVE Size By Satatistic And Numerical Approach For Porous Materials, 13 (2016) 118–126.
- [80] C. Aguilar, F. De Barbieri, I. Alfonso, G.I. Dávila-Pulido, M. Ghisellini, Influence of

the radial graded porosity distribution on elastic modulus of Ti-based alloys foams with face-centered cubic (fcc) crystal structure, *Comput. Mater. Sci.* (n.d.).

- [81] MSC, Digimat - Student Edition 2020, (2020).
<https://www.mscsoftware.com/page/digimat-student-edition>.
- [82] B. Pincheira, F. Javier, Análisis de esfuerzos mediante el método de elementos finitos de implantes dentales de titanio poroso, *Ing. y Desarrollo*. 33 (2015) 80–97.
- [83] H.C. Hsu, S.K. Hsu, S.C. Wua, P.H. Wang, W.F. Ho, Design and characterization of highly porous titanium foams with bioactive surface sintering in air, *J. Alloys Compd.* 575 (2013) 326–332.
- [84] NIH, ImageJ, (2020). <https://imagej.nih.gov/ij/download.html>.
- [85] Digimat, Digimat USER'S MANUAL, (2017).
- [86] OriginLab, Origin Software, (2020).
<https://www.originlab.com/index.aspx?go=Products/Origin>.
- [87] P. Trueba, E. Chicardi, J.A. Rodríguez-Ortiz, Y. Torres, Development and implementation of a sequential compaction device to obtain radial graded porosity cylinders, *J. Manuf. Process.* 50 (2020) 142–153.
- [88] Y. Torres, P. Trueba, J.J. Pavón, E. Chicardi, P. Kamm, F. García-Moreno, J.A. Rodríguez-Ortiz, Design, processing and characterization of titanium with radial graded porosity for bone implants, *Mater. Des.* 110 (2016) 179–187.

Capítulo 7. ANEXOS

7.1. Ansys Workbench – Mechanical: Etapas

Dentro del módulo de mecánica estructural, la secuencia para el análisis completo en este estudio de elementos finitos se detalla como sigue:

- **Creación de materiales**

En la categoría Engineering Data, es posible encontrar diferentes propiedades para representar materiales. Para crear el material, lo primero es asignar el nombre de este y luego seleccionar las propiedades a estudiar, en este caso se utiliza la densidad (propiedad física) junto con el módulo de Young y Poisson (elástico lineal) y su valor (magnitud y unidad), lo anterior se encuentra mostrado en la Figura 33.

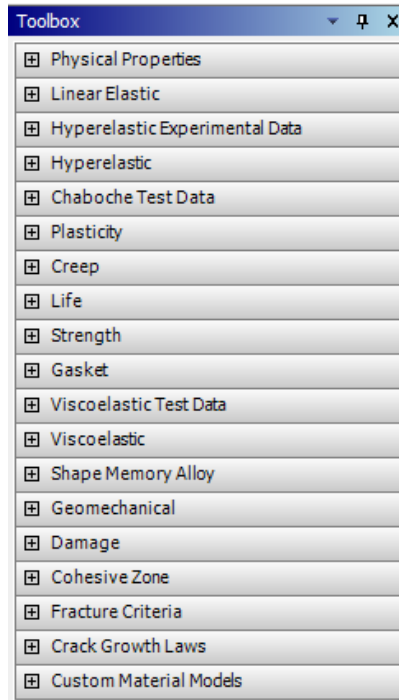
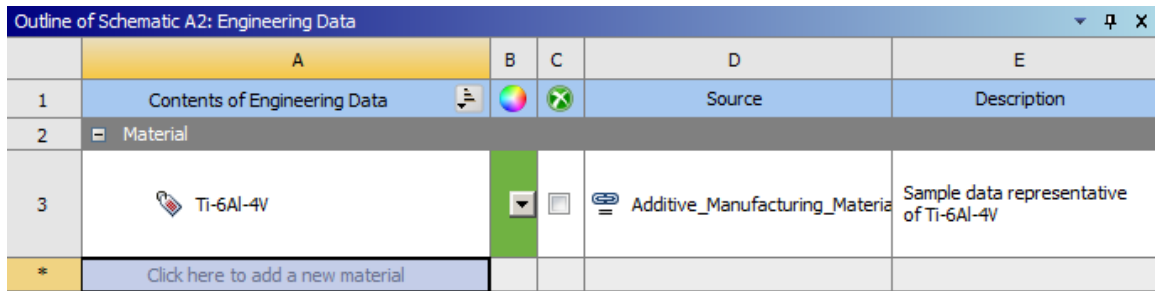


Figura 33: Componentes para crear materiales. Esquema general (sup.) y “toolbox” de propiedades (inf.).

- **Geometría**

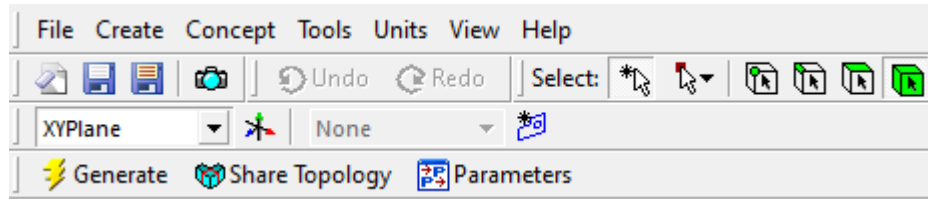


Figura 34: Panel principal editor Design Modeler, pestañas “File” y “Create” son utilizadas.

Con los materiales creados, se selecciona y ejecuta el editor de geometría Design Modeler (o Space Claim), para importar los archivos de modelo, en este estudio el formato es texto parasolid (.xmt_txt). En la Figura 34 se muestra en panel principal de navegación del editor DM, interfaz para importar la geometría (File→Import External Geometry), que posteriormente es sometida a operaciones geométricas del tipo booleanas (Create→Boolean→Unite) para consolidar el cuerpo, como se muestra en el esquema de la Figura 35. Si es que luego de unir los cuerpos, existen sólidos remanentes de fragmentos aislados, es necesario suprimirlos y no considerarlos en el modelo. Con el cuerpo generado por completo, se procede a ejecutar el módulo Mechanical, donde se realiza el mallado, se aplican las condiciones de borde y se resuelve el sistema.

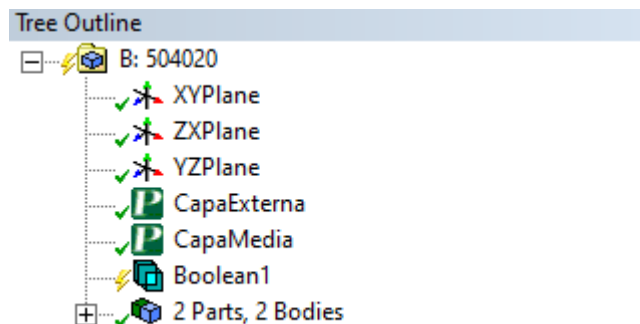


Figura 35: Esquema del editor (Tree Outline) para modelar cuerpos, importar geometrías (capas) y operar con los sólidos (boolean).

- **Mechanical Setup – Ajustes del modelo**

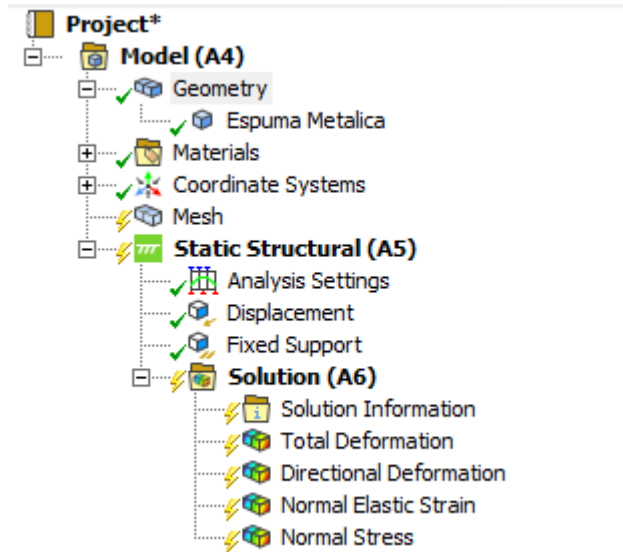


Figura 36: Esquema de operaciones módulo Mechanical.

Al importar la geometría, se ejecuta un nuevo programa con el esquema de operaciones que se muestra en la Figura 36, donde está la geometría y asignación del material a estudiar, el sistema de coordenadas utilizado y la operación de mallado. La Figura 37 (sup.) muestra como ejemplo de visualización el modelo estudiado 505020.

Luego de asignar el material correspondiente para evaluar, se aplica en primera instancia el mallado (mesh). El orden y tamaño del elemento serán configurados por el algoritmo del programa (default) y la refinación del elemento (tetraedros) se ajusta para lograr convergencia del mallado. Para verificar la calidad del elemento se utiliza el parámetro Skewness (Figura 38) y se procura estar en un buen rango de oblicuidad (0-0.5), de no poseer buena calidad, se recomienda afinar el tamaño de elemento.

Con la malla completa, como se observa en la Figura 37 (inf.), se asignan las condiciones de borde, i.e., desplazamientos y soportes (Figura 36), que puede ser una carga o un desplazamiento acoplado de la cara superior en sobre eje vertical/axial (Figura 39) y restringir el movimiento de la cara inferior (Fixed Support). También es posible aplicar una fuerza proporcional al área donde aplica, para luego obtener el desplazamiento. Teniendo correctas y adecuadas las condiciones de contorno, se procede a resolver el

Análisis del efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base titanio con estructura FCC mediante elementos finitos

sistema, dando clic a “Solve”. Finalizado el tiempo es posible solicitar los resultados post-procesamiento.

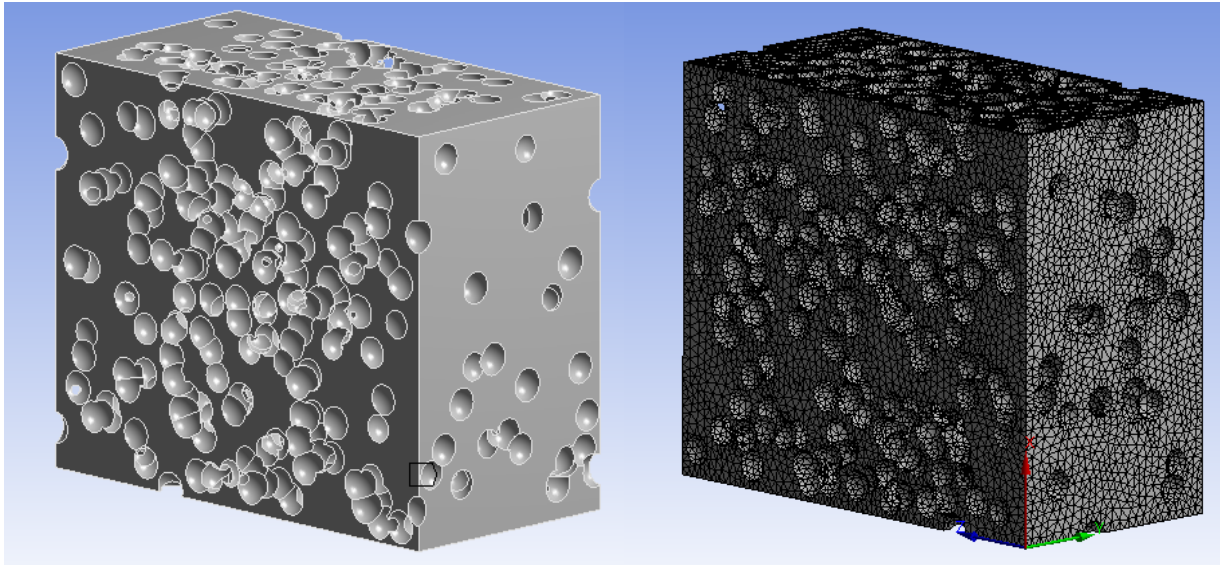


Figura 37: (sup.) Modelo ejemplar 505020 (gradiente de porosidad en eje Z), luego de ser importado. (inf.) Modelo luego de ser mallado con resolución máxima y 467.000 elementos.

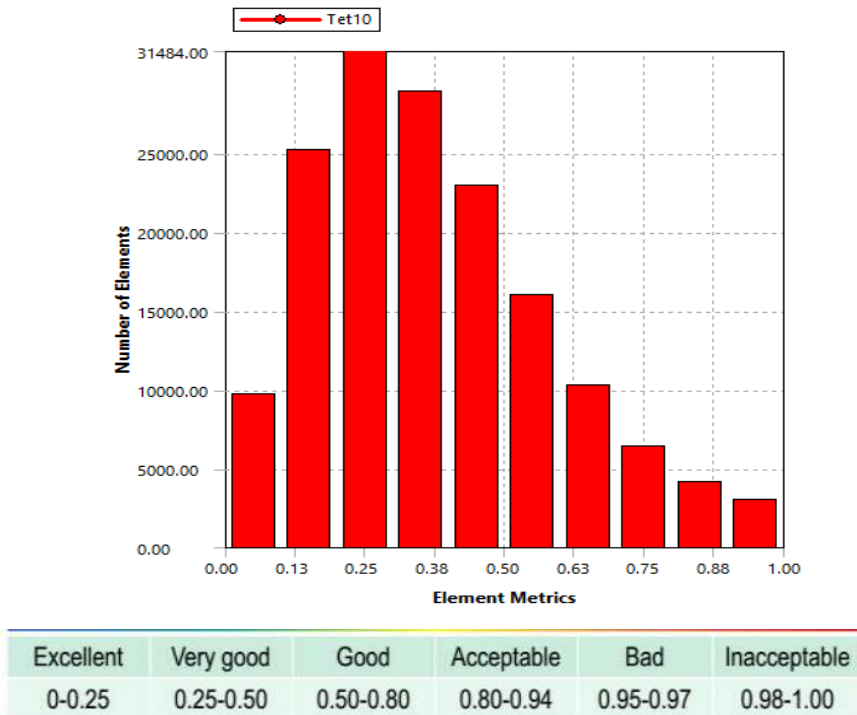


Figura 38: Número de elementos tetraédricos en función de la métrica “skewness” para modelo 505020. Oblicuidad ideal entre valores 0 y 0.5.

Análisis del efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base titanio con estructura FCC mediante elementos finitos

Details of "Displacement"	
Scope	
Scoping Method	Geometry Selection
Geometry	1 Face
Definition	
Type	Displacement
Define By	Components
Coordinate System	Global Coordinate System
<input type="checkbox"/> X Component	-2.5e-003 mm (ramped)
<input type="checkbox"/> Y Component	0. mm (ramped)
<input type="checkbox"/> Z Component	0. mm (ramped)
Suppressed	No

Figura 39: Parámetros de detalle para desplazamiento, eje X corresponde al eje axial. Componentes Y-Z permanecen fijas.

- **Resultados**



Figura 40: Esquema principal para obtener resultados post-procesamiento.

Para este estudio estructural, donde se analiza el efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico, son 2 o 3 las variables necesarias para la determinación del módulo elástico de las espumas. Para ello, se solicita el desplazamiento direccional (deformation) para corroborar que es igual al aplicado, el esfuerzo normal promedio (stress) para analizar las tensiones y compresiones y, de ser necesario, solicitar la deformación normal promedio (strain), como se evidencia en la Figura 40. Al solicitar estos resultados el programa ofrece una cantidad de opciones para mostrar la información, donde pide especificar: (i) la geometría donde se aplica, (ii) la orientación de los ejes, y (iii) el tipo de esfuerzo o deformación a analizar (normal, cortante, máximo principal, Von Mises, etc.), detalles mostrados en la Figura 41.

Lo que es verdaderamente atractivo y seductor para el ojo humano es la visualización en paleta de colores del comportamiento elástico del material, donde es posible generar una animación del fenómeno de compresión. Puede ajustarse el factor de deformación, para clarificar las zonas críticas y también pueden generarse cortes transversales o bien longitudinales del cuerpo para analizar las tensiones y deformación al interior del sólido poroso, ver Figura 42.

Análisis del efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base titanio con estructura FCC mediante elementos finitos

Details of "Normal Stress"	
Scope	
Scoping Method	Geometry Selection
Geometry	All Bodies
Definition	
Type	Normal Stress
Orientation	X Axis
By	Time
<input type="checkbox"/> Display Time	Last
Coordinate System	Global Coordinate System
Calculate Time History	Yes
Identifier	
Suppressed	No
Integration Point Results	
Display Option	Averaged
Average Across Bodies	No
Results	
<input type="checkbox"/> Minimum	-2510.8 MPa
<input type="checkbox"/> Maximum	133.83 MPa
<input type="checkbox"/> Average	-38.633 MPa
Minimum Occurs On	Solid
Maximum Occurs On	Solid
Information	

Figura 41: Panel con detalles para especificar resultados post-procesamiento (esfuerzo normal). "Scope" y "Definition" son relevantes para el estudio.

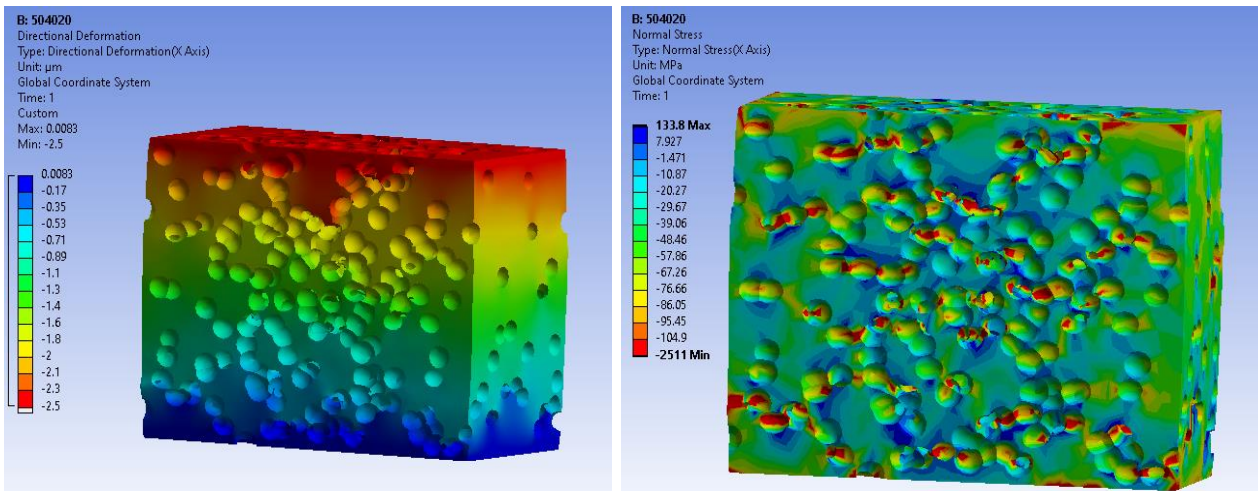


Figura 42: Visualización de simulación sin malla del desplazamiento (sup.) y esfuerzo normal (inf.) para modelo 504020, aleación Ti-30Nb-13Ta.

7.2. Caracterización Morfológica ImageJ

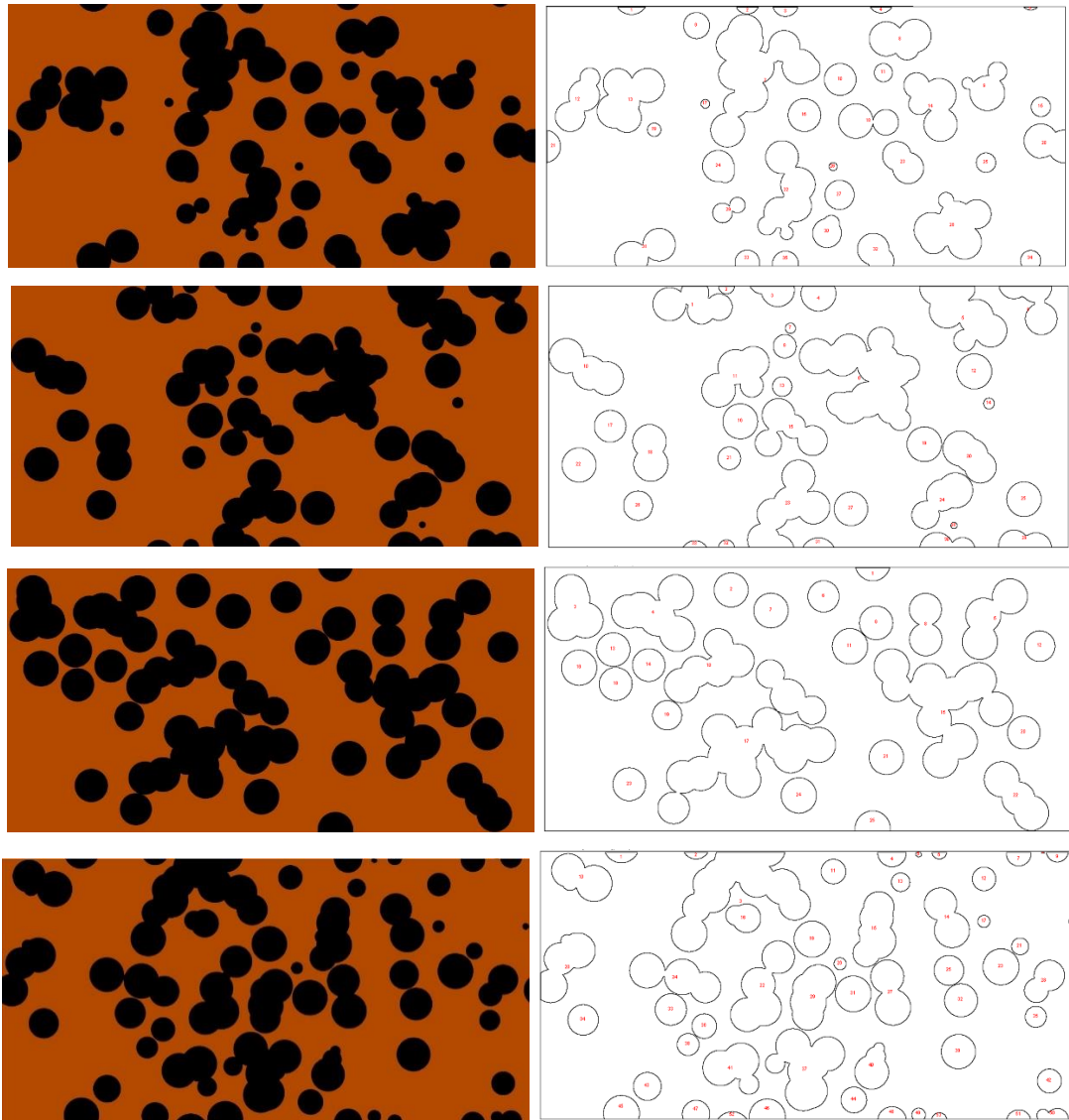


Figura 43: (izq.) Muestras transversales de modelo 403020 con ajuste de contraste para destacar poros. (der.) Transformación digital para análisis y recuento de poros.

Tabla 14: Estadística de diámetro equivalente, circularidad y redondez para modelo 403020

	Diámetro, μm	Circularidad	Redondez
Promedio	192.9	0.735	0.727
Desviación Estándar	116.0	0.201	0.259
Min	7.9	0.162	0.167
Max	673.0	0.990	0.999

Análisis del efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base titanio con estructura FCC mediante elementos finitos

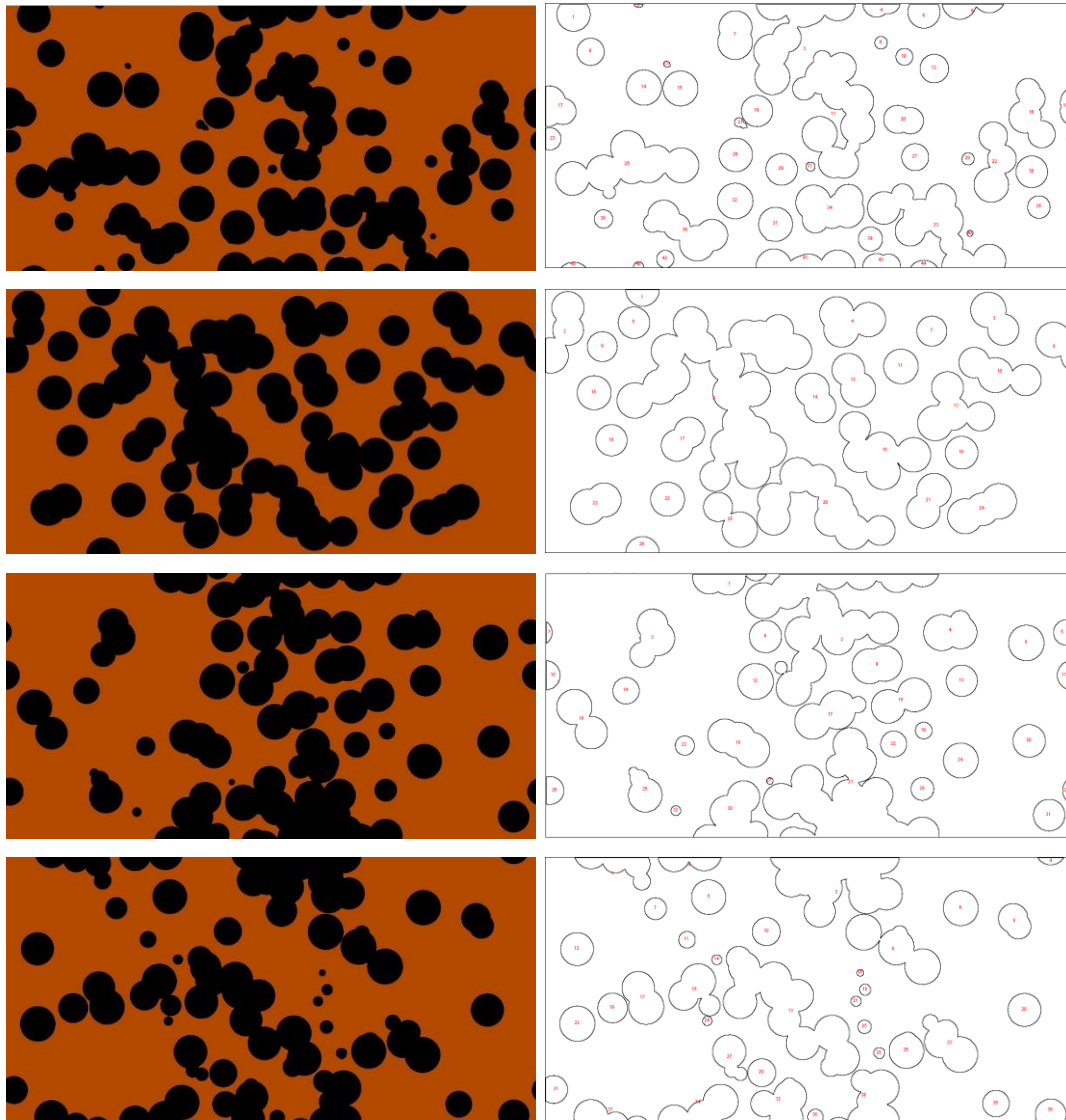


Figura 44: (izq.) Muestras transversales de modelo 503020 con ajuste de contraste para destacar poros. (der.) Transformación digital para análisis y recuento de poros.

Tabla 15: Estadística de diámetro equivalente, circularidad y redondez para modelo 503020

	Diámetro, μm	Circularidad	Redondez
Promedio	201.2	0.732	0.739
Desviación Estándar	126.7	0.227	0.263
Min	29.9	0.122	0.159
Max	796.4	0.972	1.000

Análisis del efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base titanio con estructura FCC mediante elementos finitos

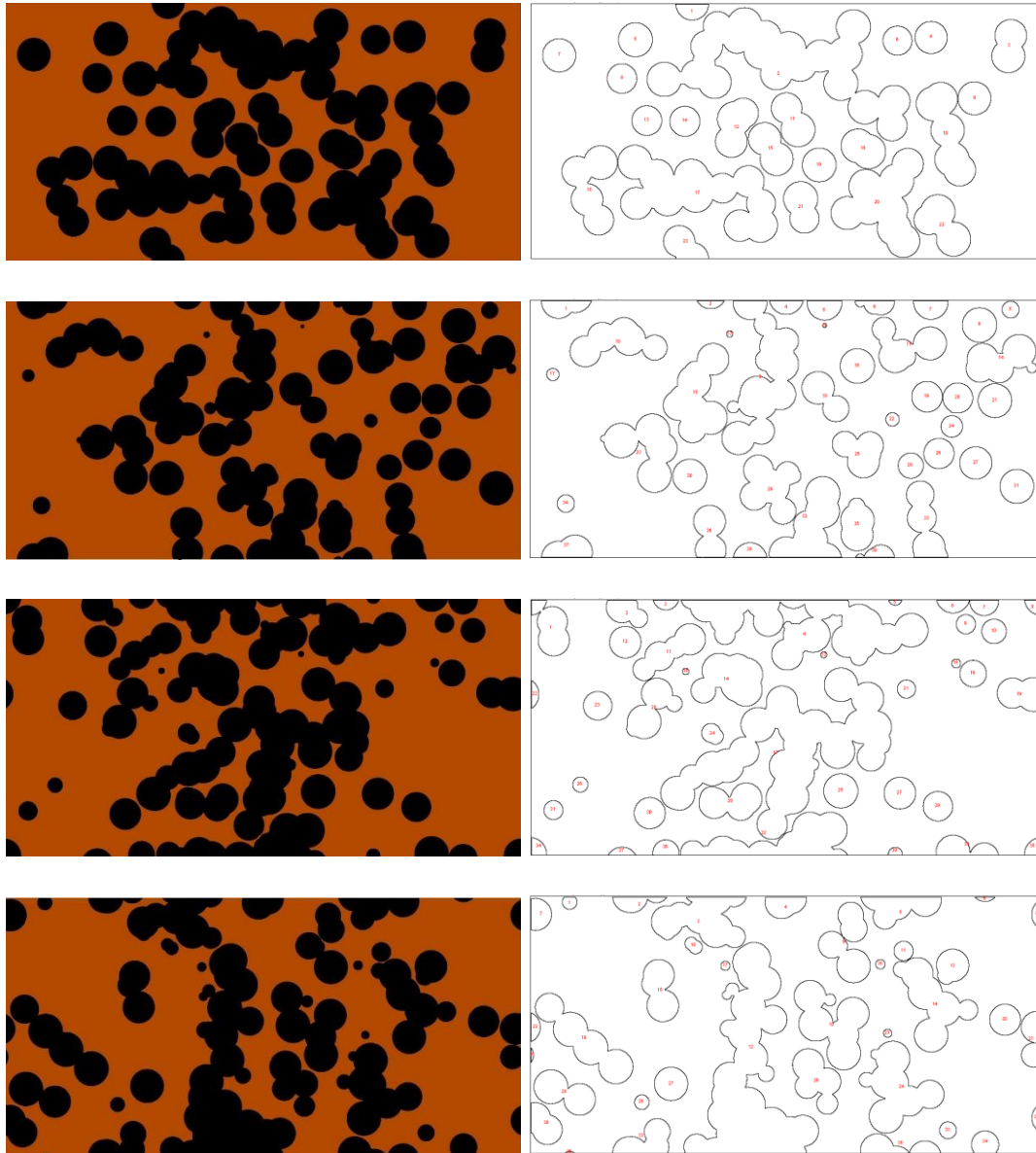


Figura 45: (izq.) Muestras transversales de modelo 504020 con ajuste de contraste para destacar poros. (der.) Transformación digital para análisis y recuento de poros.

Tabla 16: Estadística de diámetro equivalente, circularidad y redondez para modelo 504020

	Diámetro, μm	Circularidad	Redondez
Promedio	210.2	0.691	0.688
Desviación Estándar	142.7	0.230	0.266
Min	22.6	0.135	0.194
Max	804.7	1.000	1.000

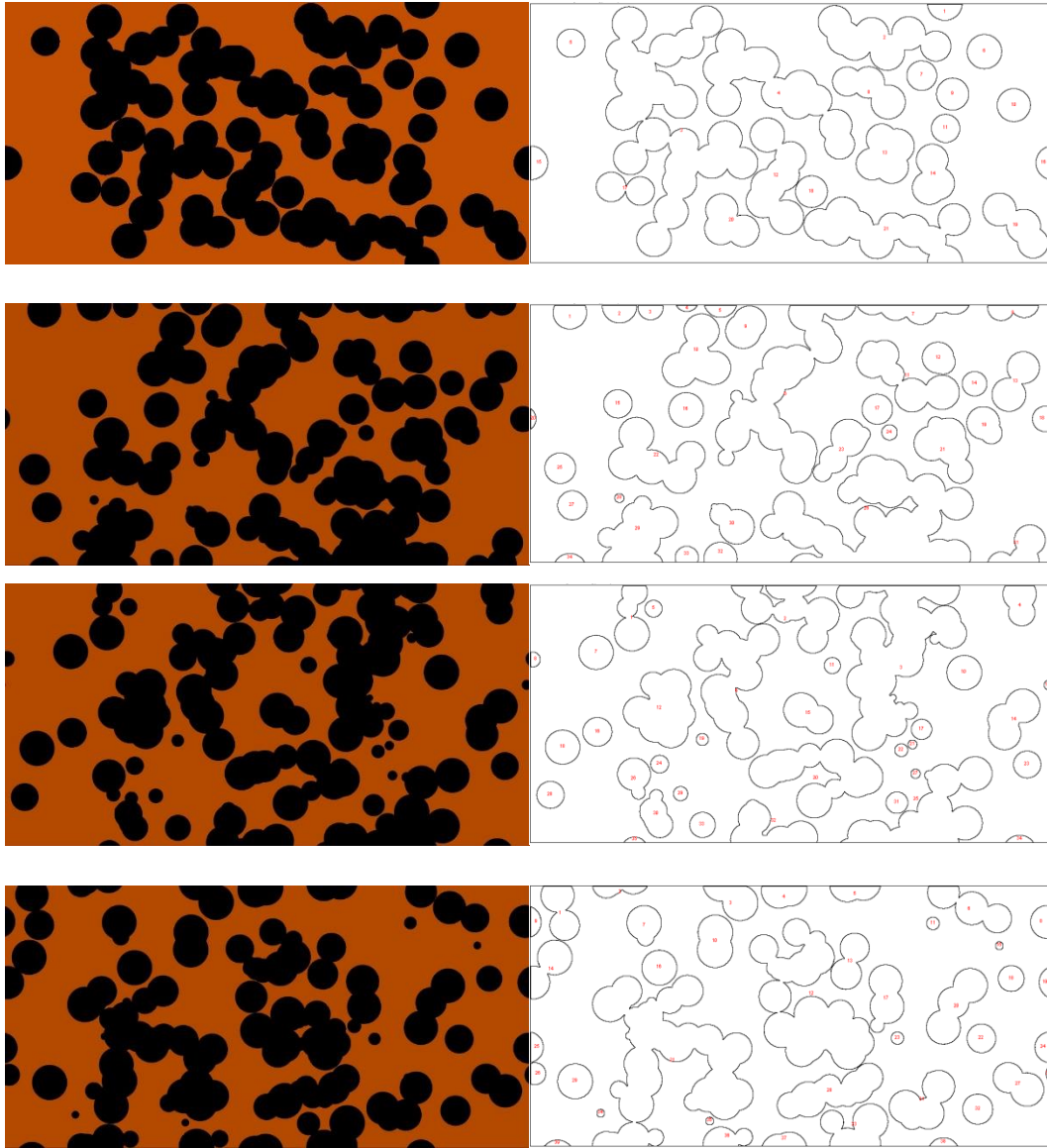


Figura 46: (izq.) Muestras transversales de modelo 505020 con ajuste de contraste para destacar poros. (der.) Transformación digital para análisis y recuento de poros.

Tabla 17: Estadística de diámetro equivalente, circularidad y redondez para modelo 505020

505020	Diámetro, μm	Circularidad	Redondez
Promedio	222.7	0.680	0.677
Desviación Estándar	156.9	0.242	0.262
Min	40.7	0.107	0.169
Max	824.5	1.000	1.000

Análisis del efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base titanio con estructura FCC mediante elementos finitos

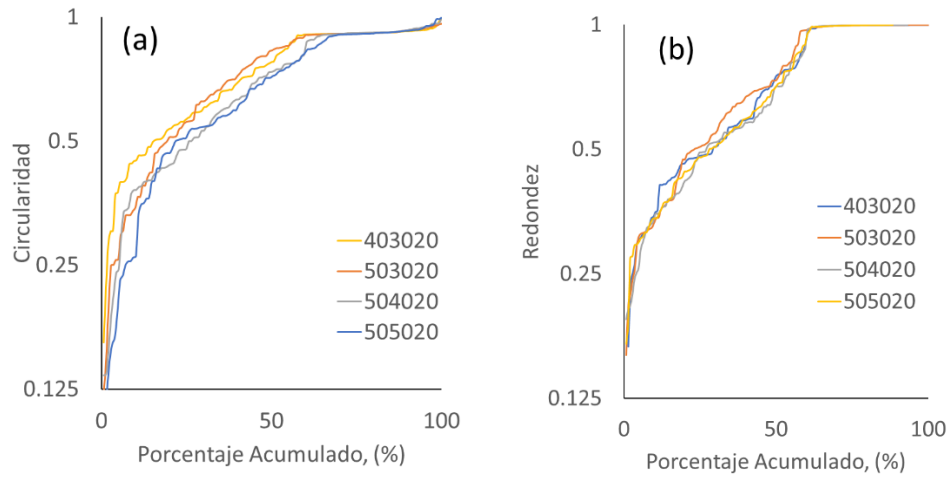


Figura 47: Diagramas de distribución para a) circularidad y b) redondez versus porcentaje acumulado de poros, considerando todos los modelos y sus cortes transversales

7.3. Memoria de Resultados de Simulación

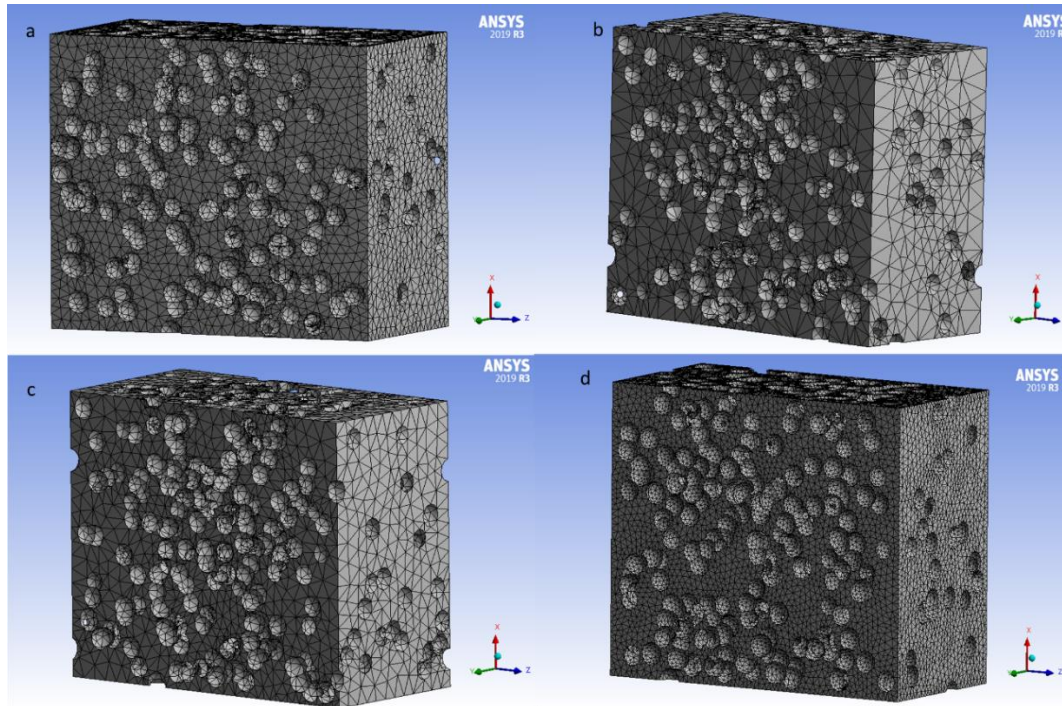


Figura 48: Mallado generado de los modelos de estudio, (a) 403020, (b) 503020, (c) 504020 y (d) 505020.

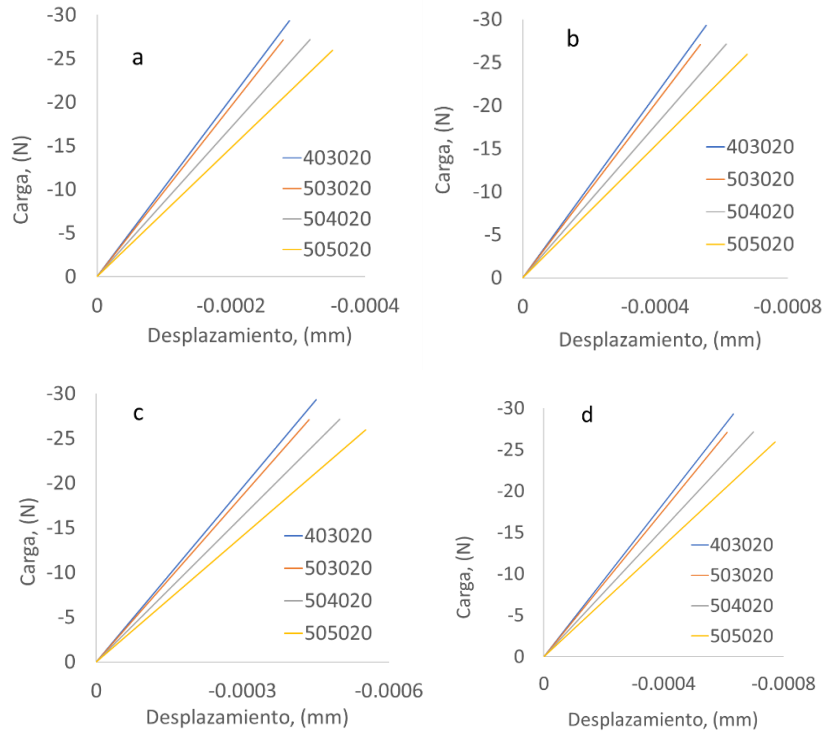


Figura 49: Curvas de carga-desplazamiento obtenidas por MEF para cada aleación y sus respectivos modelos de porosidad. (a) Ti c.p., (b) Ti-33Nb-4Mn, (c) Ti-30nb-13Ta y (d) Ti-13Ta-6Sn.

Análisis del efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base titanio con estructura FCC mediante elementos finitos

Tabla 18: Módulo de Young obtenido por MEF para cada aleación y modelos de porosidad según densidad relativa

Notación	Módulo de Young MEF, (GPa)				densidad relativa
	Ti c.p.	Ti33Nb4Mn	Ti30Nb13Ta	Ti13Ta6Sn	
bulk	110.0	70.0	57.0	50.0	1.0
403020	83.4	53.1	43.2	37.9	0.70
503020	80.8	51.5	41.9	36.7	0.67
504020	74.3	47.3	38.5	33.8	0.63
505020	67.6	43.0	35.0	30.7	0.60

Tabla 19: Módulo de Young corregido para cada aleación y modelos de porosidad según densidad relativa.

Notación	Módulo de Young Corregido (GPa)				densidad relativa
	Ti c.p.	Ti33Nb4Mn	Ti30Nb13Ta	Ti13Ta6Sn	
bulk	110.0	70.0	57.0	50.0	1.0
403020	56.3	35.9	29.2	25.6	0.70
503020	51.9	33.0	26.9	23.6	0.67
504020	45.1	28.7	23.4	20.5	0.63
505020	38.5	24.5	20.0	17.5	0.60

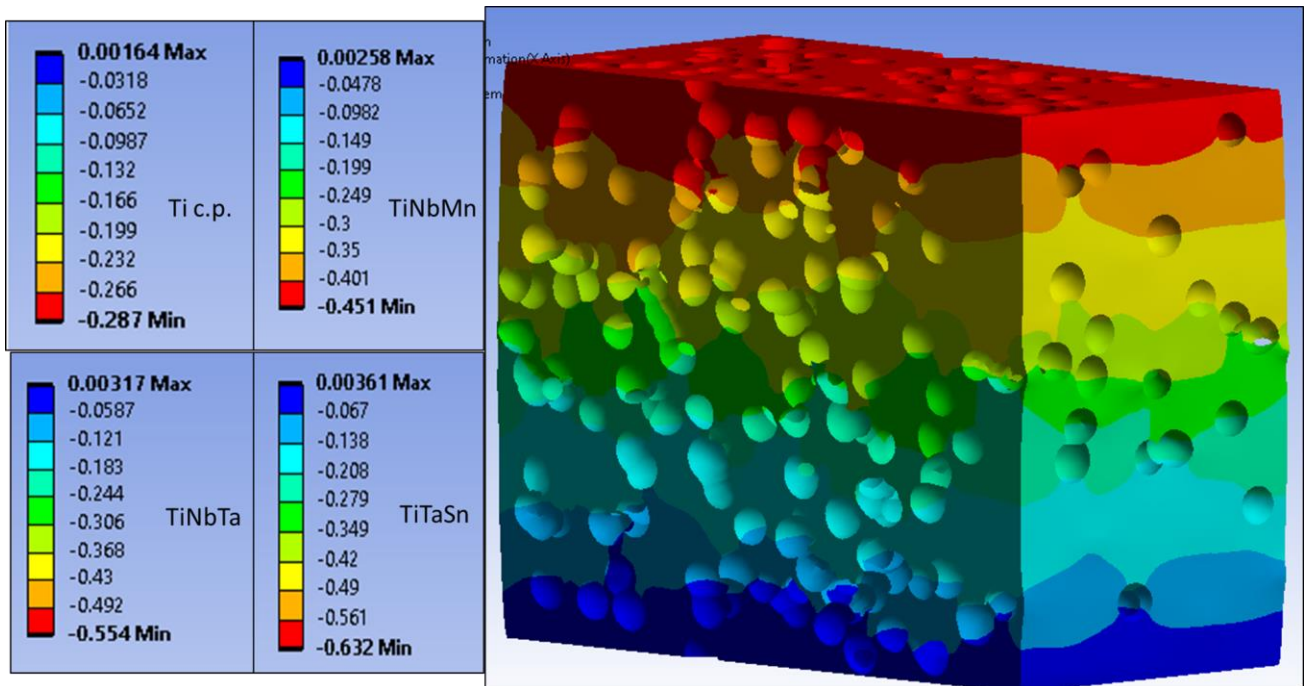


Figura 50: Simulación del desplazamiento percibido para las 4 aleaciones con modelo 403020.

Análisis del efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base titanio con estructura FCC mediante elementos finitos

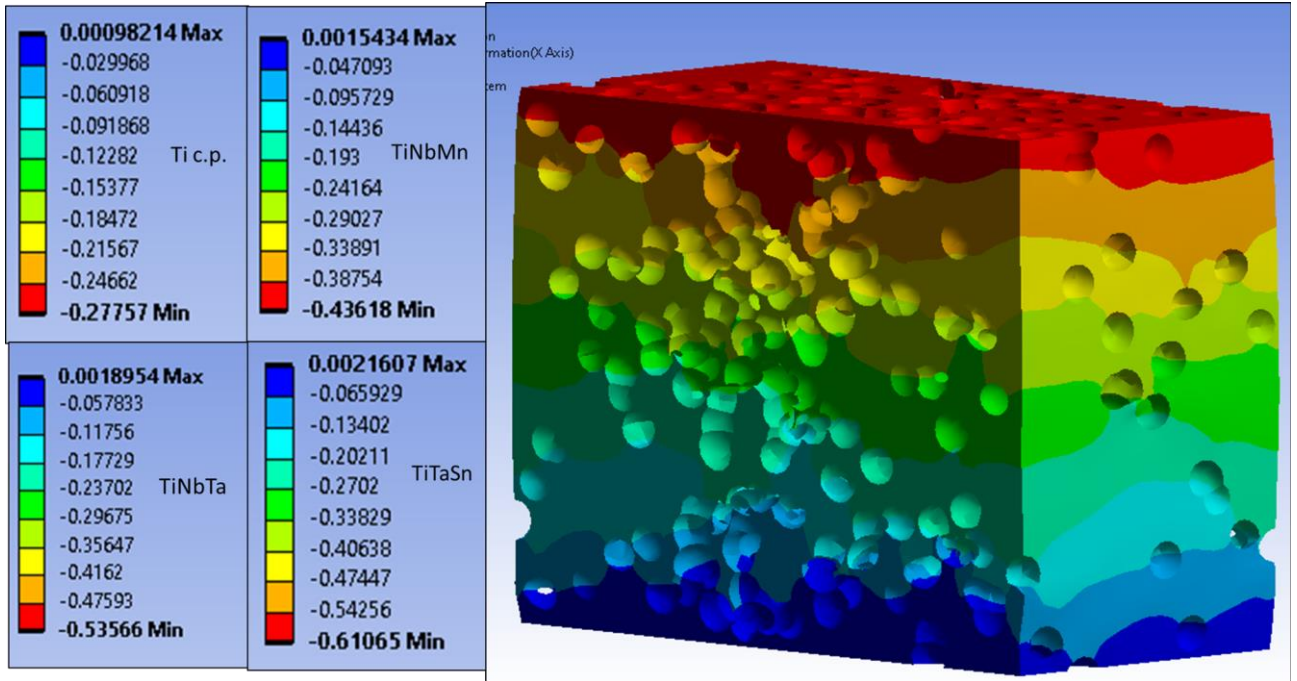


Figura 51: Simulación del desplazamiento percibido para las 4 aleaciones con modelo 503020.

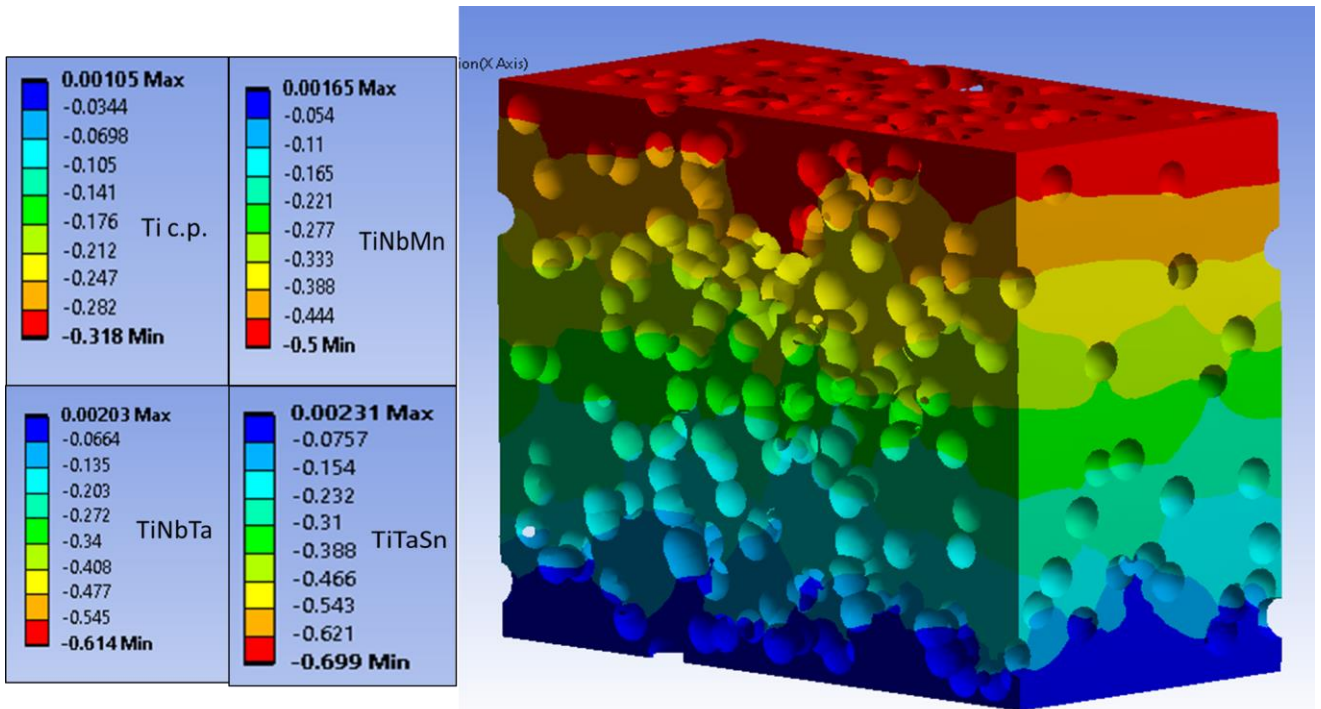


Figura 52: Simulación del desplazamiento percibido para las 4 aleaciones con modelo 504020.

Análisis del efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base titanio con estructura FCC mediante elementos finitos

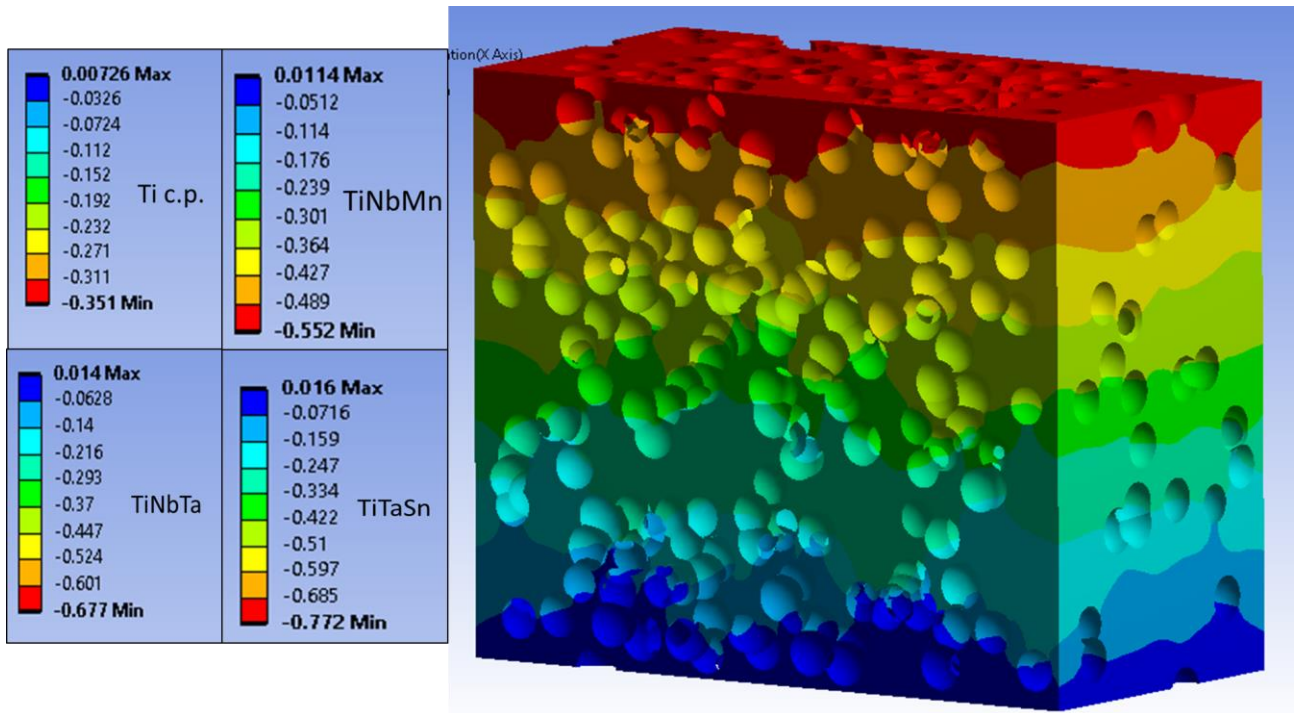


Figura 53: Simulación del desplazamiento percibido para las 4 aleaciones con modelo 505020.

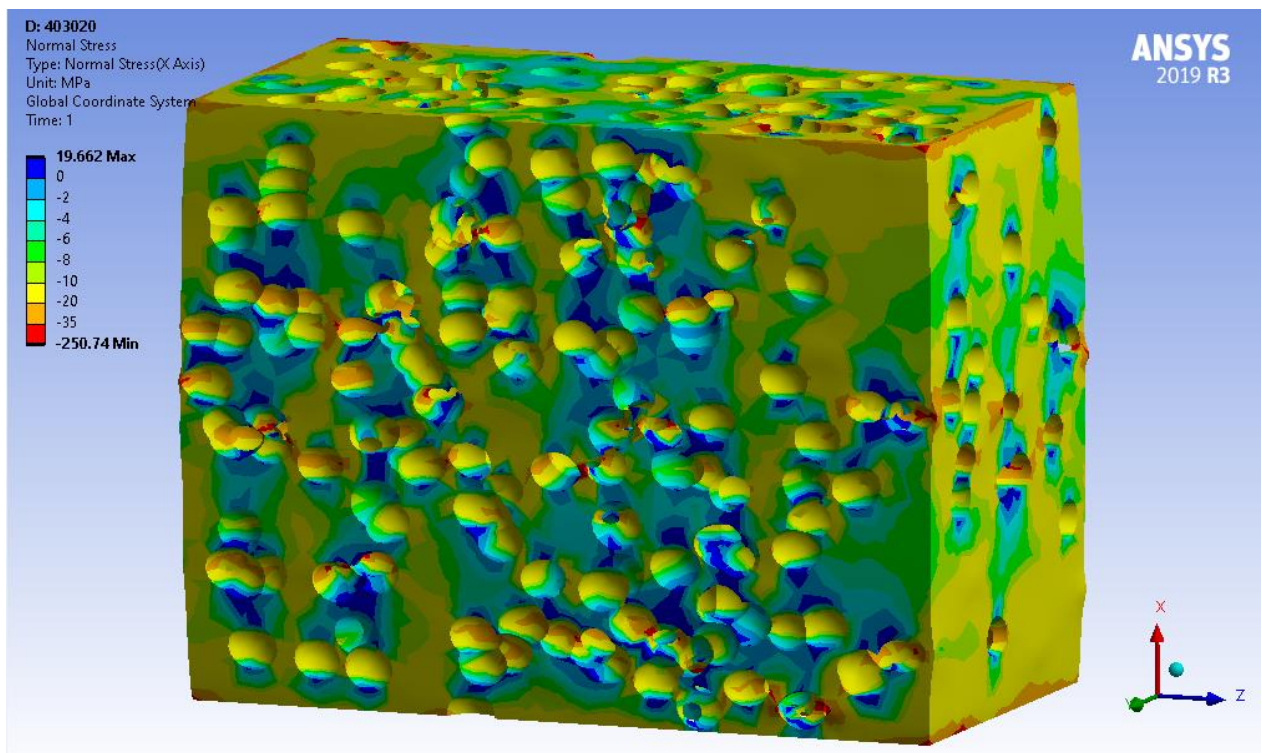


Figura 54: Simulación de esfuerzo normal solicitado para modelo 403020, similar en todas las aleaciones.

Análisis del efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base titanio con estructura FCC mediante elementos finitos

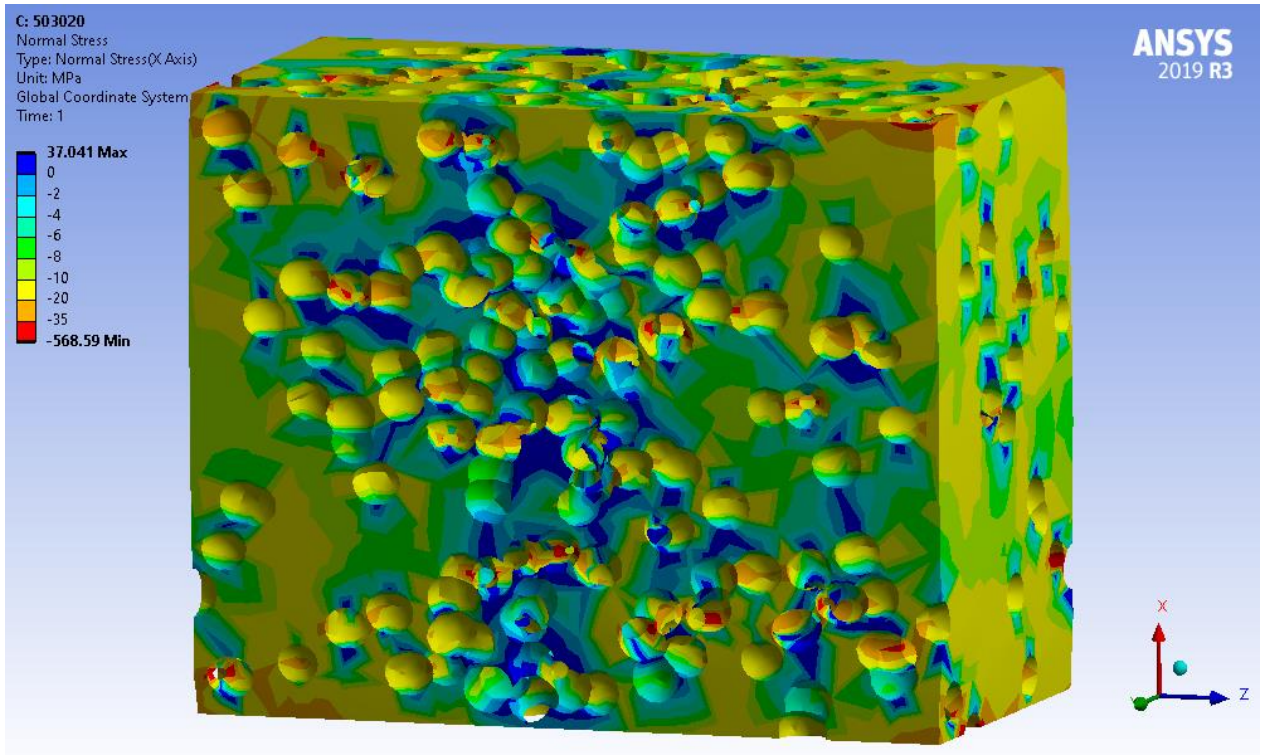


Figura 55: Simulación de esfuerzo normal solicitado para modelo 503020, similar en todas las aleaciones.

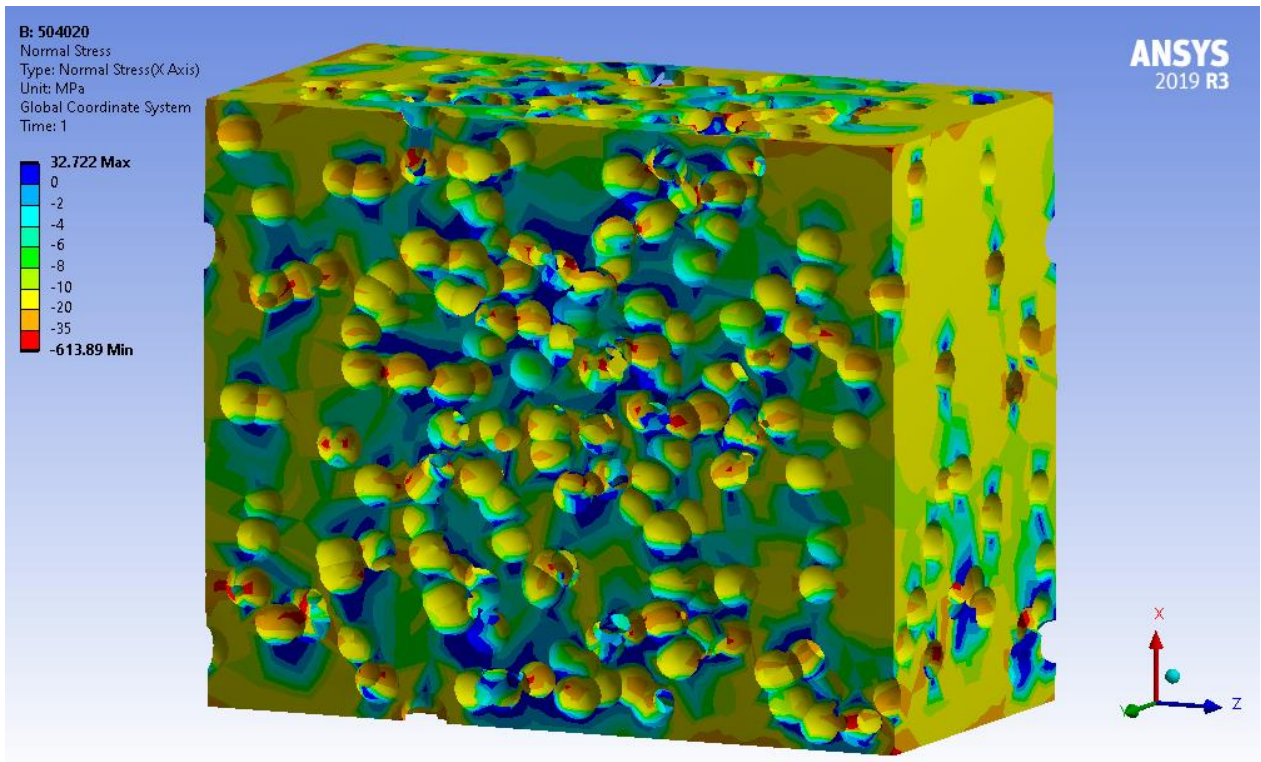


Figura 56: Simulación de esfuerzo normal solicitado para modelo 504020, similar en todas las aleaciones.

Análisis del efecto de la porosidad gradiente sobre el módulo elástico en espumas de aleaciones base titanio con estructura FCC mediante elementos finitos

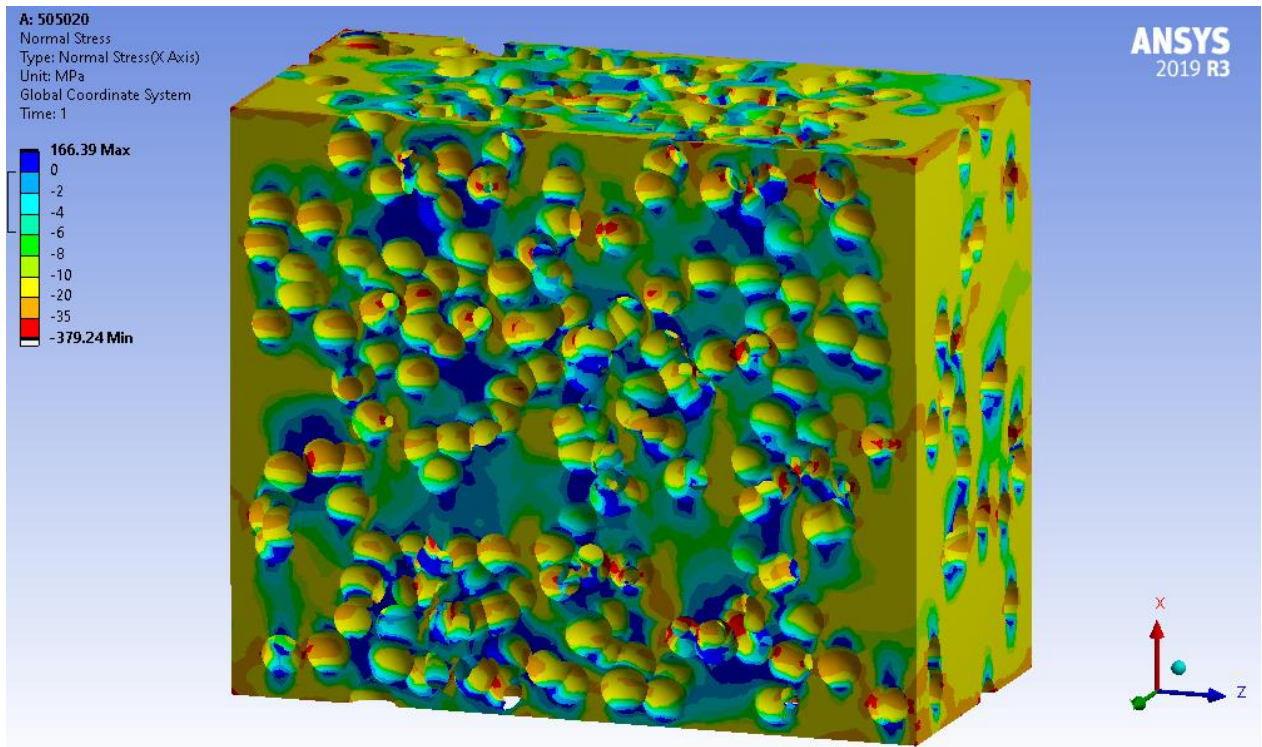


Figura 57: Simulación de esfuerzo normal solicitado para modelo 505020, similar en todas las aleaciones.