

**COMPARACIÓN DEL COMPORTAMIENTO MECÁNICO POR
ANÁLISIS DE ELEMENTOS FINITOS USANDO MALLADO
BASADO EN LA ESTRUCTURA MOLECULAR Y MALLADO
CONVENCIONAL**

(Autor)
ADRIAN JUSETTE GIL ROJANO

**PROGRAMA DE INGENIERIA MECANICA
DEPARTAMENTO DE INGENIERIA MECANICA, MECATRONICA
E INDUSTRIAL
FACULTAD DE INGENIERIAS Y ARQUITECTURAS**



**UNIVERSIDAD DE PAMPLONA
PAMPLONA, junio 6 de 2020**

**COMPARACIÓN DEL COMPORTAMIENTO MECÁNICO POR
ANÁLISIS DE ELEMENTOS FINITOS USANDO MALLADO
BASADO EN LA ESTRUCTURA MOLECULAR Y MALLADO
CONVENCIONAL**

(Autor) ADRIAN JUSETTE GIL ROJANO

**Trabajo de grado presentado como requisito para optar al título de
INGENIERO MECÁNICO**

**Director: EDISON MARTINEZ OVIEDO
INGENIERO MECANICO
edisonmartinez@unipamplona.edu.co**

**Codirector: BLADIMIR AZDRUBAL RAMON
INGENIERO METALURGICO
Baramon12@gmail.com**

**PROGRAMA DE INGENIERIA MECANICA
DEPARTAMENTO DE INGENIERIA MECANICA, MECATRONICA
E INDUSTRIAL
FACULTAD DE INGENIERIAS Y ARQUITECTURAS
UNIVERSIDAD DE PAMPLONA
Pamplona, junio 6 de 2020**

Dedicatoria

El presente trabajo investigativo lo dedicamos principalmente a Dios, por ser el inspirador y darnos fuerza para continuar en este proceso de obtener uno de los anhelos más deseados.

A nuestros padres, por su amor, trabajo y sacrificio en todos estos años, gracias a ustedes hemos logrado llegar hasta aquí y convertirnos en lo que somos. Ha sido el orgullo y el privilegio de ser sus hijos, son los mejores padres.

A nuestros hermanos por estar siempre presentes, acompañándonos y por el apoyo moral, que nos brindaron a lo largo de esta etapa de nuestras vidas.

A todas las personas que nos han apoyado y han hecho que el trabajo se realice con éxito en especial a aquellos que nos abrieron las puertas y compartieron sus conocimientos.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos a Dios por bendecirnos la vida, por guiarnos a lo largo de nuestra existencia, ser el apoyo y fortaleza en aquellos momentos de dificultad y de debilidad.

Gracias a nuestros padres por ser los principales promotores de nuestros sueños, por confiar y creer en nuestras expectativas, por los consejos, valores y principios que nos han inculcado, por la motivación que nos han brindado, por extender su mano cada vez que caemos y sentimos que no podemos más y ser ese apoyo que necesitamos para nuevamente ponernos en pie y recuperar las fuerzas perdidas.

Agradezco a nuestros docentes de la universidad de pamplona, por haber compartido sus conocimientos a lo largo de la preparación de nuestra profesión, de manera especial, al ingeniero Edison Martínez Oviedo tutor de nuestro proyecto y al ingeniero Bladimir Azdrubal Ramon quienes han guiado con su paciencia, y su rectitud como docentes, y a la ciudad de pamplona y a su universidad por abrir sus puertas y recibirme con los brazos abiertos permitiéndome adquirir estudio, vivienda y experiencias de vida que han contribuido en una formación para el resto de la vida.

TABLA DE CONTENIDO

1. INTRODUCCION.....	27
2. JUSTIFICACION	28
3. OBJETIVOS	29
3.1 Objetivo general.....	29
3.2 Objetivos específicos	29
4. ESTADO ACTUAL.....	30
4.1 Barras y armaduras.....	31
4.2 Vigas y marcos	35
4.3 Elementos tetraédricos, hexaédricos y pentaédricos.....	38
4.4 Modelo molecular elástico por el MEF	43
4.4.1 Método de mecánica molecular.....	46
Tensión	47
Flexión.....	48
Torsión	48
Interacción electrostática.....	49
Interacciones de van der Waals	50
4.4.2 Un modelo molecular elástico para la inelasticidad de caucho (an elastic molecular model for rubber inelasticity)	51
5. METODOLOGIA EXPERIMENTAL	54
5.1 ecuaciones electricas y variables (Dependientes e independientes)	54
5.2 construccion del elemento finito de un dipolo electrico	55
5.2.1 Coordenadas y funciones de forma.....	57
5.2.2 Enfoque de energía potencial.....	61
5.3 enlaces quimicos	63
5.3.1 Enlace iónico	63
5.3.2 Enlace covalente	65
Orbitales atómicos.....	66
Traslape de orbitales.....	67
Analogía del enlace covalente como sistema de resortes.....	68
Constante de rigidez del enlace covalente.....	71
5.4 selección del material y Geometría molecular	73
5.4.1 Selección.....	74

5.4.2	Polietileno (PE).....	74
	Polimerización y características.	74
5.4.3	Modelo de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia..	76
5.4.4	Constante de rigidez de la repulsión entre orbitales.....	78
5.5	Software desarrollado para la resolución del problema	81
5.5.1	función de mallado de cadena.....	81
	Multiplicación de cadenas	83
5.5.2	Función módulo de rigidez	84
5.5.3	Solver MEF.....	85
5.5.4	Desarrollo de la simulación en el software	85
5.6	Simulación en Ansys.....	86
5.6.1	Pre-proceso.....	86
	Modelado 3D de la probeta	86
	Configuración del material en el software de simulación.....	87
	Preparación de la malla.....	87
	Puntos de aplicación de la fuerza y puntos fijos.....	88
	Configuración de análisis	89
6.	RESULTADOS	90
6.1	Simulación de elementos finitos con mallado basado en la estructura molecular	90
6.1.1	Comparación de las propiedades mecánicas de la simulación por mallado molecular con las propiedades reales del material.....	93
6.2	Simulación en ANSYS con mallado convencional	94
6.2.1	Comparación de las propiedades mecánicas de la simulación en ANSYS con las propiedades reales del material.	96
7.	CONCLUSIONES.....	98
8.	RECOMENDACIONES Y TRABAJOS FUTUROS	99
9.	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	100

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Distribución de los pares electrónicos alrededor de un átomo central (A) en una molécula y geometría de algunas moléculas y iones sencillos en los que el átomo central no tiene pares libres. Tomada de Química Raymond Chang y Goldsby y de Química la ciencia central Brawn y LeMay (Brown et al., 2009).	77
Tabla 2. numeración del elemento coordinado en un espacio tridimensional.	81
Tabla 3. matriz de conectividad y matriz de propiedades compiladas en una sola tabla	82

LISTA DE FIGURAS

Ilustración 1. representación de elemento barra con sus respectivas variables. Lecture notes: finite element method, yijun liu(Liu, 2003).....	31
Ilustración 2. Armadura compuesta de barras con aplicación de cargas en cada uno de sus nodos TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D., P.E en su libro <i>introducción al estudio del elemento finito en ingeniería</i> (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999).....	32
Ilustración 3. a) barra suspendida en un espacio coordinado en tres dimensiones, b) formulación de elemento deformado TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D., P.E en su libro <i>introducción al estudio del elemento finito en ingeniería</i> (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D.	34
Ilustración 4. representación de elemento viga con sus respectivas variables. Lecture notes: finite element method, yijun liu(Liu, 2003)	35
Ilustración 5. marco con aplicación de cargas distribuida transversales y momentos en cada uno de sus nodos TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D., P.E en su libro <i>introducción al estudio del elemento finito en ingeniería</i> (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999).....	37
Ilustración 6. al lado izquierdo representación de elementos tetraedro, hexaedro y pentaedro, de lado diestro geometrías simuladas con estos elementos. Lecture notes: finite element method, yijun liu(Liu, 2003).....	38
Ilustración 7. Elemento tetraedro con tres grados de libertad en cada uno de sus nodos. TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D., P.E en su libro <i>introducción al estudio del elemento finito en ingeniería</i> (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999).....	39
Ilustración 8. Cubo dividido en tetraedros teniendo en sus aristas nodos con su correspondiente numero asignado en la esquina izquierda superior, debajo de este su respectiva matriz de conectividad, y a lado derecho el explosionado de los tetraedros que conforman el cubo. TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D., P.E en su libro <i>introducción al estudio del elemento finito en ingeniería</i> (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999).....	41
Ilustración 9. Hexaedro con medidas cualesquiera en sus aristas como ejemplificación del elemento a lado izquierdo, y hexaedro mapeado con lados base de dos unidades en un sistema coordinado ξ , η , y ζ , esta representación es usada para definir un sistema coordinado intrínseco base para la forma del elemento, en este se interpolaran las soluciones que serán obtenidas por medio de operaciones algebraica con la matriz de rigidez. TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D., P.E en su libro <i>introducción al estudio del elemento finito en ingeniería</i> (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999).....	42
Ilustración 10. Enlaces en tensión, flexión y torsión. Obtenido de Atomistic finite element model for axial buckling of single-walled carbon nanotubes de los autores R. Ansarin, S. Rouhi(Rouhi & Ansari, 2012)	47
Ilustración 11. Enlace en tensión. Obtenido de Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single- layered graphene sheets.(Rouhi & Ansari, 2012)..	47

Ilustración 12. Barra en tensión. Obtenido de Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets. (Rouhi & Ansari,2012)	48
Ilustración 13. enlaces en flexión. Obtenido de Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets. (Rouhi & Ansari, 2012).....	48
Ilustración 14. Barra en flexión. Obtenido de Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets. (Rouhi & Ansari, 2012)	48
Ilustración 15. Enlaces en torsión. Obtenido de Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets. (Rouhi & Ansari, 2012) ..	49
Ilustración 16. Barra en torsión. Obtenido de Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets. (Rouhi & Ansari, 2012)	49
Ilustración 17. Repulsión de átomos en extremos de enlaces. Obtenido de Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets. (Rouhi & Ansari, 2012)	50
Ilustración 18. Bucles de histéresis para cauchos sometidos a esfuerzos cíclicos de forma experimental. Obtenido de Lutz Nasdala, Andreas Kempe y Raimund Rolfes, en su artículo An elastic molecular model for rubber inelasticity(Nasdala et al., 2015)	51
Ilustración 19. Componentes modelados del caucho. Obtenido de Lutz Nasdala, Andreas Kempe y Raimund Rolfes, en su artículo An elastic molecular model for rubber inelasticity(Nasdala et al., 2015)	52
Ilustración 20. Curvas de esfuerzo deformación para un modelo simulado obteniendo mayor precisión a medida que es aumentado el número de átomos, a medida que estos aumentan se observa que las curvas son más próximas a la gráfica de la ilustración 18. Obtenido de Lutz Nasdala, Andreas Kempe y Raimund Rolfes, en su artículo An elastic molecular model for rubber inelasticity(Nasdala et al., 2015)	52
Ilustración 21. Curvas de esfuerzo deformación para un modelo simulado obteniendo mayor precisión a medida que es aumentado la velocidad de aumento de carga, a medida que estos aumenta se observa que la curva es más próxima a la gráfica de la ilustración 18. Obtenido de Lutz Nasdala, Andreas Kempe y Raimund Rolfes, en su artículo An elastic molecular model for rubber inelasticity(Nasdala et al., 2015).	53
Ilustración 22.interacción entre cargas eléctricas de signo positivo en repulsión. Autor	56
Ilustración 23.interaccion entre cargas eléctricas de signo negativo, en repulsión. Autor	56
Ilustración 24. interacción entre dos cargas eléctricas de signos opuestos en atracción. Autor	56
Ilustración 25. semejanza de la interacción de dos cargas eléctricas positivas con el comportamiento de un resorte en compresión. Autor	56
Ilustración 26. semejanza de la interacción de dos cargas eléctricas negativas con el comportamiento de un resorte en compresión. Autor	56
Ilustración 27. semejanza de la interacción de dos cargas eléctricas de signos opuestos con el comportamiento de un resorte en tensión. Autor	56
Ilustración 28. modelación del elemento finito de un dipolo eléctrico, conformándolo por medio de dos resortes y tres nodos para un elemento.	57
Ilustración 29.Desplazamiento interno dentro del elemento.	58
Ilustración 30. Función de forma N1. Autor realizado en DESMOS	58
Ilustración 31.Función de forma N2. Autor realizado en DESMOS	58
Ilustración 32.Función de forma N3. Autor realizado en DESMOS	59
Ilustración 33.interpolacion utilizando las funciones inversas. Autor realizado en DESMOS	59

Ilustración 34. Diagrama de energía potencial de morse. Tomado de Química la ciencia centra Brawn LeMay (Brown et al., 2009).....	64
Ilustración 35. representacion del enlace iónico como resorte. Autor.....	64
Ilustración 36. El enlace covalente en el H ₂ . Atracciones y repulsiones entre electrones y núcleos en la molécula de hidrógeno. Obtenida del libro Química la ciencia centra Brawn LeMay (Brown et al., 2009).....	66
Ilustración 37. representación de los orbitales s como región esférica y p como un conjunto de regiones esfericas chatas para cada eje. tomado de http://www.quimitube.com/videos/orbitales-atomicos-y-numeros-cuanticos	67
Ilustración 38. enlaces covalentes en H ₂ , HCl y Cl ₂ como resultado del traslape de orbitales atómicos. tomado de del libro Química la ciencia centra Brawn LeMay (Chang & Goldsby, 2013).	67
Ilustración 39. elementos en enlace covalente. Autor	68
Ilustración 40. grafica de energía total contra delta de r o posición del electrón. Autor realizado en DESMOS	69
Ilustración 41. entalpia de enlace CH. Autor realizado en DESMOS	70
Ilustración 42. grafica del polinomio de grado 5 con raíz en Δr 1, 0 . Autor realizado en DESMOS	71
Ilustración 43. enlace covalente como sistema de resortes. Autor	72
Ilustración 44. Transformación delta estrella de los resortes en formación delta k ₄ , k ₅ , y k ₆ , a una mas simple. Autor	72
Ilustración 45. Molécula de etileno estructura de Lewis, monómero simple de C ₂ H ₄ con enlace doble ente carbono y simples de carbonos e hidrógenos. Autor.....	74
Ilustración 46. rompimiento del enlace covalente doble lo cual permite a los carbonos poseer un electrón libre. Obtenida de química chang y Goldsby (Chang & Goldsby, 2013) y química la ciencia central de brawn y LeMay (Brown et al., 2009).....	75
Ilustración 47. radical reaccionando con molécula de etileno, y provocando la aparición de otro radical, este proceso se repite. obtenido de Química Raymond chan y goldsby (Chang & Goldsby, 2013).....	75
Ilustración 48. Moleculas de etileno radical reactivo ataca una molécula de etileno uniéndose y se genera un nueva molécula de mayor peso. Obtenido de química la ciencia central de brawn y LeMay (Brown et al., 2009).....	75
Ilustración 49. El segmento que aparece aquí consiste en 28 átomos de carbono. obtenido de quimica la ciencia central Brawn y LeMay (Brown et al., 2009).....	76
Ilustración 50. regiones cristalinas o de ordenamiento y alineación de las cadenas dentro de un polímero, marcadas con un circulo. obtenido de quimica la ciencia central Brawn y LeMay (Brown et al., 2009).	76
Ilustración 51. Geometría tetraédrica de una molecula, en donde la lineas verdes representan la union por enlace covalente y las lineas naranjas las repulciones de los los electrones en los orbitales. Autor realizada en GeoGebra.....	78
Ilustración 52. Triangulo interno de molécula tetraédrica formado por el átomo central y dos átomos de las aristas. Autor	79
Ilustración 53. Triangulo interno O ₁ O ₂ A. Autor	79
Ilustración 54. Triangulo interno O ₁ CA. Autor	80
Ilustración 55. Triangulo interno BO ₂ A. Autor	80

Ilustración 56. Triangulo interno BCA. Autor.....	80
Ilustración 57. Modelo en cadena de la molécula de polietileno. Autor	83
Ilustración 58. Cadena simple de polietileno a la izquierda, en el centro la cadena ha sido reproducida tres veces, en la imagen de la derecha, las cadenas ya reproducida a lo largo del eje X, ahora son replicadas cuatro veces en dirección del eje Y. Autor.....	84
Ilustración 59. Molécula de polietileno insertada dentro de una caja. Autor desarrollado en Geogebra 3D.....	84
Ilustración 60. Nodos superiores en donde es aplicada la fuerza, y nodo base que se mantiene fijo. Autor.....	86
Ilustración 61. Probeta tipo I de la norma ASTM a638 con sus medidas en milímetros. Autor, modelado en SolidEdge ST10.....	87
Ilustración 62. Propiedades definidas para ANSYS de acuerdo a los datos arrojados por las fichas técnicas consultadas para el HDPE. Autor, obtenida de ANSYS.	87
Ilustración 63. Configuración propuesta para la malla de elementos finitos en el mallador de ANSYS. Autor, obtenido de ANSYS.	88
Ilustración 64. A la izquierda con la etiqueta de color rojo los extremos en los que es aplicada la fuerza, a la derecha en azul los lados que se mantienen fijos. Autor, obtenido de ANSYS.	89
Ilustración 65. Configuración que le fue asignada a los puntos de aplicación de la fuerza en ANSYS. Autor, obtenido de ANSYS.	89
Ilustración 66. Configuración asignada al análisis en ANSYS. Autor, obtenido de ANSYS. .	89
Ilustración 67. Gráfico de la tensión verdadera contra la tensión verdadera para la deformación de HDPE a 35°C. obtenida de A simultaneous SAXS/WAXS and stress-strain study of polyethylene deformation at high strain rates de los autores D. J. Hughesa, A. Mahendrasingama, W. B. Oatwaya, E. L. Heeleya, C. Martina and W. Fullera (Hughes et al., 1997)(Lu et al., 2001).	90
Ilustración 68. Cadenas de polietileno en deformación sometidas a tensión. Autor.	91
Ilustración 69. Diagrama de esfuerzo contra deformación unitaria para cadenas moleculares de polietileno de alta densidad. Autor obtenido de ANSYS	92
Ilustración 70. Diagrama de esfuerzo contra deformación total. Autor obtenido de ANSYS..	94
Ilustración 71. Diagrama de esfuerzo contra tiempo. Autor obtenido de ANSYS.....	95
Ilustración 72. Diagrama de deformación total contra tiempo. Autor obtenido de ANSYS. ...	95
Ilustración 73. Diagrama de esfuerzo contra deformación unitaria. Autor obtenido de ANSYS	96

COMPARISON OF MECHANICAL BEHAVIOR FOR FINITE ELEMENT ANALYSIS USING MESHING BASED ON MOLECULAR STRUCTURE AND CONVENTIONAL MESHING

COMPARACIÓN DEL COMPORTAMIENTO MECÁNICO POR ANÁLISIS DE ELEMENTOS FINITOS USANDO MALLADO BASADO EN LA ESTRUCTURA MOLECULAR Y MALLADO CONVENCIONAL

Adrián Jusette Gil Rojano¹, Edison Martínez Oviedo², Bladimir Azdrubal Ramon³.

^{a,b}*Pamplona University, Km 1 Via B/manga, Pamplona, Colombia*

^b*Rovira i Virgili University, Av. Paissos Catalans 26, 43007, Tarragona España*

Resumen

el modelamiento de los enlaces moleculares a través del fenómeno que los rige, puedo ayudar al modelamiento de malla-do moleculares estándar. analizado a través de la ley de coulomb, se pueden representar como barras largas que se ex-tienden desde el centro de un átomo hasta el otro, pudiendo ser estos analizados por el método de los elementos finitos como barras, vigas o resortes, con átomos a cada extremo, de esta manera podemos entender las estructuras moleculares como arreglos estructurales. Para comparar el comportamiento mecánico por análisis de elementos finitos usando un malla-do basado en la estructura molecular, primeramente, se debe obtener el elemento finito de las distintas interacciones electromagnéticas del desarrollo matemático y numérico de las ecuaciones diferenciales que gobiernan el fenómeno, entre estas se encuentran las leyes de maxwell y así construir un elemento para cada enlace químico. Debido a la complejidad de las estructuras moleculares de muchos polímeros, se opta por seleccionar un material de esta familia con estructura molecular simple, de esta manera reducir la complejidad del estudio. Lo anterior permitirá desarrollar una simulación utilizando un mallado basado en la estructura molecular de la probeta del material seleccionado, para tener un punto de comparación se desarrolla una simulación utilizando un mallado convencional de la probeta del material seleccionado. Los resulta-dos obtenidos de las simulaciones permitirán comparar e indagar los resultados obtenidos con los datos de la ficha técnica del material seleccionado, y su diagrama de esfuerzo-deformación, verificando así la eficacia de la desratización funda-mentada en la estructura molecular del material.

Palabras clave: Mallado, Estructura, Molecular, HDPE, MEF.

Abstract

modeling molecular bonds through the phenomenon that governs them, I can help modeling standard molecular meshing. analyzed through coulomb's law, they can be represented as long bars that extend from the center of one atom to the other, and can be analyzed by the finite element method such as bars, beams or springs, with atoms at each extreme, in this way we can understand molecules as structural arrangements. To compare the mechanical behavior by finite element analysis using a mesh based on molecular structure, first, the finite element of the different electromagnetic interactions of the mathematical and numerical development of the differential equations that govern the phenomenon must be obtained, among these are Maxwell's laws and thus construct a finite element for each chemical bond. Due to the complexity of the molecular structures of many polymers, it is decided to select a material from this family with a simple molecular structure, thus reducing the complexity of the study. This will allow a simulation to be developed using a mesh based on the molecular structure of the specimen of the selected material, to have a point of comparison a simulation is developed using a conventional mesh of the specimen of the selected material. The results obtained from the simulations will allow comparing and investigating the results obtained with the data from the technical data sheet of the selected material, and its stress-deformation diagram, thus verifying the effectiveness of the discretization based on the molecular structure of the material.

Keywords: Mesh, structure, molecular, HDPE, MEF.

1. Introducción

La ley de Hooke propuesta por el físico inglés Robert Hooke, fue el punto de partida para el estudio de las propiedades mecánicas de los materiales, del módulo de rigidez k de su ley se derivan muchas otras constantes, como el módulo de Young E , el módulo de cizalladura G , coeficiente Poisson ν , módulo de compresibilidad K , entre otras.

Todas las anteriores constantes se relacionan con las propiedades mecánicas de los enlaces químicos presentes en los materiales de los que están compuestos los cuerpos. La mecánica de materiales a partir del siglo XX y muchos otros campos de la física han sido estudiados por procedimientos alternativos a los métodos analíticos infinitesimales, dichas técnicas han ayudado a que distintos problemas complejos de resolver puedan haber sido resueltos de formas muy aproximadas a la solución analítica, estos pueden ser conocidos como métodos de discretización, por ejemplo, el método de los elementos finitos desarrollado desde los años 40, ha sido uno de los más utilizados por sus cualidades de convergencia y su relativa facilidad de comprensión, consiste en la discretización de ecuaciones diferenciales continuas o sistemas continuos, descomponiéndolos en elementos tales como barras, vigas, o cuerpos geométricos (las cuales no serán tomadas en cuenta), unidimensionales, bidimensionales y tridimensionales, cada elemento utilizado según la necesidad. Para la mecánica de materiales, los elementos barran son elementos que soportan solo cargas axiales, y los elementos viga cargas axiales, flexión y torsión. Los enlaces moleculares analizados a través de la ley de coulomb, pueden ser representados como barras largas que se extienden desde el centro de un átomo hasta el otro, pudiendo ser estos representados por el método de los elementos finitos como barras o vigas, con átomos a cada extremo, de esta manera podemos entender las estructuras moleculares como arreglos estructurales.

En la actualidad, el método de elementos finitos ha sido aplicado a modelos moleculares con el objetivo de simular su comportamiento. En los trabajos como An elastic molecular model for rubber inelasticity de los autores Lutz Nasdala, Andreas Kempe y Raimund Rolfes (Nasdala et al., 2015), en donde se objeta la simulación del comportamiento de polímeros. También en On the molecular mechanics of single layer graphene sheets de los autores S.N. Korobeynikova, V.V. Alyokhina y A.V. Babichevc (Korobeynikov et al., 2018), en donde se trabaja en la simulación molecular del grafeno. se utiliza el método de mecánica molecular para el modelamiento del elemento finito de los enlaces moleculares. Es aplicado el método de mecánica molecular para el modelamiento del elemento finito de los enlaces moleculares, de igual forma en los trabajos de Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets de los autores S. Rouhi, y R. Ansari (Rouhi & Ansari, 2012), también en Modal analysis of carbon nanotubes and nanocones using FEM de los autores J.H. Lee, y B.S. Lee (Lee & Lee, 2012), y en Nonlinear analysis of coiled carbon nanotubes using the molecular dynamics finite element method de los autores Seyed Hadi Ghaderi, y Ehsan Hajiesmaili (Ghaderi & Hajiesmaili, 2013) se modela molécula a molécula un resorte de nano tubos de carbono y se evalúa su comportamiento, en todos ejemplos se ha utilizado el modelo de mecánica molecular para el modelamiento de moléculas, cada uno con resultados satisfactorios.

En Homogenized Elastic Properties of Graphene for Small Deformations de los autores Eduard Mareníć, Adnan Ibrahimbegovic, Jurica Sori y Pierre-Alain Guidault (Mareníć et al., 2013), proporciona la cuantificación de las propiedades mecánicas elásticas lineales y no lineales del grafeno sobre la base

de la combinación juiciosa de resultados de simulación de mecánica molecular y métodos de homogeneización. En otro trabajo realizado por Filipe C. Rodrigues, Nuno Silvestre, y Augusto M. Deus, presentado en su artículo denominado nonlinear mechanical behaviour of γ -graphyne through an atomistic finite element model (Rodrigues et al., 2017), se presenta un modelo de elementos finitos no lineal para la simulación del comportamiento mecánico en el plano de c -graphyne. Se simulan diferentes tipos de enlaces (Single C-C, Aromatic C=C, Triple C≡C) mediante resortes no lineales, que tienen en cuenta con precisión el diferente comportamiento de las fuerzas interatómicas en tensión y compresión a 0 K de temperatura.

En el trabajo A modified molecular structural mechanics model for the buckling analysis of single layer graphene sheet, de los investigadores R.D. Firouz-Abadi, H. Moshrefzadeh-Sany, H. Mohammadkhani, y M. Sarmadi (Firouz-Abadi et al., 2016), se modifica el modelo clásico de mecánica estructural molecular del grafeno para mejorar su precisión para el análisis de deformaciones transversales. Con este objetivo, se modela una hoja de grafeno de muestra bajo una presión uniforme mediante métodos tanto de dinámica molecular como de mecánica estructural molecular. Las propiedades de sección del elemento de viga, mediante el cual se modelan los enlaces covalentes, se modifican de modo que se minimiza la diferencia entre los resultados del modelo de mecánica molecular y la simulación de dinámica molecular. Utilizando el modelo modificado, se investiga el comportamiento de pandeo del grafeno bajo una presión de borde uniforme sujeto a diferentes condiciones de contorno para las quiralidades tanto en zigzag como en sillón.

Este artículo nombrado Elastic properties of coiled carbon nanotube reinforced nanocomposite: a finite element study, presentado por Navid Khani, Mehmet Yildiz, Bahattin Koc (Khani et al., 2016), presenta el modelado y análisis de nanocompuestos poliméricos reforzados con nanotubos de carbono enrollados (CCNT). Se proponen un nuevo método algorítmico de generación de elementos de volumen representativo (RVE) y un análisis de elementos finitos basado en RVE para predecir las propiedades elásticas de los nanocompuestos CCNT. Se estudian las propiedades elásticas de los nanocompuestos de polímero CCNT con respecto a su interfase, fracción de volumen, orientación, número de espiras y variaciones geométricas como el diámetro del tubo, el diámetro de la bobina y el ángulo de la hélice utilizando el análisis de elementos finitos propuesto. En un estudio denominado Anisotropic elastic modulus, high Poisson's ratio and negative thermal expansion of graphynes and graphdiynes, realizado por Sergio A. Hernandez, y Alexandre F. Fonseca (Hernandez & Fonseca, 2017), mediante simulaciones clásicas de dinámica molecular tomando como base la mecánica molecular, se calcula el módulo de Young, la relación de Poisson y el coeficiente de expansión térmica lineal (TEC) de los siete tipos de Graphyne (GY) propuestos originalmente y los correspondientes graphydine (GDY). Se investiga por primera vez la dependencia de estas propiedades con la densidad de la estructura. Se encontró un aumento cuadrático de la TEC de las estructuras GY y GDY con la densidad. Se demostró que el módulo elástico de los GY y GDY es más sensible a su densidad que los materiales porosos en general.

Efocando el estudio a otro material basado en el fósforo, en el estudio On the stability characteristics of zigzag phosphorene nanotubes: a finite element investigation, de los autores A. Shahnazari, R. Ansari y S. Rouhi (Shahnazari et al., 2017), Este artículo tiene como objetivo investigar las propiedades mecánicas de los nanotubos de fósforo en zigzag bajo carga de compresión. Para ello se utiliza un modelo de elementos finitos cuyas propiedades elementales se calculan simulando los enlaces P-P en

la estructura de los nanotubos de fosforeno mediante elementos de haz. Se muestra que la fuerza de compresión crítica de los nanotubos de fosforeno en zigzag es significativamente menor que la de los nanotubos de carbono de pared simple con el mismo tamaño y condiciones de contorno. Al investigar el efecto de la relación de aspecto y el radio sobre las características de compresión de los nanotubos de fosforeno, se representa que la fuerza de compresión crítica tiene una relación inversa y directa con el primer y último parámetro geométrico, respectivamente.

En el estudio denominado como On the elastic and plastic properties of the bismuthene adsorbed by H, F, Cl and Br atoms, de los autores P. Aghdasi, R. Ansari, S. Rouhi, y M. Goli (Aghdasi et al., 2019), La teoría de la función de densidad se utiliza aquí para investigar las propiedades elásticas y plásticas del bismuteno prístino y adsorbido. Los átomos de H, F, Cl y Br se consideran los átomos adsorbentes. Se calculan los módulos elásticos de la nanopláca prístina y adsorbida bajo carga uniaxial y sus módulos de volumen bajo tensión biaxial. Se muestra que la adsorción de la nanopláca de bismuteno por los átomos mencionados conduce a la disminución de sus módulos elásticos y de volumen. La influencia de la adsorción sobre el módulo elástico del bismuteno es más prominente que su efecto del módulo de volumen.

En Mechanical behavior of planar borophenes: A molecular mechanics Study del autor Georgios I. Giannopoulos (Giannopoulos, 2017), El objetivo es proporcionar datos numéricos sobre la respuesta mecánica de tracción en el plano de láminas de boro bidimensionales conocidas como láminas de borofeno o borofenos. El enfoque teórico propuesto se basa en un método de mecánica molecular que utiliza la estructura atómica base de equilibrio de los nanomateriales que se encuentran bajo investigación. Además, incorpora elementos finitos especiales en forma de resorte para aproximarse al campo de fuerza interatómico. En trabajada como Stochastic fracture analysis of cracked nano-graphene sheets by scaled boundary finite element method de los autores M. Hajian, y M. Moradi (Hajian & Moradi, 2019), se investiga la fractura probabilística de láminas de nanografeno agrietadas mediante el análisis de fracturas estocásticas y el método de elementos finitos de límite escalado por el método de mecánica molecular. En un investigación nombrada Scaled boundary finite element simulation and modeling of the mechanical behavior of cracked nanographene sheets de los autores M. Honarmand, y M. Moradi (Honarmand & Moradi, 2018), en el cual se basó la investigación antes mencionada, fue utilizado el método de elementos finitos de límite escalado (SBFM), se simuló por primera vez una hoja de nanografeno perfecta o grietas. En este análisis, los enlaces de carbono atómicos se modelaron mediante elementos de barra simples con secciones transversales circulares. A pesar de la dinámica molecular (MD), los resultados obtenidos del análisis SBFM son bastante aceptables para grietas de grado cero.

Los autores Xiaoxing Lu, y Zhong Hu, en su artículo Mechanical property evaluation of single-walled carbon nanotubes by finite element modeling (X. Lu & Hu, 2012), Aplicaron la simulación computacional para predecir las propiedades mecánicas de los nanotubos de carbono (CNT) se fue adoptada como una herramienta poderosa en relación con la dificultad experimental. Basado en la mecánica molecular, se fue desarrollado un modelo 3D mejorado de elementos finitos (FE) para nanotubos de carbono de pared simple (SWNT). Se ha consideraron la rigidez a la flexión de la capa de grafeno, así como los potenciales asociados con las interacciones atómicas dentro de un SWNT se evaluaron mediante las energías de deformación de los elementos del haz que sirven como sustituciones estructurales de enlaces covalentes. La deformación fuera del plano de las uniones se distinguió de la deformación en el plano al considerar

una sección transversal elíptica para los elementos de la viga. En otro estudio denominado Prediction of the mechanical behavior of double walled-CNTs using a molecular mechanics-based finite element method: Effects of chirality de los investigadores Jaehyeok Doh, y Jongsoo Lee (Marenić et al., 2013), desarrollaron modelos de elementos finitos de nanotubos de carbono de pared simple (SWCNT) y nanotubos de carbono de pared doble (DWCNT) basados en la teoría de la mecánica molecular para evaluar propiedades mecánicas como el módulo de Young, la resistencia máxima y la deformación de acuerdo con la quiralidad. De igual forma en Estimation of material properties of carbon nanotubes using finite element method, de los autores BOCKO Jozef, LENGVARSKÝ Pavol, y PÁSTOR Miroslav (Bocko et al., 2019), El artículo trata de la estimación de las propiedades de los materiales de los nanotubos de carbono de pared simple (SWCNT). Los SWCNT se simulan como marcos, donde los átomos de carbono se reemplazan por nodos y las interacciones interatómicas se reemplazan por haces. La carga de tensión y torsión se aplica a los SWCNT para determinar el módulo elástico, la relación de Poisson, el módulo de corte y la rigidez de la membrana de los SWCNT. Las simulaciones para obtener alargamientos y ángulos de torsión de SWCNT se realizan mediante el método de elementos finitos.

La aplicabilidad de elementos finitos para simulaciones de dinámica molecular de acuerdo con Lutz Nasdala, Andreas Kempe, y Raimund Rolfes, en su artículo ¿Are finite elements appropriate for use in molecular dynamic simulations? (Nasdala et al., 2012), depende tanto de las dimensiones de la estructura como del tipo de campo de fuerza subyacente. Los elementos de capa y continuo describen las estructuras moleculares solo en un sentido promedio, por lo que no son el tema de este artículo. Por el contrario, los elementos de celosía y viga son candidatos potencialmente atractivos cuando se trata de reproducir con precisión las interacciones atómicas. Sin embargo, se requieren consideraciones especiales para los campos de fuerza que usan no solo potenciales de dos cuerpos, sino también de múltiples cuerpos.

El método fue desarrollado por Westheimer, Hendrickson, Wiberg, Allinger, Warshel entre otros, y es aplicable a los estados electrónicos básicos. La mayoría de las aplicaciones va dirigida a compuestos orgánicos, pero las aplicaciones se están extendiendo al desarrollo en compuestos órgano-metálicos y compuestos de coordinación de metales de transición (Ira N. Levine, 2001). el método de mecánica molecular utiliza un modelo de una molécula compuesta de átomos unidos por enlaces. Utilizando parámetros como el voltaje de enlace y las constantes de fuerza de enlace, permitiendo las interacciones entre átomos no unidos, el método construye una expresión de energía potencial que une a las posiciones atómicas. Este método minimiza la expresión para diferentes isómeros conformacionales moleculares y proporciona geometrías de equilibrio y energías relativas (Ira N. Levine, 2001).

La mecánica molecular estudia de los cambios en la energía electrostática de las moléculas debidos efectos mecánicos como lo son el estiramiento del enlace (V_{ten}), flexión del ángulo de enlace (V_{flex}), flexión fuera del plano (V_{ffp}), rotación interna (torsión) en torno a los enlaces (V_{tor}), las interacciones entre estos movimientos que producen un término cruzado (V_{cruz}), atracciones y repulsiones de Van Der Waals entre átomos no ligados (V_{vdw}) e interacciones electrostáticas entre átomos, La suma de estas contribuciones da la energía potencial de la mecánica molecular V_{mm} (llamada energía estérica) para el movimiento de los átomos en la molécula o moléculas si el sistema que se está calculando tiene más de una molécula. (Vel) (Ira N. Levine, 2001).

En este proyecto se buscó simular a través del método de elementos finitos el comportamiento mecánico de una probeta de polímero, desde su estructura molecular, Representada como arreglos estructurales de barras, formando el objeto por completo; de este modo se llegó a un comportamiento más real del objeto simulado, llegando de esta forma a un método alternativo para el estudio del comportamiento mecánico de materiales sometidos a distintos tipos de esfuerzo, tomando un camino distinto al método de mecánica molecular. Mediante la utilización de un software programado en Python o Matlab se planeó llegar a una solución computacional, la cual fue comparada con los resultados de ensayos de tracción, compresión, entre otros. Se llegó a concretar un método alternativo que toma en cuenta las características moleculares propias del material de estudio.

2. Experimental

Material

La influencia de la geometría molecular en las propiedades físicas determina en gran parte el comportamiento de material, en cuanto a su influencia en la facilitación a la hora de la preparación de la malla para una simulación depende de la complejidad de la misma, como se determinó, el desarrollo del estudio fue enfocado a los polímeros, se entiende que existen muchos polímeros con geometrías muy distintas, que van desde los muy complejos como la geometría del ABS (Acrilonitrilo Butadieno Estireno) hasta más simples como el polietileno, este último siendo un termoplástico posee una estructura molecular particularmente simple, contando con una cadena base de etileno C_2H_4 , lo cual permite que a la hora de desarrollar la malla esta puede ser construida de la malla base del radical y luego ser copiada en muchos radicales y apilarlos con mayor facilidad a la hora de crear las cadenas largas del polímero, en contraste como por ejemplo a polipropileno el cual cuenta con un radical base de C_3H_6 con una ramificación de CH_3 en una de los carbonos de su cadena principal, esto implicaría un grado de complejidad mayor a la hora de la creación del mallado o de la molécula base.

Polietileno (PE)

El polietileno es un polímero termoplástico con una estructura molecular simple, Según Raymond Chang y Kenneth A. Goldsby (Chang & Goldsby, 2013), los polímeros son compuestos moleculares que se distinguen por poseer una masa molar grande, que comprende desde miles a millones de monómeros unidos en cadenas, y por estar formado por muchas unidades que se repiten.

Polimerización y características

El polietileno cuenta con una estructura molecular muy simple que se obtiene a partir de la unión de monómeros de etileno.

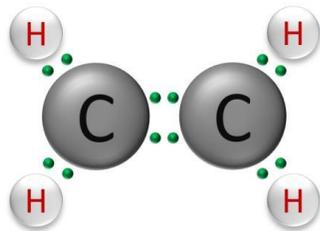


Figura 1. Molécula de etileno estructura de Lewis, monómero simple de C_2H_4 con enlace doble entre carbono y simples de carbonos e hidrógenos. Autor.

El etileno es una molécula formada por dos átomos de carbono que forman un enlace covalente doble y cuatro átomos de hidrógeno que forman enlace covalente simple con los átomos de carbono como muestra la Figura 1. De monómeros de etileno se obtienen las largas cadenas que conforman la estructura del polietileno, esto mediante el proceso de reacción por adición como explican Chang y Goldsby (Chang & Goldsby, 2013). En el libro química de autores mencionados se describe el proceso de polimerización por adición con brevedad:

1. se comienza por el calentamiento de una molécula iniciadora, esto permite romper el enlace covalente doble que tienen los carbonos del etileno entre ellos, quedando solo un covalente simple, esto produce dos radicales, cada carbono con un electrón libre.

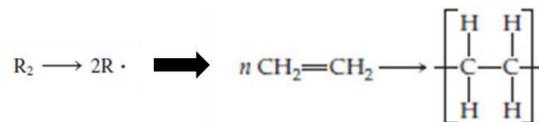


Figura 2. rompimiento del enlace covalente doble lo cual permite a los carbonos poseer un electrón libre. Obtenida de química Chang y Goldsby y química la ciencia central de Brawn y LeMay (Brown et al., 2009).

2. El radical reactivo provoca el rompimiento del enlace covalente doble de otra molécula de etileno, enlazando con esta y generando un nuevo radical, este proceso continuo sucesivamente y con múltiples radicales.



Figura 3. radical reaccionando con molécula de etileno, y provocando la aparición de otro radical, este proceso se repite. obtenido de Química Raymond Chang y Goldsby (Chang & Goldsby, 2013).

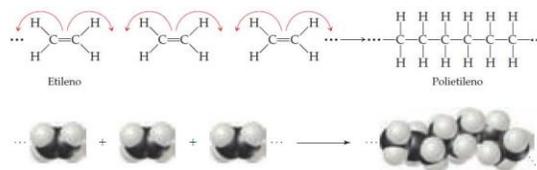


Figura 4. Moléculas de etileno radical reactivo ataca una molécula de etileno uniéndose y se genera una nueva molécula de mayor peso. Obtenido de química la ciencia central de Brawn y LeMay (Brown et al., 2009).

El proceso de polimerización por adición permite obtener moléculas de masa molar muy elevada que en este caso son cadenas muy largas de CH_2 como se observa en la Figura 4.



Figura 5. El segmento que aparece aquí consiste en 28 átomos de carbono, obtenido de química la ciencia central Brawn y LeMay (Brown et al., 2009).

En el caso de los polietilenos comerciales como menciona Brawn (Brown et al., 2009) las longitudes de la cadena varían de 10^3 y 10^5 unidades de CH_2 , también añade las cadenas son flexibles y pueden enrollarse y torcerse de forma aleatoria, como

vemos en esta figura 5. Debido a que dentro de estos materiales existe cadenas de diversos tamaños el ordenamiento dentro del material va a estar lejos de ser totalmente cristalino, los polímeros son materiales amorfos o no cristalinos, suelen presentar la alineación y ordenamiento de cadenas por regiones como lo muestra la Figura 6, a continuación:

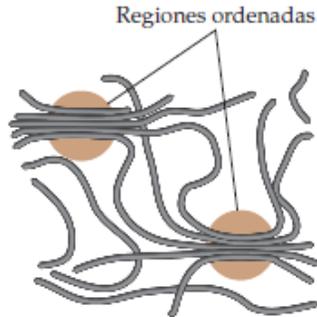


Figura 6. regiones cristalinas o de ordenamiento y alineación de las cadenas dentro de un polímero, marcadas con un círculo. obtenido de química la ciencia central Brawn y LeMay (Brown et al., 2009)

Estas regiones varían dependiendo de los procesos aplicados sobre el material, lo que indica que puedan tener mayor o menor cantidad de regiones, esta cantidad se mide a partir del grado de cristalinidad, entre más alto sea mayor cantidad de regiones cristalinas tendrá, lo que favorecerá a que el material sea más denso, más duro, menos soluble y más resistente al calor. Estas regiones se mantienen unidas gracias a Las fuerzas intermoleculares entre las cadenas del polímero. Para facilitar este estudio se asumirá el polímero tomado con un grado de cristalinidad del 100%, y con las cadenas internas totalmente rectas.

Estructura geométrica tridimensional por medio del modelo RPECV

El modelo RPECV consiste en que la geometría tridimensional adoptada por una molécula es aquel ordenamiento en el cual se logra la repulsión mínima entre los pares de electrones de la capa de valencia, la posición que adoptaran los orbitales que contienen los electrones de la capa de valencia será aquella en la que estén a mayor distancia entre ellos, debido a la repulsión electrónica (Chang & Goldsby, 2013). De acuerdo con el modelo RPECV, la molécula de polietileno base posee como forma base una estructura tetraédrica como se observa en la Figura 7, en la que cada uno de sus orbitales enlazados entre ellos tienen un Angulo de 109.5 grados. A partir de la descripción geométrica del modelo expuesto con anterioridad se encontrará una ecuación para la rigidez de la repulsión de los pares de electrones de la capa de valencia.

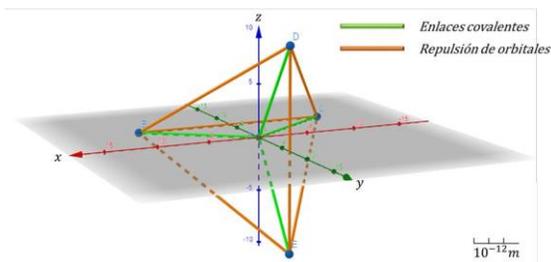


Figura 7. Geometría tetraédrica de una molécula, en donde las líneas verdes representan la unión por enlace covalente y las líneas naranjas las repulsiones de los electrones en los orbitales. Autor realizado en GeoGebra.

Deducción del elemento finito de los enlaces químicos y de la interacción entre orbitales

En el libro química la ciencia central de Theodore L. Brown, H. Eugene LeMay (Brown et al., 2009) describen el enlace químico como la unión fuertemente consolidada entre dos átomos. Debido a las leyes del electromagnetismo se afirma que es la unión entre átomos debido a las interacciones electromagnéticas entre estos. Con brevedad existen tres tipos de enlaces principales los cuales son el enlace iónico, el enlace covalente y el enlace metálico. En este apartado se obtuvo la representación analógica de los enlaces químicos como resorte o como sistema de resortes, al final se encontrará una constante de rigidez a partir de la reducción de sistemas de resortes, siendo esta la rigidez general del sistema, pero antes fue determinado el elemento finito de las interacciones electromagnéticas de cargas puntuales.

Ecuaciones eléctricas y variables (dependientes e independientes)

La interacción de dos cargas puntuales es explicada a través de la ley de coulomb condensada en las leyes de maxwell, de estas pueden ser obtenidas las ecuaciones diferenciales de la energía potencial eléctrica y su relación con el campo eléctrico y la fuerza eléctrica. Como es mencionado por Raymond A. Serway en su libro FÍSICA para ciencias e ingeniería con Física Moderna. (Serway & Emérito, John W. Jewett, 2009)

“la componente en x del campo eléctrico es igual al negativo de la derivada del potencial eléctrico respecto a x”

De esta podemos obtenerlas siguientes ecuaciones diferenciales:

$$E = -\nabla V \tag{1}$$

$$F = Q_2 E \tag{2}$$

$$F = -Q_2 \nabla V \tag{3}$$

$$F = -Q_2 \left(\frac{\partial V}{\partial x} i + \frac{\partial V}{\partial y} j + \frac{\partial V}{\partial z} k \right) \tag{4}$$

Para el desarrollo del elemento finito de la interacción electrostática se conoce que la carga y la constante eléctrica no son dependientes de la distancia x, por lo tanto, pueden sacarse de la función derivada de la energía potencial. Para este desarrollo solo se tendrá en cuenta la interacción en el eje x por el momento. De lo anterior obtenemos:

$$F = -Q_2 \frac{\partial V}{\partial x} \tag{5}$$

$$F = -K_E Q_2 Q_2 \frac{\partial R(x)}{\partial x} \tag{6}$$

Al sacar las constantes de la derivada se obtiene una función dependiente de la distancia, esta sería la función R(x), como se observa en la ecuación 6. esta hace a la fuerza dependiente de la distancia, y de igual forma quedan dependientes de la distancia el esfuerzo, la deformación unitaria, el desplazamiento y la carga. los vectores de las variables dependientes anteriormente mencionadas serian:

$$R = R(x) \quad \text{Función R de la fuerza} \tag{7}$$

$$u = u(x) \quad \text{Distancia} \quad (8)$$

$$\sigma = \sigma(x) \quad \text{Esfuerzo} \quad (9)$$

$$\epsilon = \epsilon(x) \quad \text{Deformación unitaria} \quad (10)$$

$$f = f(x) \quad \text{Fuerza de cuerpo} \quad (11)$$

Habiendo definido definidos las ecuaciones a utilizar y las variables dependientes e independientes, a continuación, se desarrollará la modelación del elemento finito para un dipolo eléctrico en una sola dimensión o unidimensional. El paso siguiente será modelar el elemento finito de un dipolo eléctrico, para dipolos de dos cargas de signos opuestas y dos cargas de signos iguales.

Construcción del elemento finito de un dipolo eléctrico

Para la modelación del elemento finito de un dipolo eléctrico lo primero que fue considerado es la semejanza de su interacción con resortes en sentido más técnico muelles. La semejanza de estos se considera a partir de los comportamientos que poseen al ser aplicados sobre estas cargas axiales. La diferencia radica en sus comportamientos al ser de igual o diferente signo, según Charles-Augustin de Coulomb (1736-1806) cuando las cargas son de signos opuestos la manifestación de su comportamiento se acciona en la atracción entre estas, mientras que estas cuando son de signos iguales se manifiesta repulsión entre las mismas.

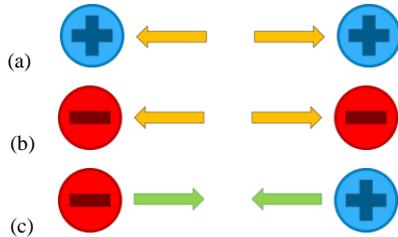


Figura 8. interacción entre cargas eléctricas de igual y diferentes signos. Autor.

En las ilustraciones anteriores se puede apreciar gráficamente la manifestación de la interacción entre cargas. Anteriormente se había hablado de la comparación de su comportamiento con la forma en cómo se comportan los muelles, profundizando en esta con una descripción detallada podemos inferir que la interacción presentada en la Figura 8 (a) y (b) es semejante a la de un resorte en compresión, y la interacción presentada en la Figura 8 (c) se asemeja al accionar de un resorte en tensión.

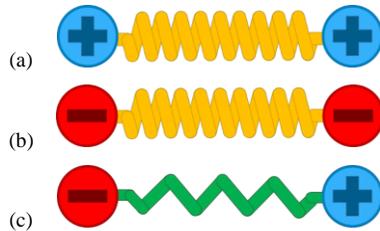


Figura 9. semejanza de la interacción de dos cargas eléctricas con el comportamiento de un resorte en compresión (a) y (b) y en tensión (c). Autor

En las Figura 9 (a) y (b) las flechas han sido reemplazadas por un resorte amarillo en donde su color simboliza su comportamiento en compresión, por lo que su reacción está siendo ejercida hacia afuera o en la misma dirección en la que apuntaban las flechas amarillas con anterioridad indicado un sentido

divergente y de repulsión. En la Figura 9 (c) por su parte podemos ver que estas flechas han sido reemplazadas por un muelle de color verde aparentemente estirados y sometido a carga en tensión, por lo que su reacción será halarlas una hacia la otra o en sentido convergente entre ellas o atractivo. Teniendo en cuenta lo anterior, podemos afirmar que nuestro elemento finito será un resorte, este resorte unirá dos nodos, los cuales serán las cargas eléctricas. En este análisis el elemento será dividido en tres nodos.

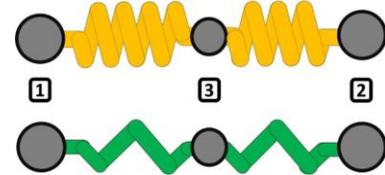


Figura 10. modelación del elemento finito de un dipolo eléctrico, conformándolo por medio de dos resortes y tres nodos para un elemento. Autor.

En la Figura 10 tenemos los nodos uno y dos que representan las posiciones de las cargas y el nodo tres se ubica en esta posición con el fin de interpolar un ajuste inverso. La notación usada para este estudio será de x_i , en donde corresponde al número del nodo.

$$Q = [Q_1 \quad Q_2 \quad Q_3]^T \quad (12)$$

$$F = [F_1 \quad F_2 \quad F_3]^T \quad (13)$$

El vector (12) es el vector de desplazamiento global del elemento. Por otro lado, el vector (13) es el vector de carga global. Los nodos con grados de libertad nulos se no tendrán ningún desplazamiento, por lo tanto, $Q_i = 0$.

Coordenadas y funciones de forma

El desplazamiento a través del elemento se obtendrá a través de un sistema coordenado natural, la posición interna dentro del elemento se encontrará en función x , estará denotada por la variable ϵ .

$$\epsilon = \frac{2(x - x_3)}{(x_2 - x_1)} \quad (14)$$

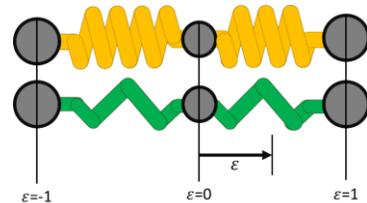


Figura 11. Desplazamiento interno dentro del elemento. Autor.

La ecuación 58 permite el desplazamiento interno dentro del elemento, la variación de x , permite la ubicación en cualquiera de los nodos, cuando $\epsilon = -1$ la ubicación será el nodo 1, y así respectivamente con los siguiente, para $\epsilon = 0$ será el nodo 3, y $\epsilon = 1$ será el nodo 2. A continuación de ϵ serán definidas las funciones de forma.

$$N_1 = \frac{1}{(\epsilon + 2)^2} \quad (15)$$

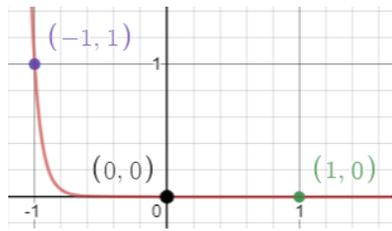


Figura 12. Función de forma N_1 . Autor realizado en DESMOS.

$$N_2 = \frac{1}{(\epsilon - 2)^{16}} \quad (16)$$

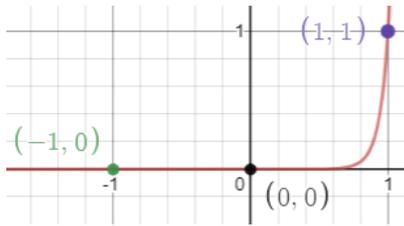


Figura 13. Función de forma N_2 . Autor realizado en DESMOS.

$$N_3 = 1 - \frac{1}{(\epsilon + 2)^{16}} - \frac{1}{(\epsilon - 2)^{16}} \quad (17)$$

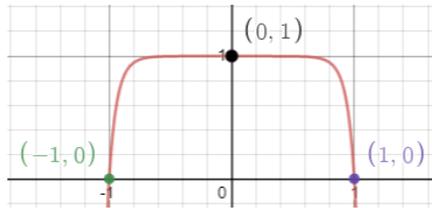


Figura 14. Función de forma N_3 . Autor realizado en DESMOS.

De las expresiones anteriores se obtuvo la ecuación de interpolación para la deformación unitaria y también una expresión para la fuerza eléctrica, que fueron indispensables para este desarrollo.

$$B = \frac{1}{x_2 - x_1} \left[\frac{-16}{(\epsilon + 2)^{17}} - \frac{-16}{(\epsilon - 2)^{17}} + \frac{16}{(\epsilon + 2)^{17}} + \frac{16}{(\epsilon - 2)^{17}} \right] \quad (18)$$

$$\epsilon = Bq \quad (19)$$

$$F = \frac{-K_E Q_1 Q_2}{(x_2 - x_1)^2} Bq \quad (20)$$

Enfoque de energía potencial

Del libro del autor Chandrupatla podemos encontrar una expresión general para la energía potencial.

$$\Pi = \sum_e \frac{1}{2} \int_e \sigma^T \epsilon A dx - \sum_e \int_e u^T f A dx - \sum_e \int_e u^T T dx - \sum_e u_i P_i \quad (21)$$

Las cantidades vistas en esta expresión fueron descritas en la sección 5.1. por otro lado, la variable T representa la tracción, está por definición es la carga distribuida que actúa sobre la superficie del cuerpo, en este estudio no será considerada y será tomada como cero debido a que la interacción entre cargas eléctricas es

dada en el vacío sin ningún tipo de interacción material entre ellas. Por otro lado, la variable P_i es la fuerza que actúa en cualquier punto i , y u_i es el desplazamiento sobre el eje x en esa ubicación. De la sustitución de las expresiones para la fuerza $F^T = \sigma^T A$ y $f = W_i / lA$ en la ecuación de energía potencial se obtuvo.

$$\Pi = \sum_e \frac{1}{2} \int_e F^T A dx - \sum_e \int_e u^T \frac{W_i}{l} dx - \sum_e u_i P_i \quad (22)$$

De las anteriores expresiones se obtuvieron la matriz de rigidez K^e expresión (24) y el vector de fuerza interna F^e expresión (25), donde el módulo rigidez K se expresa en la ecuación 23.

$$K = \frac{K_E Q_1 Q_2}{(x_2 - x_1)^3} \quad (23)$$

$$K^e = K \begin{bmatrix} 31,0303 & -1,705e-6 & -31,0303 \\ -1,705e-6 & 31,0303 & -1,705e-6 \\ -31,0303 & -1,705e-6 & 62,06060265 \end{bmatrix} \quad (24)$$

$$F^e = W_i \begin{bmatrix} 0,066666662 \\ 0,066666662 \\ 1,866666676 \end{bmatrix} \quad (25)$$

Para la aplicación en un sistema tridimensional ya propio del grupo de moléculas que fueron simuladas la matriz de rigidez y el vector de fuerza fueron operados con matrices de transformación.

Enlace covalente

El enlace covalente descrito por Raymond Chang y Kenneth A. Goldsby en su libro Química (Chang & Goldsby, 2013), como un enlace en el que dos electrones son compartidos por dos átomos, electrostáticamente podemos decir que los núcleos de ambos átomos se repelen entre ellos, pero a su vez se atraen con ambos electrones, los electrones repeliéndose de igual forma entre ellos. Para la formación de este tipo de enlaces la diferencia de electronegatividad debe estar por debajo de 1.7 o 1.6. como ellos mencionan en los enlaces covalente solo participan los electrones de valencia. Existen distintos tipos de enlaces covalente, como lo son el enlace covalente simple, covalente doble y covalente triple, existe otro tipo de enlace covalente denominado covalente polar, los cuales son formados cuando la diferencia de electronegatividad se acerca al 1.6 o 1.7, como menciona Raymond Chang (Chang & Goldsby, 2013) en el libro antes mencionado. Para este estudio solo se tendrá en cuenta el enlace covalente simple.

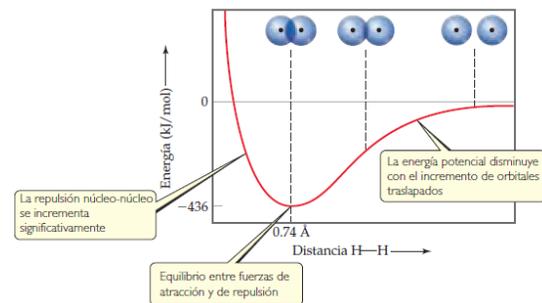


Figura 15. Diagrama de energía potencial de Morse. Tomado de Química la ciencia centra Brawn LeMay (Brown et al., 2009).

En el diagrama de energía potencial de Morse puede ser observado en la Figura 15 que los átomos se mantendrán unidos a determinada distancia en donde el punto más alto de la atracción se da en r_0 , en donde la variación de la energía potencia potencial eléctrica está en equilibrio por lo tanto su pendiente es cero. el r_0

para los enlaces covalentes será tomado como la suma de los radios atómicos, por lo tanto:

$$r_0 = R_{A1} + R_{A2} \quad (26)$$

En la ecuación 89, el radio atómico del primer átomo será denotado como R_{A1} , para el átomo número 2, su radio atómico será denotado por R_{A2} .

Analogía del enlace covalente como sistema de resortes

Para entender el enlace covalente como sistema de resortes se tuvieron en cuenta los conceptos de orbital y traslape de orbitales. Con se explicaba, los electrones presentes en los orbitales están siendo atraídos por el núcleo de los elementos opuestos, y a su vez esos mismos electrones se encuentran en repulsión, así como los núcleos de los átomos, la unión se mantiene debido a que las fuerzas están en equilibrio. De lo anterior se debe considerar que no es conocida la posición exacta de los electrones entre sus respectivos orbitales, siendo estas regiones volumétricas. Para poder encontrar la representación como sistema de resortes del enlace covalente solo se tendrán en cuenta los puntos de esa región volumétrica que se encuentre posicionados sobre una línea recta que una los núcleos de los elementos que se encuentran enlazados.

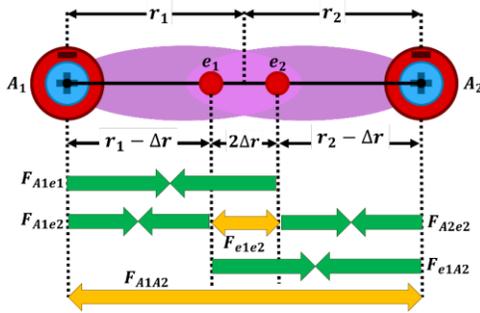


Figura 16. elementos en enlace covalente. Autor realizado en DESMOS

En la Figura 16 se puede observar la línea recta que une a los núcleos de los dos elementos A_1 y A_2 , separados por una distancia equivalente a la suma de sus radios r_1 y r_2 , sobre estas líneas se encuentran los electrones e_1 y e_2 , separados entre ellos a una distancia $2\Delta r$. La posición de ambos electrones será Δr dentro del radio de su respectivo átomo, esta consideración fue tomada debido a que la configuración de cada elemento influye sustancialmente sobre la posición del electrón sobre la línea que une los núcleos complicando en mayor medida el encontrar la ubicación de ambos, reduciendo encontrar Δr_1 y Δr_2 para e_1 y e_2 , a solo hallar Δr . Se expresó primeramente la ecuación que describe la energía potencial eléctrica en el sistema.

$$U_T = U_{A1e1} + U_{A2e2} + U_{A1e2} + U_{A2e1} + U_{A1A2} + U_{e1e2} \quad (27)$$

$$U_T = \frac{k_E n_{v1} n_{v2} p^2}{r_1 + r_2} + \frac{k_E e^2}{2\Delta r} - \frac{k_E e_2 n_{v1} p}{r_1 + \Delta r} - \frac{k_E e_1 n_{v2} p}{r_2 + \Delta r} - \frac{k_E e_1 n_{v1} p}{r_1 - \Delta r} - \frac{k_E e_2 n_{v2} p}{r_2 - \Delta r} \quad (28)$$

Se consideraron como núcleo para cada átomo los protones, los neutrones, y los electrones de los niveles de energía inferiores a los de los electrones de valencia, por lo tanto la carga total del núcleo será el número de electrones de los niveles de energía internos más el número total de protones, por lo tanto esto sería igual al número de electrones de valencia n_{v1} y n_{v2} por la carga de un protón p , la carga de los protones será considerada como igual a la carga del electrón. en la ecuación 27 se observa la

sumatoria de energías de la interacción entre cargas, la energía total U_T será graficada como función de Δr , el valor Δr no puede ser 0, y tiene que ser menor que el radio del átomo más pequeño del enlace.

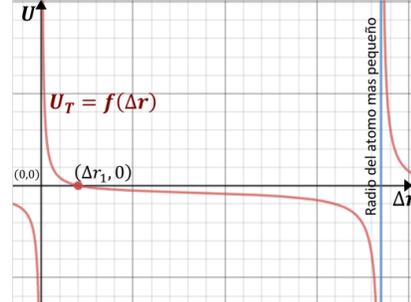


Figura 17. grafica de energía total contra delta de r o posición del electrón. Autor realizado en DESMOS.

En la Figura 17 se aprecia el cambio de la energía total U_T con respecto a Δr , el valor de energía potencial que fue tomado como igual a la entalpia de enlace, la cual mide la energía necesaria para romper los enlaces de un mol sustancia, para este estudio se observó el valor de esta para varias moléculas diatómicas que se encuentran en la tabla 8.4 del libro Química la ciencia centra Brawn LeMay (Brown et al., 2009) y la tabla 9.4 del libro Química de Raymond Chang y Kenneth A. Goldsby (Chang & Goldsby, 2013), como por ejemplo el $C-H$, $C-C$, $H-F$ y $H-Cl$ entre otros, la entalpia de cada una de la moléculas diatómicas mencionadas fue dividida entre el número de Avogadro, de esta manera fue obtenida la energía para un solo enlace, el valor de esa energía es del orden de los $10^{-10} J$.

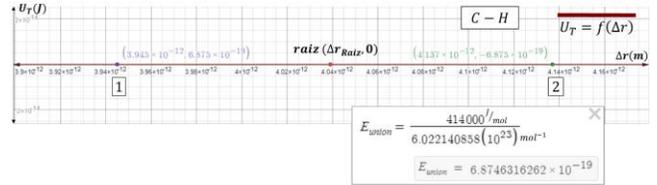


Figura 18. entalpia de enlace CH. Autor realizado en DESMOS.

En la Figura 18 de puede observar que los puntos 1 y 2 corresponden a los valores de la entalpia de enlace positiva y negativa para determinados Δr para la molécula de CH y la raíz de la ecuación de energía potencial justo en medio de ambas, si se considera tomar el valor medio, este estaría muy cerca de la raíz y la diferencia sería muy pequeña, por tal razón se asumió a $U_T = 0$ tomando como posición del electrón la raíz de la ecuación desde cero al radio del átomo de menor tamaño. De la anterior interpretación se obtuvo un polinomio del cual por medio de raíces de ecuaciones se obtienen el valor de Δr . La función es:

$$a\Delta r^5 + b\Delta r^4 + c\Delta r^3 + d\Delta r^2 + g\Delta r + h = 0 \quad (28)$$

$$a = \frac{n_{v1} n_{v2}}{r_1 + r_2}$$

$$b = \frac{1}{2}$$

$$c = 2(n_{v1} r_1 + n_{v2} r_2) - \frac{n_{v1} n_{v2}}{r_1 + r_2} (r_1^2 + r_2^2)$$

$$d = \frac{1}{2} x^2 (r_1^2 + r_2^2)$$

$$g = r_1 r_2 \left(\frac{n_{v1} n_{v2}}{r_1 + r_2} r_1 r_2 - 2(n_{v1} r_2 + n_{v2} r_1) \right)$$

$$h = \frac{1}{2} r_1^2 r_2^2$$

En la Figura 19 se puede apreciar la gráfica del polinomio 97, la cual tiene tres raíces, la raíz que se necesita en la que se encuentra en intervalo $0 \leq x \leq r_{Amen}$, siendo r_{Amen} el radio de átomo de menor tamaño.

Rigidez del enlace covalente

Se definió un sistema de resortes del enlace covalente, reducido a partir de la teoría para resortes en serie, en paralelo, y el teorema de Kennelly más conocido como transformación delta-estrella para impedancias. Primeramente, será utilizado el teorema de Kennelly.

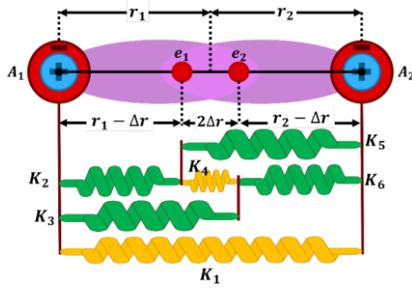


Figura 20. enlace covalente como sistema de resortes. Autor

Los valores para cada constante de rigidez se determinan por las siguientes expresiones tomadas a partir de la ecuación 23:

$$K_1 = \frac{k_E n_{v1} n_{v2} e^2}{(r_1 + r_2)^3} \quad (29)$$

$$K_2 = -\frac{k_E n_{v1} e^2}{(r_1 - \Delta r)^3} \quad (30)$$

$$K_3 = -\frac{k_E n_{v1} e^2}{(r_1 + \Delta r)^3} \quad (31)$$

$$K_4 = \frac{k_E e^2}{(2\Delta r)^3} \quad (32)$$

$$K_5 = -\frac{k_E n_{v2} e^2}{(r_2 + \Delta r)^3} \quad (33)$$

$$K_6 = -\frac{k_E n_{v2} e^2}{(r_2 - \Delta r)^3} \quad (34)$$

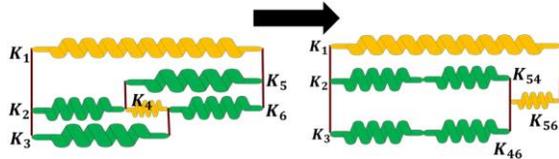


Figura 19. transformación delta estrella de los resortes en formación delta k4, k5, y k6, a una más simple. Autor

$$K_{54} = K_5 + K_4 + \frac{K_5 K_4}{K_6} \quad (35)$$

$$K_{56} = K_5 + K_6 + \frac{K_5 K_6}{4} \quad (36)$$

$$K_{46} = K_6 + K_4 + \frac{K_6 K_4}{K_5} \quad (37)$$

$$K_{254} = \frac{K_2 K_{54}}{K_2 + K_{54}} \quad (38)$$

$$K_{346} = \frac{K_3 K_{46}}{K_3 + K_{46}} \quad (39)$$

$$K_a = K_{254} + K_{346} \quad (40)$$

$$K_{a56} = \frac{K_a K_{56}}{K_a + K_{56}} \quad (35)$$

$$K_{COV} = K_1 + K_{a56} \quad (36)$$

La constante de rigidez total del enlace covalente K_{COV} fue necesario hallarla para simplificar el elemento finito, esto para reducir el tiempo de cálculo numérico.

Rigidez de la repulsión entre orbitales

A partir de la descripción geométrica del modelo expuesto con anterioridad en la figura 7 se encontró una ecuación para la rigidez de la repulsión de los pares de electrones de la capa de valencia. Para encontrar la constante de rigidez de repulsión de orbitales, se asumió que los electrones en los enlaces se ubican exactamente a un radio de distancia de su respectivo átomo, por ejemplo, si tenemos una molécula CH los electrones estarán ubicados a un radio atómico $7.7e - 11 m$ del carbono, mientras que para los hidrógenos estarán ubicados a $3.7e - 11 m$. El modelo que fue utilizado consto de un triángulo que involucra a el átomo central y dos átomos de las puntas como se observa en a figura 20.

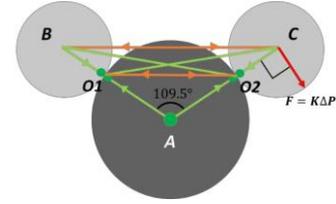


Figura 20. Triángulo interno de molécula tetraédrica formado por el átomo central y dos átomos de las aristas. Autor.

Para hallar la constante de rigidez se asumió que cada barra es un resorte, entonces los resortes presentes son: $O1O2$ que sería la repulsión pura de orbitales, BC sería la repulsión débil de los núcleos positivos, $O1C$ y $O2C$ serían las atracciones débiles entre los núcleos positivos y los orbitales opuestos. Se tomó momento con respecto a A , y fue hecha una sumatoria, con esto se pretendió hallar una rigidez tal que un resorte que produzca un momento con la fuerza F tenga una deformación angular $\Delta\theta$ que sea la misma deformación para los resortes anteriormente mencionados ejerciendo el momento opuesto. Las distancias $rAO1$ y $rAO2$ puesto que son el radio del átomo central. Las expresiones a continuación corresponden a la rigidez de las interacciones electromagnéticas de los orbitales y los átomos enlazados, se hallan los ángulos y las distancias necesarias para la solución, a continuación, las expresiones:

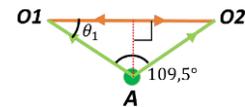


Figura 21. Triángulo interno $O1O2A$. Autor.

$$1. \quad \theta_1 = 90 + 109.5/2 \quad (37)$$

$$2. \quad L_{O1O2} = r_{AO2} \sqrt{2 - 2 \cos(109.5^\circ)} \quad (38)$$

$$3. \quad K_{O1O2} = \frac{4K_E e^2}{L_{O1O2}^3} \quad (39)$$

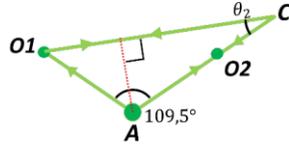


Figura 22. Triángulo interno O1CA. Autor.

$$1. \quad r_{AC} = r_{AO2} + r_{O2C} \quad (40)$$

$$2. \quad L_{O1C} = \frac{2K_E Q_c e}{L_{O1C}^3} \quad (41)$$

$$3. \quad K_{O1C} = \frac{2K_E Q_c e}{L_{O1C}^3} \quad (42)$$

$$4. \quad \theta_2 = \cos^{-1} \left(\frac{r_{AC}^2 + L_{O1C}^2 - r_{AO1}^2}{2r_{AC}L_{O1C}} \right) \quad (43)$$

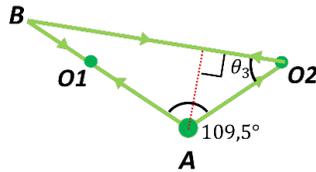


Figura 23. Triángulo interno BO2A. Autor.

$$1. \quad r_{AB} = r_{AO1} + r_{O1B} \quad (44)$$

$$2. \quad L_{BO2} = \frac{2K_E Q_B e}{L_{BO2}^3} \quad (45)$$

$$3. \quad K_{BO2} = \frac{2K_E Q_B e}{L_{BO2}^3} \quad (46)$$

$$4. \quad \theta_3 = \cos^{-1} \left(\frac{r_{AO2}^2 + L_{BO2}^2 - r_{AB}^2}{2r_{AO2}L_{BO2}} \right) \quad (47)$$

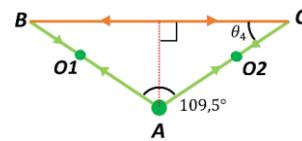


Figura 24. Triángulo interno BCA. Autor

$$1. \quad L_{BC} = \frac{K_E Q_B Q_C}{L_{BC}^3} \quad (48)$$

$$2. \quad K_{BC} = \frac{K_E Q_B Q_C}{L_{BC}^3} \quad (49)$$

$$3. \quad \theta_4 = \cos^{-1} \left(\frac{r_{AC}^2 + L_{BC}^2 - r_{AB}^2}{2r_{AC}L_{BC}} \right) \quad (50)$$

La expresión a continuación corresponde a la rigidez de los orbitales, esta fue obtenida luego de varios despejes:

$$K_{ORB} = \frac{M_1 + M_2 + M_3 + M_4}{(r_{AO2} + r_{O2C})^2} \quad (51)$$

$$M_1 = K_{O1O2} r_{AO2}^2 \sin(\theta_1)$$

$$M_2 = K_{O1C} r_{AC}^2 \sin(\theta_2)$$

$$M_3 = K_{BO2} r_{AO2}^2 \sin(\theta_3)$$

$$M_4 = K_{BC} r_{AB}^2 \sin(\theta_4)$$

Software desarrollado

El planteamiento de las todas las anteriores analogías y hallazgo de la rigidez de los enlaces y repulsiones de orbitales implicadas, ayudo en la comprensión del comportamiento de las estructuras moleculares, lo que ha llevado a poder culminar el desarrollo del elemento finito para el presente estudio, se optó por desarrollar una simulación por medio de un software programado para obtener el módulo de Young y el diagrama esfuerzo deformación del polietileno de alta densidad. El programa cuenta con tres partes, que son una función de mallado de cadena, función de rigidez, y por último el cuerpo del programa que, con la información arrojada por el mallador y la función de rigidez, calcula por medio del MEF las deformaciones de los enlaces de la molécula del material, en la Figura 25 se puede apreciar los modelos arrojados por el programa para la resolución del problema.

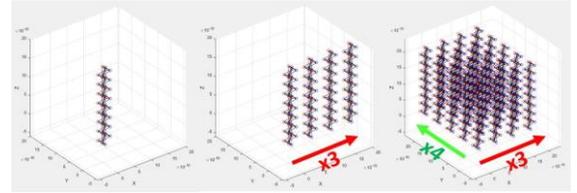


Figura 25. Cadena simple de polietileno a la izquierda, en el centro la cadena ha sido reproducida tres veces, en la imagen de la derecha, las cadenas ya reproducida a lo largo del eje X, ahora son replicadas cuatro veces en dirección del eje Y. Autor, obtenido de MATLAB.

La función de mallado de cadena es que realiza la tarea de mallado, consiste en una serie de tres tablas que almacenan la información necesaria para la construcción de una molécula de polietileno. La primera de estas es la matriz de geometría, que contiene las coordenadas de quince puntos en un espacio tridimensional cartesiano que cuentan con la configuración de la molécula de polietileno, cada punto representa un átomo de la molécula de polietileno. En la tabla 2 se encuentran unidas la matriz de conectividad MC y la matriz de propiedades MP, en este caso solo fueron incluidos los diez primeros datos. La matriz de conectividad contiene dos columnas, la columna num1 y num2, que son el número del punto coordinado en la tabla 2, los cuales se conectan si entran en la misma fila. Luego está la matriz de propiedades la cual contiene primeramente la rigidez K, estos valores serán calculados he introducidos posteriormente, los radios atómicos R_a y R_b , los electrones de valencia V_a y V_b , Tipo es la clase de interacción en donde 1 representa el enlace covalente y 0 la repulsión de orbitales, si es repulsión de orbitales en la columna R átomo central será almacenado el radio átomo central del elemento al que pertenecen los orbitales, por último las masas atómicas $ma1$ y $ma1$.

Condiciones de simulación

De acuerdo con lo que permitan los requerimientos del sistema para simulaciones con un tiempo de proceso óptimo, para la preparación de la malla se planteó que longitud de la cadena debió ser de 8 moléculas de polietileno, la malla consto de un grupo de cuatro cadenas moleculares, de 2 por 2, las distancias entre las cadenas moleculares dependió de la densidad del material por lo tanto del valor de la variable a que le fue designado el valor de

dicha distancia, los nodos fijos fueron los primeros nodos de cada cadena, en donde estos eran el nodo de la base de cada cadena molecular. el esfuerzo aplicado fue aumentado exponencialmente, comenzando en 0 y terminando en los 35GPa, debido a que se estimó que en este valor se presenta el pico de elongación de las cadenas, y de este en adelante se presentan indeterminaciones. Del esfuerzo fue calculada la fuerza que fue aplicada en los cuatro últimos nodos o átomos de cada da cadena. Entendiéndose como últimos a aquellos que se encuentra ubicados en los extremos superiores de las cadenas.

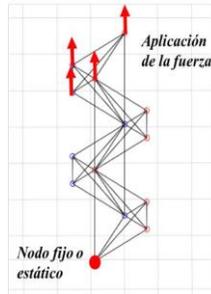


Figura 26. Nodos superiores en donde es aplicada la fuerza, y nodo base que se mantiene fijo. Autor, obtenido de MATLAB.

Simulación en ANSYS

La simulación en ANSYS aportó un punto de comparación con el comportamiento del mallado propuesto por el proyecto, el objetivo de este apartado es el de presentar los pasos que se llevaron a cabo para la obtención del diagrama esfuerzo deformación, de forma resumida.

Modelado 3D de la probeta

Modelado en 3d de la probeta de acuerdo con la norma ASTM d638 la halterio tipo 1, consta de una longitud de 165 mm, un ancho de 19 mm y espesor de 7 mm, la zona más delgada de este solo varia en el ancho teniendo una diferencia de 5 mm con respecto a los 19 mm de los extremos, teniendo de esta manera una magnitud de 13 mm, la probeta fue desarrollada en el programa solid edge st10.

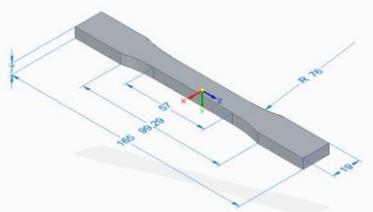


Figura 27. Probeta tipo I de la norma ASTM a638 con sus medidas en milímetros. Autor, modelado en SolidEdge ST10.

Configuración del material en el software de simulación

Las propiedades del material fueron definidas a partir de los datos mostrados por las fichas técnicas consultadas.

Isotropic Elasticity

Derive from	Young's Modulus and Poisson's Ratio
Young's Modulus	1,3e+09 Pa
Poisson's Ratio	0,46000
Bulk Modulus	5,4167e+09 Pa
Shear Modulus	4,4521e+08 Pa
Isotropic Secant Coefficient of Thermal Expansion	0,00023000 1/°C
Compressive Ultimate Strength	0 Pa
Compressive Yield Strength	0 Pa
Tensile Ultimate Strength	4,3e+07 Pa
Tensile Yield Strength	3,4277e+07 Pa

Figura 28. Propiedades definidas para ANSYS de acuerdo a los datos arrojados por las fichas técnicas consultadas para el HDPE. Autor, obtenida de ANSYS.

Puntos de aplicación de la fuerza y puntos fijos

Se dispuso a ubicar los puntos de aplicación de la fuerza en las zonas en donde natural mente le son aplicados en los ensayos de tracción reales, las zonas fijas para este caso se escogieron bajo el mismo criterio, siendo estas los extremos de la probeta, uno de sus extremos fue seleccionado para aplicación de la fuerza y opuesta fue seleccionado como fijo. a la fuerza que fue usada en el programa, se llegó gracias a numerosas pruebas que fueron realizadas y al final fue la máxima para la que se tuvo una convergencia coherente.

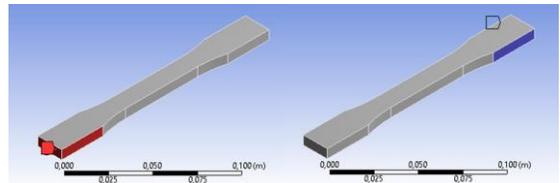


Figura 29. A la izquierda con la etiqueta de color rojo los extremos en los que es aplicada la fuerza, a la derecha en azul los lados que se mantienen fijos. Autor, obtenido de ANSYS.

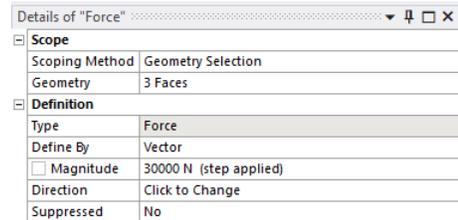


Figura 30. Configuración que le fue asignada a los puntos de aplicación de la fuerza en ANSYS. Autor, obtenido de ANSYS.

Configuración de análisis

La configuración aplicada fue definida de acuerdo a la convergencia que iba siendo obtenida a medida que fueron hechas las pruebas, el minimum time step se tomó en el valor más pequeño posible, por este motivo se llegó a la siguiente configuración:

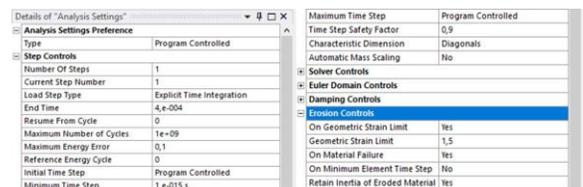
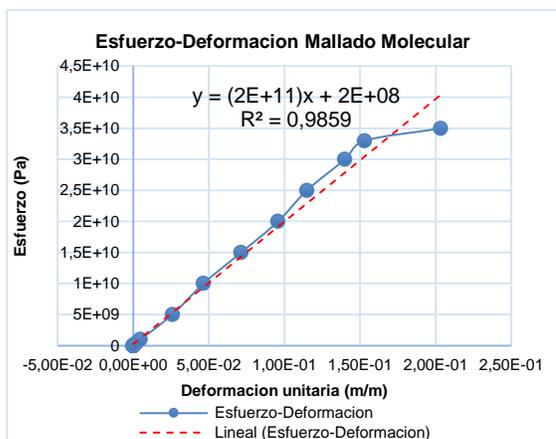


Figura 31. Configuración asignada al análisis en ANSYS. Autor, obtenido de ANSYS.

3. Resultados

En este apartado serán presentados los resultados obtenidos de las simulaciones realizadas, la descripción y la interpretación de cada uno. Simulación de elementos finitos con mallado basado en la estructura molecular los parámetros establecidos para la simulación fueron escogidos de acuerdo al criterio de menor tiempo de simulación y óptima cantidad de elementos. La cantidad de moléculas de polietileno fue de 8 moléculas por cadena, el número de cadena establecidas para la simulación fue de cuatro cadenas, con factores multiplicadores en x de 1, y en y de 1, en donde dicho valor representa el número de veces que se multiplica la cadena, por lo tanto, para el valor de 1 la cadena es multiplicada por 2, por lo tanto, habrá una cadena más o una línea de cadenas adicional para el caso del eje y. Luego de haber establecido las condiciones dadas para la simulación, los resultados obtenidos fueron los siguientes:



Grafica 1. Diagrama esfuerzo-deformación arrojado por la simulación por análisis de elementos finitos basado en la estructura molecular. Autor.

En la gráfica pueden ser visto los resultados de la simulación desarrollada con elementos finitos aplicando un mallado basado en la estructura molecular, en esta se puede apreciar una tendencia lineal de crecimiento en el esfuerzo de 0 hasta los 33GPa en función de una deformación unitaria que va desde 0 hasta 0.153 m/m, luego la pendiente se aplanada desde los 33GPa hasta los 35GPa en función de una deformación unitaria que va desde 0.153 m/m hasta los 0.203 m/m. la tendencia de la curva es correspondiente con el comportamiento del diagrama esfuerzo deformación para un material con un porcentaje de cristalinidad de 100% lo cual es consistente con la simulaciones realizadas. En lo que respecta a la línea de tendencia, representada en la gráfica con la recta lineal roja con ecuación respectiva $\sigma(x) = (2e11)x + 2e8$, en donde x es la deformación unitaria y el valor que lo acompaña que para este caso sería $2e11$ Pa, corresponde al módulo de Young para cada cadena molecular de polietileno, haciendo una respectiva comparación con el módulo de Young extraído de fichas técnicas consultadas de matweb material propertys data, Mitsubishi Chemicals advaced materials, de directplastics, entre otras, correspondiente a 1.2GPa como media, se puede observar que el módulo de Young obtenido de las cadenas moleculares el 166.66 veces más grande que el módulo determinado de forma experimental presentado en las fichas técnicas.

Comparación de las propiedades mecánicas de la simulación por mallado molecular con las propiedades reales del material

Debido a que el mallado molecular se presentó en la simulación con una cristalinidad del 100%, sus propiedades con respecto a las propiedades reales del material tomadas de la ficha técnica y el diagrama esfuerzo-deformación real fueron mucho mayores, esto porque la simplificación de muchos parámetros para el desarrollo de la simulación llevo a que diversos factores no fueran tomados en cuenta a la hora de llevar a cabo el desarrollo, presentando un comportamiento ideal que el polietileno de alta densidad debería poseer en caso de ser construido molécula a molécula, lo cual conllevaría a una clara mejora en las propiedades mecánicas presentadas por dicho material.

Los factores que fueron dejados de lado fueron las ramificaciones, las zonas cristalinas no alineadas dentro del material, las numerosas regiones amorfas, los enrollamientos, las torceduras y entrelazamientos de las cadenas, las impurezas presentadas dentro del material, entre muchas otras condiciones presentadas dentro de la estructura interna del HDPE en condiciones reales, todo esto contribuye a que el diagrama esfuerzo deformación que muestra el comportamiento mecánico del material en tensión, para el mallado molecular a comparación del diagrama del HDPE experimental, se presente muy parecida a la de un material con rotura frágil y con mayor módulo de elasticidad con magnitud de 200GPa, el cual se presentaría como el ideal para este, aproximadamente 166.6666 veces mayor que el módulo de elasticidad promediado de las fichas técnicas en las que se registra con un valor de 1.2 GPa para el HDPE de inyección.

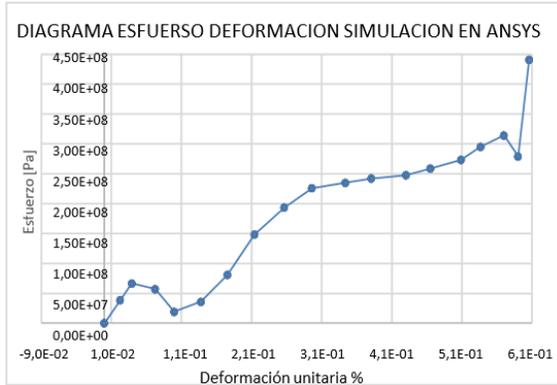
El diagrama para el material real se presenta los comportamientos elásticos y plástico, con una deformación mayor a menor esfuerzo que la deformación unitaria presentada por el mallado molecular en la simulación, que es aproximadamente de 616% a comparación a comparación del 20.3 % que obtuvo el mallado molecular con mucho mayor esfuerzo instantes antes de su ruptura, aproximadamente se podría decir que se deforma 30,34 veces más debido a la falta de cristalinidad e imperfecciones presentada dentro del material.

La simulación llevada a cabo por el MEF con mallado molecular nos presentó la idealización del HDPE con propiedades mecánicas mejoradas, 100% cristalino con alineación total de las cadenas moleculares con un módulo de Young cercano al de muchos máteles, pudiendo de esta manera ser relacionado con los nanotubos de carbono, los cuales poseen estructuras que son construidas molécula a molécula, con cristalinidad adquirida del 100% sin imperfección alguna, con estructuras geométricamente bien alineadas, debido a lo anterior sus propiedades mecánicas son más altas que la de la mayoría de los materiales, en el artículo Structural rigidity and low frequency vibrational modes of long carbon tubules realizado en 1993 por Overney G, Zhong Wy Tomanek D. (Overney et al., 1993), se estimó teóricamente que su módulo de elasticidad debería ser cercano a 1250 GPa y su tensión de rotura alrededor de 60 GPa.

En otro estudio denominado Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties de los autores Yu M.F., Files B.S., Arepalli S., Ruoff R.S. (Yu et al., 2000) en el año 2000, fueron estimados de forma experimental la magnitud de sus propiedades mecánicas, desarrollando ensayos a tracción a 15 nanotubos de una sola capa, los resultados obtenidos arrojaron un módulo de elasticidad que en su valor más alto fue de 1040 GPa para una tensión de rotura de 52 GPa y una deformación-unitaria de 0.05, lo cual coincide con lo estimado por el estudio anterior. Los datos arrojados por la simulación encajan a cabalidad con el caso de los nanotubos de carbono por eso se puede afirmar que las propiedades mecánicas arrojadas por la simulación serían las ideales para el material real.

Simulación en ANSYS con mallado convencional

Los parámetros establecidos para la simulación fueron escogidos de acuerdo a la mejor optimización posible de las condiciones para asegurar una convergencia de los resultados lo más acorde a un ensayo de tracción en la máquina universal. Las propiedades escogidas para el material fueron las establecidas por el programa las cuales no diferían en gran medida con las planteadas por las fichas técnicas consultadas. Los resultados obtenidos en la simulación en ANSYS fueron:



Grafica 2. Diagrama esfuerzo-deformación arrojado por la simulación en ANSYS. Autor.

En la gráfica puede ser visto el diagrama esfuerzo deformación obtenido de la simulación de una probeta de HDPE sometida a tensión, puede ser relacionada con el diagrama presentado por un material dúctil. En el diagrama presentado con anterioridad que la región elástica se extiende para esfuerzo desde los 0 Pa a 38,575e6 Pa y para la deformación unitaria desde los 0 m/m hasta los 2,284e-2 m/m, por otra parte, la región de fluencia se extiende para esfuerzo desde 66,531e6 Pa hasta 35,95e6 Pa y para la deformación unitaria desde 3,914e-2 m/m hasta los 1,38e-1 m/m. la región de endurecimiento por deformación va desde el punto 35,95e6 Pa en esfuerzo y 1,31e-1 m/m para deformación unitaria en adelante, presentando ruptura en 314,25e6 Pa y deformación unitaria de 5,7e-1 m/m.

Comparación de las propiedades mecánicas de la simulación en ANSYS con las propiedades reales del material

En lo que respecta al comportamiento mecánico de la simulación con mallado convencional a comparación del comportamiento mecánico experimental del HDPE, se observa que debido a que en general el MEF utilizando mallado convencional está enfocado para trabajar con las propiedades globales del material, este tendera a presentar en los resultados un comportamiento mecánico muy similar al que presentan los ensayos reales, en muchos casos por condiciones de frontera mal definidas o no congruentes con el fenómeno o refinamientos mal logrados del mallado pueden hacer que los resultados pueden presentar desviaciones muy grandes.

En el diagrama esfuerzo-deformación de la probeta simulada a comparación de las propiedades obtenidas de las fichas técnicas y el diagrama presentado con anterioridad se observa que los esfuerzos de ruptura llegan a valores muy cercanos, en el caso de la simulación a un valor de 314,25 MPa y para el caso del diagrama de esfuerzo deformación real 112 MPa los cuales presentaron una diferencia considerable. La diferencia estuvo en las deformaciones unitarias las cuales difirieron en cantidad, para el caso de la presentada por la simulación en ANSYS, este registro un valor máximo de 0,436624242 o 43,6624242%, que es significativamente menor que el registrado en las fichas técnicas y

el presentado por el diagrama real de esfuerzo-deformación, el cual presenta un valor de 6,16 m/m o 616%, esto dependiente de las condiciones propias del material de la probeta en donde las moléculas de PE presentes en el material real cuentan con grados de movilidad superiores, dando de esta manera mayores rangos de desplazamiento y al estar sometidas a tensión permiten una deformación mayor en dichas condiciones. condición con la cual no cuentan los elementos de malla presentados en la simulación en ANSYS, estos están conectados en una estructura compacta, de acuerdo a la configuración que les sea prevista, para el caso de estudio fueron utilizados hexaedros, para resultados más acordes en cuanto a la deformación unitaria a los de la ficha técnica, pueden ser realizadas configuraciones más exhaustivas y avanzadas en las condiciones de la simulación, pero no es el motivo de este estudio.

4. Conclusiones

La investigación realizada determina que las propiedades arrojadas en los resultados para la simulación por análisis de elementos finitos usando un mallado basado en la estructura molecular para el material simulado, al no poseer ningún tipo de imperfección o discontinuidad, son las ideales para el HDPE, planteando de este modo que si se construyeran polímeros molécula a molécula estos tendrían mejores propiedades mecánicas, siendo así útil para determinar las propiedades mecánicas de los materiales en condiciones ideales de cristalinidad, no dejando atrás el hecho de que tomando en cuenta condiciones de malla moleculares más complejas pueden ser obtenidos comportamientos mecánicos más cercanos a los reales, pero con costes de máquina mucho mayores en caso de conservar las escalas presentadas a nivel molecular. la clara desventaja presentada por el método de mallado molecular frente al mallado convencional es el tiempo de desarrollo de la malla, los cuales son extensos dependiendo de la complejidad de la estructura molecular del material que se pretenda estudiar, resultando de esta manera más sencilla de elaborar para los metales, los cuales poseen estructuras cristalinas geoméricamente más simples que por ejemplo los polímeros.

En cuanto los elementos finitos obtenidos para las interacciones electro magnéticas, enlaces químicos, repulsión de orbitales y las formas geométricas moleculares bases presentadas por el método RPECV, pueden ser utilizados para la elaboración de módulos de ANSYS o la programación softwares que automatizen el desarrollo de mallas moleculares, presentándose de esta forma como una alternativa al mallado convencional para los casos que lo requieran, para casos de mayor complejidad pueden ser considerados para el mallado factores tales como las ramificaciones, las zonas cristalinas no alineadas dentro del material, las numerosas regiones amorfas, los enrollamientos, las torceduras y entrelazamientos de las cadenas, las impurezas presentadas dentro del material, añadiendo claro mayor exigencia computacional a la hora de ser resuelto, esto en dependencia del material que sea simulado.

5. Agradecimientos

Agradecemos a Dios por bendecirnos la vida, por guiarnos a lo largo de nuestra existencia, ser el apoyo y fortaleza en aquellos momentos de dificultad y de debilidad.

Gracias a nuestros padres por ser los principales promotores de nuestros sueños, por confiar y creer en nuestras expectativas, por los consejos, valores y principios que nos han inculcado, por

la motivación que nos han brindado, por extender su mano cada vez que caemos y sentimos que no podemos más y ser ese apoyo que necesitamos para nuevamente ponernos en pie y recuperar las fuerzas perdidas.

Agradezco a nuestros docentes de la universidad de pamplona, por haber compartido sus conocimientos a lo largo de la preparación de nuestra profesión, de manera especial, al ingeniero Edison Martínez Oviedo tutor de nuestro proyecto y al ingeniero Bladimir Azdrubal Ramon quienes han guiado con su paciencia, y su rectitud como docentes, y a la ciudad de pamplona y a su universidad por abrir sus puertas y recibirme con los brazos abiertos permitiéndome adquirir estudio, vivienda y experiencias de vida que han contribuido en una formación para el resto de la vida.

References

- Aghdasi, P., Ansari, R., Rouhi, S., & Goli, M. (2019). On the elastic and plastic properties of the bismuthene adsorbed by H, F, Cl and Br atoms. *Superlattices and Microstructures*, *135*(March 2020), 106242. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2019.106242>
- Alexander, C. ., & Sadiku, M. N. O. (2006). *Fundamentos de circuitos electricos* (3rd ed., Issue 1). <https://doi.org/10.16309/j.cnki.issn.1007-1776.2003.03.004>
- Bocko, J., Lengvarský, P., & Pástor, M. (2019). Estimation of material properties of carbon nanotubes using finite element method. *Strojnický Casopis*, *69*(2), 7–14. <https://doi.org/10.2478/scjme-2019-0014>
- Brown, T. L., LeMay, H. E. J., Bursten, B. E., & Mutphy, C. J. (2009). *QUIMICA la ciencia central* (11th ed.). PEARSON EDUCACION, SA.
- Chang, R., & Goldsby, K. A. (2013). *Química* (11th ed.). McGrawHill.
- Firouz-Abadi, R. D., Moshrefzadeh-Sany, H., Mohammadkhani, H., & Sarmadi, M. (2016). A modified molecular structural mechanics model for the buckling analysis of single layer graphene sheet. *Solid State Communications*, *225*, 12–16. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2015.10.009>
- Ghaderi, S. H., & Hajiesmaili, E. (2013). Nonlinear analysis of coiled carbon nanotubes using the molecular dynamics finite element method. *Materials Science and Engineering A*, *582*, 225–234. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2013.05.060>
- Giannopoulos, G. I. (2017). Mechanical behavior of planar borophenes: A molecular mechanics study. *Computational Materials Science*, *129*, 304–310. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.12.045>
- Hajian, M., & Moradi, M. (2019). Stochastic fracture analysis of cracked nano-graphene sheets by scaled boundary finite element method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, *98*(May 2018), 54–63. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2018.10.005>
- Hernandez, S. A., & Fonseca, A. F. (2017). Anisotropic elastic modulus, high Poisson's ratio and negative thermal expansion of graphynes and graphdiynes. *Diamond and Related Materials*, *77*(June), 57–64. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2017.06.002>
- Honarmand, M., & Moradi, M. (2018). Scaled boundary finite element simulation and modeling of the mechanical behavior of cracked nanographene sheets. In *Superlattices and Microstructures* (Vol. 118). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2018.04.029>
- Hughes, D. J., Mahendrasingam, A., Oatway, W. B., Heeley, E. L., Martin, C., & Fuller, W. (1997). A simultaneous SAXS/WAXS and stress-strain study of polyethylene deformation at high strain rates. *Polymer*, *38*(26), 6427–6430. [https://doi.org/10.1016/S0032-3861\(97\)00351-0](https://doi.org/10.1016/S0032-3861(97)00351-0)
- Ira N. Levine. (2001). *Química Cuántica Levine.pdf* (P. HALL (ed.); 5th ed., Vol. 12, Issue 6). PEARSON EDUCACION, SA. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/741517>
- Khani, N., Yildiz, M., & Koc, B. (2016). Elastic properties of coiled carbon nanotube reinforced nanocomposite: A finite element study. *Materials and Design*, *109*, 123–132. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2016.06.126>
- Korobeynikov, S. N., Alyokhin, V. V., & Babichev, A. V. (2018). On the molecular mechanics of single layer graphene sheets. *International Journal of Engineering Science*, *133*, 109–131. <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2018.09.001>
- Lee, J. H., & Lee, B. S. (2012). Modal analysis of carbon nanotubes and nanocoones using FEM. *Computational Materials Science*, *51*(1), 30–42. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.06.041>
- Liu, Y. (2003). Lecture Notes: Introduction to the Finite Element Method. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering*, *217*(6), 461–473. <https://doi.org/10.1243/095440703766518096>
- Lu, J., Sue, H. J., & Rieker, T. P. (2001). Dual crystalline texture in HDPE blown films and its implication on mechanical properties. *Polymer*, *42*(10), 4635–4646. [https://doi.org/10.1016/S0032-3861\(00\)00719-9](https://doi.org/10.1016/S0032-3861(00)00719-9)
- Lu, X., & Hu, Z. (2012). Mechanical property evaluation of single-walled carbon nanotubes by finite element modeling. *Composites Part B: Engineering*, *43*(4), 1902–1913. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2012.02.002>
- Marenčić, E., Ibrahimbegovic, A., Sorić, J., & Guidault, P. A. (2013). Homogenized elastic properties of graphene for small deformations. *Materials*, *6*(9), 3764–3782. <https://doi.org/10.3390/ma6093764>
- MARGARITA DEL ROCÍO MARTÍNEZ BUSTAMANTE, D. B. P. Z. (2015). *SIMULACIÓN POR ORDENADOR MEDIANTE EL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS Y OPTIMIZACIÓN POR EL MÉTODO DE INGENIERÍA ROBUSTA, DE CONECTORES PARA ESTANTERÍA METÁLICA*. 89.
- Nasdala, L., Kempe, A., & Rolfes, R. (2012). Are finite elements appropriate for use in molecular dynamic simulations? *Composites Science and Technology*, *72*(9), 989–1000. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2012.03.008>
- Nasdala, L., Kempe, A., & Rolfes, R. (2015). An elastic molecular model for rubber inelasticity. *Computational Materials Science*, *106*, 83–99. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.04.036>
- Overney, G., Zhong, W., & Tománek, D. (1993). Structural

- rigidity and low frequency vibrational modes of long carbon tubules. *Zeitschrift Für Physik D Atoms, Molecules and Clusters*, 27(1), 93–96. <https://doi.org/10.1007/BF01436769>
- Rodrigues, F. C., Silvestre, N., & Deus, A. M. (2017). Nonlinear mechanical behaviour of γ -graphyne through an atomistic finite element model. *Computational Materials Science*, 134(August 2018), 171–183. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.03.051>
- Rouhi, S., & Ansari, R. (2012). Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 44(4), 764–772. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2011.11.020>
- Serway, R. A., & Emérito, John W. Jewett, J. (2009). *FÍSICA para ciencias e ingeniería con Física Moderna* (Sergio R. Cervantes González (ed.); Volumen 2.). cengege learning.
- Shahnazari, A., Ansari, R., & Rouhi, S. (2017). On the stability characteristics of zigzag phosphorene nanotubes: A finite element investigation. In *Journal of Alloys and Compounds* (Vol. 702). Elsevier B.V. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.01.265>
- TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, P. D. (1999). *Introducción al método del elemento finito* (M. G. M. Pablo Eduardo Roig Vázquez, Ajnando Castañeda Conález & Edición (eds.); segunda). Prentice-Hall. Inc.
- Young, H. D., Freedman, R. A., & Ford, A. L. (2013). *FÍSICA UNIVERSITARIA CON FÍSICA MODERNA* (13th ed.). PEARSON EDUCACION, SA.
- Yu, M. F., Files, B. S., Arepalli, S., & Ruoff, R. S. (2000). Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties. *Physical Review Letters*, 84(24), 5552–5555. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.5552>

1. INTRODUCCION

La ley de Hooke propuesta por el físico inglés Robert Hooke, fue el punto de partida para el estudio de las propiedades mecánicas de los materiales, de la constante elástica k de su ley se derivan muchas otras constantes, como el módulo de Young E , el módulo de cizalladura G , coeficiente Poisson ν , módulo de compresibilidad K , entre otras. Todas las anteriores constantes se relacionan con las propiedades mecánicas de los enlaces químicos presentes en los materiales de los que están compuestos los cuerpos. La mecánica de materiales a partir del siglo XX y muchos otros campos de la física han sido estudiados por procedimientos alternativos a los métodos analíticos infinitesimales, dichas técnicas han ayudado a que distintos problemas complejos de resolver puedan haber sido resueltos de formas muy aproximadas a la solución analítica, estos pueden ser conocidos como métodos de discretización, por ejemplo, el método de los elementos finitos desarrollado desde los años 40, ha sido uno de los más utilizados por sus cualidades de convergencia y su relativa facilidad de comprensión, consiste en la discretización de ecuaciones diferenciales continuas o sistemas continuos, descomponiéndolos en elementos tales como barras, vigas, o cuerpos geométricos (las cuales no serán tomadas en cuenta), unidimensionales, bidimensionales y tridimensionales, cada elemento utilizado según la necesidad. Para la mecánica de materiales, los elementos barra son elementos que soportan solo cargas axiales, y los elementos viga cargas axiales, flexión y torsión. Los enlaces moleculares analizados a través de la ley de Coulomb, pueden ser representados como barras largas que se extienden desde el centro de un átomo hasta el otro, pudiendo ser estos representados por el método de los elementos finitos como barras o vigas, con átomos a cada extremo, de esta manera podemos entender las estructuras moleculares como arreglos estructurales.

En este proyecto se buscó simular a través del método de elementos finitos el comportamiento mecánico de una probeta de polímero, desde su estructura molecular, representada como arreglos estructurales de barras, formando el objeto por completo; de este modo se llegó a un comportamiento más real del objeto simulado, aproximándose al comportamiento mecánico en ensayos reales, llegando de esta forma a un método alternativo para el estudio del comportamiento mecánico de materiales sometidos a distintos tipos de esfuerzo. Mediante la utilización de un software programado en Python o Matlab se planeó llegar a una solución computacional, la cual será comparada con los resultados de ensayos de tracción, compresión, entre otros. Se llegó a concretar un método alternativo más realista que permite el estudio y la comprensión de la mecánica de materiales.

2. JUSTIFICACION

El método de elementos finitos sin lugar a dudas como cualquier otro método no está exento de lagunas, como se mencionó anteriormente por Margarita del Rocío Martínez y Diego Benigno Patiño (MARGARITA DEL ROCÍO MARTÍNEZ BUSTAMENTE, 2015) en su tesis de maestría, “simulación por ordenador mediante MEF y optimización por el método de ingeniería robusto, de conectores para estantería metálica”, algunas de las dificultades radican en los ajustes y arreglos de la geometría los cuales toman mucho tiempo y generan con frecuencia problemas de mal estructurado del mallado e inconstante grado de convergencia de la solución aproximada en comparación a la solución exacta en diferentes puntos, por esto encontramos necesario una discretización más propia del material, en la cual se tenga en cuenta la estructura atómica y las propiedades electromagnéticas de los enlaces químicos presentes en esta para la creación de los elementos que constituyen la malla, lo cual nos hace prescindir de la necesidad de hacer arreglos a la geometría , debido a que esta sería estándar específicamente para el material del cual este constituido el objeto; de acuerdo con lo anterior muy probablemente se obtendrían datos más aproximados a los reales que a los arrojados por un mallado arbitrario y con elementos comúnmente utilizados para el método de elementos finitos y por esta razón se lleva a cabo esta investigación, verificando qué tan factible sería esta nueva discretización. sin lugar a dudas este desarrollo traería grandes beneficios a gran parte de la población académica y muchas de otras áreas en las cuales el MEF sea ampliamente utilizado.

3. OBJETIVOS

3.1 OBJETIVO GENERAL

Comparar el comportamiento mecánico por análisis de elementos finitos usando un mallado basado en la estructura molecular y mallado convencional.

3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1. Obtener el elemento finito de los distintos enlaces moleculares del desarrollo matemático y numérico de las ecuaciones diferenciales que gobiernan el fenómeno y así construir el elemento molécula de la probeta.
2. Seleccionar un material de la familia de los polímeros con estructura molecular simple.
3. Desarrollar una simulación utilizando un mallado basado en la estructura molecular de la probeta del material seleccionado.
4. Desarrollar una simulación utilizando un mallado convencional de la probeta del material seleccionado.
5. Comparar e indagar los resultados obtenidos de las simulaciones del mallado basado en la estructura molecular y el mallado convencional, con los datos de la ficha técnica del material seleccionado, verificando así la eficacia de la discretización fundamentada en la estructura molecular del material.

4. ESTADO ACTUAL

El comportamiento de los materiales esta intrínsecamente ligado a los fenómenos eléctricos de los enlaces químicos presentes en la molécula de la que están conformados, los diferentes tipos como lo son los enlaces covalentes (simple, doble, triple), iónico, por puente de hidrogeno, enlace metálico, entre otros. Dicho comportamiento fue caracterizado y formulado por Charles-Augustin de Coulomb(Serway & Emérito, John W. Jewett, 2009). De esta se desarrollaron un conjunto de ecuaciones diferenciales relacionadas con la teoría electro-magnética que fueron resumidas en las leyes de maxwell, las anteriormente mencionadas explican el comportamiento de los sumideros y fuentes eléctricas (ley de Gauss para el campo eléctrico), flujos magnéticos (ley de Gauss para el campo magnético), e inducción de campos magnéticos y eléctricos (ley de Faraday y ley de ampere). Debido a lo que fue descubierto pudieron ser comprendidos los comportamientos de la materia niveles moleculares, se dieron grandes avances en lo que respecta a las configuraciones geométricas de las moléculas y fue desentrañado este aspecto de la materia.

La mecánica de materiales a partir del siglo XX y muchos otros campos de la física han buscado procedimientos alternativos a los métodos analíticos infinitesimales, dichas técnicas han ayudado a que distintos problemas complejos de solucionar puedan haber sido resueltos de formas muy aproximadas a la solución analítica, estos pueden ser conocidos como métodos de discretización, los cuales dividen en porciones más pequeñas un todo y describe cada fracción por medio de una expresión algebraica simple, uniendo todo nuevamente y encontrando una solución muy cercana. Uno de estos métodos populares es, por ejemplo; el método de los elementos finitos, que fue desarrollado desde los años 40, este ha sido uno de los más utilizados por sus cualidades de convergencia y su relativa facilidad de comprensión. Se sobreentiende que el presente proyecto tiene como base teórica y como fundamento este método, el cual consiste en el fraccionamiento de un medio continuo, tal como dice el autor TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D., P.E en su libro *introducción al estudio del elemento finito en ingeniería* (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999)

En este método de análisis, una región compleja que define un continuo se discretiza en formas geométricas simples llamadas elementos finitos. Las propiedades del material y las relaciones gobernantes. son consideradas sobre esos elementos y expresadas en términos de valores desconocidos en los bordes del elemento. Un proceso de ensamble, cuando se consideran debidamente las cargas y restricciones, da lugar a un conjunto de ecuaciones. La solución de esas ecuaciones nos da el comportamiento aproximado del continuo.

Según lo anteriormente referenciado un elemento finito es una fracción de muchas, que son parte de la descomposición en porciones geométricas más pequeñas de área, volumen o cuerpo mucho más grande. En este método no se cuenta con una

descomposición geométrica estándar, sino que pueden ser utilizadas distintas geometrías según el estudio lo requiera, estas se clasifican en dependencia de los grados de libertad en posean en los nodos que tengan. varios de los elementos usados son por ejemplo resortes y barras que son elementos con un solo grado de libertad en sus nodos, las vigas por otro lado son elementos que pueden tener hasta seis grados de libertad, otros de estos son los elementos tetraédricos, hexaédricos y pentaédricos, entre muchos otros que son composiciones de barras. Los anteriores se describen matemáticamente según sus grados de libertad y las propiedades del material del cual está conformado el medio continuo, definiendo de esta forma su comportamiento físico en diferentes condiciones de carga, como puede ser en tensión, compresión, torsión y momento. A continuación, se explicarán las aplicaciones que actualmente les son dadas a los elementos finitos.

4.1 Barras y armaduras

En el estudio de los elementos finitos se encontraron diversas aplicaciones en muchos campos, uno de estos campos de aplicación que fue en la resolución de problemas en elementos estructurales. Como primer elemento de aplicación encontramos las barras, estas son utilizadas en gran medida en el MEF. Para la mecánica de materiales, los elementos barra son elementos que soportan solo cargas axiales, tanto en compresión como en tensión, por lo tanto, solo poseen un solo grado de libertad en cada nodo que la conforma, este se encontraría a lo largo del elemento.

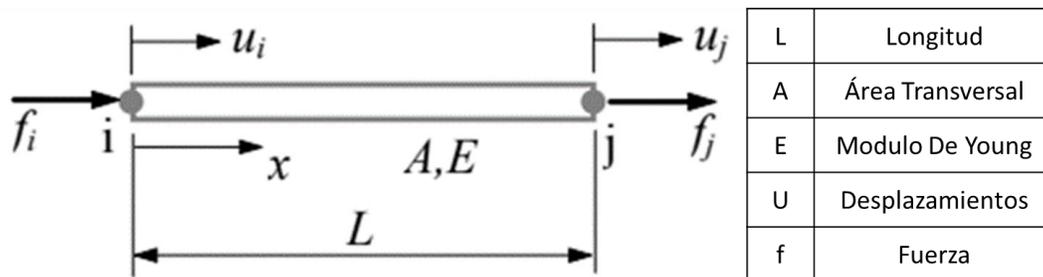


Ilustración 1. representación de elemento barra con sus respectivas variables. Lecture notes: finite element method, yijun liu(Liu, 2003)

En la anterior ilustración obtenida del libro Lecture notes: finite element method del autor yijun liu, se puede apreciar una barra de longitud L que une los puntos i y j, sobre los cuales se ejercen fuerzas, f_i y f_j , en el sentido longitudinal de la barra, generando así los desplazamientos, u_i y u_j , sobre el eje x. A partir de esta interpretación se desarrollan las siguientes ecuaciones utilizando el método de galerkin aplicado sobre la ecuaciones de la ley de hooke, esfuerzo axial y deformación unitria:

$$k^e = \frac{E_e A_e}{l_e} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (1)$$

$$F^e = \frac{A_e l_e f_e}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$\frac{E_e A_e}{l_e} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i \\ u_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_i \\ F_j \end{bmatrix} \quad KX = F \quad (3)$$

Las anteriores expresiones algebraicas expresan el comportamiento lineal de una barra, k^e es la constante de elasticidad del elemento que algebraicamente se describe por una matriz como se puede ver en la ecuación 1 la cual se conoce como matriz de rigidez, E_e es el módulo de Young, A_e el área transversal, l_e la longitud inicial del elemento, F^e es la fuerza de cuerpo o la fuerza que ejerce la masa sobre el mismo, en dónde A^e es el área transversal, X es el vector de deformación. Las barras son mayormente utilizadas en la composición de armaduras, estas se unen en sus extremos con el objetivo de formar una estructura que cuente con soporte y distribución de cargas, estas componen en mayor medida la aplicación total de los elementos barra. tal como dice el autor TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D., P.E en su libro *introducción al estudio del elemento finito en ingeniería* (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999)

En una armadura se requiere que todas las cargas y reacciones estén aplicadas sólo en los nodos y que todos los miembros estén conectados entre sí en sus extremos por medio de articulaciones sin fricción.

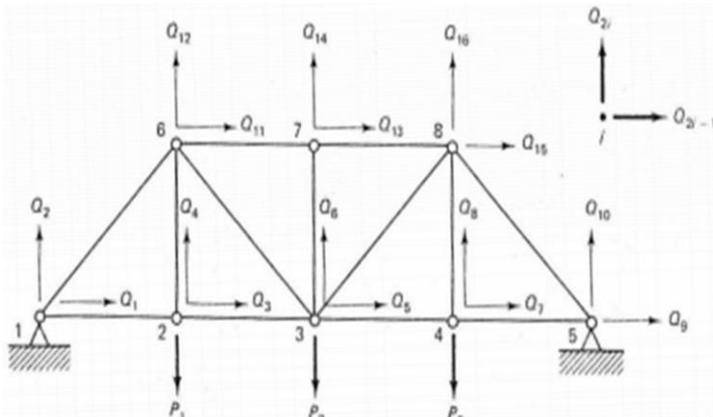


Ilustración 2. Armadura compuesta de barras con aplicación de cargas en cada uno de sus nodos TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D., P.E en su libro *introducción al estudio del elemento finito en ingeniería* (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999)

en la ilustración 2 podemos observar una armadura de ocho nodos y trece barras, en la cual los elementos cuentan con más de una dimensión, en este caso dos, la composición de la armadura cuenta con barras con diversas inclinaciones. Para una barra inclinada la expresión algebraica anterior se modifica mediante el producto con una nueva matriz que contenga los respectivos valores que expresen su dirección, esta es llamada matriz de transformación como es mencionado por TIRUPATHI R.

CHANDRUPATLA, PH.D., P.E en su libro introducción al estudio del elemento finito en ingeniería(TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999).

$$L = \begin{bmatrix} l & m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & l & m \end{bmatrix} \quad (4)$$

$$l = \frac{x_2 - x_1}{l^e} = \cos \theta_x \quad (5)$$

$$m = \frac{y_2 - y_1}{l^e} = \cos \theta_y \quad (6)$$

$$l^e = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2} \quad (7)$$

La matriz de la ecuación 4 contiene los valores de los vectores unitarios o los cosenos directores l componente director con respecto al eje x y m componente director con respecto al eje y , ambos componentes de un vector unitario que expresa la posición de la barra.

$$k^e = L^T k L \quad (8)$$

$$k^e = \frac{E^e A^e}{l^e} \begin{bmatrix} l^2 & lm & -l^2 & -lm \\ lm & m^2 & -lm & -m^2 \\ -l^2 & -lm & l^2 & lm \\ -lm & -m^2 & lm & m^2 \end{bmatrix} \quad (9)$$

$$F^e = \frac{A_e l_e f_e}{2} \begin{bmatrix} l \\ m \\ l \\ m \end{bmatrix} \quad (10)$$

$$\frac{E^e A^e}{l^e} \begin{bmatrix} l^2 & lm & -l^2 & -lm \\ lm & m^2 & -lm & -m^2 \\ -l^2 & -lm & l^2 & lm \\ -lm & -m^2 & lm & m^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u'_{1i} \\ v'_{1j} \\ u'_{2i} \\ v'_{2j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f'_{1i} \\ f'_{2j} \\ f'_{2i} \\ f'_{1j} \end{bmatrix} \quad KX = F \quad (11)$$

La ecuación 8 nos muestra de qué forma se opera la matriz de rigidez k con la matriz de transformación L , el producto de las anteriores nos da como resultado la expresión 9 que sería la expresión de la matriz de rigidez para espacios bidimensionales, de igual forma nos encontramos con la expresión 10 el vector de la fuerza de cuerpo del

elemento F^e , y la ecuación 11 que sería la generalización del elemento finito de la barra, con su respectivo vector de deformación X .

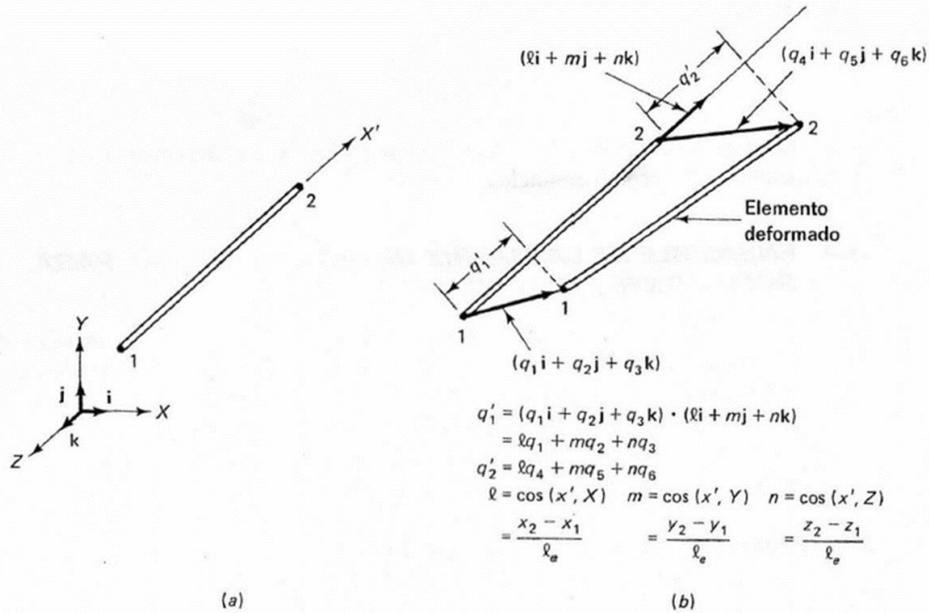


Ilustración 3. a) barra suspendida en un espacio coordenado en tres dimensiones, b) formulación de elemento deformado TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D., P.E en su libro introducción al estudio del elemento finito en ingeniería (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D.

La ilustración 3 nos muestra el análisis respectivo de una barra para espacio de tres ejes coordenados, en estos el procedimiento es el mismo que lo anteriormente escrito, se obtiene una matriz de transformación L y se desarrolla un producto con la matriz de rigidez del elemento.

$$L = \begin{bmatrix} l & m & n & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & l & m & n \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$l = \frac{x_2 - x_1}{l^e} = \cos \theta_x \quad (13)$$

$$m = \frac{y_2 - y_1}{l^e} = \cos \theta_y \quad (14)$$

$$n = \frac{z_2 - z_1}{l^e} = \cos \theta_z \quad (15)$$

$$l^e = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2} \quad (16)$$

Con la aplicación de la anterior matriz de transformación las dimensiones de la matriz de rigidez pueden ajustarse a tres dimensiones, dando como resultado la función general.

$$F^e = \frac{A_e l_e f_e}{2} \begin{bmatrix} l \\ m \\ n \\ l \\ m \\ n \end{bmatrix} \quad (17)$$

$$\frac{E^e A^e}{l^e} \begin{bmatrix} l^2 & lm & ln & -l^2 & -lm & -ln \\ lm & m^2 & mn & -lm & -m^2 & -mn \\ ln & mn & n^2 & -ln & -mn & -n^2 \\ -l^2 & -lm & -ln & l^2 & lm & ln \\ -lm & -m^2 & -mn & lm & m^2 & mn \\ -ln & -mn & -n^2 & ln & mn & n^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u'_{1i} \\ v'_{1j} \\ w'_{1k} \\ u'_{2i} \\ v'_{2j} \\ w'_{2k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f'_{1i} \\ f'_{2j} \\ f'_{2i} \\ f'_{2j} \end{bmatrix} \quad KX = F \quad (18)$$

4.2 Vigas y marcos

Dentro del panorama de los elementos estructurales las vigas son elementos que han sido considerados dentro del MEF, estas son elementos que son capaces de soportar mayor diversidad de cargas que las barras, por lo tanto, cuenta con más grados de libertad en sus extremos o nodos. Las vigas son elementos que pueden ser sometidos a tensión o compresión o en general cargas axiales, flexión, y torsión, teniendo de este modo con seis grados de movimiento.

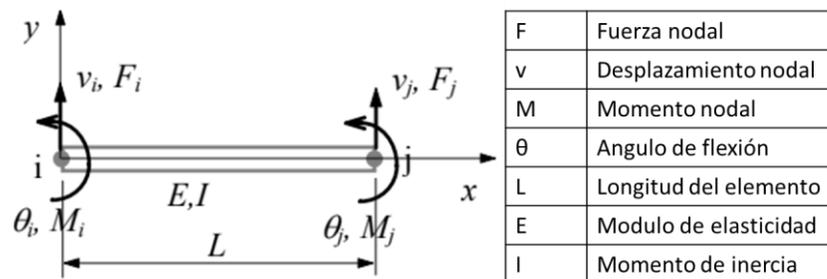


Ilustración 4.representación de elemento viga con sus respectivas variables. Lecture notes: finite element method, yijun liu(Liu, 2003)

En la anterior ilustración obtenida del libro Lecture notes: finite element method del autor yijun liu, se puede apreciar una viga de longitud L que une los puntos i y j, sobre estos son ejercidas las fuerzas, f_i y f_j , y los momentos, M_i y M_j , en el sentido longitudinal de la barra y en cada extremo para los momentos, generando así desplazamientos, u_i y u_j , y ángulos de flexión, θ_i y θ_j , sobre el eje de la viga. A partir de esta interpretación se desarrollan las siguientes ecuaciones utilizando el método de galerkin aplicado

sobre la ecuaciones de la ley de hooke, esfuerzo axial, esfuerzo de flexion, deformacion unitria:

$$k^e = \begin{bmatrix} \frac{EA}{L} & 0 & 0 & -\frac{EA}{L} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{12EI}{L^3} & \frac{6EI}{L^2} & 0 & -\frac{12EI}{L^3} & \frac{6EI}{L^2} \\ 0 & \frac{6EI}{L^2} & \frac{4EI}{L} & 0 & -\frac{6EI}{L^2} & \frac{2EI}{L} \\ -\frac{EA}{L} & 0 & 0 & \frac{EA}{L} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{12EI}{L^3} & -\frac{6EI}{L^2} & 0 & \frac{12EI}{L^3} & -\frac{6EI}{L^2} \\ 0 & \frac{6EI}{L^2} & \frac{2EI}{L} & 0 & -\frac{6EI}{L^2} & \frac{4EI}{L} \end{bmatrix} \quad (19)$$

$$F^e = \begin{bmatrix} A_e l_e f_e \\ \frac{2}{pl_e} \\ \frac{2}{pl_e^2} \\ \frac{12}{A_e l_e f_e} \\ \frac{2}{pl_e} \\ \frac{2}{pl_e^2} \\ \frac{12}{12} \end{bmatrix} \quad (20)$$

$$\begin{bmatrix} \frac{EA}{L} & 0 & 0 & -\frac{EA}{L} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{12EI}{L^3} & \frac{6EI}{L^2} & 0 & -\frac{12EI}{L^3} & \frac{6EI}{L^2} \\ 0 & \frac{6EI}{L^2} & \frac{4EI}{L} & 0 & -\frac{6EI}{L^2} & \frac{2EI}{L} \\ -\frac{EA}{L} & 0 & 0 & \frac{EA}{L} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{12EI}{L^3} & -\frac{6EI}{L^2} & 0 & \frac{12EI}{L^3} & -\frac{6EI}{L^2} \\ 0 & \frac{6EI}{L^2} & \frac{2EI}{L} & 0 & -\frac{6EI}{L^2} & \frac{4EI}{L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i \\ v_i \\ \theta_i \\ u_j \\ v_j \\ \theta_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_e l_e f_e \\ \frac{2}{pl_e} \\ \frac{2}{pl_e^2} \\ \frac{12}{A_e l_e f_e} \\ \frac{2}{pl_e} \\ \frac{2}{pl_e^2} \\ \frac{12}{12} \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} KX \\ = F \end{matrix} \quad (21)$$

Las anteriores expresiones algebraicas expresan el comportamiento lineal de una viga, k^e es la constante de elasticidad del elemento que algebraicamente se describe por

una matriz como se puede ver en la ecuación 19, a diferencia de la matriz de rigidez para una barra ecuación 1, la matriz de rigidez de una viga cuenta con las posiciones no solo de los efectos de tensión o compresión, que serían las posiciones (1,1), (1,4), (4,1) y (4,4), que también se encuentran presentes en la matriz de rigidez de la barra, sino, que las posiciones (2,2), (2,3), (3,2), (3,3) y posiciones similares presentes son para efectos de torsión, flexión y efectos combinados. I es el momento de inercia dependiente del perfil de la viga, E_e es el módulo de Young, A_e el área transversal, l_e la longitud inicial del elemento, F^e es la fuerza de cuerpo o la fuerza que ejerce la masa sobre el mismo, vector que cuenta con los efectos de tensión o compresión en sus posiciones (1,1) y (4,1), en donde A^e es el área transversal, X es el vector de deformación. Las vigas son mayormente utilizadas en la composición de marcos estructurales, estas se unen en sus extremos de forma rígida con el objetivo de formar una estructura que cuente con soporte y distribución de cargas axiales, transversales. tal como dice el autor TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D., P.E en su libro *introducción al estudio del elemento finito en ingeniería* (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999)

“Las vigas son miembros esbeltos que se usan para soportar cargas transversales. Los miembros horizontales largos usados en edificios y puentes, y las flechas apoyadas en cojinetes son algunos ejemplos de vigas. A las estructuras complejas con miembros rígidamente conectados se les llama marcos y pueden encontrarse en estructuras de automóviles y aviones, así como en máquinas y mecanismos transmisores de fuerza y movimiento”.

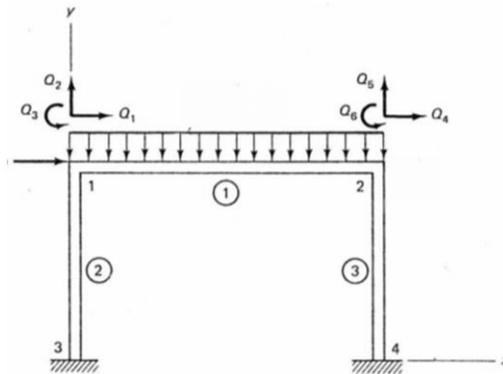


Ilustración 5. marco con aplicación de cargas distribuida transversales y momentos en cada uno de sus nodos TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D., P.E en su libro *introducción al estudio del elemento finito en ingeniería* (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999)

Con la aplicación de una matriz de transformación las dimensiones de la matriz de rigidez pueden ajustarse en dos, y tres dimensiones según la necesidad.

4.3 Elementos tetraédricos, hexaédricos y pentaédricos

El método de elementos finitos se extiende más allá de los elementos estructurales. Su versatilidad y aplicación es muy usada en el campo del diseño mecánico, abarca el modelamiento y simulación de cuerpos, los elementos utilizados para el uso en estos campos son los cuerpos tetraédricos, hexaédricos y pentaédricos, principalmente los dos primeros. En la ilustración 6 podemos ver los elementos más usados en el MEF para la modelación de geometrías complejas.

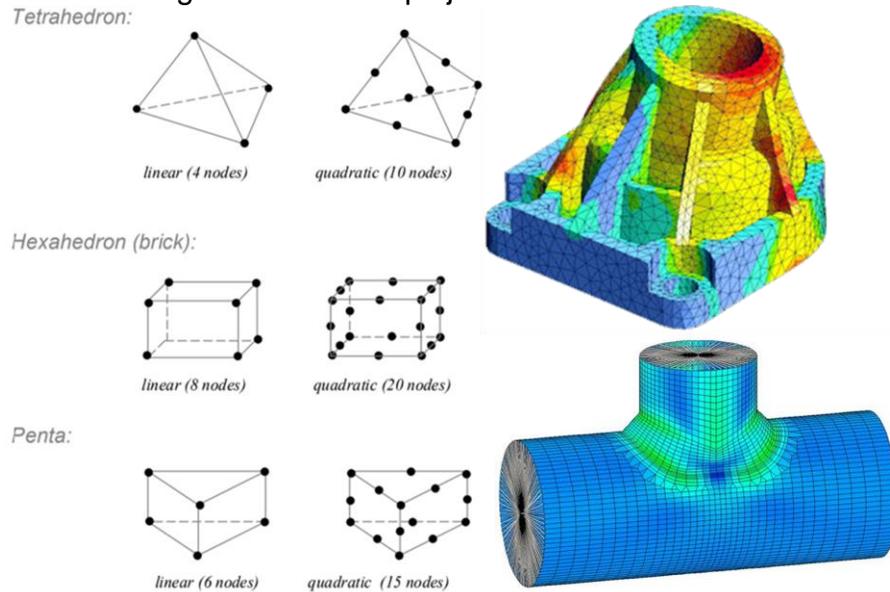


Ilustración 6. al lado izquierdo representación de elementos tetraedro, hexaedro y pentaedro, de lado diestro geometrías simuladas con estos elementos. Lecture notes: finite element method, yijun liu(Liu, 2003)

En la ilustración 6 a lado izquierdo podemos apreciar la forma geométrica utilizada para dicho análisis, entre estas podemos encontrar un tetraedro de cuatro nodos, que se ubican en cada uno de sus vértices, también podemos observar una variante en la cual la cantidad de nodos es multiplicada debido a que se ubica uno nuevo en medio de la distancia que une a cada uno de los que ya había, encontrando los nodos a su vez en el centro de cada una de las aristas, la forma tetraédrica es utilizada para construir cuerpos geométricos más complejos, apilando y conectado tetraedros pequeños hasta conseguir dicha geometría, como puede ser apreciado en el lado derecho de la ilustración 6, en donde se puede observar un acoplador que está formado por miles de tetraedros diminutos, que se encuentran conectados y confinados dentro del contorno de su geometría. Contemporáneo al caso anterior se observa en la ilustración 6 la presencia de otra de las discretizaciones geométricas utilizadas, los hexaedros son cuerpo con ocho nodos, cada uno está ubicado en los vértices del cuerpo, una variante de este es el hexaedro con nodos adicionales en el centro de sus aristas, de igual forma son utilizado para formar cuerpos geométricos complejos conectándolos y acoplándolos dentro de su geometría. La formulación matemática de este tipo de elementos consta de la división del volumen en

determinado número de nodos, siendo asignado a cada nodo un número y sus respectivas coordenadas espaciales.

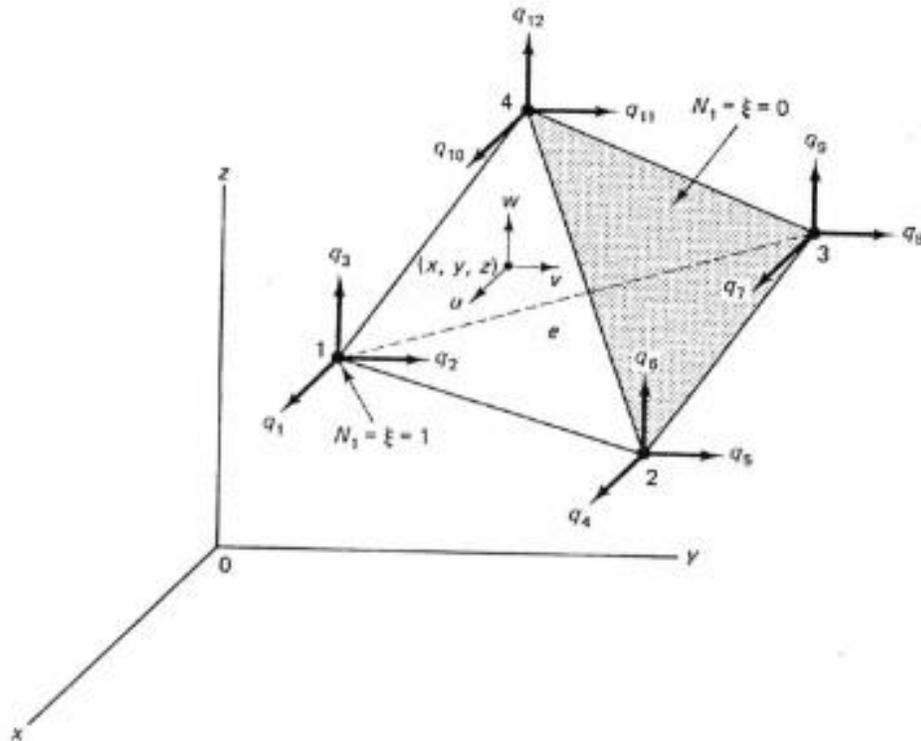


Ilustración 7. Elemento tetraedro con tres grados de libertad en cada uno de sus nodos. TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D., P.E en su libro introducción al estudio del elemento finito en ingeniería(TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999).

En la ilustración anterior se puede observar un elemento tetraedro ubicado en un espacio con coordenadas cartesianas tridimensionales, cada uno de los nodos del cuerpo posee una posición en el espacio y cuenta con tres grados de libertad representados por la letra q , cada una de sus libertades está asociada a los ejes es lo que pueden ser desplazados. En el libro introducción al estudio del elemento finito en ingeniería del autor TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, en el capítulo 9 Problemas tridimensionales y análisis de esfuerzos, puede ser encontrado el procedimiento detallado de cómo obtener la matriz rigidez, el vector de fuerza interna y el vector de tracción del cuerpo(TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999).

$$K^e = V_e B^T D B \quad (22)$$

$$\sigma = D B q \quad (23)$$

$$(24)$$

$$F^e = \frac{V^e}{4} [f_x \ f_y \ f_z \ f_x \ f_y \ f_z \ f_x \ f_y \ f_z \ f_x \ f_y \ f_z]^T$$

$$T^e = \frac{A^e}{4} [f_x \ f_y \ f_z \ f_x \ f_y \ f_z \ f_x \ f_y \ f_z \ f_x \ f_y \ f_z]^T \quad (25)$$

El termino B presente en la ecuación 22, es la matriz de deformación unitaria-desplazamiento, la cual está dada por

$$B = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 & 0 & A_{12} & 0 & 0 & A_{13} & 0 & 0 & -\tilde{A}_1 & 0 & 0 \\ 0 & A_{21} & 0 & 0 & A_{22} & 0 & 0 & A_{23} & 0 & 0 & -\tilde{A}_2 & 0 \\ 0 & 0 & A_{31} & 0 & 0 & A_{32} & 0 & 0 & A_{33} & 0 & 0 & -\tilde{A}_3 \\ 0 & A_{31} & A_{21} & 0 & A_{32} & A_{22} & 0 & A_{33} & A_{23} & 0 & -\tilde{A}_3 & -\tilde{A}_2 \\ A_{31} & 0 & A_{11} & A_{32} & 0 & A_{12} & A_{33} & 0 & A_{13} & -\tilde{A}_3 & 0 & -\tilde{A}_1 \\ A_{21} & A_{11} & 0 & A_{22} & A_{12} & 0 & A_{23} & A_{13} & 0 & -\tilde{A}_2 & -\tilde{A}_1 & 0 \end{bmatrix} \quad (26)$$

De la matriz 26 destacan los términos A_{ij} los cuales están determinados por los valores concreto en las posiciones de la siguiente matriz

$$A = J^{-1} = \frac{1}{\det(J)} \begin{bmatrix} y_{24}z_{34} - y_{34}z_{24} & y_{34}z_{14} - y_{14}z_{34} & y_{14}z_{24} - y_{24}z_{14} \\ z_{24}x_{34} - z_{34}x_{24} & z_{34}x_{14} - z_{14}x_{34} & z_{14}x_{24} - z_{24}x_{14} \\ x_{24}y_{34} - x_{34}y_{24} & x_{34}y_{14} - x_{14}y_{34} & x_{14}y_{24} - x_{24}y_{14} \end{bmatrix} \quad (27)$$

Los valores para los términos de x_{ij} , y_{ij} y z_{ij} , de la matriz 27 pueden ser determinados por las siguientes expresiones

$$x_{ij} = x_i - x_j \quad (28)$$

$$y_{ij} = y_i - y_j \quad (29)$$

$$z_{ij} = z_i - z_j \quad (30)$$

Los sub índices i y j en los términos x_i , y_i , z_i , x_j , y_j , z_j , x_{ij} , y_{ij} y z_{ij} , de las ecuaciones anteriores, indican el nodo que está siendo tomado para el cálculo en ese momento. Luego de la matriz 27 podemos destacar el determinante del Jacobiano j de la transformación, el cual es calculado de la matriz que está dada por

$$J = \begin{bmatrix} x_{14} & y_{14} & z_{14} \\ x_{24} & y_{24} & z_{24} \\ x_{34} & y_{34} & z_{34} \end{bmatrix} \quad (31)$$

Por ultimo cabe mencionar para el término D la matriz de simetría del elemento presentada en la ecuación 22, es una matriz de (6×6) que puede ser encontrada en el capítulo 1 conceptos fundamentales del libro introducción al estudio del elemento finito en ingeniería del autor TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA(TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999), en la ecuación 1.15, la cual está dada por

$$D = \frac{E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \begin{bmatrix} 1 - \nu & \nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & 1 - \nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & \nu & 1 - \nu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.5 - \nu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5 - \nu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5 - \nu \end{bmatrix} \quad (32)$$

De la ecuación 32 el término ν es el coeficiente de Poisson del material, E es el módulo de elasticidad del mismo. Con lo anterior puede perfectamente ser simulado el comportamiento mecánico de un cuerpo compuesto por tetraedros, calculando la matriz de rigidez de cada uno, sus vectores de fuerzas externas y su tracción, estos pueden ser relacionados por medio de una matriz de rigidez general, vector de fuerza general, entre otros y ser halladas las deformaciones de los mismos.

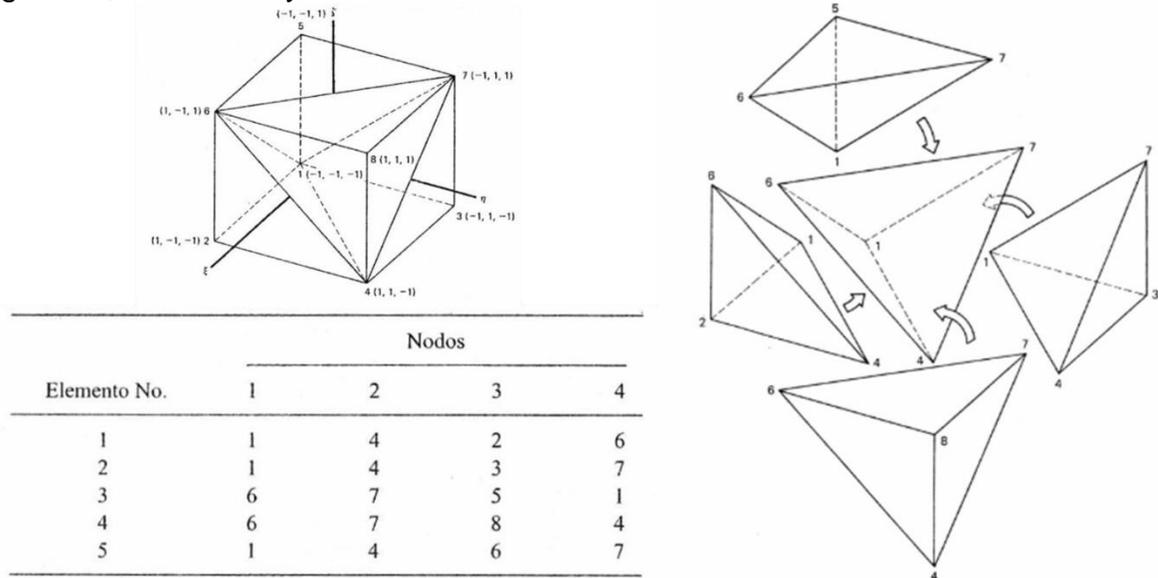


Ilustración 8. Cubo dividido en tetraedros teniendo en sus aristas nodos con su correspondiente numero asignado en la esquina izquierda superior, debajo de este su respectiva matriz de conectividad, y a lado derecho el explotado de los tetraedros que conforman el cubo. TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D., P.E en su libro introducción al estudio del elemento finito en ingeniería(TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999).

En la ilustración 8 podemos ver un cubo dividido en cinco tetraedros los cuales están conectados por una serie de nodos que comparten, en la matriz de conectividad se puede apreciar en la columna Elemento No. El número de elemento que le es asignado

a cada tetraedro y en las columnas al lado derecho los respectivos nodos que forman la pieza. La matriz de conectividad es utilizada para relacionar los elementos entre ellos por medio de algunos nodos que son compartidos y de relacionar a estos dentro de la matriz de rigidez general, dentro del vector de fuerza y el vector de tracción. A lado derecho se puede observar de forma clara cada uno de los elementos que conforman el cubo.

Las ecuaciones y expresiones vectoriales y matriciales anteriormente vistas, son utilizadas para determinar las propiedades de un elemento tetraedro, para elementos de grados superiores como el hexaedro puede ser aplicado el mismo procedimiento, el libro introducción al estudio del elemento finito en ingeniería del autor TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999), en el capítulo 9 Problemas tridimensionales y análisis de esfuerzos, se desarrolla parcialmente para un elemento hexaedro la obtención de la matriz de rigidez, este culmina con la obtención de una integral, por medio de la cual puede ser encontrada matriz antes mencionada.

$$K^e = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 B^T D B |det(J)| d\xi d\eta d\zeta \quad (33)$$

Para el elemento hexaedro es considerado sobre un cubo con aristas de dos unidades colocando el elemento simétricamente en un sistema con coordenadas ξ , η , y ζ , como es mostrado en la ilustración 9.

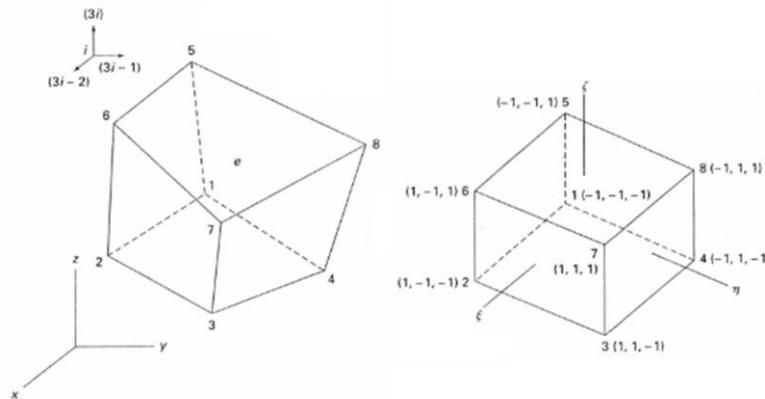


Ilustración 9. Hexaedro con medidas cualesquiera en sus aristas como ejemplificación del elemento a lado izquierdo, y hexaedro mapeado con lados base de dos unidades en un sistema coordenado ξ , η , y ζ , esta representación es usada para definir un sistema coordenado intrínseco base para la forma del elemento, en este se interpolaran las soluciones que serán obtenidas por medio de operaciones algebraica con la matriz de rigidez. **TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D., P.E en su libro introducción al estudio del elemento finito en ingeniería(TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999).**

4.4 Modelo molecular elástico por el MEF

En la actualidad, el método de elementos finitos ha sido aplicado a modelos moleculares con el objetivo de simular su comportamiento. En los trabajos como An elastic molecular model for rubber inelasticity de los autores Lutz Nasdala, Andreas Kempe y Raimund Rolfes(Nasdala et al., 2015), en donde se objetiva la simulación del comportamiento de polímeros. También en On the molecular mechanics of single layer graphene sheets de los autores S.N. Korobeynikova, V.V. Alyokhina y A.V. Babichevc(Korobeynikov et al., 2018), en donde se trabaja en la simulación molecular del grafeno. se utiliza el método de mecánica molecular para el modelamiento del elemento finito de los enlaces moleculares. Es aplicado el método de mecánica molecular para el modelamiento del elemento finito de los enlaces moleculares, de igual forma en los trabajos de Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets de los autores S. Rouhi, y R.Ansari(Rouhi & Ansari, 2012), también en Modal analysis of carbon nanotubes and nanocones using FEM de los autores J.H. Lee, y B.S. Lee(Lee & Lee, 2012), y en Nonlinear analysis of coiled carbon nanotubes using the molecular dynamics finite element method de los autores Seyed Hadi Ghaderi, y Ehsan Hajiesmaili(Ghaderi & Hajiesmaili, 2013) se modela molécula a molécula un resorte de nano tubos de carbono y se evalúa su comportamiento, en todos ejemplos se ha utilizado el modelo de mecánica molecular para el modelamiento de moléculas, cada uno con resultados satisfactorios.

En Homogenized Elastic Properties of Graphene for Small Deformations de los autores Eduard Mareníć, Adnan Ibrahimbegovic, Jurica Sori y Pierre-Alain Guidault (Mareníć et al., 2013), proporciona la cuantificación de las propiedades mecánicas elásticas lineales y no lineales del grafeno sobre la base de la combinación juiciosa de resultados de simulación de mecánica molecular y métodos de homogeneización. En otro trabajo realizado por Filipe C. Rodrigues, Nuno Silvestre, y Augusto M. Deus, presentado en su artículo denominado nonlinear mechanical behaviour of γ -graphyne through an atomistic finite element model (Rodrigues et al., 2017), se presenta un modelo de elementos finitos no lineal para la simulación del comportamiento mecánico en el plano de γ -graphyne. Se simulan diferentes tipos de enlaces (Single C–C, Aromatic C=C, Triple C \equiv C) mediante resortes no lineales, que tienen en cuenta con precisión el diferente comportamiento de las fuerzas interatómicas en tensión y compresión a 0 K de temperatura.

En el trabajo A modified molecular structural mechanics model for the buckling analysis of single layer graphene sheet, de los investigadores R.D. Firouz-Abadi, H. Moshrefzadeh-Sany, H. Mohammadkhani, y M. Sarmadi (Firouz-Abadi et al., 2016), se modifica el modelo clásico de mecánica estructural molecular del grafeno para mejorar su precisión para el análisis de deformaciones transversales. Con este objetivo, se modela una hoja de grafeno de muestra bajo una presión uniforme mediante métodos tanto de dinámica molecular como de mecánica estructural molecular. Las propiedades de sección del elemento de viga, mediante el cual se modelan los enlaces covalentes,

se modifican de modo que se minimiza la diferencia entre los resultados del modelo de mecánica molecular y la simulación de dinámica molecular. Utilizando el modelo modificado, se investiga el comportamiento de pandeo del grafeno bajo una presión de borde uniforme sujeto a diferentes condiciones de contorno para las quiralidades tanto en zigzag como en sillón.

Este artículo nombrado Elastic properties of coiled carbon nanotube reinforced nanocomposite: a finite element study, presentado por Navid Khani, Mehmet Yildiz, Bahattin Koc (Khani et al., 2016), presenta el modelado y análisis de nanocompuestos poliméricos reforzados con nanotubos de carbono enrollados (CCNT). Se proponen un nuevo método algorítmico de generación de elementos de volumen representativo (RVE) y un análisis de elementos finitos basado en RVE para predecir las propiedades elásticas de los nanocompuestos CCNT. Se estudian las propiedades elásticas de los nanocompuestos de polímero CCNT con respecto a su interfase, fracción de volumen, orientación, número de espiras y variaciones geométricas como el diámetro del tubo, el diámetro de la bobina y el ángulo de la hélice utilizando el análisis de elementos finitos propuesto. En un estudio denominado Anisotropic elastic modulus, high Poisson's ratio and negative thermal expansion of graphynes and graphdiynes, realizado por Sergio A. Hernandez, y Alexandre F. Fonseca (Hernandez & Fonseca, 2017), mediante simulaciones clásicas de dinámica molecular tomando como base la mecánica molecular, se calcula el módulo de Young, la relación de Poisson y el coeficiente de expansión térmica lineal (TEC) de los siete tipos de Graphyne (GY) propuestos originalmente y los correspondientes graphydine (GDY). Se investiga por primera vez la dependencia de estas propiedades con la densidad de la estructura. Se encontró un aumento cuadrático de la TEC de las estructuras GY y GDY con la densidad. Se demostró que el módulo elástico de los GY y GDY es más sensible a su densidad que los materiales porosos en general.

Efocando el estudio a otro material basado en el fósforo, en el estudio On the stability characteristics of zigzag phosphorene nanotubes: a finite element investigation, de los autores A. Shahnazari, R. Ansari y S. Rouhi (Shahnazari et al., 2017), Este artículo tiene como objetivo investigar las propiedades mecánicas de los nanotubos de fosforeno en zigzag bajo carga de compresión. Para ello se utiliza un modelo de elementos finitos cuyas propiedades elementales se calculan simulando los enlaces P-P en la estructura de los nanotubos de fosforeno mediante elementos de haz. Se muestra que la fuerza de compresión crítica de los nanotubos de fosforeno en zigzag es significativamente menor que la de los nanotubos de carbono de pared simple con el mismo tamaño y condiciones de contorno. Al investigar el efecto de la relación de aspecto y el radio sobre las características de compresión de los nanotubos de fosforeno, se representa que la fuerza de compresión crítica tiene una relación inversa y directa con el primer y último parámetro geométrico, respectivamente.

En el estudio denominado como On the elastic and plastic properties of the bismuthene adsorbed by H, F, Cl and Br atoms, de los autores P. Aghdasi, R. Ansari, S. Rouhi, y M. Goli (Aghdasi et al., 2019), La teoría de la función de densidad se utiliza aquí para

investigar las propiedades elásticas y plásticas del bismuteno prístino y adsorbido. Los átomos de H, F, Cl y Br se consideran los átomos adsorbentes. Se calculan los módulos elásticos de la nanopláca prístina y adsorbida bajo carga uniaxial y sus módulos de volumen bajo tensión biaxial. Se muestra que la adsorción de la nanopláca de bismuteno por los átomos mencionados conduce a la disminución de sus módulos elásticos y de volumen. La influencia de la adsorción sobre el módulo elástico del bismuteno es más prominente que su efecto del módulo de volumen.

En Mechanical behavior of planar borophenes: A molecular mechanics Study del autor Georgios I. Giannopoulos (Giannopoulos, 2017), El objetivo es proporcionar datos numéricos sobre la respuesta mecánica de tracción en el plano de láminas de boro bidimensionales conocidas como láminas de borofeno o borofenos. El enfoque teórico propuesto se basa en un método de mecánica molecular que utiliza la estructura atómica base de equilibrio de los nanomateriales que se encuentran bajo investigación. Además, incorpora elementos finitos especiales en forma de resorte para aproximarse al campo de fuerza interatómico. En trabajoda como Stochastic fracture analysis of cracked nano-graphene sheets by scaled boundary finite element method de los autores M. Hajian, y M. Moradi (Hajian & Moradi, 2019), se investiga la fractura probabilística de láminas de nanografeno agrietadas mediante el análisis de fracturas estocásticas y el método de elementos finitos de límite escalado por el método de mecánica molecular. En un investigación nombrada Scaled boundary finite element simulation and modeling of the mechanical behavior of cracked nanographene sheets de los autores M.Honarmand, y M. Moradi (Honarmand & Moradi, 2018), en el cual se basó la investigación antes mencionada, fue utilizado el método de elementos finitos de límite escalado (SBFM), se simuló por primera vez una hoja de nanografeno perfecta o grietas. En este análisis, los enlaces de carbono atómicos se modelaron mediante elementos de barra simples con secciones transversales circulares. A pesar de la dinámica molecular (MD), los resultados obtenidos del análisis SBFM son bastante aceptables para grietas de grado cero.

Los autores Xiaoxing Lu, y Zhong Hu, en su artículo Mechanical property evaluation of single-walled carbon nanotubes by finite element modeling (X. Lu & Hu, 2012), Aplicaron la simulación computacional para predecir las propiedades mecánicas de los nanotubos de carbono (CNT) se fue adoptada como una herramienta poderosa en relación con la dificultad experimental. Basado en la mecánica molecular, se fue desarrollado un modelo 3D mejorado de elementos finitos (FE) para nanotubos de carbono de pared simple (SWNT). Se ha consideraron la rigidez a la flexión de la capa de grafeno, así como los potenciales asociados con las interacciones atómicas dentro de un SWNT se evaluaron mediante las energías de deformación de los elementos del haz que sirven como sustituciones estructurales de enlaces covalentes. La deformación fuera del plano de las uniones se distinguió de la deformación en el plano al considerar una sección transversal elíptica para los elementos de la viga. En otro estudio denominado Prediction of the mechanical behavior of double walled-CNTs using a molecular mechanics-based finite element method: Effects of chirality de los investigadores Jaehyeok Doh, y Jongsoo Lee (Marenić et al., 2013), desarrollaron

modelos de elementos finitos de nanotubos de carbono de pared simple (SWCNT) y nanotubos de carbono de pared doble (DWCNT) basados en la teoría de la mecánica molecular para evaluar propiedades mecánicas como el módulo de Young, la resistencia máxima y la deformación de acuerdo con la quiralidad. De igual forma en *Estimation of material properties of carbon nanotubes using finite element method*, de los autores BOCKO Jozef, LENGVARSKÝ Pavol, y PÁSTOR Miroslav (Bocko et al., 2019), El artículo trata de la estimación de las propiedades de los materiales de los nanotubos de carbono de pared simple (SWCNT). Los SWCNT se simulan como marcos, donde los átomos de carbono se reemplazan por nodos y las interacciones interatómicas se reemplazan por haces. La carga de tensión y torsión se aplica a los SWCNT para determinar el módulo elástico, la relación de Poisson, el módulo de corte y la rigidez de la membrana de los SWCNT. Las simulaciones para obtener alargamientos y ángulos de torsión de SWCNT se realizan mediante el método de elementos finitos.

La aplicabilidad de elementos finitos para simulaciones de dinámica molecular de acuerdo con Lutz Nasdala, Andreas Kempe, y Raimund Rolfes, en su artículo *¿Are finite elements appropriate for use in molecular dynamic simulations?* (Nasdala et al., 2012), depende tanto de las dimensiones de la estructura como del tipo de campo de fuerza subyacente. Los elementos de capa y continuo describen las estructuras moleculares solo en un sentido promedio, por lo que no son el tema de este artículo. Por el contrario, los elementos de celosía y viga son candidatos potencialmente atractivos cuando se trata de reproducir con precisión las interacciones atómicas. Sin embargo, se requieren consideraciones especiales para los campos de fuerza que usan no solo potenciales de dos cuerpos, sino también de múltiples cuerpos.

4.4.1 Método de mecánica molecular

Basado en el libro *Química cuántica* quinta edición de Ira N. Levine (Ira N. Levine, 2001), el método de mecánica molecular utiliza un modelo de una molécula compuesta de átomos unidos por enlaces. Utilizando parámetros como el voltaje de enlace y las constantes de fuerza de enlace, permitiendo las interacciones entre átomos no unidos, el método construye una expresión de energía potencial que une a las posiciones atómicas. Este método minimiza la expresión para diferentes isómeros conformacionales moleculares y proporciona geometrías de equilibrio y energías relativas. El método fue desarrollado por Westheimer, Hendrickson, Wiberg, Allinger, Warshel entre otros, y es aplicable a los estados electrónicos básicos. La mayoría de las aplicaciones va dirigida a compuestos orgánicos, pero las aplicaciones se están extendiendo al desarrollo en compuestos organometálicos y compuestos de coordinación de metales de transición. Dado que los cálculos de la mecánica molecular son mucho más rápidos que los cálculos mecánico cuánticos, se pueden procesar sistemas con 1000 átomos con mayor facilidad. Este método no entra dentro de los métodos mecano cuánticos, debido a que no trata con un Hamiltoniano, con una función de onda o con densidad electrónica (Ira N. Levine, 2001).

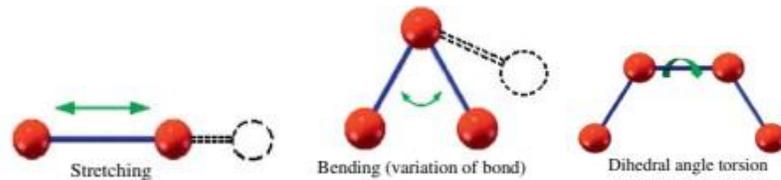


Ilustración 10. Enlaces en tensión, flexión y torsión. Obtenido de Atomistic finite element model for axial buckling of single-walled carbon nanotubes de los autores R. Ansarin, S. Rouhi(Rouhi & Ansari, 2012)

La mecánica molecular estudia de los cambios en la energía electrostática de las moléculas debidos efectos mecánicos como lo son el estiramiento del enlace (V_{Ten}), flexión del ángulo de enlace (V_{Flex}), flexión fuera del plano (V_{ffp}), rotación interna (torsión) en torno a los enlaces (V_{Tor}), las interacciones entre estos movimientos que producen un término cruzado (V_{Cruz}), atracciones y repulsiones de van der Waals entre átomos no ligados (V_{vdw}) e interacciones electrostáticas entre átomos (V_{el}) (Ira N. Levine, 2001). La suma de estas contribuciones da la energía potencial de la mecánica molecular V_{mm} (llamada energía estérica) para el movimiento de los átomos en la molécula o moléculas si el sistema que se está calculando tiene más de una molécula.

$$V_{mm} = V_{Ten} + V_{Flex} + V_{ffp} + V_{Tor} + V_{Cruz} + V_{el} \quad (34)$$

Las expresiones contenidas en cada uno de los términos de ecuación 34, muestran porque se le llama campo de fuerza de la mecánica molecular, debido a que las derivadas de las funciones energía potencial son las que determinan las fuerzas sobre los átomos, en estas los campos de fuerza contienen las fórmulas analíticas para los términos de la ecuación 34 y los valores para todos los parámetros que intervienen en las fórmulas.

Tensión

La energía potencial V_{ten} de la tensión del enlace es la suma de las energías potenciales de cada extremo del enlace en $V_{ten,ij}$, para la tensión de cada enlace de la molécula (Ira N. Levine, 2001).

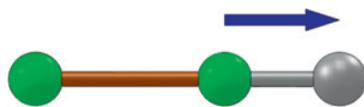


Ilustración 11. Enlace en tensión. Obtenido de Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets.(Rouhi & Ansari, 2012)

$$V_{ten} = \sum V_{ten,ij} \quad (35)$$

la energía potencial total será la sumatoria de las energías potenciales de la misma, donde esta se extiende a todos los pares de átomos enlazados entre sí. La forma más

simple de representar $V_{ten,ij}$ es usar la expresión aproximada del oscilador armónico y asumir a $V_{ten,ij}$ como una función cuadrática del desplazamiento de la longitud de enlace con respecto a su longitud de referencia. Con lo anterior se obtiene que:



Ilustración 12. Barra en tensión. Obtenido de Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets. (Rouhi & Ansari,2012)

$$V_{ten,ij} = \frac{1}{2} k_{ij} (l_{ij} - l_{ij}^0)^2 \quad (36)$$

Flexión

La energía potencial V_{flex} de flexión del enlace se asume como la suma de las energías potenciales de flexión de los ángulos entre cada enlace de la molécula (Ira N. Levine, 2001).

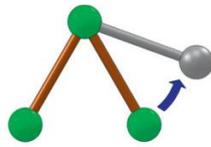


Ilustración 13. enlaces en flexión. Obtenido de Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets. (Rouhi & Ansari, 2012)

$$V_{flex} = \sum V_{flex,ijk} \quad (37)$$

la suma de la expresión 4.4.1.2.1 es aplicable a todos los ángulos entre los enlaces de la molécula. La opción más simple es tornar $V_{flex,ijk}$ como una función cuadrática (Ira N. Levine, 2001).



Ilustración 14. Barra en flexión. Obtenido de Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets. (Rouhi & Ansari, 2012)

$$V_{flex,ijk} = \frac{1}{2} k_{ijk} (\theta_{ijk} - \theta_{ijk}^0)^2 \quad (38)$$

Torsión

El término de energía potencial de torsión V_{tor} es expresada como suma de términos $V_{tor,ijkl}$ para todos los pares de atómico (Ira N. Levine, 2001).

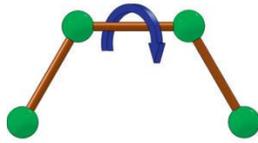


Ilustración 15. Enlaces en torsión. Obtenido de Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets. (Rouhi & Ansari, 2012)

$$V_{tor} = \sum V_{tor,ijk} \quad (39)$$



Ilustración 16. Barra en torsión. Obtenido de Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets. (Rouhi & Ansari, 2012)

$$V_{tor,ijk} = \frac{1}{2} (V_1(1 + \cos \varphi) + V_2(1 + \cos 2\varphi) + V_3(1 + \cos 3\varphi)) \quad (40)$$

Interacción electrostática

La energía potencial electrostática V_{el} se expresa comúnmente como la suma de interacciones electrostáticas que incluyen todos los pares de átomos.

$$V_{el} = \sum V_{el,ij} \quad (41)$$

$V_{el,ij}$ se calcula asignando cargas electrostáticas parciales Q_{ij} a cada átomo, y usando la expresión de la energía potencial de coulomb.

$$V_{el} = \frac{Q_i Q_j}{\epsilon_r R_{ij}} \quad (42)$$

El contante ϵ_r de la ecuación 42 es la constante dieléctrica. Para cálculos que modelan a las moléculas en fase gaseosa, la constante dieléctrica ϵ_r tiene un valor que puede ser encontrado en el intervalo de 1 a 1.5. cuando esta es mayor que 1 se presentan interacciones de apantallamiento debido a polarización de partes de una molécula entre los átomos i y j .

Interacciones de van der Waals

El término van der Waals V_{vdw} se asume usualmente como la sumatoria de las interacciones que incluyen todas las relaciones posibles de pares de átomos.

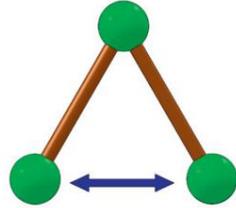


Ilustración 17. Repulsión de átomos en extremos de enlaces. Obtenido de Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets. (Rouhi & Ansari, 2012)

$$V_{vdw} = \sum V_{vdw,ij} \quad (43)$$

interacciones de van der Waals y las interacciones electrostáticas se consideran incluidas implícitamente en los parámetros de tensión de enlace y de flexión de enlace. Cada término de van der Waals de un par $V_{vdw,ij}$ es la suma de una atracción debida a fuerzas de dispersión de London y un término de repulsión, principalmente, a la repulsión de Pauli. se puede escribir de dos formas equivalentes:

$$V_{vdw} = \varepsilon_{IJ} \left[\left(\frac{R_{IJ}^*}{R_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R_{IJ}^*}{R_{ij}} \right)^6 \right] \quad (44)$$

$$V_{vdw} = 4\varepsilon_{IJ} \left[\left(\frac{\sigma_{IJ}}{R_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{IJ}}{R_{ij}} \right)^6 \right] \quad (45)$$

En lo anterior se pudieron ver modelos de energía potencial para cada forma de comportamiento, como mencionan Los investigadores Lutz Nasdala, Andreas Kempe y Raimund Rolfes, en su artículo An elastic molecular model for rubber inelasticity(Nasdala et al., 2015):

han propuesto diversas funciones de base de los potenciales de energía, dando lugar a diferentes enfoques del campo de fuerza. En el presente estudio, un campo de fuerza genérico se utiliza que lleva el nombre de André S. Dreiding.

Los anteriores modelos proceden del campo de fuerza Dreiding, en el cual muchos de los valores de las constantes trabajadas proceden de mediciones experimentales para cada elemento trabajado, varios de los cuales como la constante de elasticidad lineal k_{ij} , la constante elástica de flexión k_{ijk} , y las energías potenciales de torsión V_1 , V_2 y

V₃. Muchos investigadores han apostado por el método de mecánica molecular para encontrar solución a sus respectivos estudios, a continuación, serán expuesto algunos de estos estudios.

4.4.2 Un modelo molecular elástico para la inelasticidad de caucho (an elastic molecular model for rubber inelasticity)

En el artículo presentado por los autores Lutz Nasdala, Andreas Kempe y Raimund Rolfes (Nasdala et al., 2015), pretende lograr una simulación a través del método de mecánica molecular de un material como el caucho en el artículo hablan acerca de las características variadas del material la cuales tiene que ver con inelasticidades como el comportamiento de ablandamiento, bucles de histéresis y fraguado permanente. Para el cálculo del comportamiento del material inelástico son tomados en cuenta los modelos constitutivos que describen el caucho como un continuo homogéneo, utilizando los elementos de amortiguación o fricción.

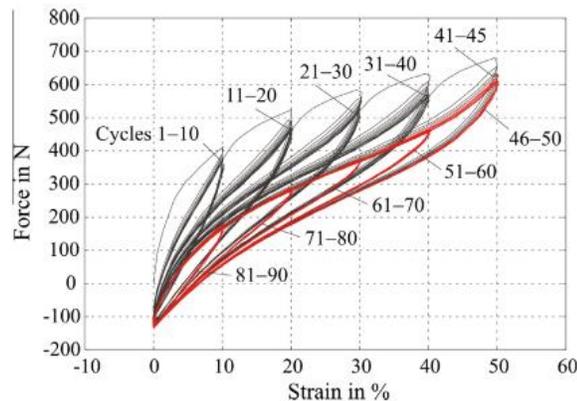


Ilustración 18. Bucles de histéresis para cauchos sometidos a esfuerzos cíclicos de forma experimental. Obtenido de Lutz Nasdala, Andreas Kempe y Raimund Rolfes, en su artículo An elastic molecular model for rubber inelasticity(Nasdala et al., 2015)

En la nanoescala, no hay necesidad de adoptar dichos modelos reológicos, el comportamiento del material inelástico puede explicarse y simularse mediante un reordenamiento continuo de enlaces, tomando un papel crucial las interacciones de van der Waals, y por las cadenas de polímeros en transición entre ángulos de torsión de equilibrio cis y trans.

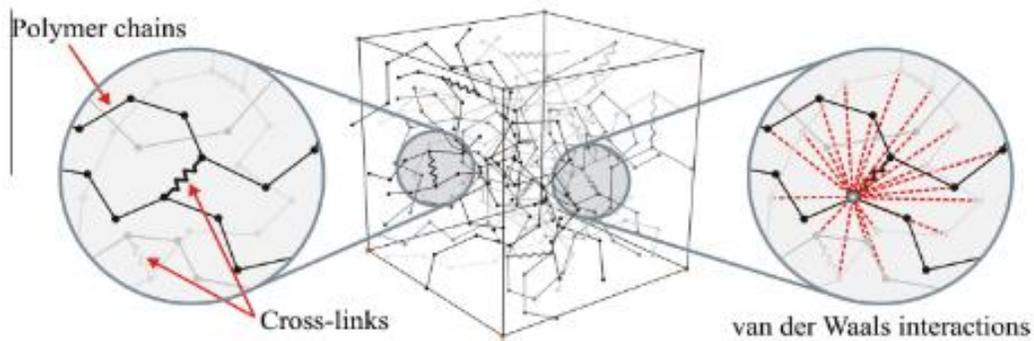


Ilustración 19. Componentes modelados del caucho. Obtenido de Lutz Nasdala, Andreas Kempe y Raimund Rolfes, en su artículo An elastic molecular model for rubber inelasticity(Nasdala et al., 2015)

Las simulaciones discretas de dinámica molecular presentadas por dicho artículo fueron realizadas en un entorno FEM explícito utilizando potenciales de campo de fuerza no lineales pero elásticos. Desde el punto de vista de la mecánica estructural, los cambios topológicos de la red de polímeros pueden interpretarse como una secuencia de problemas de inestabilidad del material local debido a la rigidez de la unión tangencial negativa.

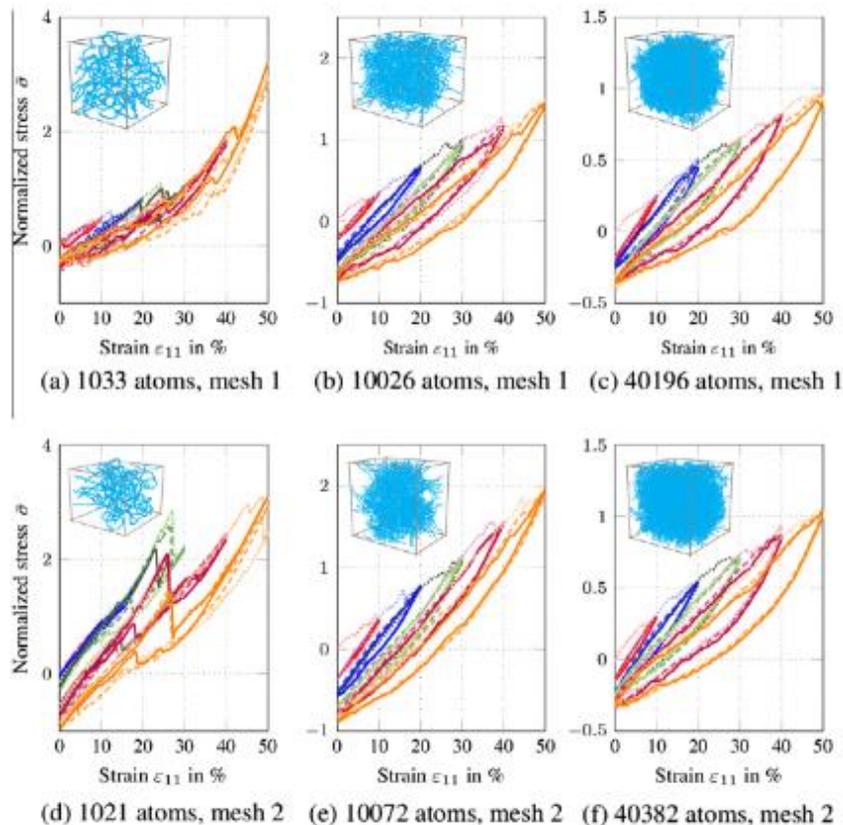


Ilustración 20. Curvas de esfuerzo deformación para un modelo simulado obteniendo mayor precisión a medida que es aumentado el número de átomos, a medida que estos aumentan se

observa que las curvas son más próximas a la gráfica de la ilustración 18. Obtenido de Lutz Nasdala, Andreas Kempe y Raimund Rolfes, en su artículo An elastic molecular model for rubber inelasticity(Nasdala et al., 2015)

Para poder obtener resultados representativos dentro de un tiempo de cálculo razonable, el modelo se optimizo con respecto al número de átomos y la velocidad de crecimiento de la carga. Se muestra que, al aumentar el tamaño del modelo, las curvas de tensión - deformación se vuelven independientes tanto del estado inicial de los átomos como de las amplitudes de deformación.

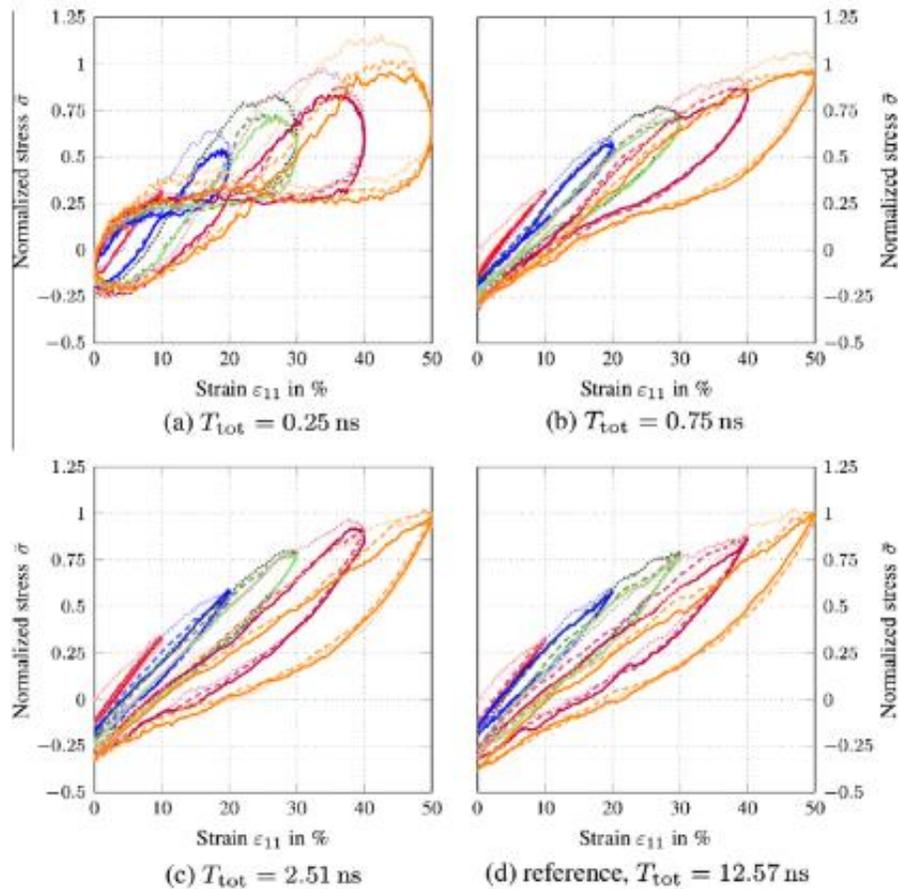


Ilustración 21. Curvas de esfuerzo deformación para un modelo simulado obteniendo mayor precisión a medida que es aumentado la velocidad de aumento de carga, a medida que estos aumenta se observa que la curva es más próxima a la gráfica de la ilustración 18. Obtenido de Lutz Nasdala, Andreas Kempe y Raimund Rolfes, en su artículo An elastic molecular model for rubber inelasticity(Nasdala et al., 2015).

Lo visto anteriormente en el modelo elástico molecular, fu utilizado base para este desarrollo. el modelamiento de los enlaces moleculares a través del fenómeno que los rige, podo ayudar al modelamiento de mallas moleculares estándar. analizado a través de la ley de coulomb, pudieron ser representados como barras largas que se extienden desde el centro de un átomo hasta el otro, pudiendo ser estos analizados por el método de los elementos finitos como barras, vigas o resortes, con átomos a cada extremo, de

esta manera podemos entender las estructuras moleculares como arreglos estructurales de barras, vigas o resortes.

5. METODOLOGIA EXPERIMENTAL

5.1 ECUACIONES ELECTRICAS Y VARIABLES (DEPENDIENTES E INDEPENDIENTES)

La interacción de dos cargas puntuales es explicada a través de la ley de coulomb condensada en las leyes de maxwell, de estas pueden ser obtenidas las ecuaciones diferenciales de la energía potencial eléctrica y su relación con el campo eléctrico y la fuerza eléctrica. Como es mencionado por Raymond A. Serway en su libro FÍSICA para ciencias e ingeniería con Física Moderna(Serway & Emérito, John W. Jewett, 2009).

“la componente en x del campo eléctrico es igual al negativo de la derivada del potencial eléctrico respecto a x”.

De esta podemos obtenerlas siguientes ecuaciones diferenciales:

$$E = -\nabla V \quad (46)$$

$$F = Q_2 E \quad (47)$$

$$F = -Q_2 \nabla V = -Q_2 \left(\frac{\partial V}{\partial x} i + \frac{\partial V}{\partial y} j + \frac{\partial V}{\partial z} k \right) \quad (48)$$

Para el desarrollo del elemento finito de la interacción electrostática se conoce que la carga y la constante eléctrica no son dependientes de la distancia x , por lo tanto pueden sacarse de la función derivada de la energía potencial. Para este desarrollo solo se tendrá en cuenta la interacción en el eje x por el momento. De lo anterior obtenemos:

(49)

$$F = -Q_2 \frac{\partial V}{\partial x}$$

$$F = -k_E Q_1 Q_2 \frac{\partial R(x)}{\partial x} \quad (50)$$

Al sacar las constantes de la derivada se obtiene una función dependiente de la distancia, esta sería la función $R(x)$, como se observa en la ecuación 50.

esta hace a la fuerza dependiente de la distancia, y de igual forma quedan dependientes de la distancia el esfuerzo, la deformación unitaria, el desplazamiento y la carga. los vectores de las variables dependientes anteriormente mencionadas serian:

$$R = R(x) \quad \text{Función R de la fuerza} \quad (51)$$

$$u = u(x) \quad \text{Distancia} \quad (52)$$

$$\sigma = \sigma(x) \quad \text{Esfuerzo} \quad (53)$$

$$\epsilon = \epsilon(x) \quad \text{Deformación unitaria} \quad (54)$$

$$f = f(x) \quad \text{Fuerza de cuerpo} \quad (55)$$

Habiendo definido definidos las ecuaciones a utilizar y las variables dependientes e independientes, a continuación, se desarrollará la modelación del elemento finito para un dipolo eléctrico en una sola dimensión o unidimensional. El paso siguiente será modelar el elemento finito de un dipolo eléctrico, para dipolos de dos cargas de signos opuestas y dos cargas de signos iguales.

5.2 CONSTRUCCION DEL ELEMENTO FINITO DE UN DIPOLO ELECTRICO

Para la modelación del elemento finito de un dipolo eléctrico lo primero que fue considerado es la semejanza de su interacción con resortes en sentido más técnico muelles. La semejanza de estos se considera a partir de los comportamientos que poseen al ser aplicados sobre estas cargas axiales. La diferencia radica en sus comportamientos al ser de igual o diferente signo, según Charles-Augustin de Coulomb (1736-1806) cuando las cargas son de signos opuestos la manifestación de su comportamiento se acciona en la atracción entre estas, mientras que estas cuando

son de signos iguales se manifiesta repulsión entre las mismas(Serway & Emérito, John W. Jewett, 2009).



Ilustración 22.interacción entre cargas eléctricas de signo positivo en repulsión. Autor



Ilustración 23.interaccion entre cargas eléctricas de signo negativo, en repulsión. Autor



Ilustración 24. interacción entre dos cargas eléctricas de signos opuestos en atracción. Autor

En las ilustraciones anteriores se puede apreciar gráficamente la manifestación de la interacción entre cargas. Anteriormente se había hablado de la comparación de su comportamiento con la forma en cómo se comportan los muelles, profundizando en esta con una descripción detallada podemos inferir que la interacción presentada en la ilustración 22 y la ilustración 23 es semejante a la de un resorte en compresión, y la interacción presentada en la ilustración 24 se asemeja al accionar de un resorte en tensión.



Ilustración 25. semejanza de la interacción de dos cargas eléctricas positivas con el comportamiento de un resorte en compresión. Autor



Ilustración 26. semejanza de la interacción de dos cargas eléctricas negativas con el comportamiento de un resorte en compresión. Autor



Ilustración 27. semejanza de la interacción de dos cargas eléctricas de signos opuestos con el comportamiento de un resorte en tensión. Autor

De las ilustraciones 23 y 24 podemos apreciar que la interacción repulsiva es representada por las flechas amarillas que apuntan en direcciones opuestas. En las ilustraciones 25 y 26 las flechas han sido reemplazadas por un resorte amarillo en donde su color simboliza su comportamiento en compresión, por lo que su reacción está siendo ejercida hacia afuera o en la misma dirección en la que apuntaban las

flechas amarillas con anterioridad indicado un sentido divergente y de repulsión. Ahora en la ilustración 24 podemos apreciar dos cargas con signos contrarios que están en atracción, esta es representada por las flechas de color verde las cuales están apuntando en direcciones opuestas hacia el mismo punto o hacia adentro del espacio entre las dos cargas, en la ilustración 27 podemos ver que estas flechas han sido reemplazadas por un muelle de color verde aparentemente estirados y sometido a carga en tensión, por lo que su reacción será halarlas una hacia la otra o en sentido convergente entre ellas o atractivo. Teniendo en cuenta lo anterior, podemos afirmar que nuestro elemento finito será un resorte, este resorte unirá dos nodos, los cuales serán las cargas eléctricas. En este análisis el elemento será dividido en tres nodos.

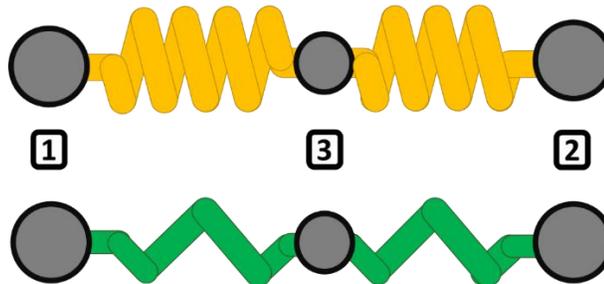


Ilustración 28. modelación del elemento finito de un dipolo eléctrico, conformándolo por medio de dos resortes y tres nodos para un elemento.

En la ilustración 28 tenemos los nodos uno y dos que representan las posiciones de las cargas y el nodo tres se ubica en esta posición con el fin de interpolar un ajuste inverso. La notación usada para este estudio será de x_i , en donde corresponde al número del nodo. Cada nodo soportará la carga que le sea correspondiente, y según sean las condiciones impuestas cada nodo poseerá su grado de libertad teniendo la posibilidad de desplazarse ya sea en dirección de $-x$ o $+x$, de acuerdo con lo mencionado en el libro introducción al método del elemento finito (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999).

$$Q = [Q_1 \quad Q_2 \quad Q_3]^T \quad (56)$$

$$F = [F_1 \quad F_2 \quad F_3]^T \quad (57)$$

El vector (56) es el vector de desplazamiento global del elemento. Por otro lado, el vector (57) es el vector de carga global. Los nodos con grados de libertad nulos se no tendrán ningún desplazamiento, por lo tanto $Q_i = 0$.

5.2.1 Coordenadas y funciones de forma

El desplazamiento a través del elemento se obtendrá a través de un sistema coordenado natural, la posición interna dentro del elemento se encontrara en función x , estará denotada por la variable ε .

$$\varepsilon = \frac{2(x - x_3)}{x_2 - x_1} \quad (58)$$

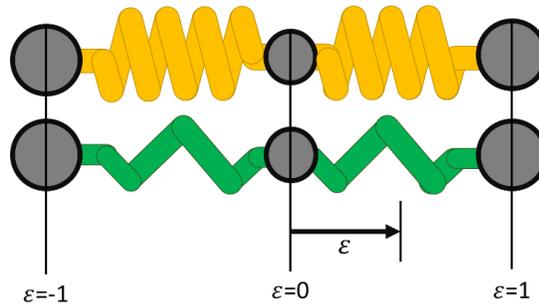
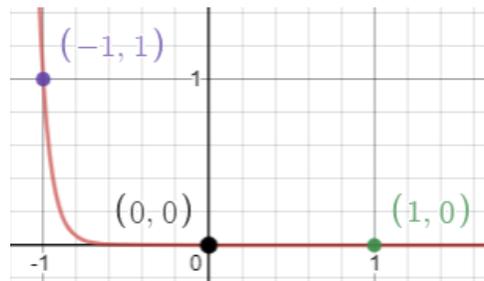


Ilustración 29. Desplazamiento interno dentro del elemento.

La ecuación 58 permite el desplazamiento interno dentro del elemento, la variación de x , permite la ubicación en cualquiera de los nodos, cuando $\varepsilon = -1$ la ubicación será el nodo 1, y así respectivamente con los siguiente, para $\varepsilon = 0$ será el nodo 3, y $\varepsilon = 1$ será el nodo 2. A continuación de ε serán definidas las funciones de forma de acuerdo con lo mencionado en el libro introducción al método del elemento finito (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999).

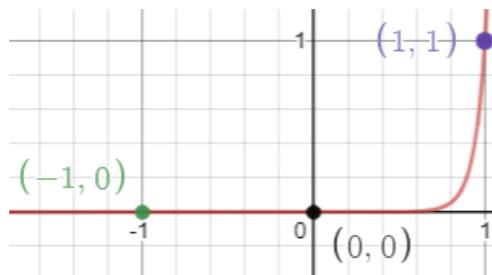
$$N_1 = \frac{1}{(\varepsilon + 2)^{16}}$$



(59)

**Ilustración 30. Función de forma N1.
Autor realizado en DESMOS**

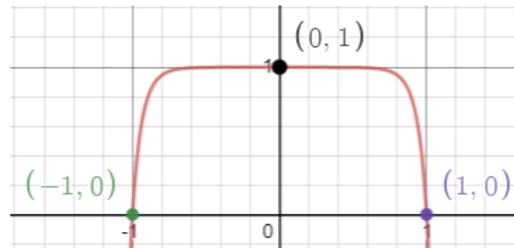
$$N_2 = \frac{1}{(\varepsilon - 2)^{16}}$$



(60)

**Ilustración 31. Función de forma N2.
Autor realizado en DESMOS**

$$N_3 = 1 - \frac{1}{(\varepsilon + 2)^{16}} - \frac{1}{(\varepsilon + 2)^{16}}$$



(61)

**Ilustración 32. Función de forma N3.
Autor realizado en DESMOS**

Las funciones de forma vistas en las ilustraciones anteriores tienen como valor 1 en su respectivo nodo y cero los demás. Las ecuaciones N_1 , N_2 y N_3 son funciones inversas, cada una graficada en las ilustraciones 30, 31 y 32, estas serán utilizadas para la interpolación dentro del elemento. Ya definidas las funciones de forma se procede a construir el campo de desplazamiento dentro del elemento, y por consiguiente el campo de variación de la fuerza con respecto al desplazamiento. En términos de q_1 , q_2 y q_3 que son los desplazamientos nodales.

$$u = N_1 q_1 + N_2 q_2 + N_3 q_3 \qquad u = Nq \qquad (62)$$

$$R = \frac{1}{(x_2 - x_1)^2} (N_1 q_1 + N_2 q_2 + N_3 q_3) \qquad R = \frac{1}{l^2} Nq \qquad (63)$$

$$N = [N_1 \quad N_2 \quad N_3] \qquad q = [q_1 \quad q_2 \quad q_3] \qquad (64)$$

u en la ecuación (62) es una interpolación inversa que pasa por q_1 , q_2 y q_3 .

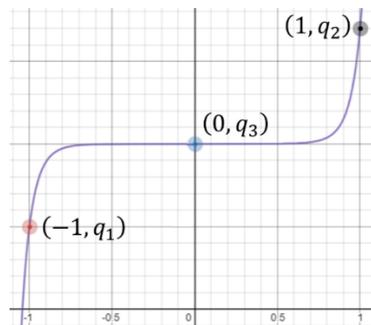


Ilustración 33. Interpolación utilizando las funciones inversas. Autor realizado en DESMOS

Por otra parte, R al ser la función que define el cambio de la fuerza con respecto a la distancia fue obtenida a partir de la ley de Coulomb, la cual define que la distancia a cuadrado es inversamente proporcional a la fuerza.

$$K_{Elas}\Delta x_{Elas} = K_{elec} \frac{Q_1 Q_2}{(x + \Delta x)^3} (x + \Delta x) \quad (65)$$

$$K_{Elas} \approx K_{elec} \frac{Q_1 Q_2}{(x + \Delta x)^3} \quad (66)$$

Al igualar la fuerza de coulomb con la ley de Hooke se interpretó aproximación de la constante de elasticidad del enlace es la expresada en la ecuación (66), por lo que se determinó que la función R es dependiente del campo de desplazamiento, y a su vez inversa a la distancia de las cargas al cuadrado, por este motivo se define la función R como la expresada en la ecuación (63).

Del libro introducción al estudio del elemento finito en ingeniería de Chandrupatla (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999), obtenemos el siguiente desarrollo para la deformación unitaria ϵ :

$$\epsilon = \frac{du}{dx} \quad (\text{relación deformación unitaria desplazamiento}) \quad (67)$$

$$\epsilon = \frac{du}{d\epsilon} \frac{d\epsilon}{dx} \quad (\text{regla de la cadena})$$

$$= \frac{2}{x_2 - x_1} \frac{du}{d\epsilon} \quad (\text{Derivando la ecuación (58)})$$

$$= \frac{2}{x_2 - x_1} \left[\frac{dN_1}{d\epsilon} \quad \frac{dN_2}{d\epsilon} \quad \frac{dN_3}{d\epsilon} \right] q \quad (\text{derivando la ecuación (62)}) \quad (68)$$

Por lo tanto, la deformación unitaria reemplazando las derivadas de las funciones de forma (59), (60) y (61), queda;

$$\epsilon = \frac{2}{x_2 - x_1} \left[-\frac{16}{(\epsilon + 2)^{17}} \quad -\frac{16}{(\epsilon - 2)^{17}} \quad \frac{16}{(\epsilon + 2)^{17}} + \frac{16}{(\epsilon - 2)^{17}} \right] q \quad (69)$$

$$(70)$$

$$\epsilon = Bq$$

$$B = \frac{2}{x_2 - x_1} \left[-\frac{16}{(\epsilon + 2)^{17}} - \frac{16}{(\epsilon - 2)^{17}} \frac{16}{(\epsilon + 2)^{17}} + \frac{16}{(\epsilon - 2)^{17}} \right] \quad (71)$$

de las expresiones anteriores se obtuvo la ecuación de interpolación para la deformación unitaria. Por otro lado, se obtendrá la expresión para la fuerza eléctrica, que es indispensable para este desarrollo.

$$F = -k_E Q_1 Q_2 \frac{\partial R}{\partial \epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x} \quad (72)$$

$$= -k_E Q_1 Q_2 \frac{2}{x_2 - x_1} \frac{\partial R}{\partial \epsilon}$$

$$= -k_E Q_1 Q_2 \frac{2}{x_2 - x_1} \frac{1}{(x_2 - x_1)^2} \left[-\frac{16}{(\epsilon + 2)^{17}} - \frac{16}{(\epsilon - 2)^{17}} \frac{16}{(\epsilon + 2)^{17}} + \frac{16}{(\epsilon - 2)^{17}} \right] q \quad (73)$$

$$F = \frac{-k_E Q_1 Q_2}{(x_2 - x_1)^2} Bq \quad (74)$$

Para obtener la ecuación 72 se desarrolló la regla de la cadena en la ecuación 50, la ecuación 71 fue posteriormente sustituida en la 73 para obtener la ecuación 74.

5.2.2 Enfoque de energía potencial

Del libro del autor Chandrupatla (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999) podemos encontrar una expresión general para la energía potencial.

$$\Pi = \sum_e \frac{1}{2} \int_e \sigma^T \epsilon A dx - \sum_e \int_e u^T f A dx - \sum_e \int_e u^T T dx - \sum_e u_i P_i \quad (75)$$

Las cantidades vistas en esta expresión fueron descritas en la sección 5.1. por otro lado la variable T representa la tracción, está por definición es la carga distribuida que actúa sobre la superficie del cuerpo, en este estudio no será considerada y será tomada como cero debido a que la interacción entre cargas eléctricas es dada en el vacío sin ningún tipo de interacción material entre ellas. Por otra lado la variable P_i es la fuerza que actúa en cualquier punto i , y u_i es el desplazamiento sobre el eje x en esa ubicación.

$$F^T = \sigma^T A \quad (76)$$

$$f = \frac{W_i}{lA} \quad (77)$$

Las expresiones 76 y 77 serán reemplazadas en la ecuación de energía potencial.

$$\Pi = \sum_e \frac{1}{2} \int_e F^T \epsilon dx - \sum_e \int_e u^T \frac{W_i}{l} dx - \sum_e u_i P_i \quad (78)$$

Ahora se sustituyen las expresiones obtenidas anteriormente de la fuerza y la deformación unitaria. De la ecuación 58 al derivar ϵ con respecto a x , podemos encontrar una expresión para dx :

$$\Pi = \sum_e \frac{1}{2} q^T \left(\frac{-k_{elect} Q_1 Q_2}{x_2 - x_1} \int_{-1}^1 (B^T B) d\epsilon \right) q - \sum_e q^T \left(W_i \int_{-1}^1 N^T d\epsilon \right) - \sum_e u_i P_i \quad (79)$$

Si comparamos la ecuación 79 con la expresión de la forma general anterior dada por el autor Chandrupatla (TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, 1999):

$$\Pi = \sum_e \frac{1}{2} q^T K_{Elas}^e q - \sum_e q^T F^e - \sum_e u_i P_i \quad (80)$$

De la comparación anterior podemos afirmar que:

$$K^e = \frac{k_{elect} Q_1 Q_2}{x_2 - x_1} \int_{-1}^1 (B^T B) d\epsilon \quad (81)$$

$$K^e = \frac{k_{elect} Q_1 Q_2}{(x_2 - x_1)^3} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 31,03030303 & -1,70534E - 06 & -31,03030132 \\ -1,70534E - 06 & 31,03030303 & -31,03030132 \\ -31,03030132 & -31,03030132 & 62,06060265 \end{bmatrix} \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{matrix} \quad (82)$$

$$F^e = W_i \int_{-1}^1 N^T d\epsilon \quad (83)$$

$$F^e = W_i \begin{bmatrix} 0,066666662 \\ 0,066666662 \\ 1,866666676 \end{bmatrix} \quad (84)$$

Al reemplazar el vector B en la expresión 81 y resolver la integral se obtiene la matriz de rigidez de un dipolo eléctrico. Y a sustituir N en la ecuación 83 e integrarla obtenemos el vector de carga del elemento. La matriz de rigidez K^e y el vector de carga F^e son ensamblados para formar estructuras atómicas complejas en una matriz de rigidez estructural.

$$K = \frac{k_{elect} Q_1 Q_2}{(x_2 - x_1)^3} \quad (85)$$

La constante de elasticidad K de la unión electrostática es el termino 85 de la matriz de rigidez, ecuación 82.

5.3 Enlaces químicos

En el libro química la ciencia central de Theodore L. Brown, H. Eugene LeMay (Brown et al., 2009) describen el enlace químico como la unión fuertemente consolidada entre dos átomos. Debido a las leyes del electromagnetismo se afirma que es la unión entre átomos debido a las interacciones electromagnéticas entre estos. Con brevedad existen tres tipos de enlaces principales los cuales son el enlace iónico, el enlace covalente y el enlace metálico. El objetivo de este apartado será obtener la representación analógica de los enlaces químicos como resorte o como sistema de resortes, al final se encontrará una constante de rigidez a partir de la reducción de sistemas de resortes, siendo esta la rigidez general del sistema.

5.3.1 Enlace iónico

El enlace iónico según Hugh D. Young y Roger A. Freedman (Young et al., 2013) en su libro física universitaria con física moderna como es la interacción entre átomos ionizados con carga opuesta, la diferencia de electronegatividad mínima para su formación ronda entre los 1.7 o 2 en adelante. En este tipo de enlace un átomo de elemento menos electronegativo cede uno de sus electrones de valencia a otro átomo más electronegativo, por lo que este primer átomo queda cargado positivamente y el átomo del elemento más electronegativo queda cargado negativamente por lo que se produce una atracción fuerte entre ambos iones.

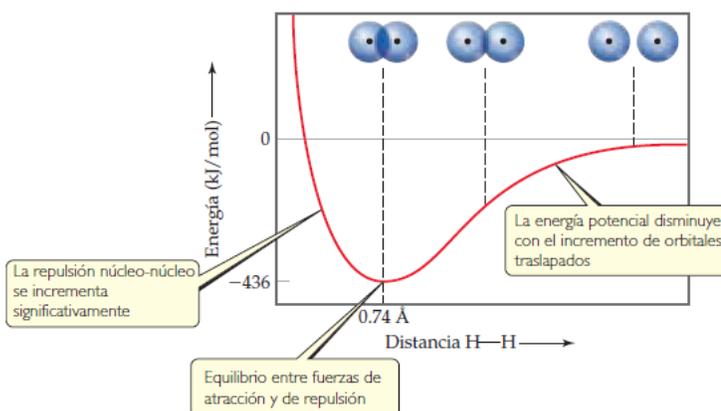


Ilustración 34. Diagrama de energía potencial de morse. Tomado de Química la ciencia centra Brawn LeMay (Brown et al., 2009).

En la ilustración 34 podemos apreciar el cambio en la energía potencial de dos iones con cargas opuestas en dependencia de la distancia, Hugh D. Young menciona (Young et al., 2013):

“Cuando la separación r entre dos iones con carga opuesta es grande, la energía potencial $U(r)$ es proporcional a $1/r$ como en las cargas puntuales, y la fuerza es de atracción. A medida que r disminuye, las nubes de carga de los dos átomos se traslapan y la fuerza de atracción es menor. Si r es menor que la separación de equilibrio r_0 , la fuerza es de repulsión”.

La energía potencial eléctrica entre los dos iones puede ser calculada por medio de su carga eléctrica total del ion, por lo tanto, su constante de rigidez puede ser calculada de igual forma.

$$Q_T = Q_e(p - e_T) \quad \begin{array}{l} Q_T \rightarrow \text{carga eléctrica total} \\ p \rightarrow \text{numero de protones} \\ e_c \rightarrow \text{electrones totales} \end{array} \quad (86)$$

En la ecuación 86 el número de total de protones les es restado el número de electrones que posee el átomo luego de haber cedido o ganado uno o más de ellos.

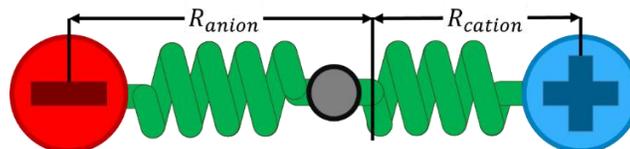


Ilustración 35. Representación del enlace iónico como resorte. Autor

En la ilustración 35 la distancia entre los núcleos de los átomos será la suma de sus radios iónicos, radio que adquieren al ceder o ganar electrones, en el primer caso su radio disminuye, en el segundo aumenta.

$$K_{ionico} = \frac{k_{elect} Q_{cation} Q_{anion}}{(R_{anion} + R_{cation})^3} \quad (87)$$

$$K^e = K_{ionico} \begin{bmatrix} 31,03030303 & -1,70534E-06 & -31,03030132 \\ -1,70534E-06 & 31,03030303 & -31,03030132 \\ -31,03030132 & -31,03030132 & 62,06060265 \end{bmatrix} \quad (88)$$

La rigidez para los enlaces iónicos esta expresada en la ecuación (87), luego de esta ser calculada podemos tomar su matriz de rigidez como la mostrada en la ecuación 88.

5.3.2 Enlace covalente

El enlace covalente descrito por Raymond Chang y Kenneth A. Goldsby en su libro Química, como un enlace en el que dos electrones son compartidos por dos átomos, electrostáticamente podemos decir que los núcleos de ambos átomos se repelen entre ellos, pero a su vez se atraen con ambos electrones, los electrones repeliéndose de igual forma entre ellos. Para la formación de este tipo de enlaces la diferencia de electronegatividad debe estar por debajo de 1.7 o 1.6. Como ellos mencionan en los enlaces covalente solo participan los electrones de valencia. Existen distintos tipos de enlaces covalente, como lo son el enlace covalente simple, covalente doble y covalente triple, existe otro tipo de enlace covalente denominado covalente polar, los cuales son formados cuando la diferencia de electronegatividad se acerca al 1.6 o 1.7, como menciona Raymond Chang en el libro antes mencionado. Para este estudio solo se tendrá en cuenta el enlace covalente simple (Chang & Goldsby, 2013).

Como se mencionaba en el apartado anterior, en la gráfica de energía potencial de morse puede ser observado que los átomos se mantendrán unidos a determinada distancia en donde el punto más alto de la atracción se da en r_0 , en donde la variación de la energía potencia potencial eléctrica está en equilibrio por lo tanto su pendiente es cero. el r_0 para los enlaces covalentes será tomado como la suma de los radios atómicos, por lo tanto:

$$r_0 = R_{A1} + R_{A2} \quad (89)$$

En la ecuación 89, el radio atómico del primer átomo será denotado como R_{A1} , para el átomo número 2, su radio atómico será denotado por R_{A2} .

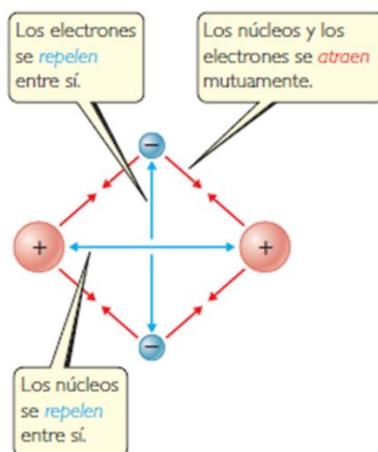


Ilustración 36. El enlace covalente en el H₂. Atracciones y repulsiones entre electrones y núcleos en la molécula de hidrógeno. Obtenida del libro Química la ciencia centra Brown LeMay (Brown et al., 2009)

Los autores Theodore L. Brown, H. Eugene LeMay, Jr., et al, proponen en su libre la siguiente representación para el enlace covalente simple ilustración 36. Para el desarrollo del elemento finito de este enlace se desarrollará una representación más simplificada que cumpla con el criterio de energía potencial mínima, para esto se tendrán en cuenta los conceptos de orbitales (Brown et al., 2009).

Orbitales atómicos

como menciona Theodore L. Brown, H. Eugene LeMay, Jr., et al, (Brown et al., 2009):

“el cuadrado de la función de onda ψ^2 , en un punto dado del espacio representa la probabilidad de que el electrón se encuentre en dicha posición. Por esta razón, se conoce como la densidad de probabilidad o la densidad electrónica.”

Los orbitales atómicos terminan siendo solución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno y en general que produce un conjunto de funciones de onda que son llamadas orbitales, por esta razón los orbitales pueden ser interpretados como la región en el espacio en la que existe la probabilidad de encontrar un electrón. Se ha determinado que hay varios tipos orbitales, estos dependen de tres números conocidos como números cuánticos, los que determinan que tipo de orbitales son dependiendo del valor que estos tomen. Raymond Chang y Kenneth A. Goldsby mencionan que estos números derivan de la solución matemática de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno y son el número cuántico principal, el número cuántico del momento angular y el número cuántico magnético. Los orbitales existentes son lo *s*, *p*, *d* y *f*, en este estudio solo serán tomados en cuenta los dos primeros tipos de orbitales (Chang & Goldsby, 2013).

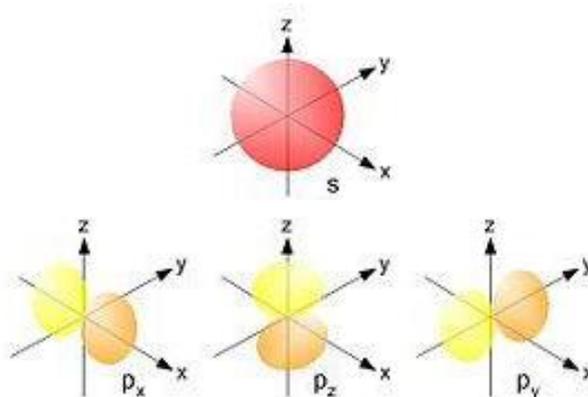


Ilustración 37. representación de los orbitales s como región esférica y p como un conjunto de regiones esféricas chatas para cada eje. tomado de <http://www.quimitube.com/videos/orbitales-atomicos-y-numeros-cuanticos>.

La ilustración 37 nos muestra la representación aparente de cómo se verían las regiones volumétricas donde es más probable encontrar posicionados a los electrones, pero Chang y Goldsby hacen mención de que estas regiones carecen de forma aparente, debido a que la función de onda que lo describe se extiende del núcleo hasta el infinito, la forma que se puede apreciar en la ilustración anterior es tomada como tal debido a que son las regiones con la más alta probabilidad de que estén presente en ellas los electrones, ya que como citan “Aunque, en principio, se puede encontrar un electrón en cualquier lugar, ya se sabe que la mayor parte del tiempo está muy cerca del núcleo”. Los orbitales s en su distribución única y p en cada una de sus posiciones en los tres ejes pueden albergar solo dos electrones (Chang & Goldsby, 2013). Por si solo los orbitales atómicos no ayudaran a definir la representación como sistemas de resortes a los enlaces covalentes, por lo que se recurrirá al traslape de orbitales, esto nos ayudara a definir igualmente la geometría tridimensional en la que se distribuyen los tomos que forman moléculas uniéndose en enlaces químicos.

Traslape de orbitales

El traslape de orbitales permite que dos electrones compartan el espacio entre los núcleos, esto es la unión de dos orbitales con electrón único en una porción de su volumen que se encontrara posicionada entre el espacio de los dos núcleos, formando un enlace covalente, como explican Brawn y LeMay (Brown et al., 2009).

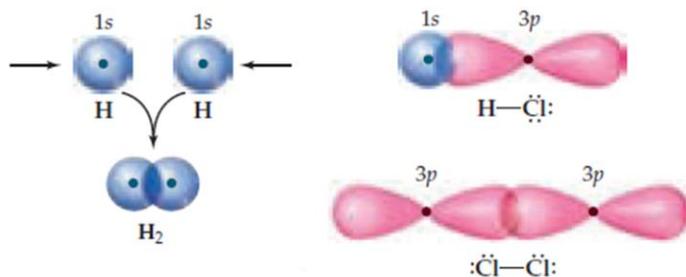


Ilustración 38. enlaces covalentes en H₂, HCl y Cl₂ como resultado del traslape de orbitales atómicos. tomado de del libro Química la ciencia centra Brawn LeMay (Chang & Goldsby, 2013).

La pequeña unión entre los orbitales de las moléculas de H_2 , HCl , y Cl_2 mostradas en la ilustración 38, es el espacio con mayor probabilidad de que se encuentre el electrón de cada orbital. Cada uno de estos orbitales está siendo atraído por el núcleo del átomo contrario, la fuerza de esta atracción es igual a la repulsión de los electrones de los orbitales y a la repulsión de los núcleos por lo que se considera la posición de equilibrio, lo que había sido representado con anterioridad en la ilustración 36, esto explica la formación de los enlaces covalentes con mayor profundidad.

Analogía del enlace covalente como sistema de resortes

Para entender el enlace covalente como sistema de resortes se tendrán en cuenta los conceptos que han sido mencionados. Como se explicaba, los electrones presentes en los orbitales están siendo atraídos por el núcleo de los elementos opuestos, y a su vez esos mismos electrones se encuentran en repulsión, así como los núcleos de los átomos, la unión se mantiene debido a que las fuerzas están en equilibrio. De lo anterior se debe considerar que no es conocida la posición exacta de los electrones entre sus respectivos orbitales, siendo estas regiones volumétricas. Para poder encontrar la representación como sistema de resortes del enlace covalente solo se tendrán en cuenta los puntos de esa región volumétrica que se encuentre posicionados sobre una línea recta que una los núcleos de los elementos que se encuentran enlazados.

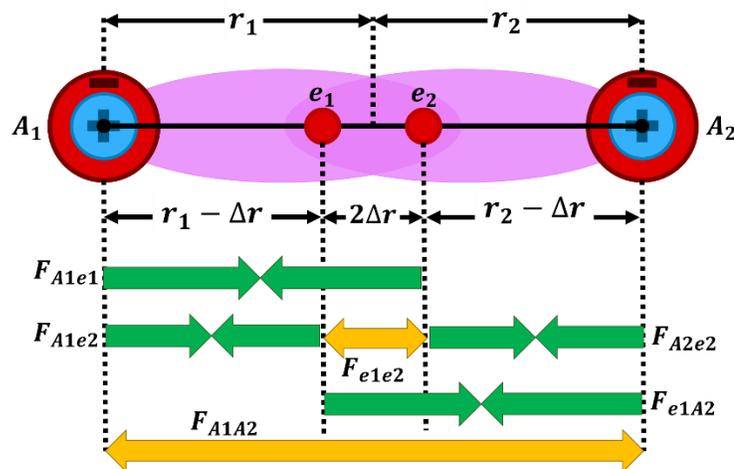


Ilustración 39. elementos en enlace covalente. Autor

En la ilustración 39 se puede observar la línea recta que une a los núcleos de los dos elementos A_1 y A_2 , separados por una distancia equivalente a la suma de sus radios r_1 y r_2 , sobre estas líneas se encuentran los electrones e_1 y e_2 , separados entre ellos a una distancia $2\Delta r$. Como se observa el sistema fue reducido a una sola dimensión a diferencia de la ilustración 36 encontrada en el libro de Brawn y Lemay, simplificando de esta manera hallar la ubicación de ambos electrones. La posición de ambos electrones será Δr dentro del radio de su respectivo átomo, esta consideración fue tomada debido a que la configuración de cada elemento influye sustancialmente sobre la posición del electrón sobre la línea que une los núcleos complicando en mayor medida el encontrar la ubicación de ambos, reduciendo encontrar Δr_1 y Δr_2 para e_1 y e_2 , a solo

hallar Δr . En la ilustración anterior se observan la fuerza que interactúan entre cada una de las cargas, el núcleo de A_1 y A_2 , en atracción con los electrones e_1 y e_2 , y ambos con fuerza repulsiva al igual que ambos electrones, la suma total de esta será igual a cero. Se expresará primeramente la ecuación que describe la energía eléctrica en el sistema.

$$Q_{A1} = n_{v1}p$$

$$Q_{A2} = n_{v2}p \quad (90)$$

$$p = e$$

$$U_T = U_{A1e1} + U_{A2e2} + U_{A1e2} + U_{A2e1} + U_{A1A2} + U_{e1e2} \quad (91)$$

$$U_T = \frac{K_e n_{v1} n_{v2} p^2}{r_1 + r_2} + \frac{K_e e^2}{2\Delta r} - \frac{K_e e_2 n_{v1} p}{r_1 + \Delta r} - \frac{K_e e_1 n_{v2} p}{r_2 + \Delta r} - \frac{K_e e_1 n_{v1} p}{r_1 - \Delta r} - \frac{K_e e_2 n_{v2} p}{r_2 - \Delta r} \quad (92)$$

Se considerara como núcleo para cada átomo los protones, los neutrones, y los electrones de los niveles de energía inferiores a los de los electrones de valencia, por lo tanto la carga total del núcleo será el número de electrones de los niveles de energía internos menos el número total de protones, por lo tanto esto sería igual al número de electrones de valencia n_{v1} y n_{v2} por la carga de un protón p , como lo expresa las consideración 90 la carga de los protones será considerada como igual a la carga del electrón como lo expresan las consideraciones mencionadas. en la ecuación 91 se observa la sumatoria de energías de la interacción entre cargas, la energía total U_T será graficada como función de Δr , el valor Δr no puede ser 0, y tiene que ser menor que el radio del átomo más pequeño del enlace.

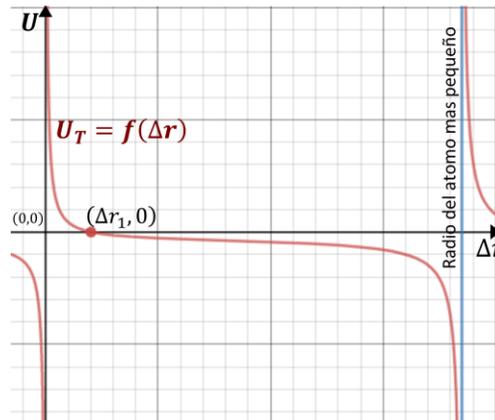


Ilustración 40. grafica de energía total contra delta de r o posición del electrón. Autor realizado en DESMOS

En la ilustración 40 se aprecia el cambio de la energía total U_T con respecto a Δr , el valor de energía potencial que será tomado será igual a la entalpia de enlace, la cual mide la energía necesaria para romper los enlaces de un mol sustancia, para este estudio se observó el valor de esta para varias moléculas diatómicas que se encuentran en la tabla 8.4 del libro Química la ciencia centra Brawn LeMay (Brown et al., 2009) y la tabla 9.4 del libro Química de Raymond Chang y Kenneth A. Goldsby (Chang & Goldsby, 2013), como por ejemplo el $C - H$, $C - C$, $H - F$ y $H - Cl$ entre otros, la entalpia de cada una de la moléculas diatómicas mencionadas fue dividida entre el número de Avogadro, de esta manera fue obtenida la energía para un solo enlace, el valor de esa energía es del orden de los $10^{-19}J$.

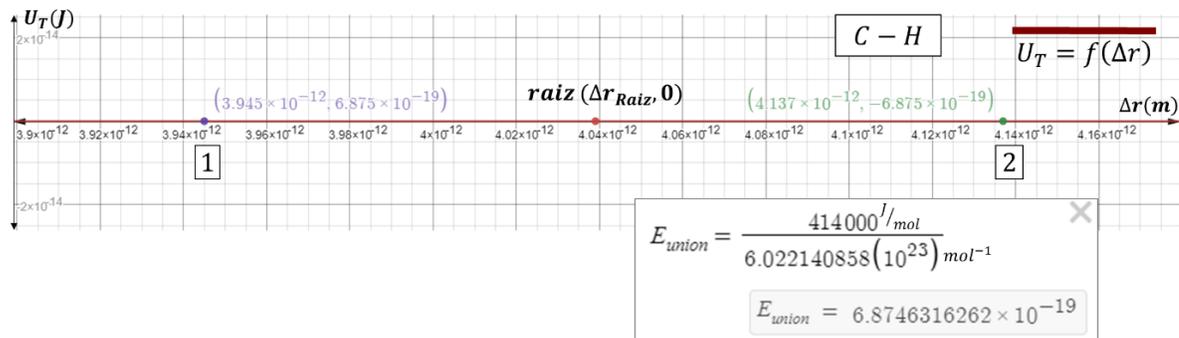


Ilustración 41. entalpia de enlace CH. Autor realizado en DESMOS

En la ilustración 41 se puede observar que los puntos 1 y 2 corresponden a los valores de la entalpia de enlace positiva y negativa para determinados Δr para la molécula de CH y la raíz de la ecuación de energía potencial justo en medio de ambas, si se considera tomar el valor medio, este estaría muy cerca de la raíz y la diferencia sería muy pequeña, por lo tanto se asumirá a $U_T = 0$ tomando como posición del electrón la raíz de la ecuación desde cero al radio del átomo de menor tamaño. para dar con la posición del electrón, entonces:

$$\frac{K_e n_{v1} n_{v2} p^2}{r_1 + r_2} + \frac{K_e e^2}{2\Delta r} - \frac{K_e e_2 n_{v1} p}{r_1 + \Delta r} - \frac{K_e e_1 n_{v2} p}{r_2 + \Delta r} - \frac{K_e e_1 n_{v1} p}{r_1 - \Delta r} - \frac{K_e e_2 n_{v2} p}{r_2 - \Delta r} = 0 \quad (93)$$

Se procede a reducir la expresión 5.3.2.2.3

$$\frac{K_e n_{v1} n_{v2} e^2}{r_1 + r_2} + \frac{K_e e^2}{2\Delta r} - \frac{K_e n_{v1} e^2}{r_1 + \Delta r} - \frac{K_e n_{v2} e^2}{r_2 + \Delta r} - \frac{K_e n_{v1} e^2}{r_1 - \Delta r} - \frac{K_e n_{v2} e^2}{r_2 - \Delta r} = 0 \quad (94)$$

Luego de una reducir al mínimo la expresión, nos queda:

$$\frac{n_{v1} n_{v2}}{r_1 + r_2} + \frac{1}{2\Delta r} - \frac{2n_{v1} r_1}{r_1^2 - \Delta r^2} - \frac{2n_{v2} r_2}{r_2^2 - \Delta r^2} = 0 \quad (95)$$

La ecuación 95 será multiplicada por $\Delta r(r_1^2 - \Delta r^2)(r_2^2 - \Delta r^2)$, para eliminar la funciones inversas, para facilitar Δr será reemplazado por x . obteniendo:

$$\begin{aligned} \frac{n_{v1}n_{v2}}{r_1 + r_2}x^5 + \frac{1}{2}x^4 + x^3 \left(2(n_{v1}r_1 + n_{v2}r_2) - \frac{n_{v1}n_{v2}}{r_1 + r_2}(r_1^2 + r_2^2) \right) \\ - \frac{1}{2}x^2(r_1^2 + r_2^2) + xr_1r_2 \left(\frac{n_{v1}n_{v2}}{r_1 + r_2}r_1r_2 - 2(n_{v1}r_2 + n_{v2}r_1) \right) \\ + \frac{1}{2}r_1^2r_2^2 = 0 \end{aligned} \quad (96)$$

$$a = \frac{n_{v1}n_{v2}}{r_1 + r_2} \quad b = \frac{1}{2} \quad c = \left(2(n_{v1}r_1 + n_{v2}r_2) - \frac{n_{v1}n_{v2}}{r_1 + r_2}(r_1^2 + r_2^2) \right)$$

$$d = -\frac{1}{2}(r_1^2 + r_2^2) \quad g = r_1r_2 \left(\frac{n_{v1}n_{v2}}{r_1 + r_2}r_1r_2 - 2(n_{v1}r_2 + n_{v2}r_1) \right)$$

$$h = \frac{1}{2}r_1^2r_2^2$$

$$ax^5 + bx^4 + cx^3 + dx^2 + gx + h = 0 \quad (97)$$

Graficamos la expresión 97.

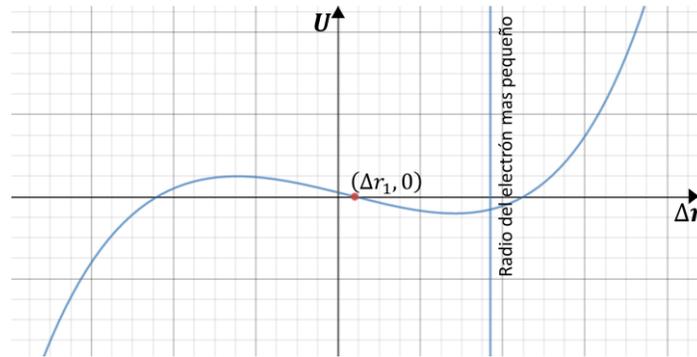


Ilustración 42. grafica del polinomio de grado 5 con raíz en $(\Delta r_1, 0)$. Autor realizado en DESMOS

En la ilustración 42 se puede apreciar la gráfica del polinomio 97, la cual tiene tres raíces, la raíz que se necesita en la que se encuentra en intervalo $0 \leq x \leq r_{Amen}$, siendo r_{Amen} el radio de átomo de menor tamaño. El valor de Δr o de x , será determinado a partir del método de bisección para raíces de ecuaciones.

Constante de rigidez del enlace covalente

Luego de haber determinado el valor de Δr , se definirá el sistema de resortes del enlace covalente.

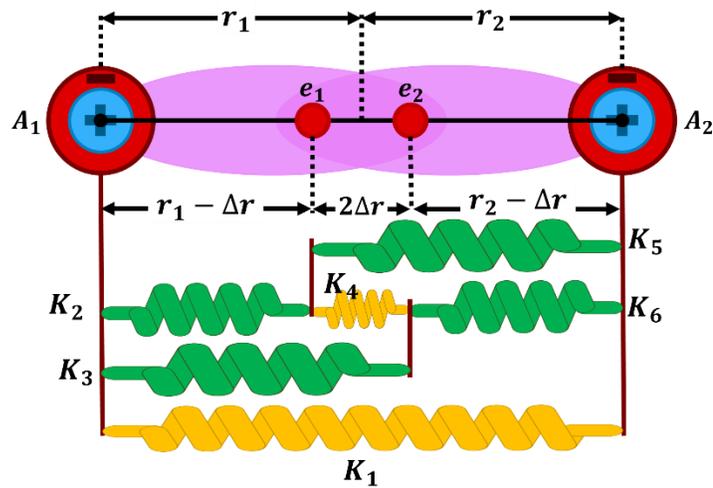


Ilustración 43. enlace covalente como sistema de resortes. Autor

El sistema de resortes de la ilustración 43 será reducido a partir de la teoría para resortes en serie, en paralelo, y el teorema de Kennelly más conocido como transformación delta-estrella para impedancias. Primeramente, será utilizado el teorema de Kennelly (Alexander & Sadiku, 2006).

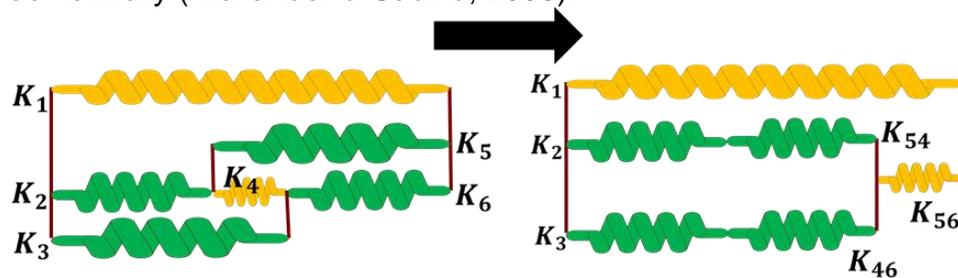


Ilustración 44. Transformación delta estrella de los resortes en formación delta k4, k5, y k6, a una mas simple. Autor

$$K_{54} = K_5 + K_4 + \frac{K_5 K_4}{K_6}$$

$$K_{56} = K_5 + K_6 + \frac{K_5 K_6}{K_4}$$

$$K_{46} = K_6 + K_4 + \frac{K_6 K_4}{K_5}$$

Teorema de Kennelly (98)

$$K_{254} = \frac{1}{\frac{1}{K_2} + \frac{1}{K_{54}}} \quad (99)$$

$$K_{346} = \frac{1}{\frac{1}{K_3} + \frac{1}{K_{46}}}$$

$$K_a = K_{254} + K_{346} \quad (100)$$

$$K_{a56} = \frac{1}{\frac{1}{K_a} + \frac{1}{K_{56}}} \quad (101)$$

$$K_{COV} = K_1 + K_{a56} \quad (102)$$

K_T es la constante de rigidez del enlace covalente, el cual es determinado a partir del anterior proceso. Los valores para cada constante de rigidez se determinan por las siguientes expresiones tomadas a partir de la ecuación 85:

$$K_1 = \frac{K_e n_{v1} n_{v2} e^2}{(r_1 + r_2)^3} \quad (103)$$

$$K_2 = -\frac{K_e n_{v1} e^2}{(r_1 - \Delta r)^3} \quad (104)$$

$$K_3 = -\frac{K_e n_{v1} e^2}{(r_1 + \Delta r)^3} \quad (105)$$

$$K_4 = \frac{K_e e^2}{(2\Delta r)^3} \quad (106)$$

$$K_5 = -\frac{K_e n_{v2} e^2}{(r_2 + \Delta r)^3} \quad (107)$$

$$K_6 = -\frac{K_e n_{v2} e^2}{(r_2 - \Delta r)^3} \quad (108)$$

La constante de rigidez total del enlace covalente K_{COV} fue necesario hallarla para simplificar el elemento finito, esto para reducir el tiempo de cálculo numérico.

5.4 Selección del material y geometría molecular

La geometría molecular como mencionan Raymond Chang y Kenneth A. Goldsby (Chang & Goldsby, 2013), esta hace referencia a la disposición tridimensional de los átomos de una molécula, también afecta sus propiedades físicas y químicas; por ejemplo, el punto de fusión, el punto de ebullición, la densidad y el tipo de reacciones en que pueden participar, además de lo anterior afecta al tema de interés de este estudio, a la transmisión de carga a través del material. El modelo en el que se centrará este estudio será el modelo de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV), pero ante se procederá a hablar del material de estudio, el polímero termoplástico polietileno, más específicamente el polietileno de alta densidad, se

hablará con brevedad sobre su estructura, la polimerización y sus cadenas moleculares.

5.4.1 Selección

Dentro de los criterios de selección para el material fueron tomadas en cuenta que este contara con determinadas características que permitieran cierta configuración de los parámetros en la simulación que facilitarían el trabajo de esta con respecto al material, principalmente la mayor dificultad es vista en cuanto al mallado del mismo. La influencia de la geometría molecular en cuanto a las propiedades físicas fue mencionada anteriormente, ahora en cuanto a su influencia en la facilitación del trabajo a la hora de la preparación de la malla para la simulación depende de la complejidad de la misma, se entiende que existen muchos polímeros con geometrías muy distintas, que van desde muy complejos como la geometría del ABS (Acrilonitrilo Butadieno Estireno) hasta más simples como el polietileno, este último siendo un termoplástico posee una estructura molecular particularmente simple, contando con una cadena base de etileno C_2H_4 , lo cual permite que a la hora de desarrollar la malla esta puede permitir la construcción de la malla base del radical y luego ser copiada en muchos radicales y apilarlos con mayor facilidad a la hora de crear las cadenas largas del polímero, en contraste como por ejemplo a polipropileno el cual cuenta con un radical base de C_3H_6 con una ramificación de CH_3 en una de los carbonos de su cadena principal, esto implicaría un grado de complejidad mayor a la hora de la creación del mallado o de la molécula base.

5.4.2 Polietileno (PE)

El polietileno es un polímero termoplástico con una estructura molecular simple, Según Chang y Goldsby (Chang & Goldsby, 2013), los polímeros son compuestos moleculares que se distinguen por poseer una masa molar grande, que comprende desde miles a millones de monómeros unidos en cadenas, y por estar formado por muchas unidades que se repiten.

Polimerización y características.

El polietileno cuenta con una estructura molecular muy simple que se obtiene a partir de la unión de monómeros de etileno.

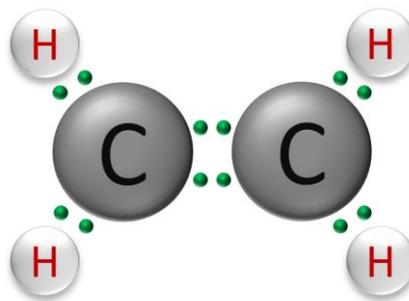


Ilustración 45. Molécula de etileno estructura de Lewis, monómero simple de C_2H_4 con enlace doble entre carbonos y simples de carbonos e hidrógenos. Autor.

El etileno es una molécula formada por dos átomos de carbono que forman un enlace covalente doble y cuatro átomos de hidrogeno que forman enlace covalente simple con los átomos de carbono como muestra la ilustración 45. De monómeros de etileno se obtienen las largas cadenas que conforman la estructura del polietileno, esto mediante el proceso de reacción por adición como explican chang y Goldsby (Chang & Goldsby, 2013). En el libro química de autores mencionados se describe el proceso de polimerización por adición con brevedad:

- 1) se comienza por el calentamiento de una molécula iniciadora, esto permite romper el enlace covalente doble que tienen los carbonos del etileno entre ellos, quedando solo un covalente simple, esto produce dos radicales, cada carbono con un electrón libre.

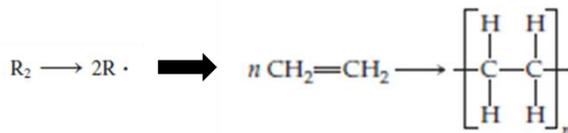


Ilustración 46. rompimiento del enlace covalente doble lo cual permite a los carbonos poseer un electrón libre. Obtenida de química chang y Goldsby (Chang & Goldsby, 2013) y química la ciencia central de brawn y LeMay (Brown et al., 2009).

- 2) El radical reactivo provoca el rompimiento del enlace covalente doble de otra molécula de etileno, enlazando con esta y generando un nuevo radical, este proceso continuo sucesivamente y con múltiples radicales.

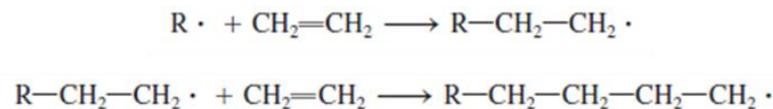


Ilustración 47. radical reaccionando con molécula de etileno, y provocando la aparición de otro radical, este proceso se repite. obtenido de Química Raymond chan y goldsby (Chang & Goldsby, 2013).

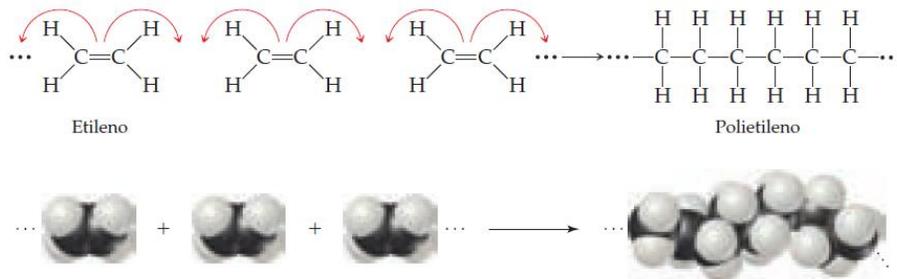


Ilustración 48. Moléculas de etileno radical reactivo ataca una molécula de etileno uniéndose y se genera un nueva molécula de mayor peso. Obtenido de química la ciencia central de brawn y LeMay (Brown et al., 2009).

El proceso de polimerización por adición permite obtener moléculas de masa molar muy elevada que en este caso son cadenas muy largar de CH_2 como se observa en la ilustración 49.



Ilustración 49. El segmento que aparece aquí consiste en 28 átomos de carbono. obtenido de química la ciencia central Brawn y LeMay (Brown et al., 2009).

En el caso de los polietilenos comerciales como menciona Brawn (Brown et al., 2009) las longitudes de la cadena varían de 10^3 a 10^5 unidades de CH_2 , también las cadenas son flexibles y pueden enrollarse y torcerse de forma aleatoria, como vemos en esta ilustración 49. Debido a que dentro de estos materiales existe cadenas de diversos tamaños el ordenamiento dentro del material va a estar lejos de ser totalmente cristalino, los polímeros son materiales amorfos o no cristalinos, suelen presentar la alineación y ordenamiento de cadenas por regiones como lo muestra la ilustración 50, a continuación:

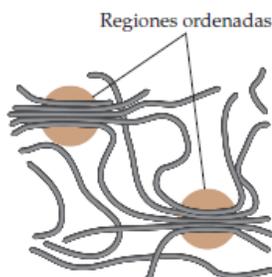


Ilustración 50.regiones cristalinas o de ordenamiento y alineación de las cadenas dentro de un polímero, marcadas con un círculo. obtenido de química la ciencia central Brawn y LeMay (Brown et al., 2009).

Estas regiones varían dependiendo de los procesos aplicados sobre el material, lo que indica que puedan tener mayor o menor cantidad de regiones, esta cantidad se mide a partir del grado de cristalinidad, entre más alto sea mayor cantidad de regiones cristalinas tendrá, lo que favorecerá a que el material sea más denso, más duro, menos soluble y más resistente al calor. Estas regiones se mantienen unidas gracias a Las fuerzas intermoleculares entre las cadenas del polímero. Para facilitar este estudio se asumirá el polímero tomado con un grado de cristalinidad del 100%, y con las cadenas internas totalmente rectas.

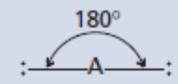
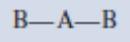
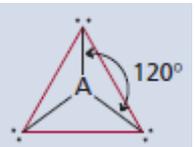
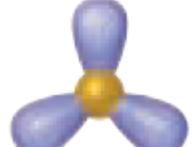
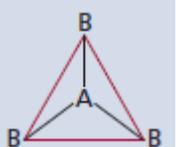
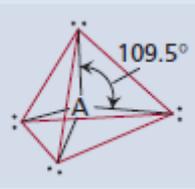
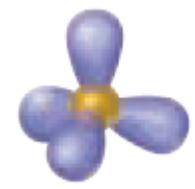
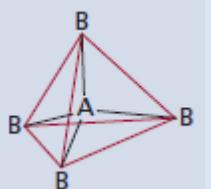
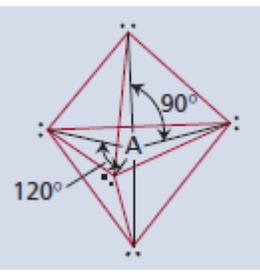
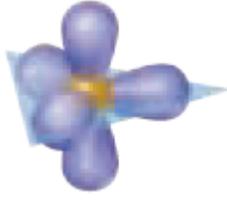
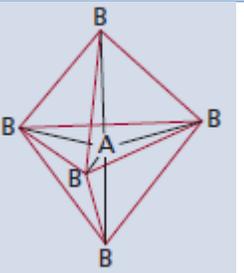
5.4.3 Modelo de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia.

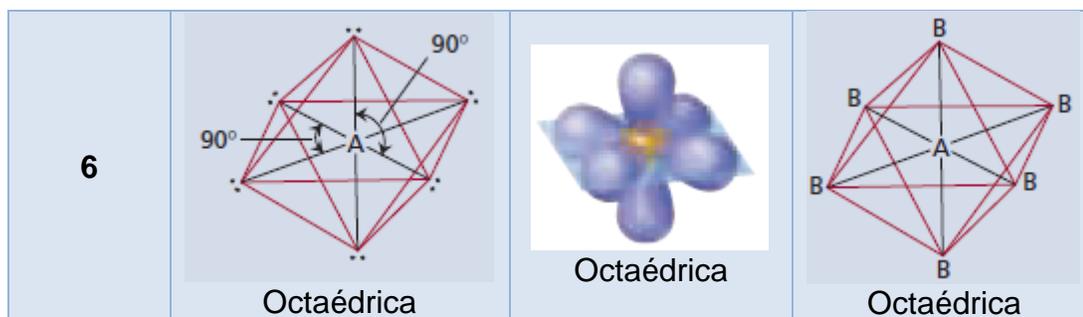
El modelo RPECV consiste en que la geometría tridimensional adoptada por una molécula es aquel ordenamiento en el cual se logra la repulsión mínima entre los pares de electrones de la capa de valencia, la posición que adoptaran los orbitales que contienen los electrones de la capa de valencia será aquella en la que estén a mayor distancia entre ellos, debido a la repulsión electrónica, de acuerdo con Chang (Chang & Goldsby, 2013). En este modelo se proponen dos reglas:

- 1) Los enlaces dobles y triples serán tratados como enlaces simples.
- 2) Si una molécula tiene dos o más estructuras resonantes puede ser aplicado el modelo RPECV.

Además de las reglas anteriormente mencionadas, el modelo cuenta con una serie de cinco posibles distribuciones de pares de electrones alrededor del átomo central, estos modelos son aplicados a moléculas que no tienen pares de electrones libre. Para la simplificación estos modelos son propuestos para moléculas de solo dos elementos A y B, A será considerado como el átomo central, la formula general propuesta es AB_x , x puede tomar valores enteros de 2,3,4... si $x = 1$ la molécula será diatómica AB , por definición lineal.

Tabla 1. Distribución de los pares electrónicos alrededor de un átomo central (A) en una molécula y geometría de algunas moléculas y iones sencillos en los que el átomo central no tiene pares libres. Tomada de Química Raymond Chang y Goldsby y de Química la ciencia central Brown y LeMay (Brown et al., 2009).

Numero de electrones	Distribución de los pares de electrones	Geometría de los orbitales	Geometría molecular
2	 <p>Lineal</p>	 <p>Lineal</p>	 <p>Lineal</p>
3	 <p>Trigonal Plana</p>	 <p>Trigonal Plana</p>	 <p>Trigonal Plana</p>
4	 <p>Tetraédrica</p>	 <p>Tetraédrica</p>	 <p>Tetraédrica</p>
5	 <p>Bipiramidal Trigonal</p>	 <p>Bipiramidal Trigonal</p>	 <p>Bipiramidal Trigonal</p>



En la tabla 1 anterior se pueden observar las distintas geometrías tomadas por las molecular sin pares de electrones libres, la orientación de sus orbitales y los ángulos que poseen cada uno de sus orbitales entre sí.

5.4.4 Constante de rigidez de la repulsión entre orbitales

De acuerdo con el modelo RPECV, la molécula de polietileno base del poseería como forma base una estructura tetraédrica como la observada en la tabla 1, en la que cada uno de sus orbitales enlazados entre ellos tienen un Angulo de 109.5 grados. A partir de la descripción geométrica del modelo expuesto con anterioridad se encontrará una ecuación para la rigidez de la repulsión de los pares de electrones de la capa de valencia.

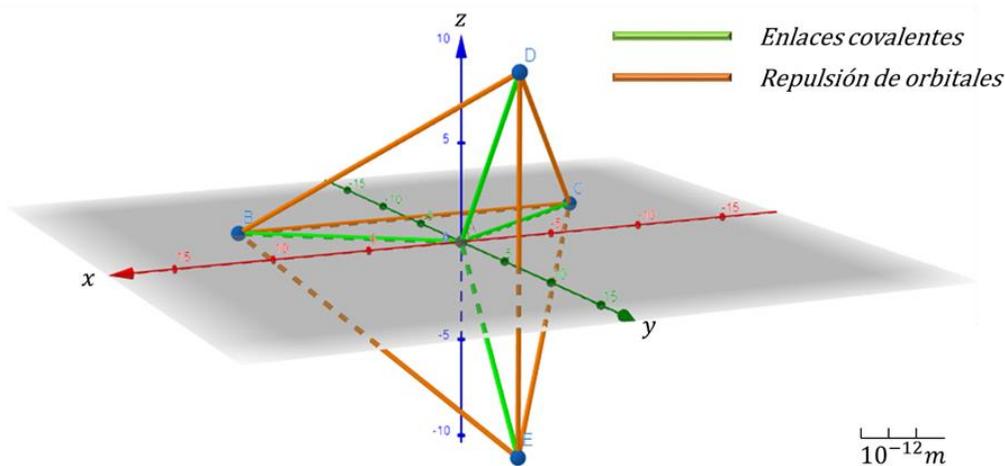


Ilustración 51. Geometría tetraédrica de una molécula, en donde la líneas verdes representan la unión por enlace covalente y las líneas naranjas las repulsiones de los los electrones en los orbitales. Autor realizada en GeoGebra.

En la ilustración 51 podemos ver una molécula con estructura tetraédrica, en la cual los enlaces covalente están representados por líneas verdes, para para encontrar la constante de rigidez de repulsión de orbitales, asumiremos que los electrones en los enlaces se ubican exactamente a un radio de distancia de su respectivo átomo, por ejemplo si tenemos una molécula CH los electrones estarán ubicados a un radio atómico $7.7e - 11 m$ del carbono, mientras que para el hidrógenos estarán ubicados a

3.7e – 11m. El modelo que será utilizados constará de un triángulo que involucra a el átomo central y dos átomos de las puntas.

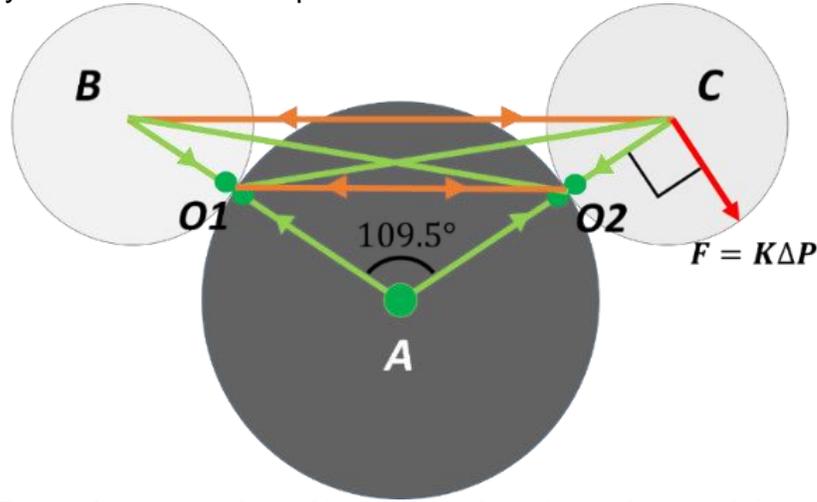


Ilustración 52, Triángulo interno de molécula tetraédrica formado por el átomo central y dos átomos de las aristas. Autor

$$M_F = F(r_{AO2} + r_{O2C}) \quad (109)$$

$$F = K_{ORB}(r_{AO2} + r_{O2C})\Delta\theta \quad (110)$$

$$M_F = K_{ORB}(r_{AO2} + r_{O2C})^2\Delta\theta \quad (111)$$

Para hallar la constante de rigidez se asumirá que cada barra es un resorte, entonces los resorte presentes son: O_1O_2 que sería la repulsión pura de orbitales, BC sería la repulsión débil de los núcleos positivos, O_1C y O_2C serían las atracciones débiles entre los núcleos positivos y los orbitales opuestos. Se tomara momento con respecto a A , y será hecha una sumatoria, con esto se pretende hallar una rigidez tal que un resorte que produzca un momento con la fuerza F tenga una deformación angular $\Delta\theta$ que sea la misma deformación para los resortes anteriormente mencionados ejerciendo el momento opuesto. Las distancias r_{AO1} y r_{AO2} puesto que son el radio del átomo central.

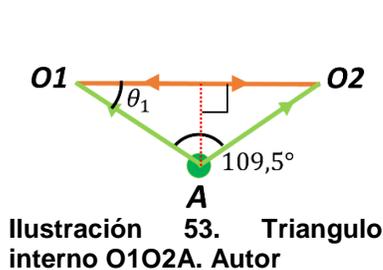


Ilustración 53. Triángulo interno O_1O_2A . Autor

$$\begin{aligned} \text{a) } \theta_1 &= 90^\circ - \frac{109.5^\circ}{2} \\ \text{b) } L_{O_1O_2} &= r_{AO2}\sqrt{2(1 - \cos(109.5^\circ))} \\ \text{c) } K_{O_1O_2} &= K_e \frac{4e^2}{L_{O_1O_2}^3} \end{aligned} \quad (112)$$

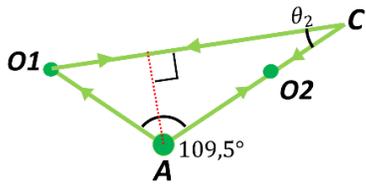


Ilustración 54. Triangulo interno O1CA. Autor

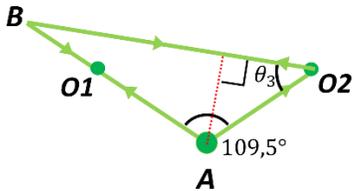


Ilustración 55. Triangulo interno BO2A. Autor

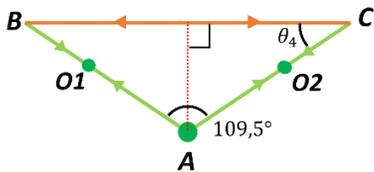


Ilustración 56. Triangulo interno BCA. Autor

$$a) r_{AC} = r_{AO2} + r_{O2C}$$

$$b) L_{O1C} = \frac{r_{AC}^2 + r_{AO1}^2 - 2r_{AO1}r_{AC} \cos(109.5^\circ)}{\sqrt{r_{AC}^2 + r_{AO1}^2 - 2r_{AO1}r_{AC} \cos(109.5^\circ)}} \quad (113)$$

$$c) K_{O1C} = K_e \frac{Q_C 2e}{L_{O1C}^3}$$

$$d) \theta_2 = \cos^{-1} \left(\frac{r_{AC}^2 + L_{O1C}^2 - r_{AO1}^2}{2r_{AC}L_{O1C}} \right)$$

$$a) r_{AB} = r_{AO1} + r_{O1B}$$

$$b) L_{BO2} = \frac{r_{AB}^2 + r_{AO2}^2 - 2r_{AO2}r_{AB} \cos(109.5^\circ)}{\sqrt{r_{AB}^2 + r_{AO2}^2 - 2r_{AO2}r_{AB} \cos(109.5^\circ)}} \quad (114)$$

$$c) K_{BO2} = K_e \frac{Q_B 2e}{L_{BO2}^3}$$

$$d) \theta_3 = \cos^{-1} \left(\frac{r_{AO2}^2 + L_{BO2}^2 - r_{AB}^2}{2r_{AO2}L_{BO2}} \right)$$

$$a) L_{BC} = \frac{r_{AB}^2 + r_{AC}^2 - 2r_{AC}r_{AB} \cos(109.5^\circ)}{\sqrt{r_{AB}^2 + r_{AC}^2 - 2r_{AC}r_{AB} \cos(109.5^\circ)}}$$

$$b) K_{BO2} = K_e \frac{Q_B Q_C}{L_{BC}^3} \quad (115)$$

$$c) \theta_4 = \cos^{-1} \left(\frac{r_{AC}^2 + L_{BC}^2 - r_{AB}^2}{2r_{AC}L_{BC}} \right)$$

En el apartado anterior fueron definidos todas las distancias necesarias para desarrollar la sumatoria de momento. Se encuentran los momentos producidos por los resortes:

$$M_1 = K_{O1O2} r_{AO2}^2 \Delta\theta \sin(\theta_1) \quad (116)$$

$$M_2 = K_{O1C} r_{AC}^2 \Delta\theta \sin(\theta_2) \quad (117)$$

$$M_3 = K_{BO2} r_{AO2}^2 \Delta\theta \sin(\theta_3) \quad (118)$$

$$M_4 = K_{BC} r_{AC}^2 \Delta\theta \sin(\theta_4) \quad (119)$$

Luego se desarrolla la sumatoria de momentos con respecto A o al átomo central.

$$M_F = M_1 + M_2 + M_3 + M_4 \quad (120)$$

$$K_{ORB}(r_{AO2} + r_{O2C})^2 = K_{O1O2}r_{AO2}^2 \sin(\theta_1) + K_{O1C}r_{AC}^2 \sin(\theta_2) + K_{BO2}r_{AO2}^2 \sin(\theta_3) + K_{BC}r_{AC}^2 \sin(\theta_4) \quad (121)$$

Por último se procederá al despeje de K_{ORB} :

$$K_{ORB} = \frac{K_{O1O2}r_{AO2}^2 \sin(\theta_1) + K_{O1C}r_{AC}^2 \sin(\theta_2) + K_{BO2}r_{AO2}^2 \sin(\theta_3) + K_{BC}r_{AC}^2 \sin(\theta_4)}{(r_{AO2} + r_{O2C})^2} \quad (122)$$

La ecuación 122 es la ecuación general para la rigidez de entre orbitales K_{ORB} de moléculas sin pares de electrones libre, con esta se podrán asumir las repulsiones entre orbitales con enlace como resorte muelle.

5.5 Software desarrollado para la resolución del problema

El planteamiento de las todas las anteriores analogías y hallazgo de la rigidez de los enlaces y repulsiones de orbitales implicadas, ayudo en la comprensión del comportamiento de las estructuras moleculares, lo que ha llevado a poder culminar el desarrollo del elemento finito para el presente estudio, se optó por desarrollar una simulación por medio de un software programado para obtener el módulo de Young del polietileno de alta densidad. El programa cuenta con tres partes, que son una función de mallado de cadena, función de rigidez, y por último el cuerpo del programa que, con la información arrojada por el mallador y la función de rigidez, calcula por medio del MEF las deformaciones de los enlaces de la molécula del material.

5.5.1 función de mallado de cadena

La función que realiza la tarea de mallado, consiste en una serie de tres tablas que almacenan la información necesaria para la construcción de una molécula de polietileno. La primera de estas tablas sería la matriz de geometría, que contiene las coordenadas de trece puntos en un espacio tridimensional cartesiano que cuentan con la configuración de la molécula de polietileno, cada punto representa un átomo de la molécula de polietileno.

Tabla 2. numeración del elemento coordinado en un espacio tridimensional.

núm.	X[m]	Y[m]	Z[m]	Elemento
1	8,89E-11	0	-1,26E-10	H
2	-6,58E-11	-9,31E-11	0	H
3	0	0	0	C
4	-6,58E-11	9,31E-11	0	H
5	1,55E-10	9,31E-11	1,26E-10	H

6	8,89E-11	0	1,26E-10	C
7	1,55E-10	-9,31E-11	1,26E-10	H
8	-6,58E-11	-9,31E-11	2,52E-10	H
9	0	0	2,52E-10	C
10	-6,58E-11	9,31E-11	2,52E-10	H
11	1,55E-10	9,31E-11	3,77E-10	H
12	8,89E-11	0	3,77E-10	C
13	1,55E-10	-9,31E-11	3,77E-10	H
14	-6,58E-11	-9,31E-11	5,03E-10	H
15	0	0	5,03E-10	C

En la tabla 2 se observa que columna núm contiene un numero específico asignado al elemento en esa posición, las columnas X, Y, y Z, las coordenadas y la última columna elemento específica de que elemento químico se trata.

Tabla 3. matriz de conectividad y matriz de propiedades compiladas en una sola tabla

MC		MP(matriz de propiedades)									
núm. 1	num.2	K	Ra1	Ra2	Va1	Va2	Tipo	R átomo central	Peso	ma1	ma2
		N/m	[m]	[m]				[m]	[N]	[UMA]	[UMA]
1	2	0	7,70E-11	3,70E-11	1	1	1	7,70E-11	0	12	1
1	3	0	7,70E-11	7,70E-11	4	4	0	0	0	12	12
1	4	0	7,70E-11	3,70E-11	1	1	1	7,70E-11	0	12	1
1	6	0	7,70E-11	7,70E-11	4	4	1	7,70E-11	0	12	12
2	3	0	7,70E-11	3,70E-11	4	1	0	0	0	12	1
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

En la tabla 3 se encuentran unidas la matriz de conectividad MC y la matriz de propiedades MP, en este caso solo fueron incluidos los diez primeros datos. La matriz de conectividad contiene dos columnas, la columna num1 y num2, que son el número del punto coordinado en la tabla 2, los cuales se conectan si entran en la misma fila. Luego está la matriz de propiedades la cual contiene primeramente la rigidez K, estos valores serán calculados he introducidos posteriormente, los radios atómicos R_a y R_b , los electrones de valencia V_a y V_b , Tipo es la clase de interacción en donde 1 representa el enlace covalente y 0 la repulsión de orbitales, si es repulsión de orbitales en la columna R átomo central será almacenado el radio átomo central del elemento al que pertenecen los orbitales, por ultimo las masas atómicas m_{a1} y m_{a1} . Las tablas son una pieza fundamental para completar la conectividad de los elementos, estas son leídas en el software por un ciclo que multiplica las tablas de MC y MP un número determinado de veces, por otro lado, la matriz de geometría es multiplicada a partir de la fila cuatro, esta multiplicación consiste en tomar todos los valores desde la celda cuatro a la quince y sumarle 12 multiplicado por el contador, en este caso como ejemplo los valores de la fila cuatro seria copiados a la fila 16 para el próximo ciclo la

próxima posición en ser copiada sería la número 28, sumándole a los valores de la columna Z una determinada distancia de ascenso que correspondería a la altura a la que asciende el próximo nodo, esta depende del número de veces que vaya a ser multiplicada la cadena, para la multiplicación de cadena en la matriz de geometría, luego de haber alargado la cadena, la última fila es copiada en la anterior, y posteriormente es eliminada, esto para garantizar que no existan filas ni columnas con solo ceros.

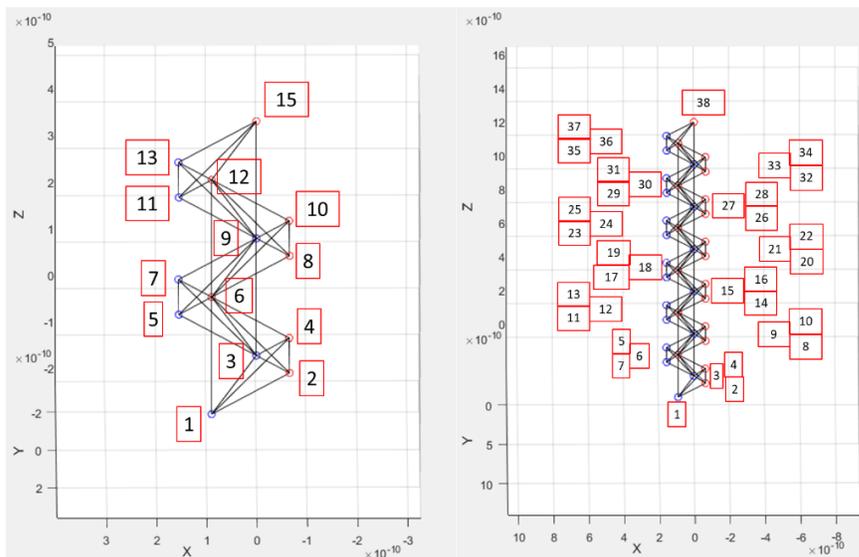


Ilustración 57. Modelo en cadena de la molécula de polietileno. Autor

En la ilustración 57 se puede observar la cadena base a la izquierda y la cadena multiplicada a la derecha.

Multiplicación de cadenas

La multiplicación de cadenas presentada por el programa, utiliza la longitud en elementos totales de la matriz de geometría para multiplicar su tamaño o número de elementos las veces que le sea indicado, si se le pide que multiplique la cadena presenten n veces, calculara el número de nodos existentes, luego creo ese mismo número de posiciones en la matriz de geometría, y los almacena en esas nuevas posiciones sumándole a la coordenada X de cada nodo la distancia de desplazamiento a lo largo del eje. Luego de haber desarrollado la multiplicación en X, ahora la realizará en el eje Y, lo primero será calcula la nueva cantidad de elementos, para ese número especificado de nodos, creará ese número de nuevas posiciones en la matriz de geometría, y almacenará las coordenadas en las posiciones indicadas, sumándoles a sus coordenadas en Y la distancia de desplazamiento a lo largo del eje.

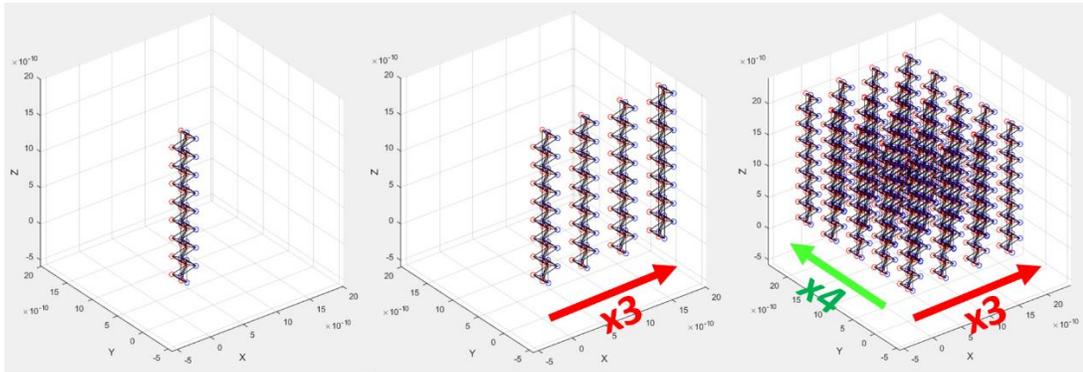


Ilustración 58. Cadena simple de polietileno a la izquierda, en el centro la cadena ha sido reproducida tres veces, en la imagen de la derecha, las cadenas ya reproducida a lo largo del eje X, ahora son replicadas cuatro veces en dirección del eje Y. Autor

La distancia a la que se encuentran las cadenas separadas las moléculas de polietileno fue calculada, tomando en cuenta la densidad del polietileno de alta densidad. El procedimiento aplicado consistió en toma un radical de polietileno y analógicamente almacenarlo en una caja con una altura equivalente a su altura inclinada $109.5^\circ/2$, la magnitud de los lados de la caja se asumió como la misma denotada por la variable a . Luego se desarrolló el siguiente procedimiento:

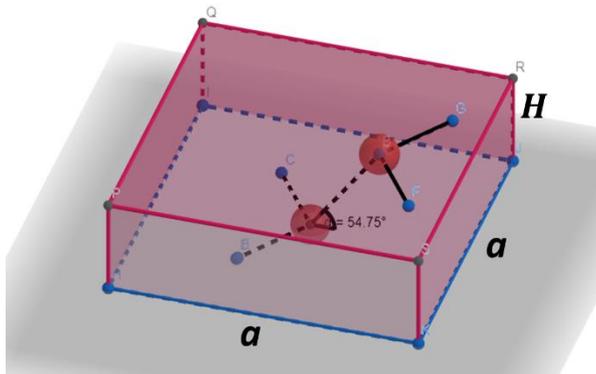


Ilustración 59. Molécula de polietileno insertada dentro de una caja. Autor desarrollado en Geogebra 3D.

$$m_{PE} = 2m_C + 4m_H$$

$$V = \frac{m}{\rho_{HDPE}}$$

$$Ha^2 = \frac{m}{\rho_{HDPE}} \quad (115)$$

$$a = \sqrt{\frac{m}{\rho_{HDPE}H}}$$

$$a = 5.81484756e - 10m$$

El valor de la densidad $\rho_{HDPE} = 955 \text{ Kg}/\text{m}^3$ fue obtenido de la ficha técnica para la resina de polietileno de alta densidad SGF4950 de Braskem empresa petroquímica brasileña.

5.5.2 Función módulo de rigidez

La función módulo de rigidez cumple con calcular los valores de la rigidez correspondiente para cada elemento de la estructura molecular estudiada e indexarla

en la columna 1 de la matriz de propiedades, estos valores son calculados a partir de las ecuaciones anteriormente vistas en sección 5.3.2 módulo de rigidez del enlace covalente y en la sección 5.4.4 módulo de rigidez de la repulsión entre orbitales, los enlaces son identificados en dependencia del valor numérico encontrado en la columna 6 de la matriz de propiedades, si el valor es 1 el enlace será covalente y serán ejecutadas en orden las ecuaciones para el cálculo de la rigidez, por el contrario si el valor es 0 la interacción será una repulsión de orbitales, por lo que el serán ejecutadas en orden las ecuaciones para el cálculo de su rigidez. Luego de esto será retornado dicho valor e ingresado en la matriz de propiedades en la columna antes mencionada.

5.5.3 Solver MEF

La última parte comprende el cuerpo de programa que se encarga de aplicar al problema el método de elementos finitos, y por medio de este encontrar la solución numérica. El solver consta de un ciclo que ubica las matrices de rigidez locales en una matriz de rigidez general, además también se encarga de armar los vectores de fuerza locales y ubicarlos en un vector de fuerza general, posterior a esto suma el vector de fuerza general y el vector de fuerzas externas. Luego de lo anterior el software eliminara toda fila y columna de todo nodo que posea restricción de movimiento en uno o todos los ejes, esto se registra en el vector de restricciones, en donde las restricciones de movimiento son representadas con 0 y la libertad de movimiento con 1, próximamente se procederá al hallazgo de los desplazamientos, las reacciones y la *graficación* de lo anteriormente calculado.

5.5.4 Desarrollo de la simulación en el software

El desarrollo de la simulación se planteó en una serie de pasos concretos con el objetivo de obtener el diagrama de esfuerzo deformación de las cadenas de polietileno los cuales serán expuestos a continuación:

- **condiciones iniciales y limitaciones.**

de acuerdo con lo que permitan los requerimientos del sistema para simulaciones con un tiempo de proceso optimo, para la preparación de la malla se plantean que longitud de la cadena debe ser de 8 moléculas de polietileno, la malla constar de un grupo de cuatro cadenas moleculares, de 2 por 2, la distancias entre las cadenas moleculares dependerá de la densidad del material por lo tanto del valor de la variable a que contendrá el valor de dicha distancia, los nodos fijos serán los primeros nodos de cada cadena, en donde estos serán el nodo de la base de cada cadena molecular.

el esfuerzo aplicado ira aumentado exponencialmente, comenzando en 0 y terminando en los 35GPa, debido a que se estimó que en este valor se presenta el pico de elongación de las cadenas. Del esfuerzo será calculada la fuerza que será aplicada en los cuatro últimos nodos o átomos de cada da cadena. Entendiéndose como últimos a aquellos que se encuentra ubicados en los extremos superiores de las cadenas.

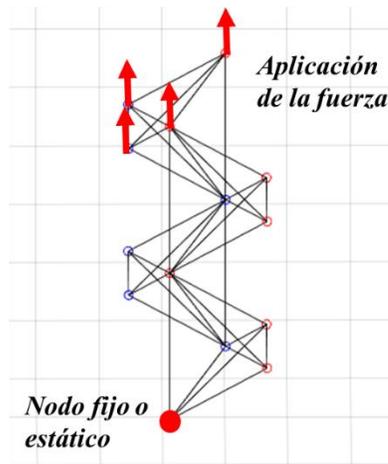


Ilustración 60. Nodos superiores en donde es aplicada la fuerza, y nodo base que se mantiene fijo. Autor

pruebas y tomas de datos:

- se ingresa el valor del esfuerzo en el programa.
- El programa calcula la fuerza aplicada en los últimos cuatro nodos de cada cadena.
- Se aplican los cálculos anteriormente vistos.
- Se obtiene la deformación unitaria.
- Se procede a digitarla en una tabla.
- este proceso se repetirá hasta que el valor del esfuerzo llegue a 35GPa de forma incremental.

Por último, se llevará a cabo la graficación de los datos, obteniendo de este modo el diagrama esfuerzo-deformación.

5.6 SIMULACIÓN EN ANSYS

La simulación en ANSYS aportara un punto de comparación con el comportamiento del mallado propuesto por el proyecto, el objetivo de este apartado es el de presentar los pasos que se llevaron a cabo para la obtención del diagrama esfuerzo deformación, de forma resumida.

5.6.1 Pre-proceso

Modelado 3D de la probeta

Modelado en 3d de la probeta de acuerdo con la normar ASTM d638 la halterio tipo 1, consta de una longitud de 165 mm, un ancho de 19 mm y espesor de 7 mm, la zona más delgada de este solo varia en el ancho teniendo una diferencia de 5 mm con respecto a los 19 mm de los extremos, teniendo de esta manera una magnitud de 13 mm, la probeta fue desarrollada en el programa solid edge st10.

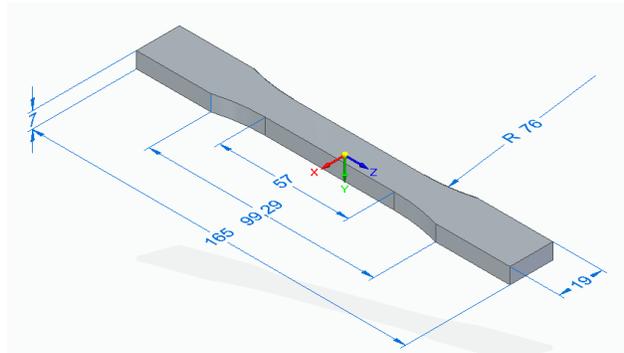


Ilustración 61. Probeta tipo I de la norma ASTM a638 con sus medidas en milímetros. Autor, modelado en SolidEdge ST10

Configuración del material en el software de simulación

Las propiedades del material fueron definidas a partir de los datos mostrados por las fichas técnicas consultadas.

▼ Isotropic Elasticity

Derive from	Young's Modulus and Poisson's Ratio
Young's Modulus	1,3e+09 Pa
Poisson's Ratio	0,46000
Bulk Modulus	5,4167e+09 Pa
Shear Modulus	4,4521e+08 Pa
Isotropic Secant Coefficient of Thermal Expansion	0,00023000 1/°C
Compressive Ultimate Strength	0 Pa
Compressive Yield Strength	0 Pa
Tensile Ultimate Strength	4,3e+07 Pa
Tensile Yield Strength	3,4277e+07 Pa

Ilustración 62. Propiedades definidas para ANSYS de acuerdo a los datos arrojados por las fichas técnicas consultadas para el HDPE. Autor, obtenida de ANSYS.

Preparación de la malla

Para la preparación del mallado de la probeta se dispusieron las siguientes configuraciones la malla:

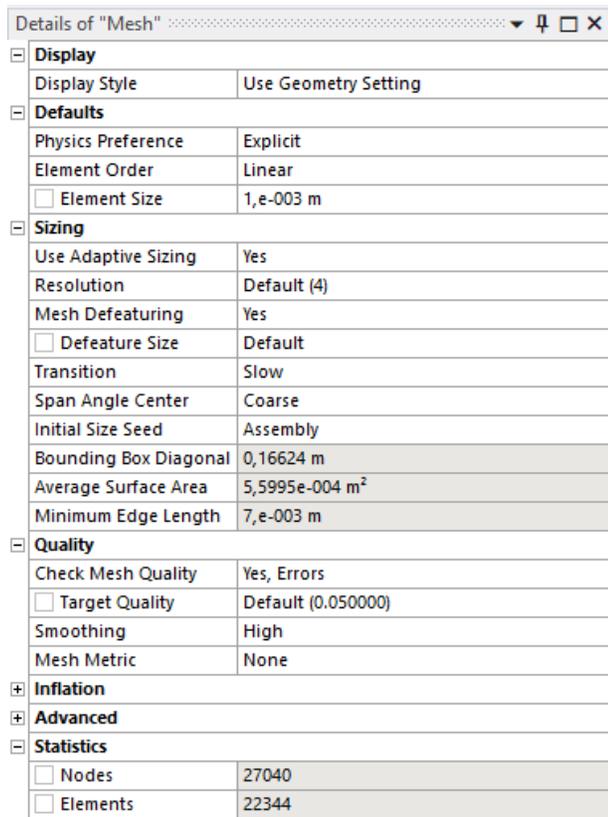


Ilustración 63. Configuración propuesta para la malla de elementos finitos en el mallador de ANSYS. Autor, obtenido de ANSYS.

Puntos de aplicación de la fuerza y puntos fijos

Se dispuso a ubicar los puntos de aplicación de la fuerza en las zonas en donde naturalmente le son aplicados en los ensayos de tracción reales, las zonas fijas para este caso se escogieron bajo el mismo criterio, siendo estas los extremos de la probeta, uno de sus extremos fue seleccionado para aplicación de la fuerza y opuesta fue seleccionado como fijo. a la fuerza que fue usada en el programa, se llegó gracias a numerosas pruebas que fueron realizadas y al final fue la máxima para la que se tuvo una convergencia coherente.

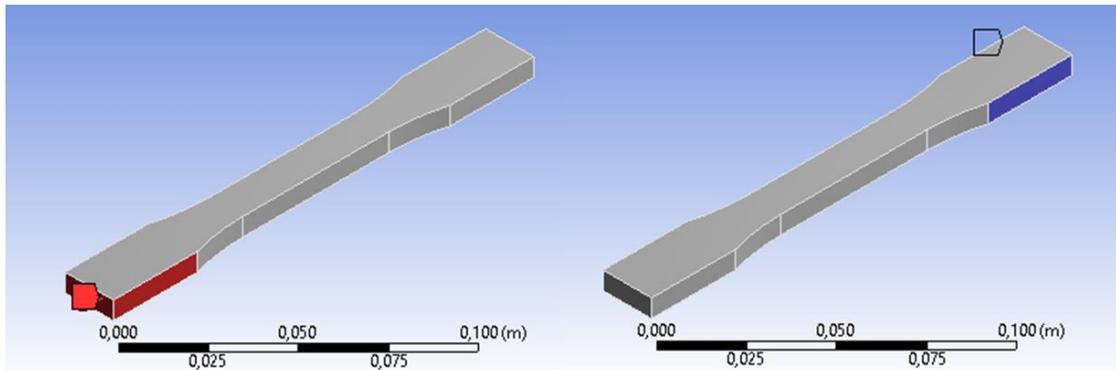


Ilustración 64. A la izquierda con la etiqueta de color rojo los extremos en los que es aplicada la fuerza, a la derecha en azul los lados que se mantienen fijos. Autor, obtenido de ANSYS.

Details of "Force"	
Scope	
Scoping Method	Geometry Selection
Geometry	3 Faces
Definition	
Type	Force
Define By	Vector
<input type="checkbox"/> Magnitude	30000 N (step applied)
Direction	Click to Change
Suppressed	No

Ilustración 65. Configuración que le fue asignada a los puntos de aplicación de la fuerza en ANSYS. Autor, obtenido de ANSYS.

Configuración de análisis

La configuración aplicada fue definida de acuerdo a la convergencia que iba siendo obtenida a medida que fueron hechas las pruebas, el minimum time step se tomó en el valor más pequeño posible, por este motivo se llegó a la siguiente configuración:

Details of "Analysis Settings"	
Analysis Settings Preference	
Type	Program Controlled
Step Controls	
Number Of Steps	1
Current Step Number	1
Load Step Type	Explicit Time Integration
End Time	4,e-004
Resume From Cycle	0
Maximum Number of Cycles	1e+09
Maximum Energy Error	0,1
Reference Energy Cycle	0
Initial Time Step	Program Controlled
Minimum Time Step	1,e-015 s
Maximum Time Step	Program Controlled
Time Step Safety Factor	0,9
Characteristic Dimension	Diagonals
Automatic Mass Scaling	No
Solver Controls	
Euler Domain Controls	
Damping Controls	
Erosion Controls	
On Geometric Strain Limit	Yes
Geometric Strain Limit	1,5
On Material Failure	Yes
On Minimum Element Time Step	No
Retain Inertia of Eroded Material	Yes

Ilustración 66. Configuración asignada al análisis en ANSYS. Autor, obtenido de ANSYS.

6. RESULTADOS

En este apartado serán presentados los resultados obtenidos de las simulaciones realizadas, la descripción y la interpretación de cada uno. Los resultados obtenidos serán comparados con los presentados por el diagrama esfuerzo deformación real del polietileno de alta densidad obtenido del artículo *A simultaneous SAXS/WAXS and stress-strain study of polyethylene deformation at high strain rates* de los autores D. J. Hughesa, A. Mahendrasingama, W. B. Oatwaya, E. L. Heeleya, C. Martina, y W. Fullera. Los datos mostrados del presente diagrama fueron comparados con la ficha técnica del polietileno presentado en la página *matweb material propertys data*, de Mitsubishi Chemicals *advanced materials*, de *directplastics*, entre otras. Propiedades que coincidieron a cabalidad con el comportamiento presentado por el diagrama de la ilustración 68.

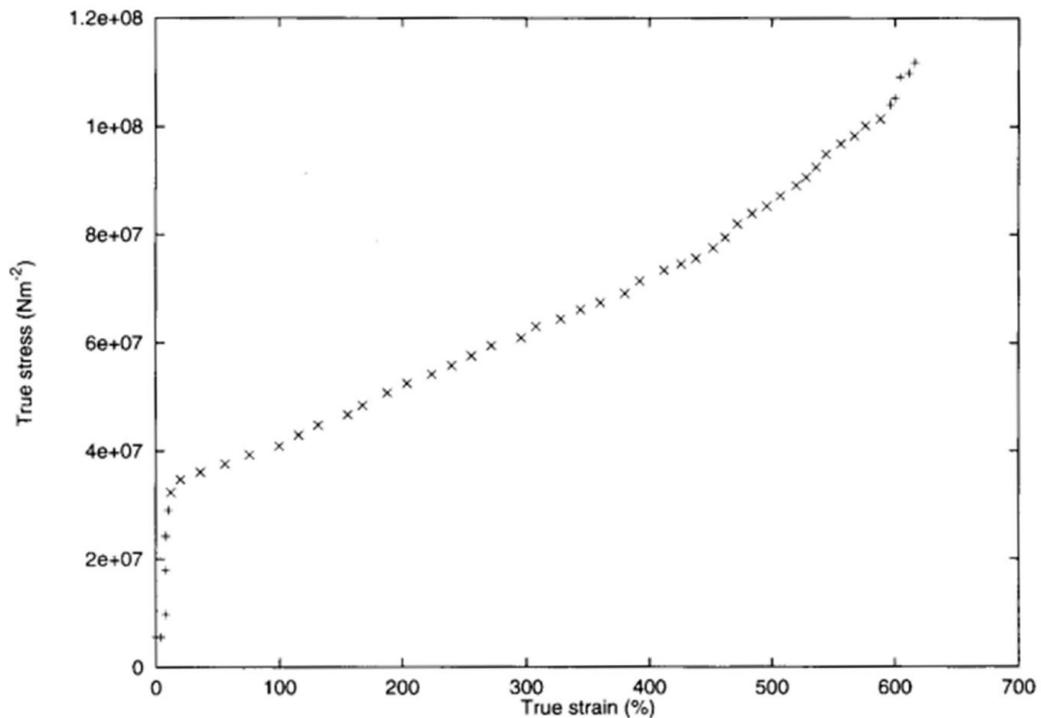


Ilustración 67. Gráfico de la tensión verdadera contra la deformación verdadera para la deformación de HDPE a 35°C. obtenida de *A simultaneous SAXS/WAXS and stress-strain study of polyethylene deformation at high strain rates* de los autores D. J. Hughesa, A. Mahendrasingama, W. B. Oatwaya, E. L. Heeleya, C. Martina and W. Fullera (Hughes et al., 1997)(J. Lu et al., 2001).

6.1 Simulación de elementos finitos con mallado basado en la estructura molecular

los parámetros establecidos para la simulación fueron escogidos de acuerdo al criterio de menor tiempo de simulación y optima cantidad de elementos. La cantidad de moléculas de polietileno fue de 8 moléculas por cadena, el número de cadena

establecidas para la simulación fue de cuatro cadenas, con factores multiplicadores en x de 1, y en y de 1, en donde dicho valor representa el número de veces que se multiplica la cadena, por lo tanto, para el valor de 1 la cadena es multiplicada por 2, por lo tanto, habrá una cadena más o una línea de cadenas adicional para el caso del eje y. Luego de haber establecido las condiciones dadas para la simulación, los resultados obtenidos fueron los siguientes:

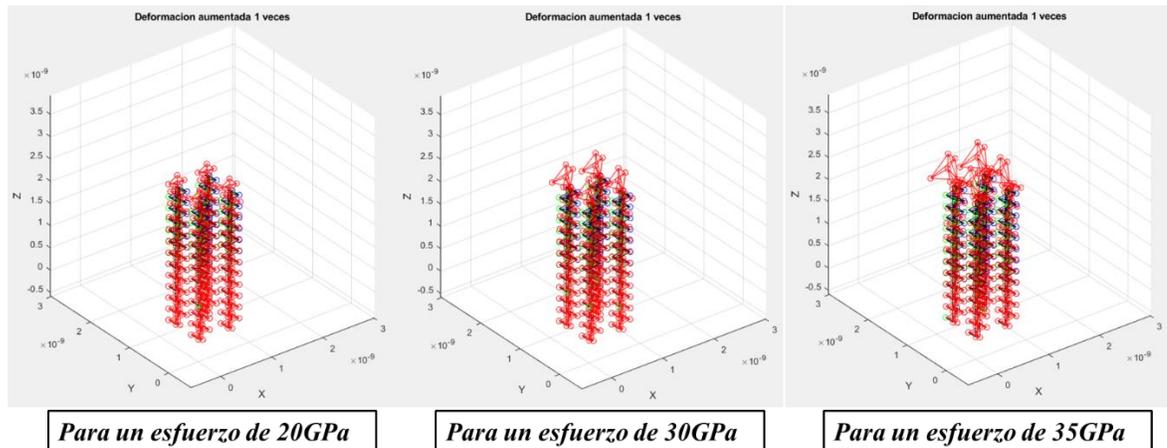


Ilustración 68. Cadenas de polietileno en deformación sometidas a tensión. Autor.

En la ilustración anterior puede ser observado con claridad el cambio geométrico que presentan las cadenas moleculares de Polietileno a medida que el esfuerzo que está siendo aplicado sobre ellas va en crecimiento. En la ilustración pueden ser vistas primero las cadenas sin esfuerzo aplicado sobre ellas en barras de color negro con uniones verdes y azules, y en rojo la estructura en deformación ya siendo sometida a esfuerzo.

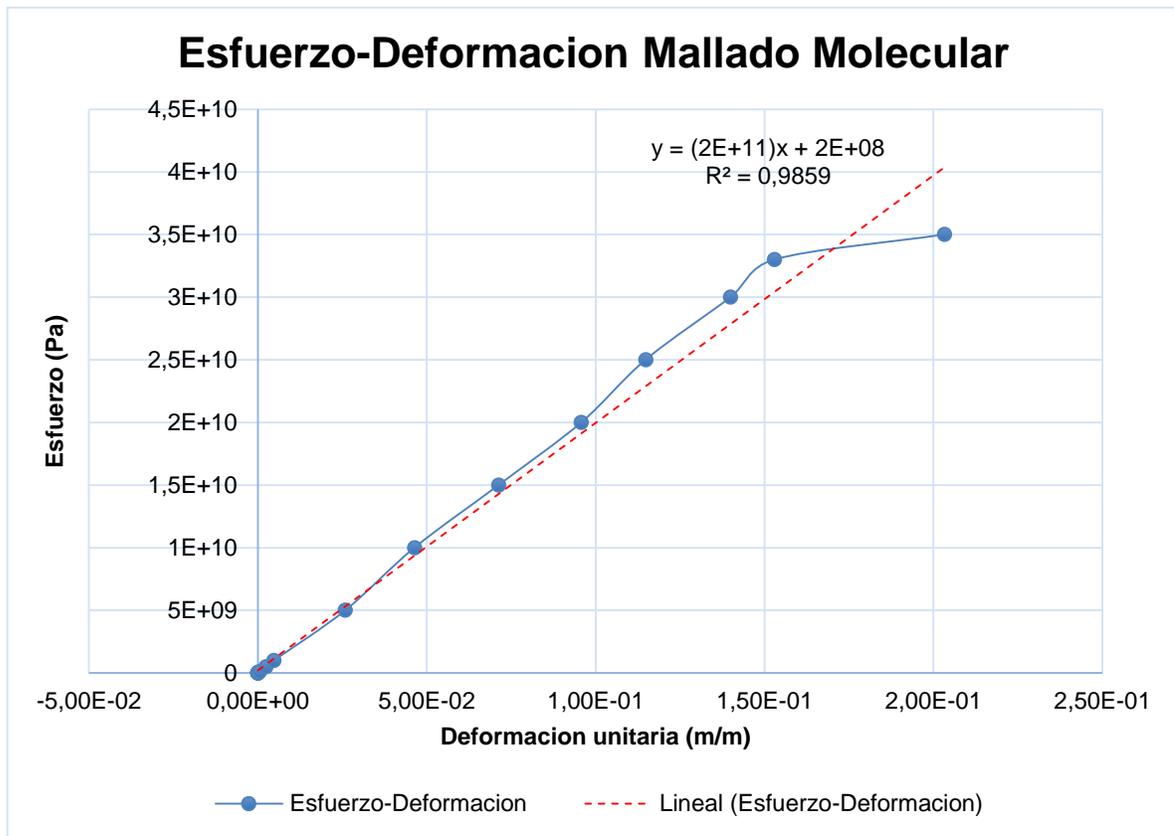


Ilustración 69. Diagrama de esfuerzo contra deformación unitaria para cadenas moleculares de polietileno de alta densidad. Autor obtenido de ANSYS

En la gráfica pueden ser visto los resultados de la simulación desarrollada con elementos finitos aplicando un mallado basado en la estructura molecular, en esta se puede apreciar una tendencia lineal de crecimiento en el esfuerzo de 0 hasta los 33GPa en función de una deformación unitaria que va desde 0 hasta 0.153 m/m, luego la pendiente se aplanada desde los 33GPa hasta los 35GPa en función de una deformación unitaria que va desde 0.153 m/m hasta los 0.203 m/m. la tendencia de la curva es correspondiente con el comportamiento del diagrama esfuerzo deformación para un material con un porcentaje de cristalinidad de 100% lo cual es consistente con la simulaciones realizadas. En lo que respecta a la línea de tendencia, representada en la gráfica con la recta lineal roja con ecuación respectiva $\sigma(x) = (2e11)x + 2e8$, en donde x es la deformación unitaria y el valor que lo acompaña que para este caso sería $2e11$ Pa, corresponde al módulo de Young para cada cadena molecular de polietileno, haciendo una respectiva comparación con el módulo de Young extraído de fichas técnicas consultadas de matweb material property data, Mitsubishi Chemicals advaced materials, de directplastics, entre otras, correspondiente a 1.2GPa como media, se puede observar que el módulo de Young obtenido de las cadenas moleculares el 166.66 veces más grande que el modulo determinado de forma experimental presentado en las fichas técnicas.

6.1.1 Comparación de las propiedades mecánicas de la simulación por mallado molecular con las propiedades reales del material

debido a que el mallado molecular se presentó en la simulación con una cristalinidad del 100%, sus propiedades con respecto a las propiedades reales del material tomadas de la ficha técnica y el diagrama esfuerzo-deformación real fueron mucho mayores, esto porque la simplificación de muchos parámetros para el desarrollo de la simulación llevo a que diversos factores no fueran tomados en cuenta a la hora de llevar a cabo el desarrollo, presentando un comportamiento ideal que el polietileno de alta densidad debería poseer en caso de ser construido molécula a molécula, lo cual conllevaría a una clara mejora en las propiedades mecánicas presentadas por dicho material.

Los factores que fueron dejados de lado fueron las ramificaciones, las zonas cristalinas no alineadas dentro del material, las numerosas regiones amorfas, los enrollamientos, las torceduras y entrelazamientos de las cadenas, las impurezas presentadas dentro del material, entre muchas otras condiciones presentadas dentro de la estructura interna del HDPE en condiciones reales, todo esto contribuye a que el diagrama esfuerzo deformación que muestra el comportamiento mecánico del material en tensión, para el mallado molecular a comparación del diagrama del HDPE experimental, se presente muy parecida a la de un material con rotura frágil y con mayor módulo de elasticidad con magnitud de 200GPa, el cual se presentaría como el ideal para este, aproximadamente 166.6666 veces mayor que el módulo de elasticidad promediado de las fichas técnicas en las que se registra con un valor de 1.2 GPa para el HDPE de inyección.

El diagrama para el material real se presenta los comportamientos elásticos y plástico, con una deformación mayor a menor esfuerzo que la deformación unitaria presentada por el mallado molecular en la simulación, que es aproximadamente de 616% a comparación a comparación del 20.3 % que obtuvo el mallado molecular con mucho mayor esfuerzo instantes antes de su ruptura, aproximadamente se podría decir que se deforma 30,34 veces más debido a la falta de cristalinidad e imperfecciones presentada dentro del material. La simulación llevada a cabo por el MEF con mallado molecular nos presentó la idealización del HDPE con propiedades mecánicas mejoradas, 100% cristalino con alineación total de las cadenas moleculares con un módulo de Young cercano al de muchos máteles, pudiendo de esta manera ser relacionado con los nanotubos de carbono, los cuales poseen estructuras que son construidas molécula a molécula, con cristalinidad adquirida del 100% sin imperfección alguna, con estructuras geométricamente bien alineadas, debido a lo anterior sus propiedades mecánicas son más altas que la de la mayoría de los materiales, en el artículo Structural rigidity and low frequency vibrational modes of long carbon tubules realizado en 1993 por Overney G, Zhong W, y Tomanek D (Overney et al., 1993). se estimó teóricamente que su módulo de elasticidad debería ser cercano a 1250 GPa y su tensión de rotura alrededor de 60 GPa.

En otro estudio denominado Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties de los autores Yu M.F., Files B.S., Arepalli S., Ruoff R.S. (Yu et al., 2000) en el año 2000, fueron estimados de forma experimental la magnitud de sus propiedades mecánicas, desarrollando ensayos a tracción a 15 nanotubos de una sola capa, los resultados obtenidos arrojaron un módulo de elasticidad que en su valor más alto fue de 1040 GPa para una tensión de rotura de 52 GPa y una deformación-unitaria de 0.05, lo cual coincide con lo estimado por el estudio anterior. Los datos arrojados por la simulación encajan a cabalidad con el caso de los nanotubos de carbono por eso se puede afirmar que las propiedades mecánicas arrojadas por la simulación serían las ideales para el material real.

6.2 Simulación en ANSYS con mallado convencional

Los parámetros establecidos para la simulación fueron escogidos de acuerdo a la mejor optimización posible de las condiciones para asegurar una convergencia de los resultados lo más acorde a un ensayo de tracción en la maquina universal. Las propiedades escogidas para el material fueron las establecidas por el programa las cuales no diferían en gran medida con las planteadas por las fichas técnicas consultadas. Los resultados obtenidos en la simulación en ANSYS fueron:

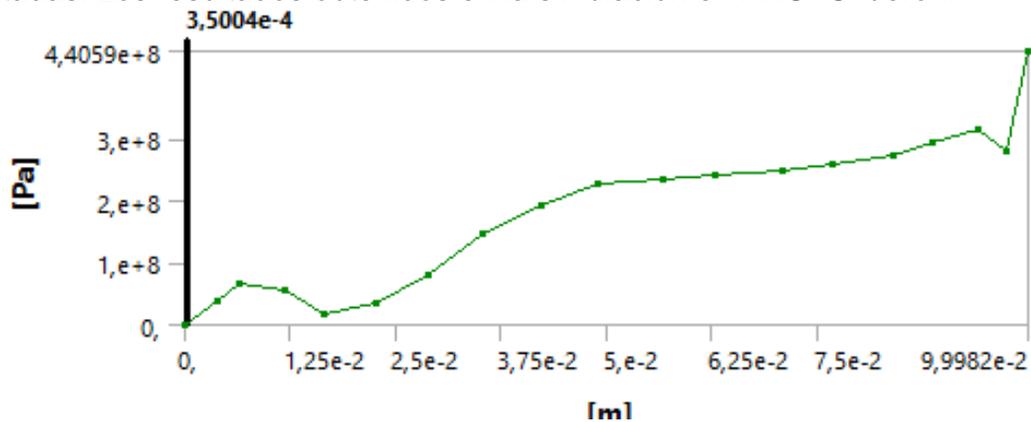


Ilustración 70. Diagrama de esfuerzo contra deformación total. Autor obtenido de ANSYS.

En la gráfica anterior puede ser observado el cambio que presenta en esfuerzo a medida que la deformación total de la probeta va en aumento.

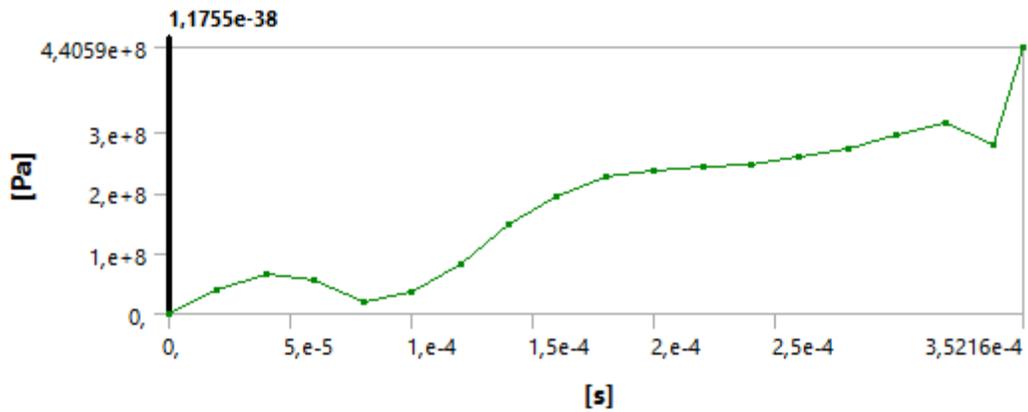


Ilustración 71. Diagrama de esfuerzo contra tiempo. Autor obtenido de ANSYS.

En la gráfica anterior puede ser observado el cambio que presenta en esfuerzo a medida que se va presentando los incrementos en el tiempo.

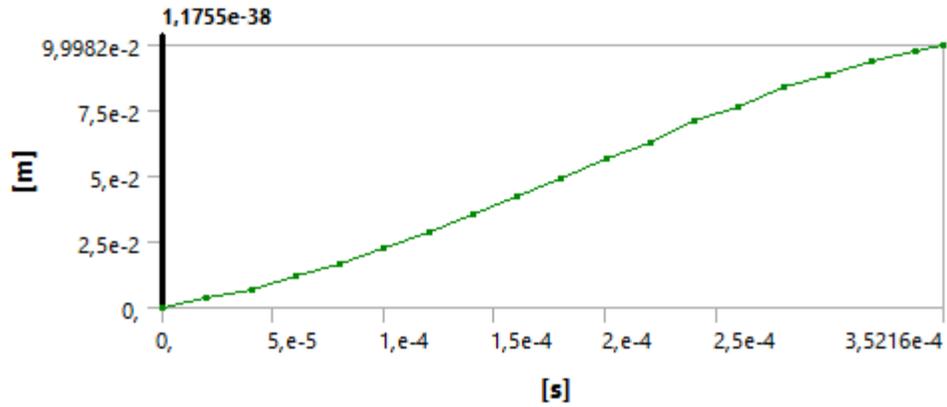


Ilustración 72. Diagrama de deformación total contra tiempo. Autor obtenido de ANSYS.

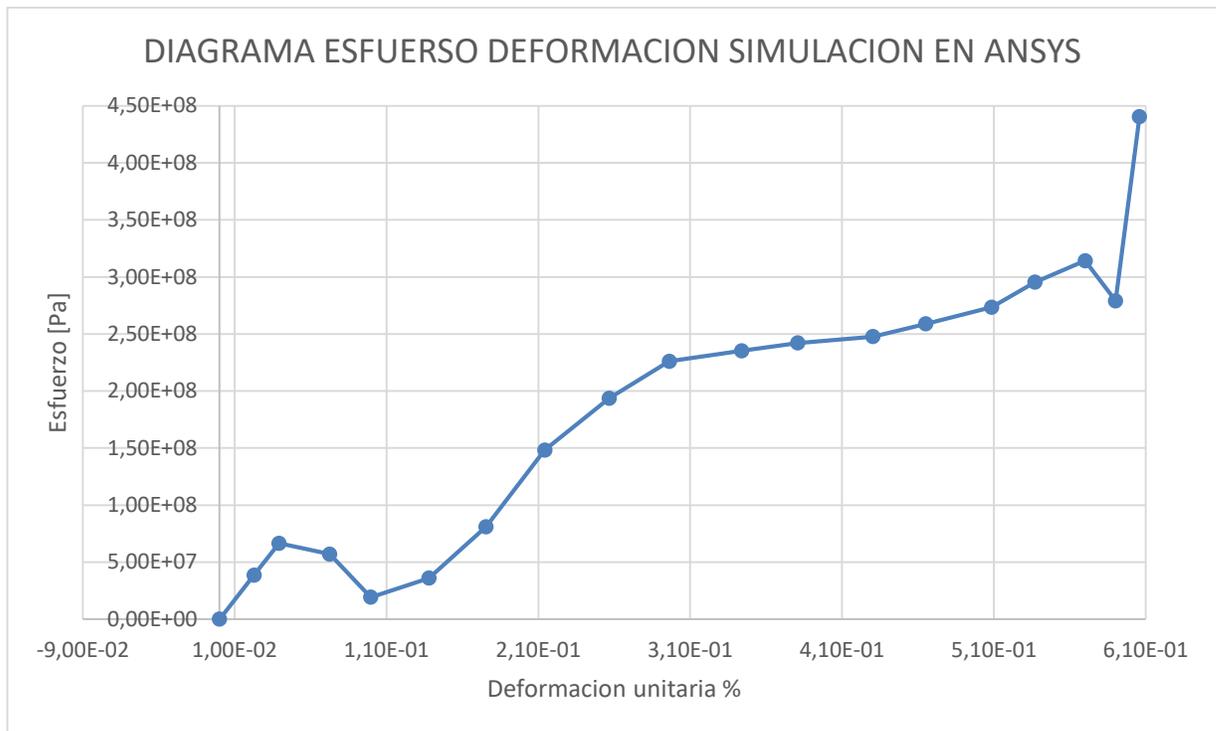


Ilustración 73. Diagrama de esfuerzo contra deformación unitaria. Autor obtenido de ANSYS

En la gráfica puede ser visto el diagrama esfuerzo deformación obtenido de la simulación de una probeta de HDPE sometida a tensión, puede ser relacionada con el diagrama presentado por un material dúctil. En el diagrama presentado con anterioridad que la región elástica se extiende para esfuerzo desde los 0 Pa a 38,575e6 Pa y para la deformación unitaria desde los 0 m/m hasta los 2,284e-2 m/m, por otra parte, la región de fluencia se extiende para esfuerzo desde 66,531e6 Pa hasta 35,95e6 Pa y para la deformación unitaria desde 3,914e-2 m/m hasta los 1,38e-1 m/m. la región de endurecimiento por deformación va desde el punto 35,95e6 Pa en esfuerzo y 1,31e-1 m/m para deformación unitaria en adelante, presentando ruptura en 314,25e6 Pa y deformación unitaria de 5,7e-1 m/m.

6.2.1 Comparación de las propiedades mecánicas de la simulación en ANSYS con las propiedades reales del material.

en lo que respecta al comportamiento mecánico de la simulación con mallado convencional a comparación del comportamiento mecánico experimental del HDPE, se observa que debido a que en general el MEF utilizando mallado convencional está enfocado para trabajar con las propiedades globales del material, este tendera a presentar en los resultados un comportamiento mecánico muy similar al que presentan los ensayos reales, en muchos casos por condiciones de frontera mal definidas o no congruentes con el fenómeno o refinamientos mal logrados del mallado pueden hacer que los resultados pueden presentar desviaciones muy grandes.

En el diagrama esfuerzo-deformación de la probeta simulada a comparación de las propiedades obtenidas de las fichas técnicas y el diagrama presentado con anterioridad se observa que los esfuerzos de ruptura llegan a valores muy cercanos, en el caso de la simulación a un valor de 115,8 MPa y para el caso del diagrama de esfuerzo deformación real 112 MPa. La diferencia estuvo en las deformaciones unitarias las cuales difirieron en cantidad, para el caso de la presentada por la simulación en ANSYS, este registro un valor máximo de 0.436624242 o 43.6624242%, que es significativamente menor que el registrado en las fichas técnicas y el presentado por el diagrama real de esfuerzo-deformación, el cual presenta un valor de 6.16 m/m o 616%, esto dependiente de las condiciones propias del material de la probeta en donde las moléculas de PE presentes en el material real cuentan con grados de movilidad superiores, dando de esta manera mayores rangos de desplazamiento y al estar sometidas a tensión permiten una deformación mayor en dichas condiciones. condición con la cual no cuentan los elementos de malla presentados en la simulación en ANSYS, estos están conectados en una estructura compacta, de acuerdo a la configuración que les sea prevista, para el caso de estudio fueron utilizados hexaedros, para resultados más acordes en cuanto a la deformación unitaria a los de la ficha técnica, pueden ser realizadas configuraciones más exhaustivas y avanzadas en las condiciones de la simulación, pero no es el motivo de este estudio.

7. CONCLUSIONES

La investigación realizada determina que las propiedades arrojadas en los resultados para la simulación por análisis de elementos finitos usando un mallado basado en la estructura molecular para el material simulado, al no poseer ningún tipo de imperfección o discontinuidad, son las ideales para el HDPE, planteando de este modo que si se construyeran polímeros molécula a molécula estos tendrían mejores propiedades mecánicas, siendo así útil para determinar las propiedades mecánicas de los materiales en condiciones ideales de cristalinidad, no dejando atrás el hecho de que tomando en cuenta condiciones de malla moleculares más complejas pueden ser obtenidos comportamientos mecánicos más cercanos a los reales, pero con costes de maquina mucho mayores en caso de conservar las escalas presentadas a nivel molecular. la clara desventaja presentada por el método de mallado molecular frente al mallado convencional es el tiempo de desarrollo de la malla, los cuales son extensos dependiendo de la complejidad de la estructura molecular del material que se pretenda estudiar, resultando de esta manera más sencilla de elaborar para los metales, los cuales poseen estructuras cristalinas geoméricamente más simples que por ejemplo los polímeros.

En cuanto los elementos finitos obtenidos para las interacciones electro magnéticas, enlaces químicos, repulsión de orbitales y las formas geométricas moleculares bases presentadas por el método RPECV, pueden ser utilizados para la elaboración de módulos de ANSYS o la programación softwares que automaticen el desarrollo de mallas moleculares, presentándose de esta forma como una alternativa al mallado convencional para los casos que lo requieran, para casos de mayor complejidad pueden ser considerados para el mallado factores tales como las ramificaciones, las zonas cristalinas no alineadas dentro del material, las numerosas regiones amorfas, los enrollamientos, las torceduras y entrelazamientos de las cadenas, las impurezas presentadas dentro del material, añadiendo claro mayor exigencia computacional a la hora de ser resuelto, esto en dependencia del material que sea simulado.

8. RECOMENDACIONES Y TRABAJOS FUTUROS

Se insta a cualquiera que se interese en la temática vista en este estudio, a que profundice en el desarrollo del mallado molecular en características más complejas para un mallado más realista o cercano a las estructuras microscópicas reales de los materiales, características tales como por ejemplo las torceduras de cadenas moleculares, entrelazamientos, ramificaciones sueltas o que conecten las cadenas moleculares de la malla, entre muchas otras. Además de lo anterior se insta a que se expanda no solo entre los polímeros sino a otro tipo de materiales, en donde resultaría más simple la programación de un mallado, llevado esto a cabo se podría contemplar la creación de programas sean capaces de crear mallas moleculares escalables, en el sentido de que una molécula de la malla de grande escala concentre las propiedades mecánicas generales de muchas moléculas base de escala nanométrica, esto permitiría la posibilidad de ahorrar trabajo de máquina. De lo anteriormente dicho la profundización en más factores o características como las mencionadas anterior mente ayudaría a comprobar las aplicaciones prácticas de este método, en la medida de que sea estudiada en otros materiales.

9. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Aghdasi, P., Ansari, R., Rouhi, S., & Goli, M. (2019). On the elastic and plastic properties of the bismuthene adsorbed by H, F, Cl and Br atoms. *Superlattices and Microstructures*, 135(March 2020), 106242. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2019.106242>
- Alexander, C. ., & Sadiku, M. N. O. (2006). *Fundamentos de circuitos electricos* (3rd ed., Issue 1). <https://doi.org/10.16309/j.cnki.issn.1007-1776.2003.03.004>
- Bocko, J., Lengvarský, P., & Pástor, M. (2019). Estimation of material properties of carbon nanotubes using finite element method. *Strojnický Casopis*, 69(2), 7–14. <https://doi.org/10.2478/scjme-2019-0014>
- Brown, T. L., LeMay, H. E. J., Bursten, B. E., & Mutphy, C. J. (2009). *QUIMICA la ciencia central* (11th ed.). PEARSON EDUCACION, SA.
- Chang, R., & Goldsby, K. A. (2013). *Química* (11th ed.). McGrawHill.
- Firouz-Abadi, R. D., Moshrefzadeh-Sany, H., Mohammadkhani, H., & Sarmadi, M. (2016). A modified molecular structural mechanics model for the buckling analysis of single layer graphene sheet. *Solid State Communications*, 225, 12–16. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2015.10.009>
- Ghaderi, S. H., & Hajiesmaili, E. (2013). Nonlinear analysis of coiled carbon nanotubes using the molecular dynamics finite element method. *Materials Science and Engineering A*, 582, 225–234. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2013.05.060>
- Giannopoulos, G. I. (2017). Mechanical behavior of planar borophenes: A molecular mechanics study. *Computational Materials Science*, 129, 304–310. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.12.045>
- Hajian, M., & Moradi, M. (2019). Stochastic fracture analysis of cracked nano-graphene sheets by scaled boundary finite element method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 98(May 2018), 54–63. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2018.10.005>
- Hernandez, S. A., & Fonseca, A. F. (2017). Anisotropic elastic modulus, high Poisson's ratio and negative thermal expansion of graphynes and graphdiynes. *Diamond and Related Materials*, 77(June), 57–64. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2017.06.002>
- Honarmand, M., & Moradi, M. (2018). Scaled boundary finite element simulation and modeling of the mechanical behavior of cracked nanographene sheets. In *Superlattices and Microstructures* (Vol. 118). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2018.04.029>
- Hughes, D. J., Mahendrasingam, A., Oatway, W. B., Heeley, E. L., Martin, C., & Fuller, W. (1997). A simultaneous SAXS/WAXS and stress-strain study of polyethylene deformation at high strain rates. *Polymer*, 38(26), 6427–6430. [https://doi.org/10.1016/S0032-3861\(97\)00351-0](https://doi.org/10.1016/S0032-3861(97)00351-0)

- Ira N. Levine. (2001). *Quimica Cuantica Levine.pdf* (P. HALL (ed.); 5th ed., Vol. 12, Issue 6). PEARSON EDUCACION, SA. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/741517>
- Khani, N., Yildiz, M., & Koc, B. (2016). Elastic properties of coiled carbon nanotube reinforced nanocomposite: A finite element study. *Materials and Design*, 109, 123–132. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2016.06.126>
- Korobeynikov, S. N., Alyokhin, V. V., & Babichev, A. V. (2018). On the molecular mechanics of single layer graphene sheets. *International Journal of Engineering Science*, 133, 109–131. <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2018.09.001>
- Lee, J. H., & Lee, B. S. (2012). Modal analysis of carbon nanotubes and nanocones using FEM. *Computational Materials Science*, 51(1), 30–42. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.06.041>
- Liu, Y. (2003). Lecture Notes: Introduction to the Finite Element Method. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering*, 217(6), 461–473. <https://doi.org/10.1243/095440703766518096>
- Lu, J., Sue, H. J., & Rieker, T. P. (2001). Dual crystalline texture in HDPE blown films and its implication on mechanical properties. *Polymer*, 42(10), 4635–4646. [https://doi.org/10.1016/S0032-3861\(00\)00719-9](https://doi.org/10.1016/S0032-3861(00)00719-9)
- Lu, X., & Hu, Z. (2012). Mechanical property evaluation of single-walled carbon nanotubes by finite element modeling. *Composites Part B: Engineering*, 43(4), 1902–1913. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2012.02.002>
- Marenić, E., Ibrahimbegovic, A., Sorić, J., & Guidault, P. A. (2013). Homogenized elastic properties of graphene for small deformations. *Materials*, 6(9), 3764–3782. <https://doi.org/10.3390/ma6093764>
- MARGARITA DEL ROCÍO MARTÍNEZ BUSTAMENTE, D. B. P. Z. (2015). *SIMULACIÓN POR ORDENADOR MEDIANTE EL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS Y OPTIMIZACIÓN POR EL MÉTODO DE INGENIERÍA ROBUSTA, DE CONECTORES PARA ESTANTERÍA METÁLICA*. 89.
- Nasdala, L., Kempe, A., & Rolfes, R. (2012). Are finite elements appropriate for use in molecular dynamic simulations? *Composites Science and Technology*, 72(9), 989–1000. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2012.03.008>
- Nasdala, L., Kempe, A., & Rolfes, R. (2015). An elastic molecular model for rubber inelasticity. *Computational Materials Science*, 106, 83–99. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.04.036>
- Overney, G., Zhong, W., & Tománek, D. (1993). Structural rigidity and low frequency vibrational modes of long carbon tubules. *Zeitschrift Für Physik D Atoms, Molecules and Clusters*, 27(1), 93–96. <https://doi.org/10.1007/BF01436769>
- Rodrigues, F. C., Silvestre, N., & Deus, A. M. (2017). Nonlinear mechanical behaviour of γ -graphyne through an atomistic finite element model. *Computational Materials*

Science, 134(August 2018), 171–183.
<https://doi.org/10.1016/j.commat.2017.03.051>

- Rouhi, S., & Ansari, R. (2012). Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 44(4), 764–772.
<https://doi.org/10.1016/j.physe.2011.11.020>
- Serway, R. A., & Emérito, John W. Jewett, J. (2009). *FÍSICA para ciencias e ingeniería con Física Moderna* (Sergio R. Cervantes González (ed.); Volumen 2.). cengege learning.
- Shahnazari, A., Ansari, R., & Rouhi, S. (2017). On the stability characteristics of zigzag phosphorene nanotubes: A finite element investigation. In *Journal of Alloys and Compounds* (Vol. 702). Elsevier B.V. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.01.265>
- TIRUPATHI R. CHANDRUPATLA, PH.D.P.E Rowan, ASHOK D. BELEGUNDU, P. D. (1999). *Introducción al método del elemento finito* (M. G. M. Pablo Eduardo Roig Vázquez, Ajnando Castañeda Conález & Edición (eds.); segunda). Prentice-Hall. Inc.
- Young, H. D., Freedman, R. A., & Ford, A. L. (2013). *FISICA UNIVERSITARIA CON FISICA MODERNA* (13th ed.). PEARSON EDUCACION, SA.
- Yu, M. F., Files, B. S., Arepalli, S., & Ruoff, R. S. (2000). Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties. *Physical Review Letters*, 84(24), 5552–5555. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.5552>