

**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**

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

Universidad de Pamplona

Comité Editorial Revista Colombiana de Tecnologías de Avanzada

Ciudadela Universitaria. Pamplona, Norte de Santander, Colombia.

Tel.: 57-7-5685303, Fax: 57-7-5685303, Ext. 144

E-mail: adrian.gil@unipamplona.edu.co, edisonmartinez@unipamplona.edu.co,
baramon12@gmail.com

Abstract: In this article, materials were modeled through the MEF applying meshing based on the base molecule of the material, assembled from the finite element of each of its molecular bonds, which were taken as springs like the other electrostatic interactions. First, it was obtained the finite element of molecular bonds, Van Der Waals, and other electrostatic effects were obtained from Maxwell's equations. The material with which it was modeled in this study was from the family of polymers with the simplest molecular structure. The required simulations were developed using the meshing obtained and the conventional meshing, from this the comparison points were obtained. The results obtained a reasonable increase in the mechanical properties due to the fact that amorphisms were not taken into account, assuming the material as crystalline, the method was consistent with the real mechanic behavior.

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

Resumen: En este artículo se modelaron materiales a través del MEF aplicando mallado basado en la molécula base del material, ensamblada a partir del elemento finito de cada uno de sus enlaces moleculares, los cuales fueron tomados como resortes al igual que las demás interacciones electrostáticas. Primeramente, se obtuvo el elemento finito de los enlaces moleculares, Van Der Waals, y demás efectos electrostáticos a partir de las ecuaciones de Maxwell. El material con el que se modeló en este estudio fue de la familia de los polímeros con la estructura molecular más simple. Se desarrollaron las simulaciones requeridas utilizando el mallado obtenido y el mallado convencional, de esto se obtuvieron los puntos de comparación. Los resultados obtenidos mostraron un aumento razonable de las propiedades mecánicas debido a que no se tomaron en cuenta los amorfismos asumiendo el material como cristalino, el método se mostró congruente con el comportamiento mecánico real.

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

1. INTRODUCCION

El método de elementos finitos ha sido aplicado a estructuras moleculares con el objetivo de simular su comportamiento, el más utilizado hoy es el método de mecánica molecular, este trabajo se hace con el objetivo de proponer un método alternativo al antes mencionado, teniendo en cuenta de forma más directa los fenómenos electrostáticos aplicando directamente las ecuaciones de Maxwell al método de elementos finitos. En la actualidad la aplicación del método se ha extendido al estudio del comportamiento mecánico de los diferentes arreglos estructurales que puede obtenerse del carbono como por ejemplo el grafeno, los nanotubos de carbono, entre otros.

Varias de las investigaciones se enfocan en la estabilidad de los nanotubos de carbono sometido a carga axial en tensión o compresión, torsión, flexión, y cargas mixtas, realizados en los artículos Atomistic finite element model for axial buckling of single-walled carbon nanotubes en el año 2010 (Ansari & Rouhi, 2010), Are finite elements appropriate for use in molecular dynamic simulations? en el año 2012 (Nasdala et al., 2012), Modal analysis of carbon nanotubes and nanocones using FEM en el año 2012 (Lee & Lee, 2012), Molecular mechanics in the context of the finite element method en 2012 (Remacle et al., 2012), Prediction of the mechanical behavior of double walled-CNTs using a molecular mechanics-based finite element method: Effects of chirality en el año 2016 (Lee & Lee, 2012), Mechanical property evaluation of single-walled carbon nanotubes by finite element modeling en 2012 (Lu & Hu, 2012), On the stability characteristics of zigzag phosphorene nanotubes: a finite element investigation en el año 2017 (Shahnazari et al., 2017) investigación similar pero en nanotubos de fósforo, A computationally efficient multiscale finite element formulation for dynamic and postbuckling analyses of carbon nanotubes en el año 2018 (Singh & Patel, 2018), Estimation of material properties of carbon nanotubes using finite element method en el año 2019 (Bocko et al., 2019), entre otros. Las investigaciones se han extendido a muelles de nanotubos de carbono en donde se estudian las propiedades elásticas y mecánicas en general de estos vistos en profundidad en Nonlinear analysis of coiled carbon nanotubes using the molecular dynamics finite element method en el año 2013 (Ghaderi & Hajiesmaili, 2013), Elastic properties of coiled carbon nanotube reinforced nanocomposite: a finite element study en el año 2016 (Khani et al., 2016), entre otros.

Para las hojas de grafeno la investigación ha sido enfocada al estudio de su comportamiento y mediciones de factores tales como vibraciones,

pandeo, comportamiento estático, tensión, dureza a la fractura, relación de Poisson, expansión térmica, entre otros aspectos profundizados en cada uno de los artículos como Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets en el año 2011 (Rouhi & Ansari, 2012), Multiresolution molecular mechanics: Statics en el año 2013 (Yang et al., 2013), Homogenized Elastic Properties of Graphene for Small Deformations en 2013 (Marenić et al., 2013), Fracture toughness of Graphene en el año 2014 (Zhang et al., 2014), A modified molecular structural mechanics model for the buckling analysis of single layer graphene sheet en el año 2016 (Firouz-Abadi et al., 2016), Anisotropic elastic modulus, high Poisson's ratio and negative thermal expansion of graphynes and graphdiynes en el año 2017 (Hernandez & Fonseca, 2017), Nonlinear mechanical behaviour of γ -graphyne through an atomistic finite element model en 2017 (Rodrigues et al., 2017), Mechanical behavior of planar borophenes: A molecular mechanics study en 2017 (Giannopoulos, 2017) en este un análisis similar es aplicado a láminas de borofeno, On the molecular mechanics of single layer graphene sheets en el año 2018 (Korobeynikov et al., 2018), Scaled boundary finite element simulation and modeling of the mechanical behavior of cracked nanographene sheets en el año 2018 (Honarmand & Moradi, 2018), Stochastic fracture analysis of cracked nano-graphene sheets by scaled boundary finite element method en el 2019 (Hajian & Moradi, 2019), entre muchos otros.

La mayor parte de las investigaciones están enfocada hacia el estudio de materiales basados en carbono, varios estudios se han enfocado en la aplicación del método de mecánica molecular a los polímeros uno de estos en el año 2015, en el artículo An elastic molecular model for rubber inelasticity (Nasdala et al., 2015), en donde se aplicó a la investigación de las propiedades mecánicas bajo vibración. El método de mecánica molecular fue desarrollado por Westheimer, Hendrickson, Wiberg, Allinger, Warshel entre otros. 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 estática) 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 estudio se buscó simular a través del método de elementos finitos el comportamiento mecánico de un material, desde su estructura molecular, Representada como arreglos estructurales de barras; 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 se planteó llegar a una solución computacional, la cual fue comparada con los resultados de simulaciones en ansys. Se llegó a concretar un método alternativo que toma en cuenta las características moleculares propias del material de estudio.

2. 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 su complejidad, el desarrollo del estudio fue enfocado a los polímeros, estos 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.

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.

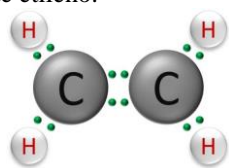


Figura 1. Molécula de etileno estructura de Lewis, monómero simple de C_2H_4 con enlace doble entre carbono y simples de carbonos e hidrógenos. Autor.

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 estos 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).

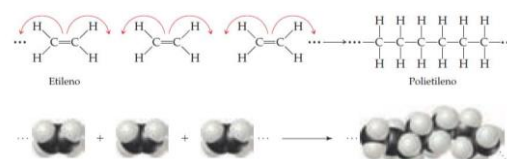


Figura 2. Moléculas de etileno radical reactivo ataca una molécula de etileno uniéndose y se genera una nueva molécula de mayor peso. Obtenido de química la ciencia central de brawn y LeMay (Brown et al., 2009).

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 2. 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. 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 3.



Figura 3. 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 4, 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.

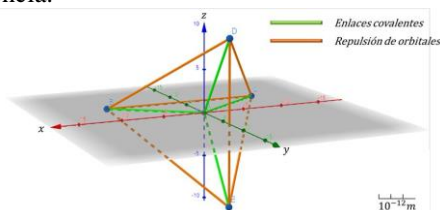


Figura 4. Geometría tetraédrica de una molécula, en donde las líneas verdes representan la unión por enlace covalente y las líneas naranjas las repulsiones de los electrones en los orbitales. Autor realizado en GeoGebra.

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.

3.ECUACIONES DE MAXWELL (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.

$$E = -\nabla V \quad (1)$$

$$F = Q_2 E \quad (2)$$

$$F = -Q_2 \nabla V \quad (3)$$

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

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 . Para este desarrollo solo se tendrá en cuenta la interacción en el eje x por el momento. De lo anterior obtenemos:

$$F = -Q_2 \frac{\partial V}{\partial x} \quad (5)$$

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

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 serían:

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

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

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

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

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

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.

4. CONSTRUCCIÓN DEL ELEMENTO FINITO

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, de acuerdo con Charles-Augustin de Coulomb (1736-1806).

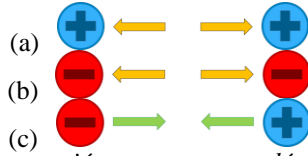


Figura 5. interacción entre cargas eléctricas de igual y diferentes signos. Autor.

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.

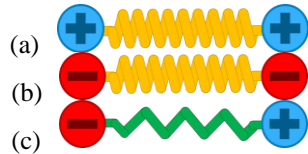


Figura 6. semejanza de la interacción de dos cargas eléctricas con el comportamiento de un resorte en compresión (a) y (b) y en tensión (c). Autor

En las Figura 6 (a) y (b) las flechas han sido reemplazadas por un resorte amarillo en donde su color simboliza su comportamiento en compresión. 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. 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. 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 .

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

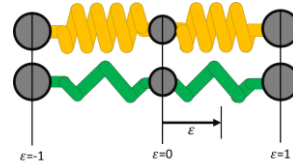


Figura 7. Desplazamiento interno dentro del elemento. Autor.

La ecuación 14 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.

$$N_1 = \frac{1}{(\varepsilon + 2)^{16}} \quad (15)$$

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

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

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.

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

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

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

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 fue considerada. 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.

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

$$K^e = K \begin{bmatrix} 31,03 & -1,71e-6 & -31,03 \\ -1,71e-6 & 31,0303 & -1,71e-6 \\ -31,03 & -1,71e-6 & 62,061 \end{bmatrix} \quad (24)$$

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

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 trasformación.

Enlace covalente

El enlace covalente descrito por Raymond Chang y Kenneth A. Goldsby en el 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. Existen distintos tipos de enlaces covalente, como lo son el enlace covalente simple, covalente doble y covalente triple, Para este estudio solo se tendrá en cuenta el enlace covalente simple. En el diagrama de energía potencial de morse permite conocer 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 26, 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. 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 como se muestra en la figura 8.

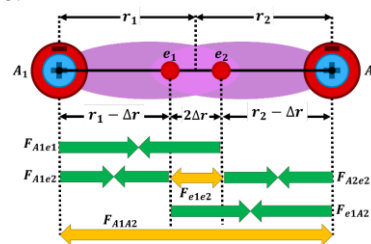


Figura 8. elementos en enlace covalente. Autor

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 fue 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.

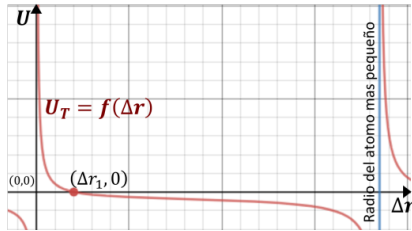


Figura 9. grafica de energía total contra delta de r o posición del electrón. Autor realizado en DESMOS.

En la Figura 9 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 $10^{-10}J$.

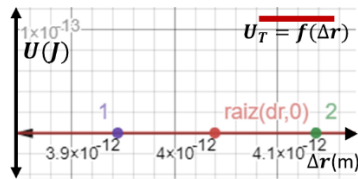


Figura 10. entalpia de enlace CH. Autor realizado en DESMOS.

En la Figura 10 se observa 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:

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

$$a = \frac{n_{v1}n_{v2}}{r_1 + r_2} \quad (28a)$$

$$b = \frac{1}{2} \quad (28b)$$

$$c = 2(n_{v1}r_1 + n_{v2}r_2) - \frac{n_{v1}n_{v2}}{r_1 + r_2}(r_1^2 + r_2^2) \quad (28c)$$

$$d = \frac{1}{2}x^2(r_1^2 + r_2^2) \quad (28d)$$

$$g = r_1r_2 \left(\frac{n_{v1}n_{v2}}{r_1 + r_2}r_1r_2 - 2(n_{v1}r_2 + n_{v2}r_1) \right) \quad (28e)$$

$$h = \frac{1}{2}r_1^2r_2^2 \quad (28f)$$

ecuación 97 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 para impedancias. Primeramente, fue aplicado el teorema de Kennelly.

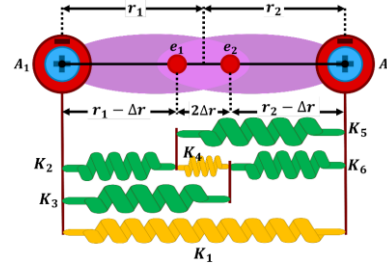


Figura 11. enlace covalente como sistema de resortes. Autor

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

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

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

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

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

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

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

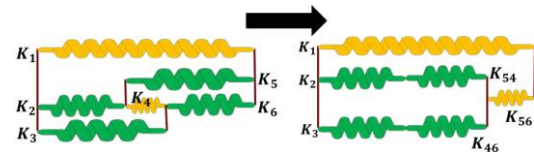


Figura 12. transformación delta estrella de los resortes en formación delta k4, k5, y k6, a una más simple. Autor

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

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

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

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

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

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

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

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

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 4 se encontró una ecuación para la rigidez de la repulsión de los pares de electrones de la capa de valencia. 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.

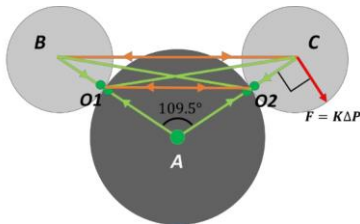


Figura 13. Triangulo interno de molécula tetraédrica formado por el átomo central y dos átomos de las aristas. Autor.

Para hallar la constante de rigidez se asumió a cada barra como resorte, 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 r_{AO1} y r_{AO2} 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:

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

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

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

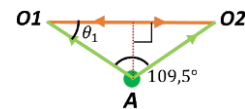


Figura 14. Triangulo interno O1O2A. Autor.

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

$$2. \quad L_{O1C} = \frac{\sqrt{r_{AC}^2 + r_{AO1}^2 - 2r_{AO1}r_{AC} \cos(109.5^\circ)}}{(41)}$$

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

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

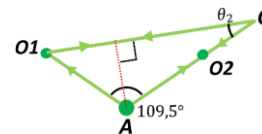


Figura 15. Triangulo interno O1CA. Autor.

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

$$2. \quad L_{BO2} = \frac{\sqrt{r_{AB}^2 + r_{AO2}^2 - 2r_{AO2}r_{AB} \cos(109.5^\circ)}}{(45)}$$

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

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

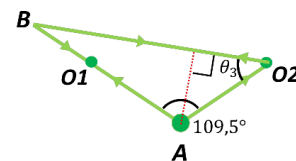


Figura 16. Triangulo interno BO2A. Autor.

$$1. \quad L_{BC} = \frac{\sqrt{r_{AB}^2 + r_{AC}^2 - 2r_{AC}r_{AB} \cos(109.5^\circ)}}{(48)}$$

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

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

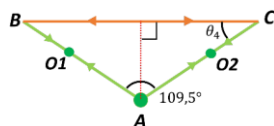


Figura 17. Triangulo interno BCA. Autor

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

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

$$M_1 = K_{O1O2} r_{AO2}^2 \sin(\theta_1) \quad (51a)$$

$$M_2 = K_{O1C} r_{AC}^2 \sin(\theta_2) \quad (51b)$$

$$M_3 = K_{BO2} r_{AO2}^2 \sin(\theta_3) \quad (51c)$$

$$M_4 = K_{BC} r_{AC}^2 \sin(\theta_4) \quad (51d)$$

Software desarrollado

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, una función de mallado de cadena, función de rigidez, y por último el cuerpo del programa que, con la información arrojada por el mayador 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.

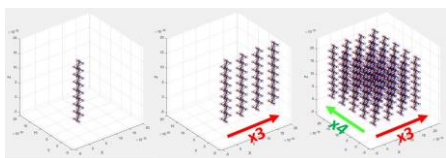


Figura 18. Cadena simple de polietileno a la izquierda, en el centro la cadena ha sido reproducida tres veces, en la imagen de la derecha, las cadenas ya reproducida a lo largo del eje X, ahora son replicadas cuatro veces en dirección del eje Y. Autor, obtenido de MATLAB.

La función de mallado de cadena consiste en una serie de tres tablas que almacenan la información necesaria para la construcción de una 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 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, 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 $ma1$ y $ma1$.

Condiciones de simulación

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 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, la 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.

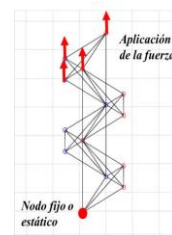


Figura 19. Nodos superiores en donde es aplicada la fuerza, y nodo base que se mantiene fijo. Autor, obtenido de MATLAB.

Simulación en ANSYS

La simulación en ANSYS aporó un punto de comparación con el comportamiento del mallado propuesto por el proyecto.

Modelado 3D de la probeta

Modelado en 3d de la probeta de acuerdo con la norma ASTM d638 la halterio tipo 1, con dimensiones 165 mmX19 mmX7 mm, la zona más delgada con anchode 13 mm.

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.

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.

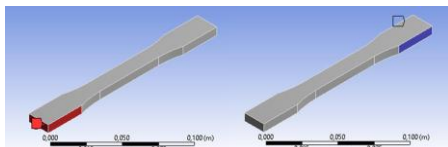


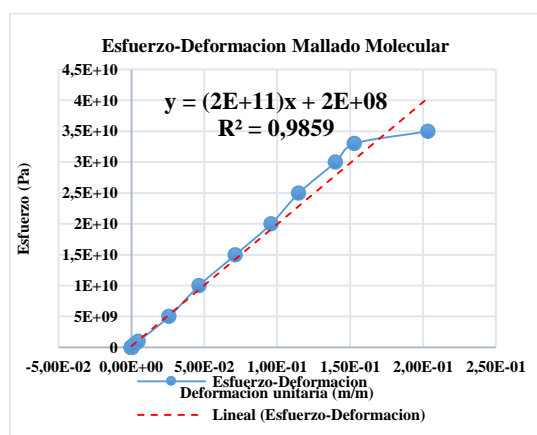
Figura 20. A la izquierda con la etiqueta de color rojo los extremos en los que es aplicada la fuerza, a la derecha en azul los lados que se mantienen fijos. Autor, obtenido de ANSYS.

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.

5.RESULTADOS

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.



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

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.

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, 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.

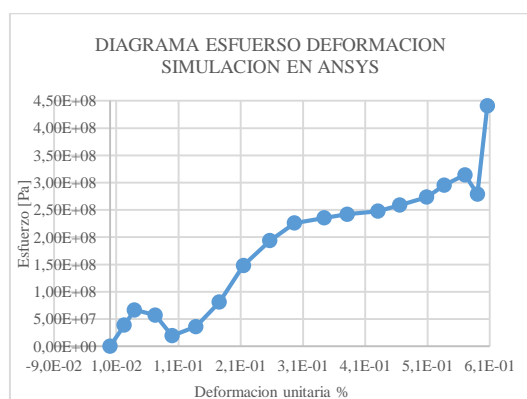
Los factores que fueron dejados de lado fueron las ramificaciones, las zonas cristalinas no alineadas dentro del material, las numerosas regiones amorfas, los enrollamientos, las torceduras y entrelazamientos de las cadenas, las impurezas presentadas dentro del material, entre muchas otras condiciones 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 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 obtenida 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.

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.

5. 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 geométricamente 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.

REFERENCIAS

- 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>
- Ansari, R., & Rouhi, S. (2010). Atomistic finite element model for axial buckling of single-walled carbon nanotubes. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 43(1), 58–69. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2010.06.023>
- 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., & Murphy, 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 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>
- Remacle, J., Lambrechts, J., & Seny, B. (2012). Blossom-Quad: A non-uniform quadrilateral mesh generator using a minimum-cost perfect-matching algorithm. *International, February*, 1102–1119. <https://doi.org/10.1002/nme>
- 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>
- Singh, S., & Patel, B. P. (2018). A computationally efficient multiscale finite element formulation for dynamic and postbuckling analyses of carbon nanotubes. *Computers and Structures*, 195, 126–144. <https://doi.org/10.1016/j.compstruc.2017.10.003>
- 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.
- Yang, Q., Biyikli, E., & To, A. C. (2013). Multiresolution molecular mechanics: Statics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 258, 26–38. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2013.01.014>
- 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>
- Zhang, P., Ma, L., Fan, F., Zeng, Z., Peng, C., Loya, P. E., Liu, Z., Gong, Y., Zhang, J., Zhang, X., Ajayan, P. M., Zhu, T., & Lou, J. (2014). Fracture toughness of graphene. *Nature Communications*, 5, 1–7.
<https://doi.org/10.1038/ncomms4782>