

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS

SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL SISTEMA NYLON/ÓXIDO DE TITANIO PARA SU POSIBLE APLICACIÓN COMO PRÓTESIS

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE: MAESTRÍA EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS

PRESENTA ING.NANCY BADILLO HERNÁNDEZ

DIRECTORES: DRA. ELSA CARMINA MENCHACA CAMPOS DR. JORGE URUCHURTU CHAVARÍN

SINODALES DRA MARISOL GÜIZADO RODRIGUEZ DR MIGUEL ÁNGEL HERNÁNDEZ GALLEGOS DR JORGE URUCHURTU CHAVARIN DRA MIRIAM FLORES DOMÍNGUEZ DRA ELSA CARMINA MENCHACA CAMPOS

CUERNAVACA MOR.

NOVIEMBRE, 2023



RESUMEN

Las condiciones específicas y las consideraciones económicas en nuestro entorno son cruciales al evaluar las alternativas de materiales, lo que incluye la búsqueda de materiales fácilmente accesibles, económicos, sostenibles y versátiles para diversas aplicaciones. Un material híbrido es el resultado de combinar dos o más materiales distintos con el fin de aprovechar las ventajas de cada componente en una sola entidad. Estos materiales han demostrado ser soluciones efectivas en una amplia gama de áreas, destacando especialmente en aplicaciones médicas, como prótesis, implantes y cartílagos. En el diseño de materiales híbridos para prótesis, es esencial cumplir con propiedades mecánicas específicas para garantizar su eficacia y seguridad. En este estudio, se presenta la caracterización por simulación numérica por el método de elemento finito de las propiedades mecánicas de un material nanohíbrido compuesto por Nylon 6,6 y nanopartículas de TiO₂. Se crearon modelos de probetas de los materiales individuales y del material híbrido, siguiendo las recomendaciones de la ASTM para pruebas de tensión y compresión. La simulación numérica se llevó a cabo considerando diversos arreglos de matriz y nanopartículas de TiO₂. Se obtuvieron las curvas esfuerzo-deformación del material híbrido en respuesta a cargas de tensión y compresión, y se calculó su módulo de Young. Estas simulaciones de elementos finitos demostraron que es posible obtener la propiedad mecánica del módulo de Young por elemento finito de este material, proporcionando información valiosa para su desarrollo y futura aplicación.

ABSTRACT

Specific conditions and economic considerations in our environment are crucial when evaluating material alternatives, including the search for easily accessible, economical, sustainable and versatile materials for various applications. A hybrid material is the result of combining two or more different materials in order to leverage the advantages of each component into a single entity. These materials have proven to be effective solutions in a wide range of areas, with special emphasis on medical applications such as prosthetics, implants and cartilage. In the design of hybrid materials for prostheses, it is essential to comply with specific mechanical properties to ensure their efficacy and safety. In this study, the characterization by numerical simulation by the finite element method of the mechanical properties of a nanohybrid material composed of Nylon 6,6 and TiO₂ nanoparticles is presented. Specimen models of the individual materials and the hybrid material were created following ASTM recommendations for tensile and compressive testing. Numerical simulation was carried out considering different matrix arrangements and TiO2 nanoparticles. Stress-strain curves of the hybrid material in response to tensile and compressive loading were obtained, and its Young's modulus was calculated. These finite element simulations demonstrated that it is possible to obtain the mechanical property of Young's modulus by finite element of this material, providing valuable information for its development and future application.

Agradezco a:

En primer lugar, les agradezco a mis padres que siempre me han brindado su apoyo incondicional para poder cumplir todos mis objetivos personales y académicos. Ellos son los que con su cariño me han impulsado siempre a perseguir mis metas y nunca abandonarlas frente a las adversidades.

Le agradezco muy profundamente a mis tutores por su dedicación y paciencia, sin sus palabras y correcciones precisas no hubiese podido lograr llegar a esta instancia tan anhelada. Gracias por su guía y todos sus consejos, los llevaré grabados para siempre en la memoria en mi futuro profesional.

Gracias a diosito y a mi virgencita, por darme esa lucecita para terminar este proceso.

A una personita muy importante, tu ayuda ha sido fundamental. Este proyecto no fue fácil, pero estuviste motivándome y ayudándome incondicionalmente, arreglando todo para nuestra nueva etapa, gracias por tu compresión en mis decisiones y tu gran amor.

Gracias a todos.

ÍNDICE

CAPÍ	TULO 1. ANTECEDENTES	10
1.1	Estado del arte	10
1.2	Planteamiento del problema	13
1.3	Justificación	14
1.4	Hipótesis	15
1.5	Objetivo general	15
1.6	Objetivos específicos	15
CAPÍ	TULO 2. MARCO TEÓRICO	17
2.1	Óxido de titanio	17
2.2	Nylon 6,6	19
2.3	Tipo de articulaciones	19
2.4	Tipos de articulaciones según su estructura	20
2.5	Cartílago	21
2.6	Cartílago articular	22
2.7	Propiedades mecánicas del cartílago articular	23
2.8	Biomateriales	24
2.9	Los polímeros como biomateriales	25
2.10	Elemento Finito	
2.11	Comsol Multiphysics	
2.12	Funcionamiento de Comsol Multiphysics	
2.13	Ensayo de tracción	30
2.14	Curvas esfuerzo-deformación	
2.15	Esfuerzo verdadero-deformación verdadera	33
2.16	Modelos de la viscoelasticidad	35
2.17	SolidWorks	35
CAPÍ	TULO 3. DESARROLLO	

3.1	Desarrollo experimental del material nanohíbrido, en Comsol	38
3.1.1	Modelo CAD de probetas de ensayo	40
3.1.2	2 Condición de simetría	41
3.1.3	Materiales	43
3.1.4	Parámetros globales	44

4.1	Nylon 6,6	51
4.2	TiO ₂	53
4.3	Nanohíbrido Nylon6,6/TiO2	56
4.3.1	Tensión	57
4.3.1	.1 Curvas Esfuerzo-Deformación	59
4.4	Conclusiones	65
4.5	Recomendaciones	66

Anexo A

Anexo B

Anexo C

Figura 2.1 Estructura del cartílago articular (Farooqi et al., 2019)	
Figura 2.2 Comportamiento del cartílago articular bajo tensión uniaxial (N	lordin &
Frankel, 2004)	
Figura 2.3 Sistema original y sistema discretizado en nodos y elementos	finitos
(Hermosillo Arteaga et al., 2017).	
Figura 2.4 Interfaz gráfica.	
Figura 2.5 Ejemplo de ensayo de tracción	
Figura 3.1 Desarrollo experimental general	
Figura 3.2 Desarrollo experimental	40
Figura 3.3 Simetría de la probeta para tensión	
Figura 3.4 Simetría de la probeta para compresión;Error! Marcador	no definido.
Figura 3.5 Probeta para ensayo de compresión con nanoesferasjErro	or! Marcador
no definido.	
Figura 3.6 Selección de la parte superior de la probeta para el desplazan	niento 46
Figura 3.7 Sección de referencia para medir desplazamientos y esfuerzo	s 48
Figura 3.8 Selección de la parte superior de la probeta para el desplazam	niento.
iError! Marcador	no definido.
Figura 3.9 Modelo de discretizado del material hibrido Nylon66/TiO2-16%	49
Figura 3.10 Modelo discretizado del material nanohibrido para prueba de	;
compresióniError! Marcador	no definido.
Figura 4.1 Punto seleccionado en el modelo para la gráfica curva esfuerz	20-
deformación.	50
Figura 4.2 Esfuerzos de la probeta Nylon 6,6	51
Figura 4.3 Evolución de los esfuerzos- probeta Nylon 6,6	52
Figura 4.4 Curva Esfuerzo-Deformación de la probeta Nylon 6,6jErro	or! Marcador
no definido.	

Figura	4.5 Curva Esfuerzo-Deformación del Nylon 6,6 en la Literatura (Yanilmaz et
al., 201	7)
Figura	4.6 Esfuerzos de la probeta TiO2
Figura	4.7 Evolución de los esfuerzos- probeta TiO2
Figura	4.8 Curva Esfuerzo-Deformación del TiO2 con simulación numérica
Figura	4.9 Curva Esfuerzo-Deformación TiO ₂ en la Literatura (Sorki, A.et al., 2022).
Figura	4.10 Interacción entre nanoesfera y la matriz en el Sistema de trabajo Nylon
6,6/Np	TiO ₂ 16%
Figura	4.11 Punto seleccionado en el modelo para la gráfica curva esfuerzo-
deform	ación 60
Figura	4.12 Curvas esfuerzo deformación: Nylon 6,6/Np TiO2- Centro
Figura	4.13 Curvas esfuerzo deformación: Nylon 6,6/Np TiO2- Dispersas
Figura	4.14 Curvas comparativas esfuerzo deformación: Nylon 6,6-Sistemas
híbrido	s64
Figura	4.15 Ilustración del desplazamiento de nanopartículas con tensión alrededor.
	iError! Marcador no definido
Figura	4.16 Evolución de tensión material nanohibrido ¡Error! Marcador no
definid	lo.

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 2.1 Tipos de cartílago jError! Marcador no	definido.
Tabla 2.2 Composición de la matriz extracelular (Bell, 2011) ¡Error! Mare	cador no
definido.	
Tabla 3.1 Sistemas de trabajo	40
Tabla 3.2 Sistemas de trabajo con sus normas	41
Tabla 3.3 Porcentaje en volumen de esferas en la probeta del sistema hibrido) Nylon
6,6/ TiO2	43
Tabla 3.4 Porcentajes de esferas dentro de la probeta del sistema hibrido Ny	'lon 6,6/
TiO ₂	43
Tabla 3.5 Configuración de la ecuación de viscoelasticidad	44
Tabla 3.6 Configuración del material en blanco para el Nylon 6,6	44
Tabla 3.7 Configuración del material en blanco para el TiO2	44
Tabla 3.8 Función analítica para cada sistema	45
Tabla 3.9 Configuraciones de la función analítica	45
Tabla 3.10 Configuración de estudio	46
Tabla 3.11 Configuración del nodo desplazamiento prescrito.	47
Tabla 3.12 Configuración para ubicar un punto en el modelo en los diferentes	3
sistemas de trabajo	47
Tabla 4.1 Relación de porcentaje con el número de nanopartículas de TiO2	
Tabla 4.2 Resultados en tensión de los diferentes sistemas de trabajo	
Tabla 4.3 Curvas Esfuerzo-Deformación con simulación numérica de los siste	emas
nanohíbridos	

CAPÍTULO 1. ANTECEDENTES

1.1 Estado del arte

Las condiciones especiales de nuestro entorno, donde las razones económicas son importantes a la hora de evaluar las opciones de uso de los diferentes materiales, obligan a buscar un material de fácil disponibilidad, económico, duradero, y que represente una alternativa adecuada. Entonces por estas razones se han buscado los materiales híbridos como una excelente alternativa, para sus diferentes aplicaciones y con propiedades específicas. Los materiales híbridos están formados por dos constituyentes fundamentales una matriz y un material de refuerzo, la matriz proporciona estabilidad al refuerzo, y el refuerzo dependiendo de la aplicación aporta mayor flexibilidad o mayor tensión.

Los materiales híbridos como mezclas de dos o más materiales con nuevas propiedades creadas por nuevos orbitales electrónicos formados entre cada material, tal como enlace covalente entre polímero y el silanol (H₄OSi) y molecular en híbridos inorgánico/orgánico (Miller & Jensen, 1989). También se encontró en la literatura otra definición de materiales híbridos; como una combinación intencional de dos o más materiales, complementando uno con otro para tener superfunciones o nuevas funciones que no poseen los materiales que los componen (Borisova et al., 2015). Por otro lado, Ashby y Bréchet en 2003 definieron los materiales híbridos como "una combinación de dos o más materiales en geometrías y tamaños predeterminados que sirven a una solución de ingeniería específica" (Ashby & Bréchet, 2003).

Makisima definió materiales híbridos como mezclas de dos o más materiales con enlaces nuevos recién formados. Makisima explica que la diferencia entre materiales híbridos y nanohíbridos no está muy clara, y los nanocompuestos incluyen en muchos casos materiales híbridos y nanohíbridos. (Makisima, 2004).

La caracterización de materiales híbridos y materiales relacionados se muestra a continuación (Makisima, 2004):

- 1. Compositos: mezcla de materiales consistentes de matriz y dispersión a nivel micro.
- 2. Nanocompositos: mezcla a nivel submicrométrico de materiales similares.
- 3. Híbridos: mezcla a nivel submicrométrico de materiales diferentes.
- 4. Nanohíbridos: mezcla a nivel atómico o molecular de materiales diferentes con enlace químico entre sus diferentes componentes.

Según sus estándares, la diferencia entre materiales híbridos y compuestos radica en su funcionalidad y/o rendimiento .Es decir, los materiales híbridos deben tener funciones o propiedades superiores comparadas a los compositos tradicionales (De Clippel et al., 2013).

Por otra parte, están los materiales híbridos biocompatibles. La primera definición oficial aceptada de biocompatibilidad se obtuvo en la reunión de la Sociedad Europea de Biomateriales de 1987 en Chester, donde la biocompatibilidad se definió como "la capacidad de un material para mostrar una respuesta tisular adecuada cuando se utiliza en una aplicación específica". (Williams, 1987).

Aunque posteriormente se definió de manera más precisa como: "Materiales biológicos capaces de realizar funciones requeridas para el tratamiento médico sin efectos adversos locales o sistémicos en el receptor o beneficiario del tratamiento, produciendo resultados apropiados para la situación celular o tisular beneficiosa. respuesta y optimizar el rendimiento clínico de la terapia" (Leeuwenburgh et al., 2008).

Un polímero el cual es ampliamente utilizado en ingeniería por sus excelentes propiedades mecánicas, térmicas y químicas es el Nylon, lo cual lo convierte en candidato idóneo para aplicación dentro del cuerpo humano. Sin embargo, son escasas las publicaciones que hacen referencia a su aplicación. Estudios *in vitro e in*

vivo han demostrado que el nailon industrial es un material relativamente inerte cuando se utiliza como material ortopédico. (Izquierdo, 2004) . También se ha encontrado la evaluación experimental en ratas sobre las propiedades biológicas y mecánicas del nailon 6,6 para uso en cerclaje ortopédico, el cual concluye que el Nylon 6,6 podría proponerse como una alternativa aceptable al acero para su uso en la fijación de fracturas en cirugía ortopédica, ya que comparte la misma biocompatibilidad y resistencia mecánica. Además, es un material económico, ampliamente disponible y técnicamente fácil de manejar (Izquierdo et al., 2006).

El Nylon por sí mismo es compatible con el ambiente interno del cuerpo. El Titanio es un metal altamente noble desde el punto de vista de la corrosión, excelentes propiedades mecánicas, y sobre todo no es rechazado por el cuerpo humano (Data sheet, 1999).

La aplicación de biomateriales metálicos en el campo de los implantes biomédicos ha logrado un éxito indiscutible en un gran número de aplicaciones, sin embargo, dado que estos biomateriales presentan una rigidez elevada, un orden de magnitud superior a la de los biomateriales metálicos, también han encontrado problemas en algunos campos de aplicación pregunta. Los biomateriales sí lo tienen. La elevada rigidez del implante puede provocar un aflojamiento de la prótesis debido a la pérdida ósea debida al blindaje de carga (Tang et al, 2002) (Ridzwan, 2007).

Una prótesis es una extensión artificial que reemplaza o provee una parte del cuerpo que falta por diversas razones. Para que una prótesis sea eficaz y bien tolerada por el cuerpo, debe ser biocompatible y adaptarse ergonómicamente al tejido circundante (Galli & Pelozo, 2017). Las prótesis de cartílago son un ejemplo de prótesis que involucra propiedades mecánicas específicas y es compatible con el cuerpo humano. Su compatibilidad y capacidad de replicar las funciones de amortiguación y lubricación que desempeña el cartílago natural en la articulación son fundamentales para garantizar la comodidad y el movimiento funcional área afectada.

Hasta el siglo XVIII los principales materiales metálicos utilizados en los implantes quirúrgicos eran el oro y la plata, en el siglo XIX se empezó a utilizar el acero, en este siglo han aparecido el acero inoxidable, las aleaciones de cromo, cobalto y molibdeno. Fue en los años 40 del siglo XX. cuando se introdujeron el titanio y sus aleaciones en el campo médico. (Gil, 1993).

1.2 Planteamiento del problema

Las condiciones particulares de nuestro medio, en que las razones económicas gravitan mucho al momento de valorar opciones en el uso de diferentes materiales, nos incentivan a la búsqueda de un material que sea de fácil obtención, económico, resistente, utilizando instrumentos mínimos y que represente una adecuada alternativa. Una herramienta muy útil para el ahorro de recursos materiales, es la simulación por elemento finito, en la cual se puede proponer diferentes arreglos para realizar la experimentación virtual y obtener las condiciones óptimas, para la posterior experimentación en laboratorio.

El tejido cartilaginoso en sus distintas variedades, se ve afectado por muchas patologías neoplásicas, congénitas, osteodegenerativas, autoinmunes, traumatismos y diversos síndromes. Actualmente, existen diversas alternativas terapéuticas para el tratamiento de diferente tipo de lesiones, en los distintos cartílagos que tenemos en el cuerpo, sin embargo, los resultados no son del todo satisfactorio ni duraderos en el tiempo, requiriendo múltiples intervenciones quirúrgicas con su amplia gama de complicaciones, por lo cual, la generación de un sustituto adecuado de cartílago elástico para uso clínico, continúa siendo un desafío.

1.3 Justificación

Debido a su alto impacto en la industria y de gran importancia tecnológica dado su carácter comercial, el nylon es un polímero ampliamente utilizado debido a sus excelentes propiedades mecánicas, térmicas y químicas. Este polímero por sí mismo es compatible con el ambiente interno del cuerpo humano para asegurar su biocompatibilidad es posible incorporar un agente para mejorar sus propiedades dentro del cuerpo humano.

Para lograr este objetivo, el óxido de titanio es un metal altamente noble desde el punto de vista de corrosión, con excelentes propiedades mecánicas, y sobre todo no es rechazado por el cuerpo humano. En la matriz polimérica se dispersará, un porcentaje de partículas de óxido de titanio, lo cual haga posible mejorar sus propiedades dentro del cuerpo humano.

En la estructura histológica del cartílago articular, la matriz extracelular, se compone de Proteoglicanos, los cuales unen las fibras de colágeno entre sí, también proporcionan la elasticidad tan necesaria al cartílago articular para resistir fuerzas intermitentes de cizallamiento y compresión, estas funciones las realizara el Nylon 6,6, el cual es la matriz polimérica. Otro componente de la matriz extracelular del cartílago, es el Colágeno, el cual confiere resistencia al cartílago (en tensión), dentro del material nanohíbrido Ny66/TiO₂, las nanopartículas de TiO₂ cubrirán esta función.

Es bien conocido el empleo de materiales de tipo polimérico dentro de la industria médica y de especialización, por lo que se considera de gran trascendencia la posibilidad de desarrollar un material con posible aplicación en prótesis, utilizando las herramientas de simulación por elemento finito y validando por medio de la experimentación. La simulación permite analizar grandes problemas complejos para los que no están disponibles resultados analíticos. De hecho, la mayoría de los problemas del mundo real encajan en esta categoría, por lo tanto, la simulación proporciona una alternativa práctica, con ahorro de recursos materiales.

1.4 Hipótesis

Las propiedades mecánicas del sistema nanohíbrido Nylon 6,6/ TiO₂ se pueden determinar mediante simulación numérica, para su posible aplicación como material de prótesis

1.5 Objetivo general

Realizar la simulación numérica por el método de elemento finito de las propiedades mecánicas del material nanohíbrido compuesto por Nylon 66 y nanopartículas de TiO₂, con el propósito de evaluar su capacidad como material para prótesis y otras aplicaciones médicas.

1.6 Objetivos específicos

Los objetivos específicos para la realización de esta tesis se describen a continuación:

- Realizar simulaciones numéricas por elemento finito de pruebas de tensión y compresión considerando diferentes configuraciones de matriz y nanopartículas de TiO₂.
- Obtener las curvas esfuerzo-deformación por simulación numérica del material híbrido en respuesta a cargas de tensión y compresión.
- Calcular el módulo de Young del material nanohíbrido como una medida de su rigidez y capacidad de respuesta mecánica.
- Evaluar las propiedades mecánicas clave con simulación numérica por el método de elemento finito del material híbrido para proporcionar información relevante que respalde su posible aplicación en prótesis y dispositivos médicos.

Estos objetivos específicos buscan caracterizar teóricamente por simulación numérica las propiedades mecánicas del material y evaluar su comportamiento bajo diferentes condiciones de carga, lo que permitirá determinar su idoneidad en aplicaciones médicas.

CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO

2.1 Óxido de titanio

El titanio es una sustancia química con el símbolo Ti y número atómico 22. Es un met al de color gris plateado sin flujo magnético, se considera el cuarto metal más abund ante en el mundo y el noveno más industrial, y no existe en estado puro sino en esta do oxidado (Van Noort, 1987). Su extracción es bastante simple, dado que no está a mucha profundidad en la corteza terrestre; sin embargo, su costoso procesamiento hace que sea considerado uno de los metales con mayor valor comercial (Arango Santander & Ramírez Vega, 2016).

El titanio se encuentra en algunas rocas (gneas y sus sedimentos, en muchos minerales (especialmente los que contienen hierro) y en organismos vegetales y animales. Los minerales más importantes para la extracción de titanio son el rutilo (óxido de titanio) y la ilmenita, muy abundantes en las arenas costeras (Van Noort, 1987). Luego de su extracción, el titanio debe pasar por un proceso de refinamiento metalúrgico para evitar que eventualmente reaccione con especies gaseosas como nitrógeno, oxígeno e hidrógeno (Arango Santander & Ramírez Vega, 2016). El titanio es liviano (43% más que el acero), dúctil, fuerte, más duro y duradero que el acero; además, puede fundirse, fundirse y soldarse (Froes & Bomberger, 1985).

Según la ASTM (American Society of Testing and Materials), la aleación más utilizada en el campo industrial es TI-3AI-2.5V (94.5% titanio, 3% aluminio y 2.5% vanadio). En el campo médico – odontológico, las más usadas son Ti-6AI-4V y Ti-AI-Nb (Jacobson, 2001).

Pasivación

El titanio, como la mayoría de los metales, se oxida si se expone a la atmósfera (Steinemann, 1998). Entre sus óxidos están el TiO, TiO₂ y el Ti₂O₃. El más usado por su estabilidad es el TiO₂. En un milisegundo, se forma una capa de 10 Å (1 nanómetro) de óxido, que en un minuto se convertirá en una capa de 100 Å (10 nanómetros) cuando el metal es expuesto a un ambiente con oxígeno. Este fenómeno se conoce como "pasivación natural" del titanio. La capa pasivada no sufre ruptura o daño bajo condiciones fisiológicas, aunque esta pasivación natural puede ser reforzada con un baño de ácido nítrico sobre el metal (Arango Santander & Ramírez Vega, 2016). Esta capa de óxido ofrece una superficie biocompatible, resistente a la corrosión y es altamente resistente a la fractura durante los cambios de fuerzas aplicadas y provee un buen medio en las mecánicas ortodóncicas de deslizamiento (Huang, 2005).

Biocompatibilidad y citotoxicidad

En cuanto a los niveles de biocompatibilidad y citotoxicidad, el dióxido de titanio muestra una solubilidad promedio muy baja en estado pasivo (Eliades, 2007). El nivel normal de titanio en el tejido humano es de 50 ppm. Sin embargo, las concentraciones observadas alrededor de los implantes de titanio que oscilan entre 100 y 300 ppm no representan un riesgo para los humanos (Kapanen et al., 2002). Según el Comité Científico para la Seguridad del Consumidor (CCSC), en términos porcentuales, las nanopartículas de dióxido de titanio utilizadas en cosméticos en concentraciones de hasta el 25% pueden considerarse seguras para los humanos. Sin embargo la mayoría de estudios in vivo e in vitro demuestran la ausencia de citotoxicidad utilizando aleaciones de titanio en concentraciones de bajo porcentaje, aunque algunos autores han reportado casos aislados de hipersensibilidad a componentes de aleaciones, como es el caso específico del níquel (Kolokitha & Chatzistavrou, 2009) (Arango Santander & Ramírez Vega, 2016).

2.2 Nylon 6,6

El nylon es un polímero sintético que pertenece a la familia de las poliamidas. Es una fibra sintética formada por enlaces amida entre unidades repetidas. Las poliamidas están formadas por largas cadenas con grupos amida (-CONH-). Hay muchos tipos de nailon, de los cuales el nylon 6,6 es el más conocido (Kowalewska et al., 2020).

El nylon 6,6 recibe su nombre de la forma en que se unen sus moléculas. Esta fibra sintética fue la primera alternativa artificial a la seda. El desarrollo del nailon 6,6 fue obra de un químico orgánico especializado en la química molecular de polímeros naturales. La fórmula química del nailon 6,6 tiene una cadena de 6 átomos de carbono unida a una cadena de otros 6 átomos de carbono. Entre cada cadena hay un grupo amida compuesto de oxígeno, carbono e hidróxido de nitrógeno.

2.3 Tipo de articulaciones

Una prótesis es un dispositivo médico diseñado para reemplazar o asistir una parte del cuerpo que ha sido perdida, dañada o disfuncional debido a diversos motivos, como accidentes, enfermedades o malformaciones congénitas. Las prótesis pueden variar en forma y función, abarcando prótesis de extremidades e incluso órganos artificiales. Un aspecto crítico en el diseño de prótesis es su capacidad para imitar las funciones y propiedades de la parte del cuerpo que reemplaza. Para que una prótesis sea efectiva y bien tolerada por el cuerpo, debe ser biocompatible y ergonómicamente adecuada para el tejido circundante. Un ejemplo de prótesis que involucra propiedades mecánicas específicas y que es compatible con el cuerpo humano es una prótesis de cartílago, su compatibilidad y capacidad para replicar las funciones de amortiguación y lubricación que cumple el cartílago natural en las articulaciones son de vital importancia para garantizar una movilidad cómoda y funcional en el área afectada. Las propiedades mecánicas y biocompatibilidad de una prótesis, como un cartílago artificial, son aspectos esenciales que se consideran cuidadosamente en su diseño y

fabricación para lograr una integración exitosa y un funcionamiento óptimo en el cuerpo humano.

Las articulaciones son estructuras que sirven como puntos de unión entre huesos o entre huesos y cartílagos. Como resultado, el movimiento se vuelve más fácil y no provoca desgaste en la estructura ósea (Gil, 2019).

Hay dos tipos principales de articulaciones en el cuerpo humano (Wyke, 2005):

- Según su estructura se dividen en: articulaciones sinoviales, articulaciones fibrosas y articulaciones cartilaginosas.
- ✓ Articulaciones según sus funciones: artrodesis, biarticularidad, sínfisis.

Las articulaciones son estructuras que sirven como puntos de unión entre huesos o entre huesos y cartílagos. Como resultado, el movimiento se vuelve más fácil y no provoca desgaste en la estructura ósea (Gil, 2019).

2.4 Tipos de articulaciones según su estructura

Las articulaciones se pueden agrupar según su estructura de su tejido. En este sentido, pueden ser (Cael, 2012):

✓ Articulaciones sinoviales

Constituyen la mayoría de las articulaciones de las extremidades inferiores. Reciben su nombre porque se mantienen unidos por una estructura llamada saco sinovial, que está lleno de líquido sinovial y es esencial para la lubricación y nutrición del cartílago que forma la articulación.

✓ Articulaciones fibrosas

Son articulaciones formadas a partir de tejido fibroso y su función es conectar huesos relacionados. Su característica principal es la mala maniobrabilidad.

✓ Articulaciones cartilaginosas

Son estructuras compuestas por cartílago que confieren a las articulaciones entre huesos relacionados una mayor capacidad para resistir las fuerzas ejercidas sobre ellos sin perder flexibilidad. Un ejemplo de articulación cartilaginosa es el tejido que conecta los discos intervertebrales, ya que absorben cargas sin impedir la movilidad en la espalda.

2.5 Cartílago

El cartílago es una variedad de tejido conectivo neural, avascular y linfático. Al igual que otros tipos de tejido conectivo, los condrocitos son un tipo de célula exclusivo del cartílago y se derivan de células madre mesenquimales (MSC) de la médula ósea (Mow et al., 1992). La matriz extracelular del cartílago (MEC) está compuesta de colágeno (60%), proteoglicanos (25%) y glicoproteínas (15%) y es sintetizada por condrocitos (Buckwalter et al., 2005) (Reyes, 2019).

Durante el desarrollo del sistema esquelético, el cartílago crece rápidamente y posteriormente se mineraliza para formar hueso. Durante las etapas iniciales del proceso de reparación de fracturas, se forma un modelo de cartílago inicial, seguido de osificación y mineralización para restaurar el tejido dañado (Fuentes Boquete et al., 2007). En el estado adulto, el cartílago se divide en tres tipos: cartílago hialino, cartílago elástico y fibrocartílago (Haines et al., 2019).El cartílago hialino tiene una apariencia vidriosa y forma cartílago costal, cartílago articular en las uniones articulares y cartílago en la nariz, laringe, tráquea y bronquios. El cartílago elástico se encuentra en la epiglotis, el pabellón auditivo externo y los cartílagos del canal auditivo, así como en algunos pequeños cartílagos laríngeos. Histológicamente, el cartílago

elástico es similar al cartílago hialino, excepto que el primero contiene una densa red de fibras elásticas finamente ramificadas (Trujillo Martín, 2005).

A diferencia de otros tipos de cartílago, el fibrocartílago contiene principalmente colágeno tipo I. Se encuentra en los labios, los discos intervertebrales, los meniscos y los discos intervertebrales dentro de las articulaciones, y es el tejido de transición entre el tejido conectivo denso que forma los tendones y el cartílago hialino (Mow et al., 1992).

Después de una lesión, el cartílago articular es incapaz de regenerarse naturalmente y volver a convertirse en tejido funcional (Chen et al., 2011), lo que justifica numerosos esfuerzos dirigidos a la ingeniería de tejidos. El cartílago articular contiene regiones específicas con diferentes funciones, la replicación de estas regiones es importante para obtener estructuras funcionales en el campo de la ingeniería de tejidos, y la histología puede servir como la primera herramienta analítica para identificar estos cambios en forma de bandas (Hu & Athanasiou, 2003).

2.6 Cartílago articular

El cartílago articular consta de dos fases distintas: una fase líquida compuesta por agua y electrolitos, y una fase sólida compuesta por condrocitos, fibras de colágeno, proteoglicanos y otras glicoproteínas (Álvarez et al., 2002). Normalmente, el 60-80% del peso húmedo total del cartílago articular corresponde a la fase líquida, y el 20-40% restante corresponde a la fase sólida (Farooqi et al., 2019). Además, las fibrillas de colágeno, especialmente las de tipo II, representan del 50 al 75 % de la fase sólida y los condrocitos menos del 5 al 10 % respectivamente, mientras que los proteoglicanos y otras glicoproteínas representan la mayor parte de la fase sólida restante. El cartílago articular se divide en cuatro zonas: superficial, de transición, profunda y calcificada. La estructura básica del cartílago articular se muestra en la Figura 2.1 (Ofek & Athanasiou, 2007) (Ferrándiz, 2020).



Figura 2.1 Estructura del cartílago articular (Farooqi et al., 2019).

2.7 Propiedades mecánicas del cartílago articular

El agua representa el 80% del peso húmedo del cartílago y su asociación con las macromoléculas de la MEC mejora las propiedades mecánicas del tejido (Lim et al., 2010). El líquido intersticial contiene gases, pequeñas proteínas, metabolitos y altas concentraciones de cationes que contrarrestan la carga negativa de los proteoglicanos. No es sorprendente que las propiedades mecánicas del cartílago articular estén relacionadas con la composición bioquímica y la permeabilidad del tejido (Sun et al., 2004). La deformación del cartílago articular es causada por la fricción interna. En los plásticos, estas fuerzas de fricción se generan por el movimiento de largas cadenas de polímeros que rozan y se deslizan entre sí cuando el material se deforma (Julkunen et al., 2005), mientras que el módulo de elaticidad del cartílago articular es de 0,5-2 MPa (Campos, 2002). La ECM de colágeno sólido y los proteoglicanos del cartílago exhiben respuestas viscoelásticas similares a los materiales plásticos cuando se deforma (Buckwalter et al., 1991).



Figura 2.2 Comportamiento del cartílago articular bajo tensión uniaxial (Nordin & Frankel, 2004).

2.8 Biomateriales

Los biomateriales son materiales o sustancias destinados a ser implantados en sistemas vivos; se utilizan para soportar o reemplazar tejido que ha sufrido un trauma, degeneración o enfermedad. Las condiciones necesarias que definen las aplicaciones exitosas de biomateriales son la respuesta biológica, la resistencia adecuada y el comportamiento mecánico. Generalmente el fracaso de estos implantes se debe a una infección, ya que estos materiales se vuelven atractivos para los microorganismos y también pueden producir rechazo inmunológico y transmisión de enfermedades virales (Jacobs et al., 2020).

Se dividen en:

 Los biomateriales metálicos se utilizan comúnmente en osteosíntesis y artroplastia (funciones temporales), son materiales con alta resistencia transversal y a la tracción y se utilizan en implantes ortopédicos y dentales. Los biomateriales cerámicos son materiales con buena biocompatibilidad cuyas aplicaciones incluyen usos ortopédicos, recubrimientos metálicos, válvulas cardíacas u odontología y, nuevamente, sus propiedades físicas son similares a las del hueso además de ser resistentes a la corrosión.

 Los biomateriales poliméricos se utilizan en aplicaciones ortopédicas y, además, para construir músculos y tendones artificiales, que son implantes elásticos y resistentes al desgaste, y los biomateriales poliméricos se subdividen en mallas, capas y compuestos.

2.9 Los polímeros como biomateriales

La experiencia adquirida durante más de 30 años de investigación en este campo muestra que los mejores resultados a medio y largo plazo se logran cuando los biomateriales interactúan adecuadamente con su entorno. Tras esta acción, las Sociedades de Biomateriales europea, americana, japonesa australiana V promulgaron una definición consensuada de "biomateriales", refiriéndose genéricamente a ellos como materiales de dispositivos médicos que interactúan con sistemas biológicos. Esta definición incluye un amplio espectro de tipos de materiales más comúnmente utilizados con fines biomédicos, típicamente formados a partir de materiales de origen metálico, cerámico o polimérico. Un requisito básico de los materiales utilizados con fines biomédicos es su capacidad para coexistir con organismos vivos, ya sea que se utilicen in vivo o in vitro, sin causar efectos inapropiados e indeseables. La buena coexistencia entre biomateriales y organismos vivos es el criterio más utilizado para considerar un sistema biocompatible. De esta manera, la "biocompatibilidad" se define como la capacidad de un material para realizar una determinada función en una aplicación específica al recibir una respuesta adecuada de los organismos vivos (Cortés et al., 2010).

Entre los polímeros en medicina veterinaria y humana, el PVC (cloruro de polivinilo) y el PP (polipropileno) se utilizan en la fabricación de sondas nasogástricas, sondas

uretrales, dentaduras postizas, catéteres intravasculares, catéteres para perfusión de soluciones intravenosas, envases de medicamentos, píldoras anticonceptivas internas uterinas, los tubos utilizados en diálisis peritoneal, canulación ruminal e intestinal, tapones esofágicos, corazones artificiales, etc., demuestran sus múltiples usos en el organismo y la adaptación de los tejidos a los polímeros (Veterinaria & Izquierdo, 2004).

2.10 Elemento Finito

El análisis del método de elementos finitos es un método que puede predecir el comportamiento de un objeto bajo diferentes fuerzas o estímulos (Clift, 1992). El método es actualmente una poderosa herramienta para la solución numérica de una variedad de problemas de ingeniería y es una parte integral de todos los diseños. Las áreas de problemas típicas resueltas utilizando el método de elementos finitos incluyen análisis estructural, transferencia de calor, fluidos, transporte de masa y electromagnetismo, etc. (Chiravarambath, 2012). Los procesos físicos se pueden representar matemáticamente o con un conjunto de ecuaciones. Otra ventaja que nos proporciona la resolución de problemas de elementos finitos es que podemos realizar el análisis utilizando diferentes configuraciones del sistema, cambiando insumos, materiales, fuerzas, condiciones de operación, de forma económica y mucho más rápida. Lo único que se requiere para realizar el análisis es contar con software y computadoras con capacidad suficiente para soportar dicho análisis (Fonseca, 2017).

El nombre de este método proviene de la descomposición del sistema o dominio en pequeños trozos llamados elementos (ver Figura 2.3). En cada uno de estos elementos se formula una solución aproximada.



Figura 2.3 Sistema original y sistema discretizado en nodos y elementos finitos (Hermosillo Arteaga et al., 2017).

2.11 Comsol Multiphysics

COMSOL Multiphysics[®] es un software de simulación de elementos finitos utilizado para modelar y analizar fenómenos físicos en ingeniería e investigación científica. El software proporciona capacidades de modelado multifísico para análisis en entornos gráficos 2D y 3D, así como la capacidad de importar diseños de otro software y usarlos para análisis. COMSOL cuenta con bibliotecas y ecuaciones predefinidas para diversos fenómenos físicos y químicos, y el software permite el uso de diferentes modelos para resolver diferentes fenómenos simultáneos, en este caso el tiempo (Bhaskar, 2013). Las siguientes secciones describen el proceso utilizado por el software de elementos finitos.

2.12 Funcionamiento de Comsol Multiphysics

COMSOL Multiphysics® es un software con entorno gráfico para la simulación de fenómenos mediante el método de elementos finitos, donde se especifican las dimensiones del problema (1D, 2D o 3D), la solución física utilizada (por ejemplo: transferencia de calor, movimiento de fluidos, electromagnética y mecánica estructural, etc.), y el tipo de estudio (estático o transitorio). Una vez determinados la física y el tipo de estudio, se crea un modelo de problema, cuya configuración se guarda en el modelo raíz. Posteriormente se realizan definiciones globales estableciendo

parámetros, variables, funciones, etc. Además, los módulos de componentes se definen en el modelo raíz. En este modelo raíz se pueden definir diferentes componentes. Cada componente es una representación de un sistema físico y cada componente está compuesto por diferentes nodos. El orden de todos los nodos se agrupa en nodos componentes. Las propiedades de cada elemento se pueden modificar en la ventana de configuración. El simulador utiliza el orden de los nodos y sus propiedades para resolver diferentes modelos. El uso de múltiples componentes da como resultado elementos que son más fáciles de resolver, comenzando con un sistema más complejo donde cada elemento es un componente y posteriormente acoplando todos los resultados de cada elemento para obtener la solución general. La Figura 2.4 muestra la interfaz gráfica del software multiphysics comsol (Bhaskar, 2013).



Figura 2.4 Interfaz gráfica.

La resolución de problemas se puede dividir en tres etapas, a saber (COMSOL AB, 2012):

Preprocesamiento: en este paso, el software obtiene los datos necesarios para resolver el problema. Hay dos tipos de datos: La primera clasificación de datos define el problema a resolver, lo cual es similar a desarrollar un modelo matemático del problema (Datta & Rakesh, 2009):

 Leyes de conservación: o ecuaciones de equilibrio, son ecuaciones algebraicas y diferenciales que definen la evolución temporal y el cambio espacial de un sistema. La principal variable dependiente también se define aquí.

 Restricciones: Son idealizaciones del sistema que ayudan a modelar la independencia de determinadas variables. Por ejemplo, para un sistema en estado estacionario, las variables son independientes del tiempo; de manera similar, si ocurre simetría axial en la geometría del modelo, ya no depende de las coordenadas azimutales. Geometría: Define las posiciones y formas relativas y absolutas de los elementos del sistema.

• Relaciones constitutivas: Están definidas por las propiedades del material, que incluyen conductividad térmica, densidad, viscosidad y conductividad eléctrica.

 Condiciones iniciales y de contorno: Son las condiciones al inicio del estudio o en los límites del sistema. Junto con las ecuaciones de equilibrio, definen la solución completa del sistema.

Fuente: son influencias externas que cambian la respuesta natural del sistema.
 Puede ser una fuente de potencial eléctrico en un circuito.

La segunda categoría son los datos que definen cómo se resuelve el sistema. Estos datos sirven como parámetros o valores requeridos para el método de elementos finitos (COMSOL AB, 2018).

 Mallado: es la discretización espacial del problema, dividiendo la geometría del sistema en pequeñas unidades (ver Figura 2.4). Las propiedades de mallado se definen en el módulo Mallado. Iteración por pasos: Utilizada para problemas transitorios o dependientes del tiempo, es una discretización del tiempo y determina los incrementos utilizados en la resolución del sistema. Este aumento se ingresa en el nodo Investigación.

Procesamiento: Este es un proceso interno automático dentro del software. A partir de la información ingresada por el usuario en el preprocesamiento, se utilizan diferentes métodos numéricos para generar y resolver ecuaciones algebraicas y obtener las principales variables o valores de interés (temperatura, caudal, potencial eléctrico, etc.).

Postprocesamiento: En este paso se muestran los valores obtenidos por el procesamiento en forma tabular o gráfica. Además, se calculan los valores de variables auxiliares (flujo de calor, tensión del fluido, corriente). Para definir diferentes gráficos y valores auxiliares, utilice el módulo Resultados.

2.13 Ensayo de tracción

Quizás una de las pruebas más importantes de la respuesta mecánica de un material sea la prueba de tracción. Debido a su amplia gama de aplicaciones, está estandarizado por normas ASTM para materiales de diferentes propiedades. En esta prueba, se utiliza una abrazadera fija para sujetar un extremo de una muestra estandarizada a una celda de carga y el otro extremo a una abrazadera de desplazamiento controlado, consulte la Figura 2.5. Los sensores en serie con la muestra proporcionan una lectura electrónica de la carga correspondiente al desplazamiento a la máquina de prueba servocontrolada, permitiendo el uso de la carga en lugar del desplazamiento como variable de control; de esta manera, el desplazamiento se monitorea como una función de la carga (Aguirre Guerrero, 2011).



Figura 2.5 Ejemplo de ensayo de tracción.

Con esta prueba se pueden determinar propiedades importantes del material a partir de la curva tensión-deformación. En la linealidad que existe desde el inicio hasta el límite de proporcionalidad (pequeñas deformaciones), muchos materiales siguen la ley de Hooke con una aproximación razonable, de modo que la tensión es proporcional a la deformación y la constante de proporcionalidad se denomina Módulo de elasticidad o Módulo de Young (E).

 $\sigma = E\epsilon$

Ecuación 1

El límite elástico (el límite máximo en el que la teoría elástica es válida) es otra propiedad que se puede obtener, sin embargo, el límite elástico y el esfuerzo último o de fractura (σu) son propiedades, aunque aparecen en las curvas de ingeniería. Por sus propiedades viscoelásticas no coincide con los valores reales registrados para materiales poliméricos (David & Becerril, 2014).

2.14 Curvas esfuerzo-deformación

Para comprender mejor el efecto de una carga determinada sobre un material, se desarrollaron curvas características bien conocidas, como tensión de ingeniería versus deformación de ingeniería ($\sigma e y \epsilon e$), para obtener información sobre el comportamiento mecánico y en función del material que cumple con los requisitos de diseño (David & Becerril, 2014).

Una vez tensionado el cuerpo, una vez superados los límites proporcionales, sufre una serie de cambios dimensionales a lo largo del ensayo (pérdida de linealidad en la curva tensión-deformación por aparición del comportamiento del material) que no se registran en las curvas de ingeniería tradicionales. Para los polímeros, estos cambios son reversibles en el rango elástico, parcialmente irreversibles en el rango viscoelástico, completamente irreversibles en el rango plástico, o pueden generar nuevas superficies, las cuales se denominan fracturas. Todos estos cambios se producen debido a la necesidad de disipar la energía suministrada al sistema. Una vez que la pieza se rompe, aparecen dos tipos de superficies en la zona de fractura, correspondientes a fractura dúctil o fractura frágil (Quagliano, 2014).

En el primer caso, el material sufre una alta deformación plástica y una alta absorción de energía, mientras que en el segundo caso no existe una deformación plástica significativa ni una alta absorción de energía, ya que ésta se aprovecha para formar la nueva superficie. (Brostow & Singh, 2004).

El valor de ingeniería de la tensión se determina a partir de la carga medida durante el ensayo (F) y el área de la sección transversal inicial de la probeta (A0) relacionada con la ecuación 1, mientras que el valor correspondiente a la deformación se determina a partir de el desplazamiento de la mordaza (Δ I) y la longitud inicial de la muestra (l_0) siguiendo la ecuación 2.

$$\sigma_{\rm e} = \frac{F}{A_0}$$

Ecuación 2

$$\epsilon_{\rm e} = \frac{\Delta {\rm l}}{l_0}$$

Ecuación 3

2.15 Esfuerzo verdadero-deformación verdadera

Como se mencionó en la sección anterior, las curvas de tensión y deformación de ingeniería deben interpretarse con precaución después del límite elástico porque las dimensiones de la muestra cambian significativamente en comparación con los valores originales debido a la inestabilidad estructural que exhibe el material polimérico. Gran estado de deformación. Teniendo en cuenta la reducción en el área de la muestra después del límite elástico, la tensión verdadera o tensión de Cauchy (σ_T) como la relación entre el área instantánea (A_i) con la carga aplicada asociada mediante la ecuación 4.

$$\sigma_T = \frac{F}{A_i}$$

Ecuación 1

La medida logarítmica de la deformación se llama deformación logarítmica o deformación verdadera (ε_T) y a menudo se relaciona con la tensión verdadera al considerar el aumento de la deformación como un aumento continuo en el

desplazamiento (dl) dividido entre la longitud inicial de la muestra (l_0)mediante (ver Ecuación 5):

$$d\varepsilon_T = \frac{dl}{l_0} \to \varepsilon_T = \int_{l_0}^{l_i} \frac{1}{l} dl \to \varepsilon_T = ln \frac{l_i}{l_0}$$

Ecuación 2

Bajo regímenes de fluencia y flujo plástico, el cambio de volumen del material es insignificante; el aumento en la longitud de la pieza se compensa con una disminución en el área de la sección transversal. Antes de que se forme el cuello, cuando la deformación aún es uniforme, la restricción de volumen se establece según la Ecuación 6.

$$\mathrm{dV} = 0 \ \rightarrow \mathrm{AL} = A_0 L_0$$

Ecuación 3

Por lo tanto, la relación entre ingeniería y tensiones y deformaciones verdaderas se puede obtener mediante las Ecuaciones 7 y 8 bajo el supuesto de incompresibilidad plástica y transformación uniforme en toda el área de prueba.

$$\sigma_T = \sigma_e (1 + \varepsilon_e)$$

Ecuación 4

$$\varepsilon_T = ln(1 + \varepsilon_e)$$

Ecuación 5

Estas ecuaciones se pueden utilizar para obtener la curva de tensión verdadera y de deformación verdadera desde la curva ingenieril hasta la deformación a la cual se comienza a formar el cuello de estricción. Mas allá este punto, la deformación es no-

uniforme en la zona de ensayo por lo que los valores de esfuerzo y deformación deben obtenerse a partir de las cargas y secciones transversales de pruebas reales.

2.16 Modelos de la viscoelasticidad

Las propiedades viscoelásticas experimentales pueden describirse mediante diferentes modelos teóricos, como el modelo sólido lineal estándar, el modelo Kelvin-Voight modelo de Maxwell generalizado, el modelo de cadena de Kelvin. Cada uno de ellos tiene un campo de aplicación. En particular, el modelo de Maxwell generalizado y el modelo de la cadena de Kelvin constan de varias "ramas", compuestas por muelles y amortiguadores con diferentes tipos de conexiones entre ellos. Estos modelos con múltiples ramas (y por lo tanto contienen muchos parámetros y muchas constantes de tiempo) son a menudo muy útiles en la modelización de un determinado comportamiento viscoelástico a lo largo de un tiempo de observación (Pomarico et al., 2016).

La cadena de Maxwell generalizada es particularmente adecuada para la descripción de los fenómenos de relajación de tensiones (disminución de la tensión en un material viscoelástico bajo tensión constante) mientras que la cadena de Kelvin es el modelo preferido para la descripción de los fenómenos de los fenómenos de fluencia (aumento de la tensión bajo tensión constante) (Sakai et al., 2015).

2.17 SolidWorks

SolidWorks es un programa para diseño mecánico principalmente en tres dimensiónes. El software tiene la capacidad para crear cualquier pieza mecánica y unirla a otras piezas en forma de ensamble para formar cualquier objeto en 3D. Se utiliza SolidWorks para el diseño de las probetas del ensayo de tracción de esta tesis por la facilidad de diseño de las piezas complejas que a pesar de que COMSOL también tiene la capacidad de diseño mecánico es mucho más complejo y tardado crear piezas y
ensamblarlas. Debido a que COMSOL es compatible con los ensamblajes de SOLIDWORKS, podemos tomar cualquier diseño y trasladarlo a COMSOL para un estudio detallado en 2D o 3D(Cost et al., 2015).

CAPÍTULO 3. DESARROLLO

En el siguiente capítulo se describe el desarrollo general por simulación numérica, para obtener y analizar el comportamiento mecánico del material nanohíbrido Nylon 6,6/TiO₂ mediante del ensayo de tensión y obtener sus propiedades (módulo de Young y limite elástico).

Se inició modelando y simulando el ensayo de tensión del Nylon 6,6, para establecer el modelo numérico y las consideraciones del material base del sistema híbrido. Los resultados por simulación y los obtenidos de pruebas experimentales que son presentados en literatura se comparan para validar el modelo. Posteriormente, se realiza el ensayo de tensión por simulación del TiO₂ y se establecen el modelo y las consideraciones realizadas para su solución. Por último, ya establecidos los modelos de cada uno de los materiales que componen al nanohíbrido, se realizó el ensayo por simulación numérica del Nylon 6,6/TiO₂, estableciendo diferentes sistemas donde el porcentaje en volumen de las nanopartículas de TiO₂ fue variado. Además, se considera dos diferentes posiciones de las nanopartículas dentro de la probeta, dispersadas a lo largo de la probeta y concentradas en el centro de la misma. El tamaño de las nanopartículas es de 25nm para todos los sistemas estudiados, el tamaño se obtuvo por la referencia (Kandregula et al., 2014), el cual es un procedimiento de síntesis verde para la obtención de las nanopartículas de TiO₂, debido que es la que se quiere seguir para la experimentación en el laboratorio. La Figura 3.1 muestra de forma general el desarrollo de las pruebas.



Figura 3.1 Desarrollo experimental general

3.1 Desarrollo experimental del material nanohíbrido, en Comsol

El proceso descrito a continuación (ver Figura 3.2) es el llevado a cabo para realizar la simulación del ensayo de tensión en el software Comsol Multiphysics® (versión educativa) de los diferentes sistemas propuestos (ver Tabla 3.1). Para establecer las cantidades de TiO₂ en el sistema nanohibrido se consideraron los porcentajes reportados en la literatura(Zarria-Romero et al., 2017).

Se inicia en COMSOL estableciendo la dimensión espacial 3D del análisis, la física (mecánica de sólidos), y la dependencia del estudio con respecto al tiempo, de tal forma que la solución de ecuaciones se adapte a la física con respecto a la variable

t. Posteriormente, se importa el modelo geométrico en 3D de la probeta normalizada, que se realizó en el software especializado de diseño Solidwoks (versión educativa). Para la probeta de Nylon 6,6, se considera la norma ASTM D638, la cual es una norma que va dedicada a la tracción de plásticos, y para la probeta TiO₂, la norma ASTM C1273 la cual describe la prueba estándar para las pruebas de tensión de los materiales cerámicos avanzados. Para el sistema híbrido se tomó la probeta tipo I de la norma ASTM D638, debido a que la matriz del material híbrido es el Nylon, con una escala 1:10000 para el ahorro de tiempo de cómputo.

El siguiente paso es definir a los materiales, indicando el comportamiento que tiene cada uno de ellos, una función lineal para el TiO₂, y una función de viscoelásticidad que describe el comportamiento del Nylon 6,6. Para la viscoelasticidad el modelo de Kelvin-Voigt es utilizado.

Después se define los parámetros, funciones y variables globales asociados a la física de estudio, además se establecen las condiciones de frontera, restricciones, desplazamientos, fuerzas, etc. En este análisis, se define una función analítica de desplazamiento prescrito en el eje axial de la probeta para representar el movimiento de las mordazas en pruebas experimentales.

Posteriormente se genera la discretización del modelo, especificando el tipo de elementos. Para este estudio, se utilizan elementos tipo tetrahedro no estructurado, se crea una malla controlada por la física y se determina la resolución de mallado fino. Se selecciona el elemento tipo tetraedro ya que utiliza un conjunto de funciones polinómial para aproximar el campo de desplazamiento estructural, es decir, cuánto se deforma el objeto en cada una de las tres direcciones de coordenadas.

Finalmente, se realiza el computo solucionando las ecuaciones dependientes del tiempo de la física en cada uno de los elementos de la malla del modelo, y se muestran los resultado, esfuerzos y deformaciones de la probeta.







Figura 3.2 Desarrollo experimental.

3.1.1 Modelo CAD de probetas de ensayo.

Se genera la geometría de las probetas normalizadas en SolidWork, con las dimensiones de la probeta Tipo I dada en la norma ASTM D638 para el blanco de

Nylon 6,6. La probeta del blanco TiO₂ se siguió las recomendaciones de la norma ASTM C1273 para materiales cerámicos avanzados (monolíticos), que permite la utilización de diversas geometrías. En este estudio, se optó por utilizar la geometría especificada en la norma ASTM E8 diseñada para materiales metálicos. Para el sistema híbrido (Nylon 6,6/ TiO₂) se utilizaron las dimensiones de la norma ASTM D638 con una escala de 1: 10000.

Para simplificar y tener una buena administración de recursos de cómputo, así como reducir los tiempos de cálculo, se considera la simetría de la probeta a lo largo del eje transversal de la misma para generar el modelo CAD (Diseño asistido por computadora) en 3D, es decir, se modela la mitad de las probetas con las dimensiones establecidas por las normas, como se muestra en los Anexos A, B y C. En la Tabla 3.2 se describe la norma para cada uno de los sistemas de trabajo. La geometría fue importada al COMSOL.

Sistema	Norma
Nylon 6,6	ASTM D638
TiO ₂	ASTM C1273
Nylon 6,6/ TiO ₂	ASTM D638

Tabla 3.2 Sistemas de trabajo con sus normas.

3.1.2 Condición de simetría

Definida la física y el análisis dependiente del tiempo, se importa a COMSOL el modelo CAD de la probeta que se estudia. Por simplificación, se diseñó la mitad de probeta para la prueba de tensión, así como para la probeta para la prueba de compresión, por lo que debe establecer la simetría dentro del modelo de simulación

para su análisis. Se establece el parámetro de simetría a lo largo del eje transversal de la probeta, como se muestra en la Figura 3.3, para la prueba de tensión.



Figura 3.3 Simetría de la probeta para tensión.

Para los modelos de los diferentes sistemas nanohíbrido Ny6,6/TiO₂, antes de establecer el parámetro de simetría, se agregaron esferas de un diámetro de 25 nm dentro del modelo de las probetas, simulando las nanopartículas de TiO₂ dentro de la matriz de Nylon 6,6. Las esferas son colocadas de forma aleatoria dentro del volumen de la matriz. Se agregan las esferas de este tamaño debido al artículo de síntesis verde realizado en laboratorio, usando extracto de la flor Hibiscus (Rosa china), teniendo como resultados nanopartículas de TiO₂ de 25 nm (Kandregula et al., 2014).

En la Tabla 3.3 se muestran los cálculos para saber cuántas nanoesferas incrustadas puede contener la probeta en la prueba de tensión. El volumen de la probeta a escala es de 0.00429 µm³, así como el volumen de la esfera es de 8.181230869 x10⁻⁶ µm³ haciendo el cálculo se define que la probeta puede contener 1048 nanoesferas, lo cual equivale a un 100%. En la Tabla 3.4 se muestran los porcentajes de esferas dentro de la probeta del sistema híbrido ocupados en este

trabajo. Posterior a agregar las esferas, se establece la simetría de la probeta del sistema nanohíbrido.

Volumen probeta	Tamaño de la esfera	Volumen esfera	% de esferas en el volumen de probeta
Ancho Alto Largo 0.04 x 0.13x 0.825= 0.00429 μm ³ o 4290000 nm ³	R= 0.0125 μm = 12.5 nm	8.181230869 x10 ⁻⁶ μm ³	100%=1048 esferas

Tabla 3.3 Porcentaje en volumen de esferas en la probeta del sistema híbrido Nylon 6,6/ TiO2.

% de esferas en el volumen de probeta	# de esferas en el volumen de probeta
4%	42
8%	84
12%	126
16%	168
20%	210

Tabla 3.4 Porcentajes de esferas dentro de la probeta del sistema híbrido Nylon 6,6/ TiO2.

3.1.3 Materiales.

Las propiedades físicas que se especifican de los materiales blanco, Nylon 6,6 y TiO₂, para la simulación del ensayo, dependen de la física mecánica de solidos establecida al inicio del estudio. El comportamiento de material elástico lineal con viscoelasticidad se determina para el blanco Nylon 6,6 y para la matriz del sistema híbrido Nylon 6,6/ TiO₂. En la tabla 3.5 se observa el modelo del comportamiento del Nylon. Para el TiO₂, el comportamiento elástico lineal es elegido. Se utilizaron las propiedades en la configuración del material mostradas en la Tabla 3.6 para el Nylon 6,6 y en la Tabla 3.7 se muestran las propiedades del TiO₂. Seleccionando la probeta completa dependiendo del sistema a trabajar como para los blancos y

utilizando los materiales mencionados anteriormente, por ejemplo, en el sistema híbrido se ocuparon los dos materiales agregados, el Nylon 6,6 para la matriz y el TiO₂ para las esferas.

Ecuación	Modelo de viscoelasticidad		
$s = 2n\dot{c}$, $n = 6\tau$	Modelo del material	Kelvin-voigt	
$Sq = 2 \eta_V e_{el,dev}, \eta_V = 0 \tau_V$	Tiempo de relajación	<i>Tv</i> = 30s	

Tabla 3.5 Configuración de la ecuación de viscoelasticidad.

Contenido del material Nylon 6,6				
Propiedad	Variable	Valor	Unidad	
Módulo de young	E	3300	[MPa]	
Coeficiente de poisson	nu	0.35	1	
Densidad	rho	1.14	[g/m^3]	

Tabla 3.6 Configuración del material en blanco para el Nylon 6,6.

Contenido del material TiO ₂				
Propiedad	Variable	Valor	Unidad	
Módulo de young	E	240	[GPa]	
Coeficiente de poisson	nu	0.325	1	
Densidad	rho	4.23	[g/m^3]	

Tabla 3.7 Configuración del material en blanco para el TiO₂.

3.1.4 Parámetros globales

Desplazamiento

Para definir el comportamiento de la probeta en función del tiempo, es decir cuánto se va a desplazar por minuto, de acuerdo a la norma ASTM D638 y la norma ASTM

C1273, se define una función analítica y argumentos en tiempo (t) como se muestra en la Tabla 3.8 para cada uno de los sistemas. En la Tabla 3.9 se muestra la configuración de la función analítica llamada en el software como (VeID), con cada uno de los apartados, cambiando la expresión para cada uno de los sistemas.

Función analítica	Sistema
2.5*t	Nylon 6,6
0.06*t	TiO ₂
2.5*t	Nylon 6,6/ TiO2-4%
2.5*t	Nylon 6,6/ TiO2-8%
2.5*t	Nylon 6,6/ TiO2-12%
2.5*t	Nylon 6,6/ TiO2-16%
2.5*t	Nylon 6,6/ TiO2-20%

Tabla 3.8 Función analítica para cada sistema.

Definición		Unidades		Parámetros de gra	afico	
Expresión	2.5 *t	Argumentos	min	Argumento	Límite inferior	Límite superior
Argumentos	t	Función	mm	t	0	10

Tabla 3.9 Configuraciones de la función analítica.

En este estudio en función del tiempo (t), se configura el tiempo en un rango que inicia en $t_0=0$, hasta un tiempo final t_f=1 minuto, con incremento de 0.10 min (ver tabla 3.10). Esta configuración se tomó para todos los sistemas de trabajo.

Etiqueta	Temporal
Configuración del estudio	
Unidad de tiempo	min
Tiempos de salida	range(0,0.10,1) min
Tolerancia	Controlado por la física

Tabla 3.10 Configuración de estudio.

La condición de frontera de desplazamiento prescrito se define en el extremo alejado del eje de simetría establecido (en el extremo de la probeta en el que es sujeta por mordazas en un ensayo de laboratorio), ver Figura 3.6. La configuración de los parámetros para el desplazamiento dentro del software Comsol se muestran en la en la tabla 3.11.



Figura 3.4 Selección de la parte superior de la probeta para el desplazamiento.

Selección de c	ontorno	Desplazamiento prescrito	
Selección	Manual	✓ Prescrito en dirección x	
10	**************************************	u _{0x} VelD(t) ✓ Prescrito en dirección y	m
	·⊕́·	u _{0y} 0 ✓ Prescrito en dirección z	m
		<i>u</i> _{0<i>z</i>} 0	m

Tabla 3.11 Configuración del nodo desplazamiento prescrito.

En el modelo se crea una referencia en el centro geométrico sobre el eje de simetría de la probeta en cada uno de los modelos de los sistemas de trabajo. Este punto de referencia permite medir desplazamiento y esfuerzos que sufre la probeta a en el tiempo, para obtener la curva del comportamiento mecánico del material sometido a tensión. En la tabla 3.12 se muestran las configuraciones y las coordenadas del punto referencia en los sistemas de trabajo. En la figura 3.7 se presenta en donde se colocó el punto.

Coordenadas del punto Nylon 6,6		Coordenadas del punto		Coordenadas del punto		
			TiO ₂		Nylon 6,6/ TiO ₂	
Punto			Punto		Punto	
х	0	mm	Х	0 mm	x	45024.715 μm
У	0.07	mm	У	-20 mm	У	6500.00 µm
Z	0.02	mm	Z	3 mm	Z	2000 µm
Sistema de coordenadas		Sistema de coordenadas		Sistema de coordenadas		
Plano de	Plano x-y	/	Plano de	Plano x-y	Plano de	Plano x-y
trabajo			trabajo		trabajo	

Tabla 3.12 Configuración para ubicar un punto en el modelo en los diferentes sistemas de trabajo.



Figura 3.5 Sección de referencia para medir desplazamientos y esfuerzos.

3.1.4 Construcción del mallado.

El mallado discretiza el modelo, dividiéndolo en pequeños elementos de formas geométricamente simples. En el mallado se utiliza el elemento tetraédrico libre (no estructurado), controlado por la física, con resolución de malla "fino" para los sistemas del Nylon 6,6 y TiO₂. Para los sistemas híbridos, fue con un tamaño de elemento "extremadamente fino". En la Tabla 3.14 se muestra el número de elementos de cada sistema.

Sistema	Número de elementos
Nylon 6,6	10560
TiO ₂	8106
Nylon 6,6/ TiO ₂ -4%	35799
Nylon 6,6/ TiO ₂ -8%	63358
Nylon 6,6/ TiO ₂ -12%	85295
Nylon 6,6/ TiO ₂ -16%	110829
Nylon 6,6/ TiO ₂ -20%	138776

Tabla 3.14 Número de elementos de cada sistema.

Ejemplo del modelo discretizado del sistema nanohíbrido, se puede observar en la Figura 3.9. El sistema presentado es del Nylon66/TiO₂ -16%, en el que la malla está formada por 673410 nodos y 110829 elementos. Se puede observar a detalle del material de refuerzo. En la tabla 3.15 se muestran el número de elementos y el número de nodos de cada sistema analizado.



Figura 3.6 Modelo de discretizado del material híbrido Nylon66/TiO₂-16%.

Sistema	Número de elementos	Numero de nodos
Nylon 6,6	10560	52876
TiO ₂	8106	40530
Nylon 6,6/ TiO ₂ -4%	35799	178953
Nylon 6,6/ TiO ₂ -8%	63358	316798
Nylon 6,6/ TiO ₂ -12%	85295	426490
Nylon 6,6/ TiO ₂ -16%	110829	673410
Nylon 6,6/ TiO ₂ -20%	138776	777145

Tabla 3.15 Número de elementos con el número de nodos de da sistema de trabajo.

CAPÍTULO 4. RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En este capítulo, se exponen los resultados de la simulación numérica de la prueba de tensión realizada tanto en el Nylon 6,6 como en el TiO₂. Además, se presentan los resultados de la simulación en tensión y compresión para los sistemas de material nanohíbrido. A lo largo de este análisis, se investiga el comportamiento de los diferentes materiales al someter los extremos de las probetas a un desplazamiento en su eje axial, manteniendo una velocidad constante para determinar las propiedades mecánicas del material híbrido tanto en tensión como en compresión.

En la simulación numérica del material, se analiza su respuesta al desplazamiento axial. Se grafica la relación entre la tensión aplicada y la deformación del material con el propósito de presentar la curva esfuerzo-deformación. Para generar esta curva, se focaliza la observación en un punto central de la probeta y se calculan los resultados, que luego se representan en un gráfico. La figura 4.1 ilustra claramente el punto seleccionado para llevar a cabo esta observación



Figura 4.1 Punto seleccionado en el modelo para la gráfica curva esfuerzo- deformación.

4.1 Nylon 6,6

La simulación de la probeta blanco Nylon 6,6 se realiza, obteniendo resultados de esfuerzo y deformación de la probeta completa. En la Figura 4.2 se observan los esfuerzos de la probeta al aplicarle el desplazamiento en los extremos de la misma en el tiempo total de 1 min marcada por la norma ASTM D638. Los esfuerzos máximos se observan en color rojo, y se presentan en el centro de la probeta, que es el lugar donde ocurre la estricción en un ensayo realizado en laboratorio. Los esfuerzos disminuyen conforme se alejan del centro geométrico de la probeta, en dirección de la aplicación de la carga. En el Gif 4.1 que se muestra en la carpeta de este documento. Se puede observar la deformación y los esfuerzos de la probeta a lo largo del tiempo en la figura 4.3.



Figura 4.2 Esfuerzos de la probeta Nylon 6,6.



Figura 4.3 Evolución de los esfuerzos- probeta Nylon 6,6.

En la Figura 4.4 se muestra la curva de esfuerzo deformación del Nylon 6,6 obtenida por el programa Comsol Multiphysics, la cual es comparable con la curva en la literatura del Nylon 6,6 (ver Figura 4.5), lo que indica que la simulación es correcta. Se aprecia un comportamiento lineal al inicio de la curva, el cual pertenece al comportamiento elástico típico de un polímero, hasta 5500 MPa, seguido de un ligero decrecimiento en la deformación, propia del comportamiento viscoelástico que tienen lugar hasta 7500 MPa. En esta región la energía suministrada al sistema produce la ruptura de algunos enlaces secundarios provocando el alineamiento de las cadenas poliméricas y la consecuencia formación del cuello de estricción.



Figura 4.4 Curva Esfuerzo- Deformación de la probeta Nylon 6,6.



Figura 4.4 Curva Esfuerzo-Deformación del Nylon 6,6 en la Literatura (Yanilmaz et al., 2017).

En aproximación con la literatura, se puede observar que se obtiene un comportamiento similar al de las curvas esfuerzo deformación del Nylon 6,6, solo que los esfuerzos son diferentes ya que, en la figura presentada, están trabajando con nanofibras de Nylon 6,6 electrohilado. Los resultados de los polímeros pueden variar, en función del método de síntesis, de peso molecular y de la técnica de procesamiento, aun tratándose del mismo material.

4.2 TiO₂

La simulación de la probeta blanco TiO₂ se realiza, obteniendo resultados de esfuerzo y deformación de la probeta completa. En la Figura 4.6 se muestran los esfuerzos al aplicarle el desplazamiento en los extremos de la misma en el tiempo total de 1 min marcada por la norma ASTM C1273 Los esfuerzos máximos se observan de color naranja y se presentan en el centro de la probeta, que es el lugar donde ocurriera la fractura en un ensayo realizado en laboratorio. Los esfuerzos disminuyen conforme se alejan del centro geométrico de la probeta, en dirección de la aplicación de la carga, los esfuerzos menores se aprecian con los colores verde y azul. En la carpeta de este documento se muestra el Gif 4.2. Se puede observar

el desplazamiento de la probeta a velocidad constante durante un tiempo total de 30 minutos. Se puede observar la deformación y los esfuerzos de la probeta a lo largo del tiempo en la Figura 4.7.



Figura 4.5 Esfuerzos de la probeta TiO₂.



Figura 4.6 Evolución de los esfuerzos- probeta TiO₂.

En la Figura 4.8 se muestra la curva de esfuerzo deformación del material TiO₂ obtenida por el programa Comsol Multiphysics. Al analizar el comportamiento del TiO₂ en la Figura 4.9, se observa que la curva resultante de la simulación numérica se aproxima a la que se encuentra en la literatura. Lo anterior, demuestra que los datos ingresados y el procedimiento en el software son correctos En la gráfica se muestra un comportamiento lineal que indica que la relación entre el esfuerzo y la

deformación unitaria en esta región inicial no sólo es lineal sino también proporcional.



Figura 4.7 Curva Esfuerzo-Deformación del TiO₂ con simulación numérica.



Figura 4.8 Curva Esfuerzo-Deformación TiO₂ en la Literatura (Sorki, A.et al., 2022).

En comparación con la literatura, se observó que el comportamiento del material TiO₂ obtenido por simulación es similar. Al observar las curvas esfuerzodeformación en la zona elástica, para una deformación de 0.05 mm/mm en ambas gráficas, el esfuerzo es de 12 GPa aproximadamente.

4.3 Nanohíbrido Nylon6,6/TiO₂

Para la prueba de tensión en los sistemas nanohíbridos. se realizó la simulación numérica siguiendo las recomendaciones de la norma ASTM D695.Se utilizaron las dimensiones indicadas por la norma (Ancho 0.04 µm x Alto 0.13 µm x Largo 0.825 µm) con una escala de 1: 10000, para simplificar y tener una buena administración de recursos de cómputo, así como reducir los tiempos de cálculo.

Al hacer el cálculo del número de nanopartículas del material, se tomó en cuenta, el volumen de la probeta matriz del Nylon, el tamaño de la esfera que es de 25 nm, así como también el volumen de la misma. Dando como resultado que el 100% de capacidad de esferas en la matriz es de 1048 esferas. Tomando en cuenta esa relación, se tomaron los porcentajes a trabajar, para ver el comportamiento del material Nanohíbrido. En la tabla 4.1 se muestra el cálculo de la relación de porcentaje con el número de nanopartículas de TiO₂.

% de nanopartículas en volumen	# de nanopartículas en volumen
100%=1048 4 %	42
8%	84
12%	126
16%	168
20%	210

Tabla 4.1 Relación de porcentaje con el número de nanopartículas de TiO₂.

4.3.1 Tensión

A continuación, se muestran los resultados del material nanohíbrido en prueba de tensión. En la Tabla 4.2 se muestran los esfuerzos del material nanohíbrido Nylon 6,6/ TiO₂ con las nanopartículas de TiO₂ en el centro de la probeta y dispersas a lo largo de la misma. Mostrando la importante diferencia entre disposición de las nanopartículas. Las probetas con nanopartículas centradas tienden a mostrar mayores esfuerzos por la concentración en el lugar, y las probetas con nanopartículas dispersas presentan menores esfuerzos.





Tabla 4.2 Resultados en tensión de los diferentes sistemas de trabajo.

La relación de escala de la probeta del material Nylon es de 1:10,000, lo que se debe al número de elementos manejados por la computadora. Esta escala más pequeña permite una mejor visualización de las nanopartículas de TiO2 y facilita la observación de su comportamiento.

En la Figura 4.10 ilustra a detalle la interacción entre la nanoesfera de TiO₂ y la matriz de Nylon 6,6, se puede apreciar que las nanopartículas únicamente solo se desplazan en la matriz de forma longitudinal.



Figura 4.9 Interacción entre nanoesfera y la matriz en el Sistema de trabajo Nylon 6,6/Np TiO₂ 16%.

En ambas situaciones, ya sea con nanopartículas centradas o dispersas en la probeta, los esfuerzos máximos se localizan alrededor de las nanopartículas esféricas. Este fenómeno se debe al proceso de redistribución de carga que ocurre cuando se aplica fuerza al material, y es más evidente en las áreas cercanas a estas inclusiones de geometría esférica.

4.3.1.1 Curvas Esfuerzo-Deformación

Esta sección muestra las curvas esfuerzo-deformación de los sistemas nanohíbrido estudiados. La Tabla 4.3 presenta las curvas de esfuerzo-deformación

obtenidas mediante simulación numérica de las probetas de material nanohíbrido, mostrando los casos con nanopartículas ubicadas en el centro y dispersas. Estos resultados evidencian que a medida que se incrementa el porcentaje de esferas en la matriz, tanto el esfuerzo como la deformación disminuyen.

Punto seleccionado para la obtención de curvas en los modelos de los sistemas

Para la obtención de le curva esfuerzo-deformación, se realizó un gráfico en 1D donde se observa el punto referencia establecido en los parámetros. En la figura 4.11 se muestra el punto seleccionado



Figura 4.10 Punto seleccionado en el modelo para la gráfica curva esfuerzo- deformación.

En la Tabla 4.3 se muestra a continuación las curvas esfuerzo deformación obtenidas mediante la simulación numérica con las nanopartículas situadas en el centro y dispersas respectivamente, en donde se demuestra que entre más porcentaje de esferas se tenga en la matriz es menos el esfuerzo y la deformación.





Tabla 4.3 Curvas Esfuerzo-Deformación con simulación numérica de los sistemas nanohíbridos.

A continuación, en las Figuras 4.12 y 14.13, se presentan las curvas esfuerzodeformación de los sistemas nanohíbridos Nylon 6,6/TiO₂, con las nanopartículas situadas en el centro y dispersas en la matriz. Estos resultados muestran una disminución tanto en el esfuerzo como en la deformación a medida que aumenta el porcentaje de nanopartículas de TiO₂ en la matriz. Además, se observa que, para ambas disposiciones del material agregado, el límite elástico o límite de proporcionalidad disminuye a medida que aumenta el porcentaje de TiO₂.



Figura 4.11 Curvas esfuerzo deformación: Nylon 6,6/Np TiO2- Centro.



Figura 4.12 Curvas esfuerzo deformación: Nylon 6,6/Np TiO2- Dispersas.

La Figura 4.14 exhibe una comparativa entre las curvas de esfuerzo-deformación del Nylon 6,6 y los sistemas nanohíbridos con nanopartículas en el centro del material. Se observa que al incorporar las nanopartículas de TiO₂, tanto el esfuerzo

como la deformación disminuyen significativamente, con una diferencia que oscila entre un 4 a 6 % en el caso de las probetas con nanopartículas dispersas.



Figura 4.13 Curvas comparativas esfuerzo deformación: Nylon 6,6-Sistemas híbridos.

Al analizar las curvas de esfuerzo-deformación de cada uno de los sistemas con distintas posiciones de las nanopartículas, se evaluó la pendiente en la región elástica para calcular el módulo de Young. Cuyos valores se muestran en la Tabla 4.4 a continuación. Al analizar los datos presentados en la Tabla 4.4, se observa una variación en el módulo de elasticidad que oscila en el rango de aproximadamente del 4% al 6% en el caso de las probetas con nanopartículas dispersas. Por otro lado, en las probetas con nanopartículas centradas, la variación se encuentra en el intervalo de aproximadamente del 2% al 8%. La variación promedio del módulo elástico en todos los sistemas estudiados del material híbrido es de alrededor del 5% en comparación con el Nylon 6,6.

Sistema	Módulo de Young Centradas N/m ²	Módulo de Young Dispersas N/m²
Nylon 6,6	16,071	16,071
Nylon 6,6/Np TiO ₂ -4%	16,490	15,087
Nylon 6,6/Np TiO ₂ -8%	16,415	15,163
Nylon 6,6/Np TiO ₂ -12%	16,122	15,403
Nylon 6,6/Np TiO ₂ -16%	15,597	15,639
Nylon 6,6/Np TiO ₂ -20%	14,768	16,754

Tabla 4.4 Módulo de Young de los sistemas híbridos.

El material nanohíbrido muestra una reducción en su módulo de Young aproximadamente del 10% a medida que aumenta el porcentaje de nanopartículas. En contraste con el Nylon 6,6, el material nanohíbrido es más elástico y flexible en respuesta a las fuerzas aplicadas.

4.4 Conclusiones

En esta tesis se han expuesto los resultados obtenidos del estudio realizado al caracterizar el comportamiento de material híbrido Ny66/TiO₂ sometido a tensión para determinar la rigidez a la tensión del material, se desarrollaron modelos de probetas en 3D para obtener la cuerva esfuerzo-deformación a la tensión de cada uno de los materiales del compuesto híbrido, así como del híbrido. Se realizaron diferentes arreglos en composición y disposición de los refuerzos metálicos nano particulados. El análisis por simulación numérica, por elementos finitos, se llevó a cabo siguiendo las recomendaciones de la ASTM para ensayos de tensión.

Podemos mencionar los siguientes puntos como conclusiones principales:

- Es posible obtener las propiedades mecánicas, por simulación de elemento finito de:
 - ✓ Nylon 6,6
 - ✓ TiO₂

✓ Material nanohíbrido Nylon 6,6/ Np TiO₂

Las curvas de esfuerzo deformación obtenidas por simulación muestran una ligera reducción (inferior al 10%) en el módulo de Young del material nanohíbrido en comparación con el Nylon6,6. El módulo de elasticidad promedio de todos los sistemas del material nanohíbrido estudiados en esta tesis es de 15,609 MPa, superando el valor de 0,5-2 MPa que se encuentra reportado en la literatura para el cartílago articular, presentando así mayor rigidez y menor deformación a fuerzas aplicadas, propiedades que se buscan en materiales para prótesis. Con respecto a la propiedad mecánica del modulo de elasticidad, se concluye que el material nanohíbrido Nylon 6,6/TiO2 puede ser usado como material para aplicación en prótesis de cartílago.

4.5 Recomendaciones

Los resultados presentados en esta tesis son importantes porque representan que se pude realizar aproximación de los resultados obtenidos con simulación numérica y resultados en literatura. Esto nos motiva a recomendar el obtener por simulación numérica el comportamiento del Material nanohíbrido Nylon6,6/NpTiO₂ en compresión detalladamente. Para el estudio futuro del mismo, poder aplicar el material estudiado en esta tesis como biocompatible en el cuerpo humano. Se recomienda la introducción de hidroxiapatita y hacer por último la comparación de resultados entre simulación numérica y los obtenidos en la síntesis en el laboratorio con sus respetivas caracterizaciones.

REFERENCIAS

- AB, C. (2012). C omsol Multiphysics User's Guide.
- AB, C. (2018). COMSOL Multiphysics Reference Guide. 1742.
- Aguirre Guerrero, D. (2011). Estudio De La Vida a La Fatiga De Un Acero Hsla.
- Álvarez, V., Monjil, F., & Soto, V. (2002). *Bioquímica y biología del cartílago articular*. 391–400.
- Arango Santander, S., & Ramírez Vega, C. (2016). Titanio: aspectos del material para uso en ortodoncia. *Revista Nacional de Odontología*, 12(23), 63–71.
- Ashby, M. F., & Bréchet, Y. J. M. (2003). Designing hybrid materials. *Acta Materialia*, *51*(19), 5801–5821.
- Bhaskar, V. (2013). Introduction to COMSOL Multiphysics Introduction to Comsol Multiphysics.
- Borisova, B., Sanchez, A., & Villalonga, R. (2015). *Graphene-Based Hybrid* Nanomaterials for Electrochemical Biosensors. 28(3), 25–28.
- Brostow, W., & Singh, R. P. (2004). Mechanical Performance of Plastics. Encyclopedia of Polymer Science and Technology, 1–35.
- Buckwalter, JA; Mankin,HJ; Grodzinsky, A. (2005). 26_BuckwalterArticularCartilage.pdf. In *Articular Cartilage and Osteoarthritis* (Vol. 54, pp. 466–480).
- Cael, C. (2012). Osteología y artrología. Anatomía Funcional, 27-48.
- Campos, F. (2002). El cartílago articular: aspectos mecánicos y su repercusión en la reparación tisuCampos, F. (2002). El cartílago articular: aspectos mecánicos y su repercusión en la reparación tisular. 380–390.lar. 380–390.
- Chen, J., Chen, H., Li, P., Diao, H., Zhu, S., Dong, L., Wang, R., Guo, T., Zhao, J., & Zhang, J. (2011). Simultaneous regeneration of articular cartilage and subchondral bone in vivo using MSCs induced by a spatially controlled gene delivery system in bilayered integrated scaffolds. *Biomaterials*, 32(21), 4793–
- Chiravarambath, S. S. (2012). Finite Element Modeling of Articular Cartilage at different length scales. *ProQuest Dissertations and Theses, April*, 173.
- Cortés, M. G. R., Díaz, B. M. V., & Perilla, y J. E. (2010). Biopolymers as materials for developing products in pharmaceutical applications and biomedical uses. *Ingeniería e Investigación*, 28(1), 57–71.

Cost, M., Software, E., & More, M. (2015). SOLIDWORKS 2015 Software. 1-9.

- Datta, A., & Rakesh, V. (2009). An Introduction to Modeling of Transport Processes. *An Introduction to Modeling of Transport Processes*.
- David, A., & Becerril, L. (2014). Obtención de curvas esfuerzo-deformación verdaderas del PP y copolímeros en bloque a velocidad de deformación constante aplicando correlación de imágenes digitales Director: Resumen.
- De Clippel, F., Dusselier, M., Van De Vyver, S., Peng, L., Jacobs, P. A., & Sels, B. F. (2013). Tailoring nanohybrids and nanocomposites for catalytic applications. *Green Chemistry*, 15(6), 1398–1430.
- Eliades, T. (2007). Orthodontic materials research and applications: Part 2. Current status and projected future developments in materials and biocompatibility. *American Journal of Orthodontics and Dentofacial Orthopedics*, 131(2), 253–262.
- Farooqi, A. R., Bader, R., & Van Rienen, U. (2019). Numerical Study on Electromechanics in Cartilage Tissue with Respect to Its Electrical Properties. *Tissue Engineering - Part B: Reviews*, 25(2), 152–166.
- Ferrándiz, M. O. (2020). Regeneración de cartílago mediante el uso de células madre de pulpa dental humanas (hDPSCs). 15.
- Fonseca, J. (2017). ¿Energía Libre? Motor Magnético Impulsado Por Imanes Permanentes. 41–45.
- Froes, F. H., & Bomberger, H. B. (1985). Beta Titanium Alloys. *Journal of Metals*, *37*(7), 28–37.
- Fuentes Boquete, I. M., del Carmen Arufe Gonda, M., Díaz Prado, S. M., Hermida Gómez, T., de Toro Santos, F. J., & Blanco García, F. J. (2007). Tratamiento de lesiones del cartílago articular con terapia celular. *Reumatología Clínica*, *3*, S63–S69.
- Galli, K., & Pelozo, S. (2017). Órtesis Y Prótesis. Auditoría Médica, 1, 6 y 10.
- Gil, P. (2019). Articulaciones Humanas Mediante Modelos Fotoelásticos 2D Y.
- Haines et al, 2019, goleman, daniel; boyatzis, Richard; Mckee, A., Haines et al, 2019, goleman, daniel; boyatzis, Richard; Mckee, A., Haines et al, 2019, & goleman, daniel; boyatzis, Richard; Mckee, A. (2019). Parylene Scaffold for Cartilage Lesion. *Journal of Chemical Information and Modeling*, *53*(9), 1689– 1699.
- Hermosillo Arteaga, A., Romo, M. P., Magaña, R., & Carrera, J. (2017). Automatic remeshing algorithm of triangular elements during finite element analyses. 10.23967/j.Rimni.2017.5.003.

- Hu, J. C. Y., & Athanasiou, K. A. (2003). Structure and Function of Articular Cartilage | SpringerLink. 73–74.
- Huang, H. H. (2005). Variation in corrosion resistance of Nickel-titanium wires from different manufacturers. *Angle Orthodontist*, 75(4), 661–665.
- Izquierdo, D., Zunino, J. H., & Semiglia, G. (2006). Evaluación experimental en ratas del comportamiento biológico y mecánico del Nylon 66 para cerclaje en ortopedia. *Archivos de Medicina Veterinaria*, *38*(3), 277–281.
- JACOBS, A., RENAUDIN, G., FORESTIER, C., NEDELEC, J.-M., & DESCAMPS, S. (2020). Biological properties of copper-doped biomaterials for orthopedic applications: a review of antibacterial, angiogenic and osteogenic aspects. *Acta Biomaterialia*.
- Jacobson, A. (2001). Orthodontic materials: Scientific and clinical aspects. *American Journal of Orthodontics and Dentofacial Orthopedics*, *119*(6), 672–673.
- Kandregula, G., Chinthakuntla, A., Rao, K., & Rajendar, V. (2014). Green Synthesis of TiO 2 Nanoparticles Using Hibiscus Flower Extract. International Conference on Emerging Technologies in Mechanical Sciences, May, 79–82.
- Kapanen, A., Ilvesaro, J., Danilov, A., Ryhänen, J., Lehenkari, P., & Tuukkanen, J. (2002). Behaviour of Nitinol in osteoblast-like ROS-17 cell cultures. *Biomaterials*, 23(3), 645–650.
- Kolokitha, O. E., & Chatzistavrou, E. (2009). A severe reaction to Ni-containing orthodontic appliances. *Angle Orthodontist*, *79*(1), 186–192.
- Kowalewska, K., Sipa, K., Leniart, A., Skrzypek, S., & Poltorak, L. (2020). Electrochemistry at the liquid–liquid interface rediscovers interfacial polycondensation of nylon-6,6. *Electrochemistry Communications*, *115*(April), 106732.
- Leeuwenburgh, S. C. G., Jansen, J. A., Malda, J., Dhert, W. A., Rouwkema, J., van Blitterswijk, C. A., Kirkpatrick, C. J., & Williams, D. F. (2008). Trends in biomaterials research: An analysis of the scientific programme of the World Biomaterials Congress 2008. *Biomaterials*, 29(21), 3047–3052.
- Lim, A., Protsenko, D. E., & Wong, B. J. F. (2010). Methods for evaluating changes in cartilage stiffness following electromechanical reshaping. *Photonic Therapeutics and Diagnostics VI*, 7548, 754821.
- Miller, M. D., & Jensen, F. (1989). Intensities. 12, 4495–4502.
- Mow, V. C., Ratcliffe, A., & Robin Poole, A. (1992). Cartilage and diarthrodial joints as paradigms for hierarchical materials and structures. *Biomaterials*, *13*(2), 67–97.

- Nordin, M., & Frankel, V. (2004). *Biomecanica Basica del Sistema Muscoesqueletico-Nordin.pdf* (p. 345).
- Ofek, G., & Athanasiou, K. A. (2007). Micromechanical properties of chondrocytes and chondrons: Relevance to articular cartilage tissue engineering. *Journal of Mechanics of Materials and Structures*, 2(6), 1059–1086.
- Pomarico, A., Roselli, G., & Caltabiano, D. (2016). *Modelling of Viscoelastic Phenomena in Concrete Structures. Figure 2*, 3–5.
- Quagliano, J. (2014). Tracción en películas de polímero biodegradable. September.
- Reyes, R. (2019). Biomateriales, factores de crecimiento y células para regeneración de cartílago. Tesis Doctoral (2017). October 2017.
- Sakai, N., Hagihara, Y., Hashimoto, C., Komori, M., Sawae, Y., & Murakami, T. (2015). An estimation of mechanical propertes of articular cartilage for biphasic finite element analyses. *Journal of Biomechanical Science and Engineering*, *10*(4), 1–12.
- Sorki, A., Guo, Y., Ihara, M., Manzhos, S., & Wang, H. (2022). *Non-invasive improvement of machining by reversible electrochemical doping: a proof of principle with computational modeling. August*, 1–21.
- Steinemann, S. G. (1998). Titanium The material of choice? *Periodontology 2000*, *17*(1), 7–21.
- Sun, D. D., Guo, X. E., Likhitpanichkul, M., Lai, W. M., & Mow, V. C. (2004). The influence of the fixed negative charges on mechanical and electrical behaviors of articular cartilage under unconfined compression. *Journal of Biomechanical Engineering*, 126(1), 6–16.
- Trujillo Martín, E. (2005). Canales de agua e iones en el cartílago articular. *Rev. Esp. Reumatol. (Ed. Impr.)*, 13–17.
- Van Noort, R. (1987). Titanium: The implant material of today. *Journal of Materials Science*, 22(11), 3801–3811.
- Veterinaria, F. D. E., & Izquierdo, D. (2004). Evaluación Biologica, Mecánica Y Mcrobiologica Del Nylon 6,6 Como Material De Cerclaje.
- Wyke, B. (2005). The neurology of joints. *Annals of the Royal College of Surgeons of England*, *41*(1), 25–50.
- Yanilmaz, M., Zhu, J., Lu, Y., Ge, Y., & Zhang, X. (2017). High-strength, thermally stable nylon 6,6 composite nanofiber separators for lithium-ion batteries. *Journal of Materials Science*, *5*2(9), 5232–5241.

Zarria-Romero, J., Osorio, A., Pino, J., Shiga, B., & Vivas-Ruiz, D. (2017). Effect of

the industrial nanoparticles TiO2, SiO2 and ZnO on cell viability and gene expression in red bone marrow of mus musculus. *Revista Peruana de Medicina Experimental y Salud Publica*, *34*(3), 436–444.
ANEXOS



ANEXO A Probeta para blanco Nylon 6,6



ANEXO B Probeta para blanco TiO₂



ANEXO C. Probeta para Material híbrido Nylon 6,6/TiO₂ en escala 1:10,000



INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS

Jefatura de Posgrado en Ingeniería y Ciencias Aplicadas

minimum minimum CilicAp

Cuernavaca, Morelos, 24 de octubre de 2023.

DR. JUAN CARLOS GARCÍA CASTREJÓN COORDINADOR DEL POSGRADO EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS P R E S E N T E

Atendiendo a la solicitud para emitir DICTAMEN sobre la revisión de la TESIS titulada: SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL SISTEMA NYLON/ÓXIDO DE TITANIO PARA SU POSIBLE APLICACIÓN COMO PROTESIS., que presenta la alumna NANCY BADILLO HERNÁNDEZ, para obtener el título de MAESTRÍA EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS.

Nos permitimos informarle que nuestro voto es **APROBATORIO.**

Atentamente **Por una humanidad culta** Una universidad de excelencia

DRA. MARISOL GUIZADO RODRÍGUEZ

DRA. MIRIAM FLORES DOMINGUEZ

DR. MIGUEL ANGEL HERNÁNDEZ GALLEGOS

DR. JORGE URUCHURTU CHAVARÍN

DRA. ELSA CARMINA MENCHACA CAMPOS

Se adiciona efirma UAEM



Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa, Cuernavaca Morelos, México, 62209 Tel. (777) 329 70 00, ext. 6208 / raquel.sotelo@uaem.mx

Una universidad de excelencia



Se expide el presente documento firmado electrónicamente de conformidad con el ACUERDO GENERAL PARA LA CONTINUIDAD DEL FUNCIONAMIENTO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS DURANTE LA EMERGENCIA SANITARIA PROVOCADA POR EL VIRUS SARS-COV2 (COVID-19) emitido el 27 de abril del 2020.

El presente documento cuenta con la firma electrónica UAEM del funcionario universitario competente, amparada por un certificado vigente a la fecha de su elaboración y es válido de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ESTADO DE MORELOS emitidos el 13 de noviembre del 2019 mediante circular No. 32.

Sello electrónico

JORGE URUCHURTU CHAVARIN | Fecha: 2023-11-15 12:20:25 | Firmante

cgzHJ6S9IRXj5Nsp+LmorefQ/UxgtxsRdyMa0ejUABPm5Fp5nQmKQSu/8X7YyRASFocLASzwUI+puRG0msasno+EvxFuX/4UkziuG5flhJVvWdSJniJRLOlwdR5CYiqn6JDSrmBkp MAcea83YZtud8eEU4qvnSh8D6QMmwCr0dl4DzK539TlpJZ7JbaSRIzXr1MsVaFV6aoyuq1y6hjvUlnPs8yPXz0n0MGUR97V/u7cp5CD/CYyEbdv9g5uzc4C8nBTGB+Dwf9cALhP VaCH/BwN3Q5t1/30r40Ftu33UsGRPerc+PhKkgB50MQUOf7bZdtLqm7kKm7noYxHeI182w==

ELSA CARMINA MENCHACA CAMPOS | Fecha: 2023-11-15 13:08:09 | Firmante

eCvHA7RHmhxrOA0L0hIFWAgclAjrhZCoKG0Dm2IWgmQ2V/n6ewxymCw3kDUwci7bcVgfaGm1P+SPZQhvlcvDbMIYRUnYyg+Yu9egidBBHT7POgZ3oCAXmEn/aaze88oz1Avp UJuLuHsPvKzlCGqjUtY1FVypMwLkfRt3AM/9hSMEodVMwp1QntrV0oCCxekOpkdU9j5aVZ8vR/sTSZ+rQe84ciceKJjRkjnwBns76ZCX0rK7LCUdLmKnOfiqueU6sPXkvNgXQxCFr paSIdlclYPqVMPYC4vuB5xBiCaOtBEj5H+65nJZ76EFYNYp9OAPKbS7hP4MgWtEKhT3sc9oBA==

MIRIAM FLORES DOMÍNGUEZ | Fecha: 2023-11-15 15:39:27 | Firmante

gh1m4dQTELF7cbS6cWIXIyZMQUFMfxZ8X7tndZwf+ksK7fNz0cjTWkjKip9X32pN5bCmPXLYOjHLFawT1WYpr5JMgQfxjxN3hHykQA5ZY5YBEZHz3mnBBRrLEIMio8XgxpGce3 uVU9ROe/VkoNojEZ/2Ahyp45/+n7QxeFMCrF8mO7OmPOprMd8H9YQ4OzYmODCICChG3qf+000vi5Kfl2nVz6FZUREaPMM2kpfcbVQZcSdPh5ibt+tcB+evy1fwkzEEbxlQw2Xjg ktrSG2JXtyIM92UcVco7D0bgs/PMczG2Wf7/VjJ2qaYy8AM5htVDFi+cq61sz1qoHu84FIx6A==

MARISOL GUIZADO RODRIGUEZ | Fecha: 2023-11-15 16:31:13 | Firmante

iDnUhFeINmbfXv/FmsJ8Kozgk2pG6D6tTJCcoQNs4zAGnLsB8cVCYZGqV4kaMZmZTb7Y5vfyyYhedF/Z4UUCh7F/c1rY1flq+GEtsKqAchOkzovoD94biCdYXo4LLjJrGGnC/loefzh kuj1Zr4yNnGVJHm11n5lj412wuqTryovdjdowhPKt3ngdi5l6l3b+086ttouMam0gKTsnCebYW9FavUOnWH1bGcTiGYHRhgaGFLt6uCUCSy3M/nIpC+57qwiWqog3bZchK3uqRk16Y Fk5pLT0gAL6ODKnJRIzELyJJSieh/xj5XsLsD4NWBz4oXWXVL0a0QpGiX6/LYs0ug==

MIGUEL ÁNGEL HERNÁNDEZ GALLEGOS | Fecha: 2023-11-16 09:06:30 | Firmante

jlvAXuvEfEXgklEtNvMCC/MWG190JclG2xf1wG/toUkApQM6q4+ElnYJ/sWN49A33lWL0OscmBR/VfVoDpRDa3JYXv65MDxzayBMl8enQsu06mUS9iKGATencch87s1EmSY0mm Cn4j+lamyuEjVO9IZSireynOWrAKQFA7wCTW1l0Rgu37wfzyiVxxn2OgucHAwc0Ji4SQOSGtYIze4f1LbirgYsvJxoNC1DPSHhef91eKx1TMT/yBg1i8LcWJC9tDXE2jgYRLPhQtG7F /tr6tR1wQTIBp+rlF4wxD0+CzXE5fGkQyieHOG6CrXcGzjBc3nsIY298TKK2opuYDkebA==

Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o

escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



Q4h5GtISX

https://efirma.uaem.mx/noRepudio/aY8dmjuP3VEWcoOkPLsFP3Pcs0K6TpT4



Una universidad de excelencia