

INSTITUTO TECNOLÓGICO DE CD. JUÁREZ
DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO E INVESTIGACIÓN



**SIMULACION COMPUTACIONAL DE UN MATERIAL COMPUESTO
A BASE DE CONCRETO Y POLÍMEROS RECICLADOS COMO
ALTERNATIVA SUSTENTABLE.**

TESIS

QUE PRESENTA

ING. ALEJANDRO VILLANUEVA RODRIGUEZ

**COMO REQUISITO PARCIAL
PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN INGENIERÍA INDUSTRIAL**

CD. JUÁREZ, CHIH.

AGOSTO 2022



EDUARDO RAFAEL POBLANO OJINAGA
JEFE DE LA DIVISIÓN DE ESTUDIOS
DE POSGRADO E INVESTIGACIÓN
P R E S E N T E.

Por medio de la presente se hace constar que la tesis denominada "**SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE UN MATERIAL COMPUESTO A BASE DE CONCRETO Y POLÍMEROS RECICLADOS COMO ALTERNATIVA SUSTENTABLE**", presentado por el(la) alumno(a) **C. ALEJANDRO VILLANUEVA RODRÍGUEZ** con número de control **M20110415**, para obtener el grado de Maestro(a) en el programa de Maestría en Ingeniería Industrial, ha sido revisada y aprobada en su forma y contenido por los suscritos, por lo que no existe ningún inconveniente para la impresión de la misma.

Se extiende la presente, constancia a petición de él(la) interesado(a) y para los fines legales que a él(ella) convengan, en Ciudad Juárez, Chihuahua, a los ocho días del mes de agosto del año dos mil veintidós.

ATENTAMENTE

"Excelencia en Educación Tecnológica"

MARCO TULLIO GALLO ESTRADA
DIRECTOR

ANA ISELA GARCÍA ACOSTA
CO-DIRECTORA

HUMBERTO GARCÍA CASTELLANOS
REVISOR

ROSA MARÍA REYES MARTÍNEZ
REVISORA

instituto Tecnológico de Ciudad Juárez

25 AGO 2022

Departamento de
Servicios Escolares

C.c.p. División de Estudios de Posgrado e Investigación
Alumno(a)

Instituto Tecnológico de Cd Juárez

RECIBIDO
24 AGO. 2022

**COORDINACIÓN
DE TITULACIÓN**



TEC DE JUÁREZ
Escuela al servicio
Institución Tecnológica



ESTRADA
100%
LIBRE DE
PLÁSTICO



Av. Tecnológico 1340 Fracc. El Crucero C.P. 32500 Cd. Juárez, Chihuahua Tel. 01 (656) 888 4500
e-mail: comunicación_y_difusion@cdjuarez.tecnm.mx | technm.mx | cdjuarez.tecnm.mx



2022 Flores
Año de Magón
PRECURSOR DE LA REVOLUCIÓN MEXICANA



Instituto Tecnológico de Ciudad Juárez

Ciudad Juárez, Chihuahua, **08/agosto/2022**

C. YADIRA DOZAL ASSMAR
JEFA DE LA DIVISIÓN DE ESTUDIOS PROFESIONALES
P R E S E N T E.

Me permito hacer de su conocimiento que se le autoriza a él **C. ALEJANDRO VILLANUEVA RODRÍGUEZ** con número de control **M20110415**, la defensa de su tesis para para obtener el grado de Maestro en el programa de Maestría en Ingeniería Industrial, quien desea titularse por medio de la TESIS.

El tema a desarrollar será denominado **"SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE UN MATERIAL COMPUESTO A BASE DE CONCRETO Y POLÍMEROS RECICLADOS COMO ALTERNATIVA SUSTENTABLE"**, quedando conformado su jurado de la siguiente manera:

- Presidente: Marco Tulio Gallo Estrada
- Secretaria: Ana Isela García Acosta
- Vocal: Humberto García Castellanos
- Vocal Suplente: Rosa María Reyes Martínez

Instituto Tecnológico de Ciudad Juárez

25 AGO 2022

**Departamento de
Servicios Escolares**

Sin otro particular de momento, me es grato enviarle un cordial saludo.

ATENTAMENTE

"Excelencia en Educación Tecnológica"

EDUARDO RAFAEL POBLANO OJINAGA
JEFE DE LA DIVISIÓN DE ESTUDIOS
DE POSGRADO E INVESTIGACIÓN

C.c.p. Departamento de Servicios Escolares
ERPO/dmsp

Instituto Tecnológico de Ciudad Juárez

RECIBIDO
24 AGO. 2022

**COORDINACIÓN
DE TITULACIÓN**



TEC DE JUÁREZ



Av. Tecnológico 1340 Fracc. El Crucero C.P. 32500 Cd. Juárez, Chihuahua. Tel. 01 (656) 688-2500
e-mail: comunicación_y_difusion@cdjuarez.tecnm.mx | tecnm.mx | cdjuarez.tecnm.mx



**2022 Flores
Magón**
Año de Magón
PRECURSOR DE LA REVOLUCIÓN MEXICANA



Instituto Tecnológico de Ciudad Juárez

Ciudad Juárez, Chihuahua, **08/agosto/2022**

Oficio N°: DEPI/043/2022

Asunto: Autorización de Impresión de Tesis

**C. ALEJANDRO VILLANUEVA RODRÍGUEZ
CANDIDATO AL GRADO DE MAESTRO EN
MAESTRÍA EN INGENIERÍA INDUSTRIAL
P R E S E N T E.**

Por este conducto, tengo el agrado de comunicarle que el Comité Tutorial asignado a su trabajo de Tesis titulado "**SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE UN MATERIAL COMPUESTO A BASE DE CONCRETO Y POLÍMEROS RECICLADOS COMO ALTERNATIVA SUSTENTABLE**" ha informado a esta División de Estudios de Posgrado e Investigación, que está de acuerdo con el trabajo presentado. Por lo anterior se le autoriza se proceda con la **IMPRESIÓN DEFINITIVA DE SU TRABAJO DE TESIS.**

Esperando que el logro del mismo sea acorde con sus aspiraciones profesionales, reciba un cordial saludo.

ATENTAMENTE

Excelencia en Educación Tecnológica

**C. EDUARDO RAFAEL POBLANO OJINAGA
JEFE DE LA DIVISIÓN DE ESTUDIOS
DE POSGRADO E INVESTIGACIÓN**

C.c.p. Departamento de Servicios Escolares
División de Estudios Profesionales

ERPO/dmsp



TEC DE JUÁREZ
Instituto de Investigación y Desarrollo Tecnológico



Av. Tecnológico 1340 Fracc. El Crucero C.P. 32500 Cd. Juárez, Chihuahua. Tel. 01 (656) 688-2500
e-mail: comunicación_y_difusion@cdjuarez.tecnm.mx | tecnm.mx | cdjuarez.tecnm.mx

Instituto Tecnológico de Ciudad Juárez

25 AGO 2022

**Departamento de
Servicios Escolares**

Instituto Tecnológico de Cd Juárez

RECIBIDO
24 AGO. 2022

**COORDINACIÓN
DE TITULACIÓN**



2022 Flores
Año de Magón
PRESENCIA DE LA REVOLUCIÓN MEXICANA

Instituto Tecnológico de Ciudad Juárez

División de Estudios de Posgrado e Investigación

CARTA CESIÓN DE DERECHOS

En la Ciudad de Juárez, Chihuahua; siendo el día 30 del mes de Agosto del año 2022, el (la) que suscribe C. Alejandro Villanueva R. alumno(a) del Programa de **Maestría en Ingeniería Industrial**, con número de control M20110415, adscrito(a) a la **División de Estudios de Posgrado e Investigación**, manifiesto(a) que es el (la) autor(a) intelectual del presente trabajo de Tesis bajo la dirección del (de la, de los) Dr. Marco T. Gallo y cede los derechos del trabajo titulado Simulación Computacional de un Material Compuesto a Base de Concreto y Polímeros, Reciclados como Alternativa Sustentable. al Instituto Tecnológico de Ciudad Juárez para su difusión, con fines académicos y de investigación.

Los usuarios de la información no deben reproducir el contenido textual, gráficas o datos del trabajo sin el permiso expreso del (de la) autor(a) y/o director(es) del trabajo. Este puede ser obtenido escribiendo a las siguientes direcciones avillan@hotmail.com. Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.



Nombre y firma del alumno(a)

AGRADECIMIENTOS

A mis docentes que aportaron conocimiento y experiencia en esta travesía de preparación y aprendizaje, Principalmente a mi director de tesis el Dr. Marco Tulio Gallo Estrada por toda la ayuda docente y personal, por su compromiso e interés en mi preparación y aprendizaje, por su guía y dedicación en este proyecto y en toda mi carrera de posgrado.

A mi querida esposa por su apoyo incondicional, su soporte y sacrificio para que yo saliera adelante a pesar de las adversidades, por todos esos momentos de convivencia familiar cambiados por horas de estudio, haciéndose a un lado para que yo enfocara mi atención ininterrumpida en mi propio aprendizaje. Gracias por todas esas palabras de aliento que enriquecieron mi espíritu y me dieron la fortaleza cuando más la necesitaba, gracias por ese compromiso tan fuerte, por todo el amor demostrado y tu interés por mi superación.

A mis padres por darme la vida, abrirme paso y mostrarme el camino para poder ser el hombre que soy ahora y haber podido llegar hasta aquí, gracias por sus consejos y por enseñarme que las caídas son parte de la vida y levantarse es la vida misma.

Al Doctor Joel Sánchez Badillo por su valiosa colaboración y ayuda incondicional durante la investigación y simulación y por su soporte durante la exposición internacional.

Al Instituto Tecnológico de Cd. Juárez por aceptarme en el programa de posgrado y haberme dado la oportunidad de brindar mis conocimientos y experiencias como profesor de ingeniería y con eso solventar mis estudios.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por su apoyo económico a través de la beca 1044902, así como al Tecnológico Nacional de México.

Agradecemos al Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México (LNS), perteneciente al padrón de laboratorios nacionales CONACYT, por los recursos computacionales, el apoyo y la asistencia técnica brindados, a través del proyecto No. 202201002N."

CONTENIDO

AGRADECIMIENTOS	2
CONTENIDO.....	4
LISTA DE FIGURAS	6
LISTA DE TABLAS.....	9
1.1. Resumen.....	10
2. INTRODUCCIÓN	11
2.1. Antecedentes.....	13
2.1.1. Los Elastómeros.....	13
2.1.2. Los Plásticos.....	19
3. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	24
3.1. Descripción del Problema.....	24
3.2. Pregunta de Investigación.....	29
3.3. Hipótesis.....	29
3.4. Objetivo General	29
3.5. Objetivos Específicos.....	29
3.6. Justificación.....	30
3.7. Delimitación.....	32
4. MARCO TEÓRICO	33
4.1. Procesos utilizados para el Reciclaje de Llantas y plástico.....	33
4.1.1. Reciclaje de Neumáticos.....	33
4.1.2. Reciclado de Plásticos.....	39
4.2. Propiedades y Selección de Materiales.....	42
4.2.2. Materiales poliméricos utilizados en el reciclaje.....	48
4.2.3. Caucho sintético.....	49

4.2.4.	Teraftalato de polietileno	50
4.2.5.	Polietileno	51
4.2.6.	Polipropileno	54
4.2.7.	Poliestireno.....	56
4.2.8.	Policloruro de Vinilo.....	58
4.2.9.	Poliuretano	61
5.	MATERIALES Y MÉTODOS	62
5.1.	Equipo de Cómputo y Software	62
5.2.	Metodología	64
5.2.1.	Dinámica Molecular.....	65
5.2.2.	Estructuras Geométricas y Campos de Fuerza moleculares	69
5.2.3.	Equilibración de los Sistemas: Cemento y compuestos a base de Cemento- Polímeros.....	72
5.2.4.	Cemento-polímeros: Simulación y propiedades.	74
6.	RESULTADOS.....	77
6.1.2.	Simulación Térmica a Escala Macroscópica.....	97
6.1.3.	Simulación Térmica.	98
	Conclusiones	103
7.	BIBLIOGRAPHY	104

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1.	MICROCOMPONENTES DE SILICIO	11
FIGURA 2.	CEMENTERIO DE NEUMÁTICOS EN LAS AFUERAS DE CD JUÁREZ.	15
FIGURA 3.	PISOS DE CAUCHO DECORATIVOS ANTIGOLPES MARCA E CORE	16
FIGURA 4.	PISTA DE ATLETISMO DE CAUCHO RECICLADO “DEPORGRASS”.	17
FIGURA 5.	SISTEMA DE CÉSPED ARTIFICIAL RECOMENDADO POR LA FIFA.	17
FIGURA 6.	CARRETERA EN USA HECHA CON ASFALTO MODIFICADO CON CAUCHO.....	18
FIGURA 7.	CONTAMINACIÓN POR PLÁSTICOS.....	19
FIGURA 8.	CLASIFICACIÓN Y APLICACIÓN DE PLÁSTICOS, ASÍ COMO SU FACILIDAD DE RECICLAJE.....	21
FIGURA 9.	PASILLO DE TABIQUES DE PLÁSTICO RECICLADO	22
FIGURA 10.	PARED DE BLOQUES FABRICADOS 100% CON PLÁSTICOS RECICLADOS	23
FIGURA 11.	MILLONES DE TONELADAS ANUALES DE NEUMÁTICOS DESECHADOS A NIVEL MUNDIAL.	24
FIGURA 12.	MILLONES DE TONELADAS ANUALES DE PLÁSTICO DESECHADO A NIVEL MUNDIAL.....	25
FIGURA 13.	LAPSO QUE TARDAN DIFERENTES POLÍMEROS EN DEGRADARSE.....	26
FIGURA 14.	COMPOSICIÓN DE NEUMÁTICOS.	27
FIGURA 15.	PERMEABILIDAD TÉRMICA DE MATERIALES.	31
FIGURA 16.	PLANTA DE PIROLISIS.....	36
FIGURA 17.	RESULTADO DEL PRIMER NIVEL DE TRITURACIÓN.....	37
FIGURA 18.	RALLADOR DE LLANTA	37
FIGURA 19.	RESULTADO DEL PRIMER NIVEL DE TRITURACIÓN.....	38
FIGURA 20.	GRANULADOR DE CAUCHO Y RESULTADO.	38
FIGURA 21.	PROCESO DE METANÓLISIS.....	41
FIGURA 22.	ARCILLA DIFERENTES COLORACIONES SEGÚN SU PUREZA	42
FIGURA 23.	BLOQUE PARA CONSTRUCCIÓN.	45
FIGURA 24.	COMPONENTES IMPORTANTES DEL CEMENTO.	48
FIGURA 25.	MOLÉCULA DE CONCRETO HIDRATADA	48

FIGURA 26.	ESTRUCTURA MOLECULAR DE SBR.....	49
FIGURA 27.	ESTRUCTURA MOLECULAR.	50
FIGURA 28.	ESTRUCTURA MOLECULAR DEL POLIETILENO	51
FIGURA 29.	HDPE Y LDPE.....	52
FIGURA 30.	IDENTIFICACIÓN DEL HDPE Y LDPE	53
FIGURA 31.	FORMAS ISÓMERAS DEL POLIPROPILENO.	55
FIGURA 32.	MOLECULA DE POLIESTIRENO.	57
FIGURA 33.	POLIMERIZACIÓN DEL CLORURO DE VINILO	59
FIGURA 34.	ENLACE DE URETANO.	61
FIGURA 35.	ESTRUCTURA DE LA TOBERMORITA 14 A. IZQUIERDA) VISTA FRONTAL, DERECHA) VISTA LATERAL..	69
FIGURA 36.	ESTRUCTURA DE LA TOBERMORITA 14 A. IZQUIERDA) VISTA FRONTAL, DERECHA) VISTA LATERAL.	70
FIGURA 37.	ESTRUCTURAS DE LAS CADENAS DE LOS POLÍMEROS: A) POLIETILENO TEREFTALATO (PET), B) POLIPROPILENO (PPL), C) POLIESTIRENO (PES), D) CAUCHO DE BUTADIENO-ESTIRENO (SBR).....	71
FIGURA 38.	CONFIGURACIÓN FINAL DEL CRISTAL DE CEMENTO OBTENIDO LUEGO DE 100 PS DE SIMULACIÓN EN EL ENSAMBLE NPT. CAJA TRICLÍNICA.	73
FIGURA 39.	CONFIGURACIÓN FINAL DEL CRISTAL DE CEMENTO OBTENIDO LUEGO DE UNA MINIMIZACIÓN EN CAJA PARALELEPÍPEDO.	74
FIGURA 40.	CONFIGURACIÓN FINAL DEL CRISTAL DE CEMENTO OBTENIDO LUEGO DE 100 PS DE SIMULACIÓN EN EL ENSAMBLE NPT EN CAJA TRICLÍNICA Y 100 PS EN CAJA PARALELEPÍPEDO.....	74
FIGURA 41.	ESTRUCTURA CEMENTO-POLÍMEROS-CEMENTO.....	75
FIGURA 42.	FIGURA 8. ESTRUCTURA EQUILIBRADA DEL SISTEMA CEMENTO-POLÍMEROS- CEMENTO LUEGO DE 50NS EN EL ENSAMBLE NPT.	76
FIGURA 43.	ESTRUCTURAS DEL SISTEMA CEMENTO-POLÍMEROS-CEMENTO A LO LARGO DE 50NS EN EL ENSAMBLE NVT..	78
FIGURA 44.	CONFIGURACIÓN DEL PET EN EL SISTEMA CEMENTO-POLÍMEROS-CEMENTO LUEGO DE 50 NS DE EQUILIBRACIÓN EN NVT.....	79
FIGURA 45.	CONFIGURACIÓN DEL PPL EN EL SISTEMA CEMENTO-POLÍMEROS-CEMENTO LUEGO DE 50 NS DE EQUILIBRACIÓN EN NVT.....	80

FIGURA 46.	CONFIGURACIÓN DEL PES EN EL SISTEMA CEMENTO-POLÍMEROS-CEMENTO LUEGO DE 50 NS DE EQUILIBRACIÓN EN NVT.....	80
FIGURA 47.	CONFIGURACIÓN DEL SBR EN EL SISTEMA CEMENTO-POLÍMEROS-CEMENTO LUEGO DE 50 NS DE EQUILIBRACIÓN EN NVT.....	81
FIGURA 48.	ENERGÍA DE INTERACCIÓN PARA EL SISTEMA CEMENTO-POLÍMEROS-CEMENTO A LO LARGO DE 50 NS.	81
FIGURA 49.	GRUPO BOTTOM (EN VERDE) Y TOP (EN AZUL) SELECCIONADOS EN EL SISTEMA CEMENTO-POLÍMEROS-CEMENTO.....	83
FIGURA 50.	CONFIGURACIÓN FINAL AL TÉRMINO DE LA SIMULACIÓN PULL NVT CON UN VALOR DE $F = 1500 \text{ KJ/MOL-NM}^2$	87
FIGURA 51.	METODOLOGÍA MÜLLER-PLATHE PARA EL CÁLCULO DE LA CONDUCTIVIDAD TÉRMICA.....	90
FIGURA 52.	CONDUCTIVIDAD TÉRMICA Y PERFIL DE TEMPERATURA	93
FIGURA 53.	ESTRUCTURA CEMENTO-POLÍMEROS-CEMENTO.....	94
FIGURA 54.	ESTRUCTURA CEMENTO-POLÍMEROS-CEMENTO PARA EL CÁLCULO DE LA CONDUCTIVIDAD TÉRMICA.	95
FIGURA 55.	CONDUCTIVIDAD TÉRMICA Y PERFIL DE TEMPERATURA OBTENIDO PARA EL SISTEMA CEMENTO-POLÍMEROS EN LAMMPS..	97
FIGURA 56.	BLOQUE DE CONCRETO.	99
FIGURA 57.	DIAGRAMA DE VON MISES PARA EL DIFERENCIAL DE TEMPERATURA EN BLOQUE DE CONCRETO. (CREACIÓN ORIGINAL CON SOLIDWORKS).	100
FIGURA 58.	BLOQUE DE COMPUESTO CEMENTO/POLÍMERO.....	101
FIGURA 59.	DIAGRAMA DE VON MISES PARA DIFERENCIAL DE TEMPERATURA EN BLOQUE DE COMPUESTO CONCRETO/POLIMERO.....	102

LISTA DE TABLAS

TABLA 1.	APLICACIONES DEL CAUCHO.	14
TABLA 2.	ESCALA DE RECICLAJE DE PLÁSTICOS.	21
TABLA 3.	PODER CALORÍFICO DE DIFERENTES COMBUSTIBLES.	34
TABLA 4.	PROCESO DE CONSTRUCCIÓN DE LADRILLOS CON ARCILLA.	43
TABLA 5.	SE UTILIZA UN MOLDE PARA OBTENER SU FORMA ESPERADA EN CALIENTE UTILIZANDO VAPOR SATURADO A 130 °C.	43
TABLA 6.	CARACTERÍSTICAS DEL LADRILLO COMÚN.	44
TABLA 7.	CARACTERÍSTICAS DEL CONCRETO.	46
TABLA 8.	CARACTERÍSTICAS DEL HULE DE ESTIRENO-BUTADIENO.	49
TABLA 9.	CARACTERÍSTICAS DEL TERAFTALATO DE POLIETILENO.	50
TABLA 10.	CARACTERÍSTICAS DEL POLIETILENO.	53
TABLA 11.	CARACTERÍSTICAS DEL POLIPROPILENO.	55
TABLA 12.	CARACTERÍSTICAS DEL POLIESTIRENO.	58
TABLA 13.	CARACTERÍSTICAS DEL POLICLORURO DE VINILO.	60
TABLA 14.	TABLA I VALORES DE LA ELONGACIÓN (STRAIN) Y TENSIÓN (STRESS) CALCULADOS PARA EL CEMENTO EN EL SISTEMA CEMENTO-POLÍMEROS A 300 K.	86
TABLA 15.	CONDUCTIVIDAD TÉRMICA RESULTANTE PROMEDIO PARA LA MEZCLA DE POLÍMEROS Y CONCRETO.	97

1.1. Resumen

En la actualidad, como tema recurrente, existe la necesidad de mejorar procesos e implementar sistemas que involucren el cuidado del medio ambiente, como la generación de energía verde y la reutilización de materiales con el fin de mejorar la ecología, la reutilización de materiales de desecho como los plásticos y el hule de llanta que son considerados frecuentemente como importantes contaminantes, marca un precedente en el cuidado del medio ambiente. Con este proyecto se pretende evaluar por simulación de computadora (en silicio) una aplicación para estos materiales; usando como base, hule de llanta de desecho y otros materiales plásticos reciclados para conseguir igualar o mejorar características y propiedades de productos existentes en la industria de la construcción y así utilizar las propiedades aislantes de calor, ruido y humedad de estos materiales y obtener productos con valor agregado como ladrillos, placas aislantes de calor para muros o piezas plásticas para piso, aportando así una alternativa de reciclado para estos desperdicios y ayudar a preservar el ecosistema de nuestro país y el mundo.

En este proyecto de investigación se llevó a cabo una simulación molecular de un sistema compuesto concreto-polímeros para determinar propiedades estructurales (módulo de Young), energía de interacción y conductividad térmica. Los resultados obtenidos muestran que, si es factible energéticamente combinar estos materiales poliméricos con el concreto, ya que el valor del Módulo de Young nos indica que el material compuesto presenta mayor estabilidad mecánica, y además el valor la conductividad térmica nos indica que el material compuesto presenta características de aislamiento térmico en comparación con materiales regularmente utilizados en la construcción.

2. INTRODUCCIÓN

La expresión: *En Silicio* (Por su término en inglés: *In silico*) se utiliza para describir un desarrollo computacional que adopta el significado: “hecho por computadora o vía Simulación computacional”. Esto debido a que los componentes electrónicos como microchips y microprocesadores de las computadoras están hechos de “Silicio”, el material usado en los semiconductores como se muestra en la Figura 1. Sin embargo, “in silico” hoy es un término universal utilizado en ingeniería y ciencia sin concernir el idioma, recogándose, incluso, como título de una revista especializada (*In Silico Biology*: <http://www.bioinfo.de/isb/>).

Las ventajas de la simulación computacional son diversas, reducción en los tiempos de producción, reducción de costos asociados a la experimentación, diseño de materiales a altas temperaturas y presiones, etc.

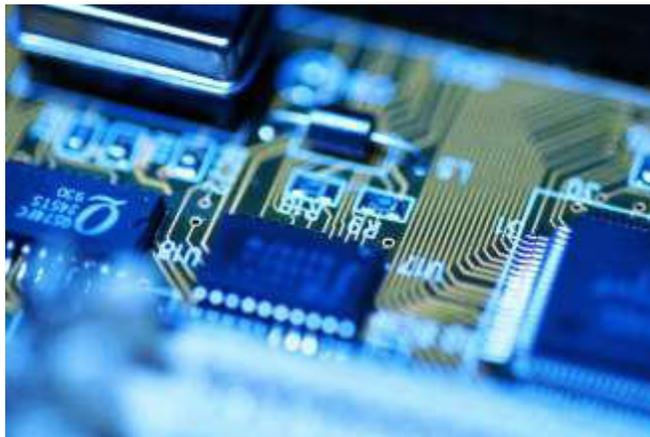


Figura 1. *Microcomponentes de silicio*

(https://es.wikipedia.org/wiki/In_silico)

En esta investigación se estudia el comportamiento estructural y energético de materiales compuestos a base de materiales construcción al combinarse con polímeros diversos provenientes de desechos de plásticos y neumáticos.

La problemática actual ocasionados por la contaminación debido al desperdicio de plásticos es alarmante, ya que se han encontrado micro plásticos y nano plásticos en diferentes especies marinas; capaces de producir efectos tóxicos a nivel celular en seres vivos incluidos los humanos, quienes ingieren estos micro plásticos al alimentarse de especies marinas. (Instituto Mexicano de Tecnología del Agua, 2020).

Otro importante impacto ambiental es la incineración de polímeros diversos como llantas y plástico de desecho que genera gases tóxicos que además, ocasionan calentamiento global, Según el Plan de Manejo de Neumáticos Usados de Desecho de la NOM-161-SEMARNAT-2011; Por lo que es importante una reutilización de estos materiales o bien el diseño de bioplásticos que sean fáciles de degradar.

La importancia de este proyecto radica en buscar la forma de incorporar los desperdicios a base de llantas de automóviles, botellas y otros productos plásticos al combinarlos o incorporarlos dentro de la matriz de materiales de construcción sin afectar las propiedades mecánicas de estos últimos y al mismo tiempo incrementando sus propiedades aislantes contribuyendo a la edificación de viviendas más sustentables con menores consumos energéticos en temporadas de invierno y calor.

2.1. Antecedentes.

Los polímeros, son descritos por Schwarz y Col. (Schwarz, 2002) como materiales provenientes de las actividades petroquímicas, conocidos como hidrocarburos orgánicos, debido a los dos elementos químicos que mayormente los conforman, el Hidrogeno y Carbono, aunque presentando también otros elementos en menor proporción. Polímero es una manera de citar la unión química de varias moléculas idénticas llamadas monómeros, una cadena de monómeros idénticos forman un polímero. Siendo compuestos muy versátiles y con propiedades muy variadas, existe una gran variedad de polímeros, esto provoca la necesidad de clasificarlos, por ejemplo, se pueden clasificar por el tipo de monómero o molécula primitiva, o por cómo se forman las cadenas poliméricas, o bien, por sus tipos de enlaces moleculares.

Otra clasificación importante de los polímeros es por cómo reaccionan molecularmente al calor, al calentar un material polimérico en ausencia de flama, la reacción puede tener dos resultados: un derretimiento uniforme, fluidificando el material, incluso manteniendo el mismo color de este. El otro resultado es un tanto diferente, al igual es un derretimiento, sin embargo, lejos de producir un fluido uniforme, el material se degrada visualmente cambiando su color y aspecto, tendiendo a gasificarse en poco tiempo. Estas diferencias dan lugar a una clasificación en dos tipos de polímeros llamados: Termoestables y Termofijos, Regularmente, los plásticos pertenecen al grupo de los termoestables y los hules o caucho y las espumas pertenecen al grupo de los termofijos también llamados elastómeros. (Schwarz, 2002).

2.1.1. Los Elastómeros.

Uno de los materiales de enfoque para este proyecto son los elastómeros conocidos regularmente como caucho o hule, entre los elastómeros más conocidos se encuentran la silicona, el neopreno, el nitrilo, la goma natural, los poliuretanos, el caucho sintético o hule de llanta y la mayoría de los hules y elásticos. El hule de llanta o caucho sintético es un material con una elasticidad y alta resistencia química, se emplea en la fabricación de productos como

calzado, tuberías, productos de transmisión de potencia, elementos para sellado de fluidos, entre otros. En la siguiente tabla Peláez - Vazquez y Colaboradores (Peláez G., Velazquez S. & Giraldo D., 2017) presentan algunas aplicaciones para este material.

Tabla 1. *Aplicaciones del caucho.*

Área de aplicación	
Generación de Energía	
<ul style="list-style-type: none"> • Incineración para producir vapor, electricidad o combustible en hornos. • Recuperación del negro de humo en el caucho reciclado. 	
Construcción e infraestructura.	
<ul style="list-style-type: none"> • Asfaltos, pavimentos y concretos. • Pisos y superficies. • Aisladores sísmicos. • Aisladores acústicos. 	
Cuidado y recuperación del medio ambiente	
<ul style="list-style-type: none"> • Tratamientos de agua. • Techos ecológicos (verdes). • Fabricación de celdas de combustible. 	
Materiales compuestos de matriz polimérica para usos diversos	
<ul style="list-style-type: none"> • Implementos deportivos. • Amortiguadores de impacto en muelles marítimos, • Almohadillas para rieles y maquinaria industrial. • Industria automovilística 	

(Pelález G. et al. 2017)

La aplicación más extensa para este material es la fabricación de neumáticos o llantas para automóvil. Cuando una llanta cumple con su vida útil es necesario reemplazarla por una nueva, desechándola, esto impacta ambientalmente, dando lugar a los llamados cementerios de neumáticos, en México regularmente se encuentran en la franja fronteriza. La siguiente figura, muestra un tiradero o un cementerio de neumáticos en las afueras de Cd. Juárez Chihuahua, cabe resaltar que la fotografía muestra solo una sección de la verdadera dimensión de este lugar.

Aun que son complejos, hoy en día existen procesos de recuperación de los materiales constituyentes de un neumático, para reintegrarlos como productos con valor agregado cuidando así la ecología.



Figura 2. Cementerio de neumáticos en las afueras de cd Juárez.

(<https://www.elheraldodejuarez.com.mx/local/juarez/es-el-cementerio-de-llantas-una-bomba-para-el-medio-ambiente-noticias-ciudad-juarez-chihuahua-7033809.html>)

Existen antecedentes de varios proyectos enfocados en la reutilización del hule de llanta, un ejemplo es la fabricación de pisos de hule, investigación realizada por Cardona-

Gomez y Col. (Gómez, 2011) quienes mencionan los pisos decorativos capaces de absorber impacto al caminar y reducen los danos en las articulaciones (Figura 3). También se presentan los tapetes antifatiga para la industria, así como el pasto sintético para canchas deportivas y pistas de atletismo, ilustradas en las siguientes Figuras 4 y 5.



Figura 3. *Pisos de Caucho Decorativos Antigolpes marca Ecore.*
(<https://www.ecorecommercial.com/Products/Composed>)

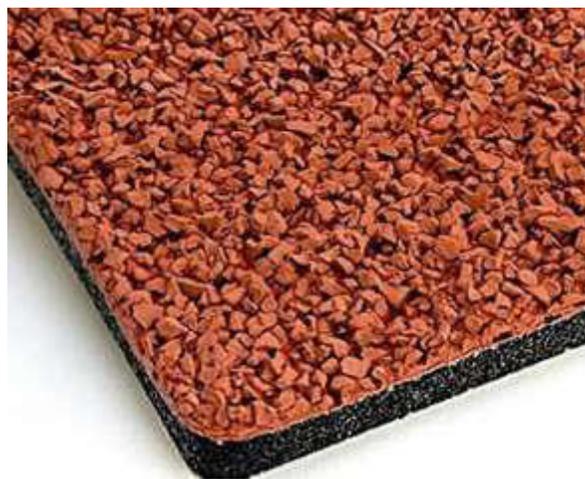


Figura 4. Pista de atletismo de caucho reciclado “Deporgrass”.
(<http://www.deporgrass.com/index.html>)

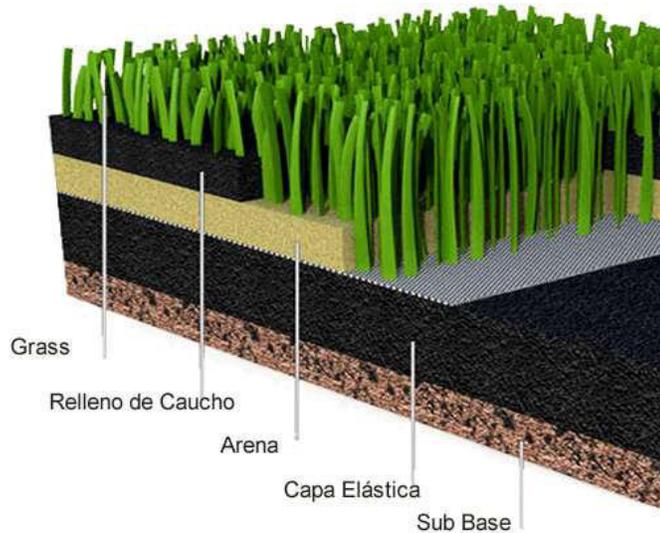


Figura 5. Sistema de césped artificial recomendado por la FIFA. (<https://www.parqueygrama.com/uso-de-la-arena-y-caucho-en-canchas-de-futbol-sinteticas/>)

Por otro lado (Carrizales, 2015) muestra como resultado de su investigación: “Asfalto Modificado con Material Reciclado de Llantas para su Aplicación en Pavimentos flexibles” que al utilizar material reciclado de llanta se mejora el comportamiento mecánico de la mezcla asfáltica en diferentes condiciones de temperatura, concluyendo que una mezcla con el 3% de caucho reciclado resulta superior que un asfalto convencional. Por otra parte Angulo y Duarte 2005 mencionan en su investigación similar, que se obtuvo “Asfalto Modificado con Caucho” y un “Asfalto Modificado con Caucho Acondicionado” mejorando algunas propiedades como el aumento en la recuperación elástica por torsión.

Esta aplicación ya ha sido utilizada por la compañía estadounidense de pavimentación y carreteras “MassDot” quienes utilizaron 123,000 llantas desechadas, las cuales fueron incorporadas a 3 proyectos de pavimentación en Massachusetts, quienes elaboraron un pavimento con mayor resistencia a los surcos y grietas como se muestra en la Figura 6, las carreteras fueron: a Ruta 128 en Waltham, la interestatal 90 en Weston y la Interestatal 91 en

Springfield. <https://blog.mass.gov/transportation/greendot/greendot-when-the-rubber-hits-the-road/>:

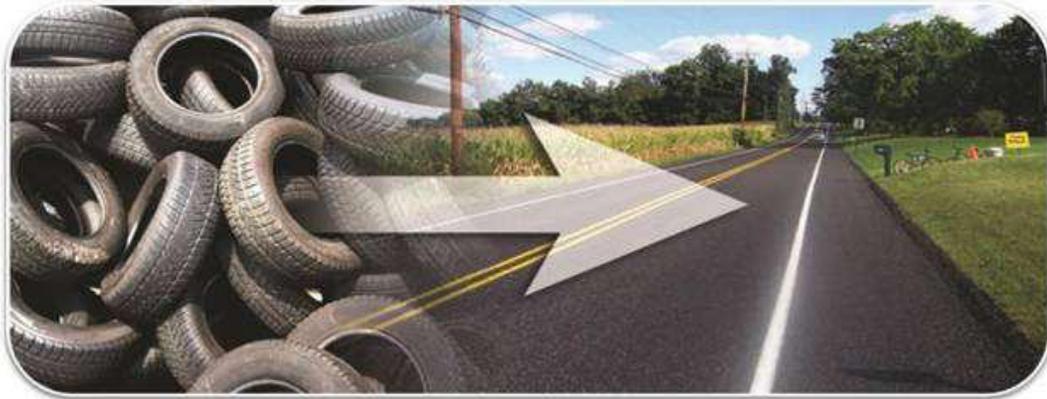


Figura 6. Carretera en USA hecha con asfalto modificado con caucho.
(<https://blog.mass.gov/transportation/greendot/greendot-when-the-rubber-hits-the-road/>)

En otro estudio Martínez-Bozo y Colaboradores, observan que las propiedades mecánicas de los concretos disminuyen al incorporarse desechos de llanta; sin embargo, el tratamiento del concreto empleando rayos gamma es una alternativa para mejorar las propiedades de la mezcla concreto-llanta, obteniendo resultados superiores a los concretos convencionales. Aunado (Martínez y Col., 2015) mencionan al nylon 6 y 12 como materiales poliméricos con los que se obtienen resultados superiores en cuanto a resistencia mecánica cuando es mezclado con el concreto.

Otro diseño interesante, realizado por (Montalvo, 2016) quien fabrico por compresión mecánica un adoquín con caucho de neumático reciclado, el cual fue fabricado utilizando 80% de polvo de llanta triturada y 20% de aglutinante de poliuretano compuesto para proveer elasticidad al comprimir el caucho; en esta investigación se elaboraron 3 diferentes adoquines utilizando granulometría de varios tamaños: 1mm, 3mm y 6mm. A los cuales se les sometió a estudios de resistencia a la compresión aplicando una carga axial creciente del orden de 13.9 Mpa, valor 6.1 Mpa por debajo del material de adoquín de hormigón normal según la norma

INEN 1485, y siendo la granulometría y la cantidad de aglutinante el factor con mayor influencia en la variación de estos resultados.

2.1.2. Los Plásticos

Los plásticos, incluyen una variedad de diversos materiales, como: el polietileno, polipropileno, PET, PVC, Poliestireno, ABS, Nylon, etc. Existe una gran cantidad de artículos fabricados con estos materiales, ya sea en su forma pura o mezcla, lo cual dificulta el reciclado y los desperdicios se acumulan en espacios que muchas veces no son los adecuados. La siguiente figura muestra un tiradero de plástico, donde se muestra la contaminación del suelo.



Figura 7. Contaminación por plásticos. (<https://www.wwf.org.pe/?368030/Un-acuerdo-global-para-evitar-la-contaminacion-por-plastico-en-la-mira-de-los-lideres-politicos-de-America-Latina>).

La compañía DKV (DKV, 2019) vendedora de seguros de salud y bienestar y activistas de la ecología, hacen un desglose del código de identificación del plástico, un sistema

internacional creado por la sociedad de la industria de plásticos en 1988. Este sistema se basa en la utilización del “triángulo de Moëbius” incluyendo en su interior un número del 1 al 7 con tres flechas formando un triángulo, representando el tipo de plástico y su nivel de reciclaje.

Entre los principales plásticos siendo los más conocidos en su consumo cotidiano se encuentran:

1. Teraftalato de polietileno (PET por sus siglas en inglés).
2. Polietileno de alta densidad (HDP por sus siglas en inglés).
3. Policloruro de vinilo (PVC por sus siglas en inglés).
4. Polietileno de baja densidad (LDP por sus siglas en inglés).
5. Polipropileno (PP por sus siglas en inglés).
6. Poliestireno (PST por sus siglas en inglés)
7. Otros (como el acronitrilo bitadieno estireno ABS, el Nylon y plásticos industriales y de ingeniería).

La lista anterior esta ordenada según el número que aparece en el “triángulo de Moëbius” el cual se encuentra en los diferentes productos de plástico regularmente en la cara inferior, identificando así el tipo de plástico. En el número 7 encontramos la categoría:” Otros” en la cual se incluye una gran gama de resinas poliméricas que no pertenecen a ningún tipo de los listados del 1 al 6 o bien son formados por mezclas de estos, creando así un material compuesto el cual modifica su estructura molecular y difiere al compararlos con cualquiera de las 6 primeras categorías mencionadas. Entre estos plásticos se encuentran el ABS, bisfenol, BPA, Nylon, Policarbonatos. Algunos como el ácido poli láctico PLA son polímeros de base biológica como almidón de maíz y resultan altamente compostables. La siguiente tabla muestra una escala de Facilidad-Complejidad en el reciclado de los plásticos.

Tabla 2. Escala de reciclaje de plásticos.

Fácil	1	2	3	4	Difícil
-------	---	---	---	---	---------

Basada en DKV Activistas Ecológicos, <https://dkv.es/>.

En la siguiente figura se muestran algunas de las aplicaciones de estos plásticos y que tan fácil es su reciclaje.



Figura 8. Clasificación y Aplicación de Plásticos, así como su facilidad de reciclaje. (<https://dkv.es/corporativo/blog-360/medioambiente/reciclaje/tipos-de-plasticos-clasificacion-reciclaje#toc-otros-tipos-de-plasticos>).

Con relación al reciclado de plásticos existen investigaciones que pueden ayudar a formar las bases para este proyecto, Flores-Rojas y Colaboradores, señala en su publicación: “Mezclas de cemento y agregados de plástico para la construcción de viviendas ecológicas” sobre el proyecto: “SandPlast” en la Unión Europea que consta en el desarrollo de ladrillos de construcción usando residuos de teraftalato de polietileno (PET por sus siglas en inglés: polyethylene terephthalate y mezclas de cementos, teniendo resultados estructurales favorables. Por otro lado (India, 2019) presenta un proyecto de reciclaje de diferentes plásticos para la fabricación de tabiques para la decoración de pisos como se muestra en la siguiente figura.



Figura 9. *Pasillo de tabiques de plástico reciclado con durabilidad de 15 años.*
(<https://www.youtube.com/watch?v=mQ93IcGCag4>)

En un proyecto similar la empresa social británica de reciclado (PreciousPlastics, 2020) desarrolla un ladrillo construido 100% con plástico reciclado capaz de ser ensamblado uno sobre otro para la construcción de un muro de plástico como se muestra en la figura, logrando un producto utilizado en la elaboración de paredes de división de habitaciones o bien refugios provisionales para gente sin hogar y por qué no?, una edificación completa en un futuro.



Figura 10. *Pared de bloques fabricados 100% con plásticos reciclados.*
(<https://www.youtube.com/watch?v=mQ93IcGCag4>)

Al analizar las aplicaciones y proyectos mencionados hasta este momento podemos evidenciar la utilización del caucho reciclado y plásticos en proyectos referentes a la industria de la construcción, con lo que se obtuvieron resultados interesantes para fines de investigación que han motivado el desarrollo e investigación de este proyecto en particular.

3. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

3.1. Descripción del Problema.

Como causa del incremento en el mercado automotriz, la cantidad de **neumáticos fuera de uso o desecho** (NFU) a nivel mundial y los desechos plásticos son cada día más alarmantes. La compañía fabricante de maquinaria para el reciclaje Eco Green y Colaboradores (EcoGreen, 2018) mencionan que para el 2015 solo en Estados Unidos una cantidad impresionante de 460 mil toneladas de NFU fueron almacenadas en vertederos de basura, asimismo en España se desecharon 200 mil toneladas de neumáticos en el año 2016. Al analizar la producción anual de neumáticos nuevos, se cuantifica el impacto ambiental que este producto representa, Peláez y Col. 2017 Mencionan un consumo a nivel mundial de neumáticos nuevos de 20.2 millones de toneladas para el 2014, también se registró un incremento de 0.7 % para el 2015 y estimaron un incremento promedio anual de 3.1% entre el 2016 y 2024 mostrado en la siguiente gráfica, en suma, para este último año se alcanzarían 230 millones de toneladas en total de NFU.

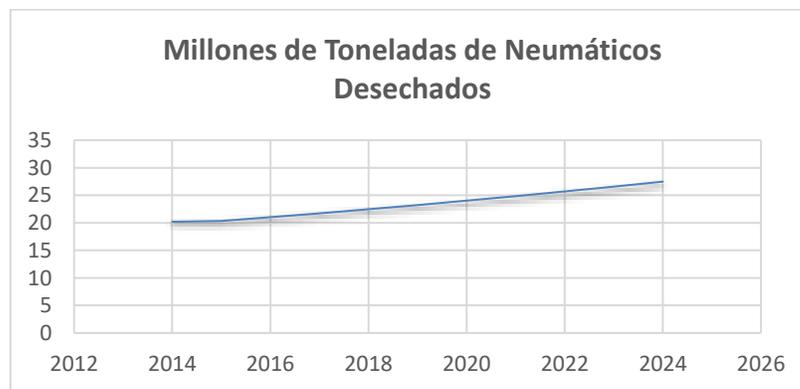


Figura 11. Millones de toneladas anuales de neumáticos desechados a nivel mundial.

(<https://www.ecoticias.com/residuos-reciclaje/194761/Cifras-graficos-estadisticas-maldito-plastico-oceanos>)

Las cantidades en la gráfica anterior resultan casi despreciables al compararlas con las cifras alcanzadas por los desechos plásticos a nivel mundial. Según Ecoticias 2019 (Capecchi, 2022) menciona que tan solo su producción rebasa los 400 millones de toneladas en todo el mundo y su desperdicio es mayor al 75% aumentando cada año.

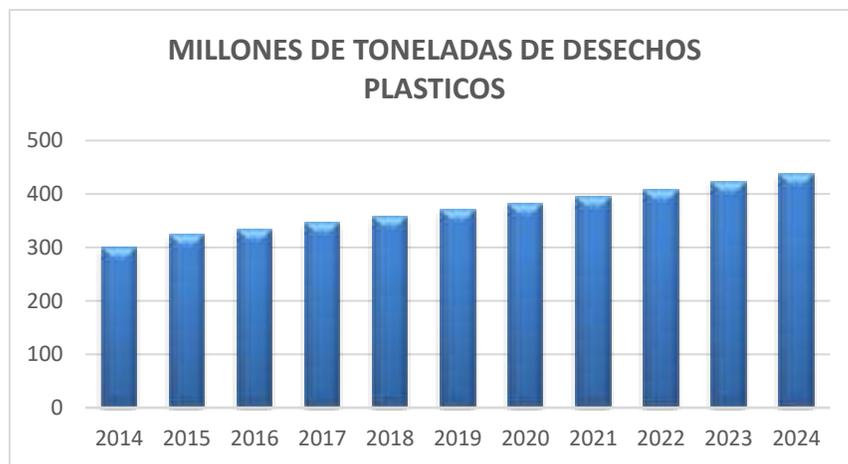


Figura 12. Millones de toneladas anuales de plástico desechado a nivel mundial.
(<https://www.ecoticias.com/residuos-reciclaje/194761/Cifras-graficos-estadisticas-maldito-plastico-oceanos>)

Es irracional esperar a que la naturaleza por si sola resuelva el problema de la contaminación por polímeros. Todos los materiales y productos que existen tienen un ciclo de vida, cualquier material se degrada con el tiempo hasta su total reincorporación a la naturaleza, los plásticos requieren desde los 50 hasta cientos de años para su descomposición, los neumáticos según Servín (1999) tardan entre 500 y 1000 años en bio-degradarse. La siguiente gráfica proporcionada por la SEMARNAT secretaria de gobierno en México nos da un panorama de la vida de los plásticos.

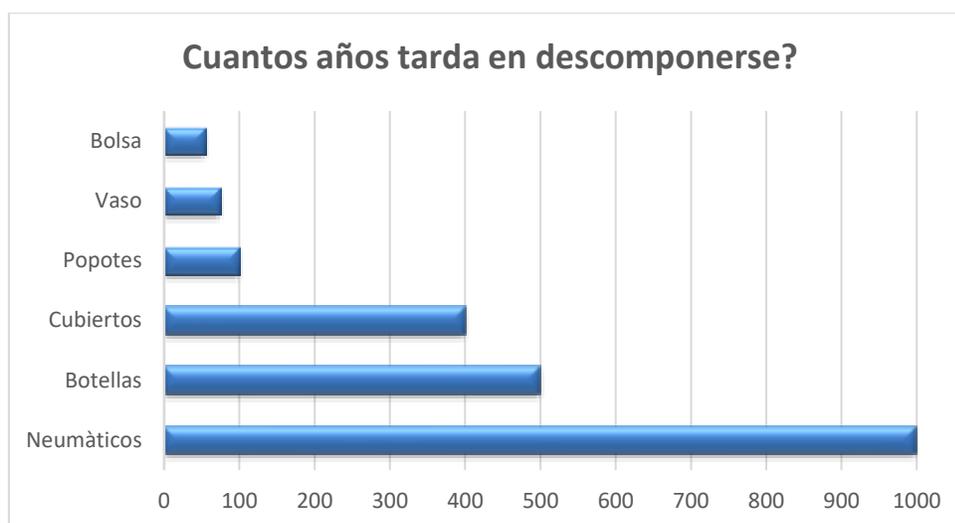


Figura 13. *Lapso que tardan diferentes polímeros en degradarse.*
 (<https://www.gob.mx/semarnat/articulos/contaminacion-por-plasticos-en-el-oceano-cifras-alarmanτες>)

Además de la contaminación de suelo, otro problema que se presenta es la contaminación de aire por gases producidos durante la incineración de polímeros que deterioran el planeta irreversiblemente, afectando a todos los seres vivos de maneras inimaginables.

Cuando los cementerios de NFU llegan a incendiarse alcanzan temperaturas muy altas haciendo difícil el controlar los incendios y evitar su propagación a zonas cercanas, Pero eso no es todo, según Huerta (2018) el humo y gases producidos debido a la incineración de llantas ocasiona cambios a nivel del ADN en seres humanos en mayor medida, aproximadamente 16 veces más que la quema de madera en chimeneas caseras. Esto debido a sus componentes: Caucho 48%, Negro de carbón 22%, Oxido de zinc 1.2%, Material textil 5%, acero 15%, Azufre 1% y otros elementos 12% que pueden ser tóxicos.

Al quemarse el plástico, Huerta (2018) señala que se produce gran cantidad de monóxido y bióxido de carbono, permanece en la atmosfera y obstruye la salida del calor terrestre al espacio, causando un efecto invernadero incrementando la temperatura de la tierra, lo que se conoce como contaminación térmica o calentamiento global. Por otro lado, el

monóxido de carbono en lo humanos y otros seres vivos disminuye la capacidad de absorción de oxígeno en la sangre provocando mareos, asfixia y muerte.

La siguiente figura muestra el porcentaje en peso de los diferentes elementos que componen un neumático.

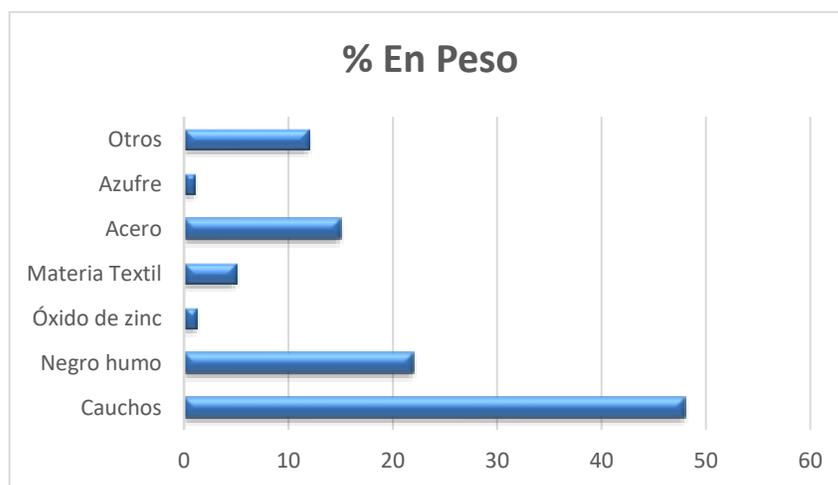


Figura 14. *Composición de neumáticos. (Ing. Guillermo Castro; Materiales y compuestos para la industria del neumático. Departamento de ingeniería mecánica F.I.U.B.A. Dic, 2009)*

Algunas enfermedades causadas por los gases de la combustión de plásticos y neumáticos fuera de uso son: la faringitis, laringitis, bronquitis y la neumonía. Siendo los niños, ancianos, enfermos cardiacos y respiratorios los más susceptibles (EcoGreen, 2018)

La compañía Eco Green menciona otro problema ocasionado por esta problemática, son las enfermedades por plagas que se pueden propagar al almacenar este tipo de desecho debido a el agua contenida en el interior de los plásticos y NFU, ocasionando la acumulación de mosquitos, los cuales producen enfermedades peligrosas como el Chikungunya, Dengue, Fiebre Amarilla, así como la Encefalitis, transmitida por medio de mosquitos; La encefalitis puede ser fatal en niños, pudiendo ocasionarse daño cerebral, coma y hasta la muerte.

El Virus del Oeste del Nilo se transmite también por los mosquitos, el cual es más mortífero, desafortunadamente en la actualidad no existe una vacuna para el Virus del Nilo Occidental.

Otros contaminantes liberados durante la combustión de plásticos son gases invernadero como el metano y el etileno que son absorbidos por la atmosfera causando impermeabilidad de calor según (Hagelberg, 2018) . Además (Garelli, 2020) menciona que la quema de plásticos genera nano partículas que pueden alojarse en los tejidos del cuerpo, entrar al torrente sanguíneo y a los pulmones generando así afectaciones, malformaciones en fetos y diversos tipos de cáncer entre otros padecimientos. Esto último involucra un problema que no se había considerado hasta no hace mucho causado por los plásticos, el cual puede llegar a ser el problema más severo relacionado con plásticos y neumáticos que es la contaminación por micro plástico.

El Gobierno de México por medio del Instituto Mexicano de Tecnología del Agua indica que: un micro plástico es definido por Organismos Internacionales como una pieza plástica menor a 5mm de tamaño, pudiendo llegar hasta las micras en tamaño. Provenientes de la degradación de los plásticos desechados de tamaño normal como plásticos, bolsas, fibras textiles y NFU. Los cuales con el tiempo se degradan y desprenden partículas plásticas, las cuales son muchos menores a 5mm. Algunos micros plásticos ya son fabricados de ese tamaño, como elementos pequeños para fármacos y cosméticos para dama, que por mucho son menores a los 5 mm llamados nano plásticos y no pueden eliminarse con sistemas de filtración y terminan en ríos y mares y son ingeridos por varias especies marinas. Lo que causa una cadena de contaminación, cuando estas especies son consumidas por el ser humano y el plásticos entran a nuestro organismo provocando distintos efectos adversos. El (GobdeMex, 19) encontró micro plásticos en dos potabilizadoras de agua lo que hace aún más grave este problema.

Todo lo anterior es parte de la problemática que representa la ahora conocida como contaminación plástica, lo que indica una oportunidad enorme de aportar un medio alternativo de reciclaje de estos materiales tan sofisticados, que como desecho afectan fuertemente al medio ambiente, pero como material reutilizado puede aportar muchos beneficios en la producción de productos con mayor valor agregado debido a sus características y propiedades físicas.

3.2. Pregunta de Investigación.

¿Es posible diseñar un material in silico compuesto para la construcción a base de concreto incorporando en su interior elastómeros y plásticos conservando sus propiedades estructurales y con características termoaislantes como una alternativa de reciclaje para los desechos de llantas y desechos de plástico utilizando simulación computacional?

3.3. Hipótesis.

Por medio de simulación computacional y dinámica molecular, será posible diseñar un material compuesto a base de concreto y polímeros con propiedades estructurales y termoaislantes que pueda ser utilizado en la construcción, constituyendo una alternativa importante de reciclaje para los desechos de plástico y llantas.

3.4. Objetivo General

Diseñar por medio de simulación computacional un material compuesto concreto-polimérico como alternativa para materiales en la industria de la construcción, con adecuadas propiedades estructurales y termoaislantes, para coadyuvar el reciclaje efectivo de desperdicios plásticos y de llantas.

3.5. Objetivos Específicos

1. Seleccionar el campo de fuerza para la dinámica molecular para los materiales a utilizar concreto, PET, Elastómero, Poliestireno, PVC, etc.
2. Realizar simulaciones de dinámica molecular para visualizar la conformación geométrica de los materiales poliméricos y elastómeros en una matriz a base de concreto.

3. Determinar el módulo de Young en el material compuesto utilizando herramientas de simulación molecular.
4. Determinar la energía de interacción entre dos superficies de concreto y la mezcla de polímeros en su interior.
5. Estudiar las características termoaislantes de los materiales compuestos.

3.6. Justificación

Según (Meza, 2018) columnista de: El Economista, en su publicación de diciembre del 2018, menciona que países como Estados Unidos, Corea del Sur, Alemania y otros países europeos tienen una tasa del 85% de recuperación de neumáticos fuera de uso. Lo que contrasta con México que recicla solo el 10% de acuerdo con la secretaria del medio ambiente. Sin mencionar las cifras alarmantes para el desecho de plástico. En la actualidad a pesar de que existen empresas dedicadas al reciclaje de llantas en desuso y plásticos desechados, por los números antes mencionados, hay una gran oportunidad de incrementar esta actividad para reducir los niveles de contaminación en el país y el mundo, además, la oportunidad lucrativa, con la generación de productos útiles provenientes del reciclado de polímeros. En su publicación del Economista, (Meza, 2018) Menciona un 40% de crecimiento anual en ganancias monetarias de la empresa mexicana “Granutec” quienes procesan 120 toneladas de llantas por mes para la fabricación de impermeabilizante ecológico. Al igual que “Trisol” quienes incrementaron su procesamiento de llantas recicladas de 30 toneladas a 3,000 toneladas mensuales con la asociación de empresas extranjeras para la fabricación de tapetes, tabiques para construcción, pistas para correr, carreteras e impermeabilizante. Otras empresas como “Reusapro” quienes compran plástico reciclado y lo transforman en materias primas recicladas y productos plásticos presentan crecimiento al abrir centros de acopio y reciclaje en varios puntos de la república.

Las características físicas de estos materiales los hacen valiosos para utilizarse en materia de aislamiento de calor y humedad. Así lo menciona Guillermo Castro en su

publicación: Materiales y compuestos para la industria 2009 quien muestra la conductividad térmica de varios materiales estando entre ellos los polímeros con menor permeabilidad de calor.

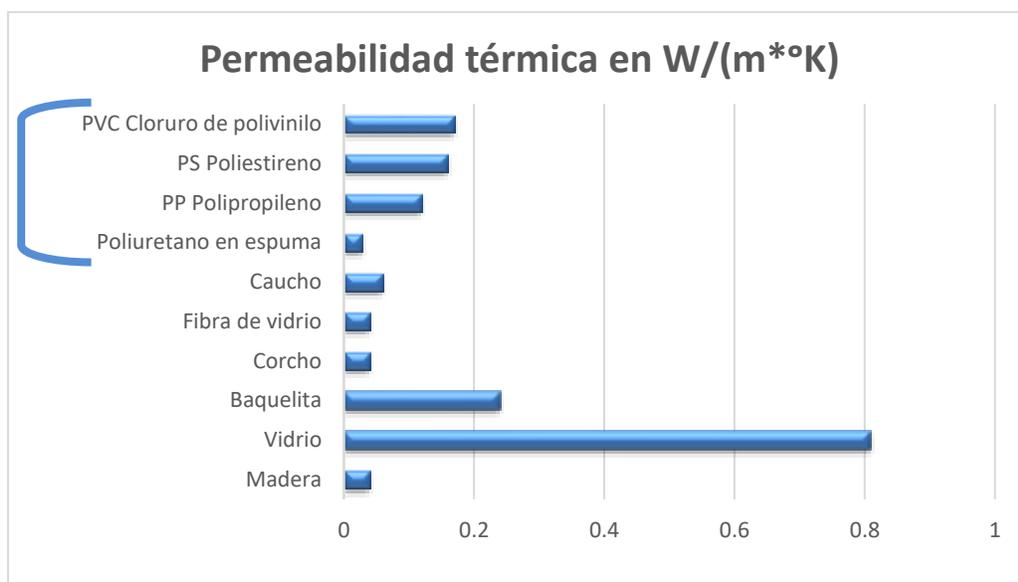


Figura 15. Permeabilidad térmica de materiales. (Guillermo Castro; *Materiales y compuestos para la industria del neumático*. Departamento de ingeniería mecánica F.I.U.B.A. Dic, 2009)

Tomando en cuenta los datos anteriores, la contaminación plástica representa una fuente interminable de materia prima, polímeros de desecho están por todos lados y particularmente en la región, según la SEMARNAT los principales cementerios de llantas en México están en Mexicali, Tijuana, Nogales, Cd. Juarez, Matamoros, Reynosa y el Distrito Federal. El problema de acumulación de neumáticos es alarmante en la frontera norte de México, en parte ocasionado por el intercambio de llantas entre ambos países; ya que EE.UU. cuenta con una normatividad más estricta en materia de disposición de residuos, por lo cual estos residuos se envían a territorio mexicano debido a que los estándares mexicanos son menos rigurosos, por lo que hay un mercado importante de este producto y el impacto ambiental es severo. Para los plásticos no existen cementerios especializados, este tipo de desechos se mandan a vertederos o tiraderos públicos de basura, donde rara vez se clasifican

y/o separan de otros tipos de desechos contribuyendo en la contaminación de suelo, muchos de ellos son desechados sin control en diversas partes llegando al océano, ríos y otros ecosistemas.

El beneficio social conseguido con el éxito de este proyecto sería la aportación de una opción más para el reciclado de estos contaminantes y así la preservación ecológica de nuestro entorno. A su vez en el ámbito de la construcción significaría un menor coste y ahorro, aumentando la calidad de vivienda para las familias mexicanas al utilizar productos de valor agregado como tabiques de plástico, pisos, aislantes, etc. Además de la importante contribución en el reciclaje de este importante desperdicio.

3.7. Delimitación

La síntesis experimental de nuevos materiales representa un costo elevado y requiere equipamiento de laboratorio, instalaciones de gas, reactivos químicos, etc., y se encuentran fuera del alcance de este proyecto de investigación.

Este trabajo se limita a la simulación por computadora para el diseño de un producto a base de polímeros y concreto que presente propiedades estructurales y termoaislantes adecuadas para el sector de la construcción. Durante esta investigación se considerarán materiales como: Caucho o hule de llanta, Teraftalato de Polietileno (PET), Polietileno de alta densidad (HDPE), Policloruro de vinilo (PVC). Polietileno de baja densidad (LDPE), Polipropileno (PP), Poliestireno (PS) y algunos poliuretanos. El material propuesto constituye una alternativa sustentable en la reducción energética en viviendas en los meses de invierno y verano, especialmente en climas extremos, al mismo tiempo que ofrece una alternativa a la solución del reciclaje de plásticos y llantas desechadas.

4. MARCO TEÓRICO

4.1. Procesos utilizados para el Reciclaje de Llantas y plástico.

En la cadena del ciclo de vida de un producto, es importante ofrecer alternativas para la posible reutilización de estos productos o su posible reincorporación a otra cadena de valor o a los ciclos naturales. Para los polímeros en México, la SEMARNAT revela que lo más común ha sido desecharlos inadecuadamente o disponerlos como combustible para su incineración, muchas veces incontrolada. Existen otras opciones de reciclaje de polímeros que nos servirán de referencia para el desarrollo de esta investigación (EcoGreen, 2018).

4.1.1. Reciclaje de Neumáticos.

Las alternativas conocidas para el reciclaje de neumáticos comprenden desde manualidades hasta procesamiento industrial, por su composición, tamaño y elementos que la conforman, el reciclaje de neumáticos suele ser complicado en comparación con los plásticos. A continuación, se muestran una compilación de algunas técnicas para la obtención de materias primas provenientes del neumático de desecho.

4.1.1.1. Neumáticos Como Combustible Alternativo

Gracias a su alto poder calorífico, utilizar neumáticos y otros polímeros como combustible en hornos de ladrilleras y cementeras es muy común. (Noriega y Col., 2018) sostiene que al menos 10 países de la comunidad europea encabezan la recuperación energética de NFU y plásticos para diversos fines, evitando que terminen en rellenos sanitarios. El utilizar plásticos y llantas como combustible es viable, dada la disponibilidad y ahorro del recurso, sin embargo, se requiere capturar los gases emitidos y evitar que salgan a la atmósfera, lo que no siempre sucede.

Según (Quezada, 2001) el neumático posee un nivel calorífico de entre 6,500 a 9,000 Kcal/Kg dependiendo de la composición y si el metal ha sido removido o no, este nivel es cercano al de los plásticos más comunes que supera las 10,000 Kcal/Kg. En comparación el carbón tiene un valor calorífico de 7,400 Kcal/Kg, más valores de referencia se presenta en la siguiente tabla:

Tabla 3. *Poder Calorífico de Diferentes Combustibles.*

Combustible	Poder Calorífico en Kcal/Kg
Estiércol vacuno	4,054
Paja de trigo	4,657
Madera seca	4,793
Corteza de pino	5,204
Carbón	7,400
Neumáticos (promedio)	8,300
Petróleo	10,409

(Quezada, 2001)

Para no generar residuos peligrosos al utilizarlos como fuente de calor, es necesario que se quemen a una temperatura cercana a los 1,100 °C y con controles de gases emitidos (Quezada, 2001).

Esto representa un problema para la utilización de neumáticos y plásticos reciclados en la construcción de viviendas, ya que en caso de un incendio pueden causarse estragos

importantes, para solucionar esto, se puede variar las concentraciones de caucho e incluso aislarlo con recubrimientos no flaméales para prevenir el contacto con el fuego en un posible evento.

4.1.1.2. Reciclado Por Pirolisis.

Este proceso es utilizado para el reciclaje tanto para neumáticos como para plástico, La pirolisis consiste en incinerar los polímeros en ausencia de oxígeno, recuperándose de forma total los elementos químicos: El caucho y plásticos se recuperan como aceites (olefinas y ceras) que se puede refinar para generar otros productos; además la generación de diversos gases que también pueden ser utilizados. El acero de las llantas se recupera limpio en su totalidad por lo que se puede utilizar en otros procesos industriales o en la fabricación de llantas nuevas. En su publicación (Klug, 2012) Explica como el proceso de pirolisis tiene tres etapas: La alimentación de la materia prima, La transformación de la masa y finalmente la separación de los productos (Carbón, Aceite y gas).

Básicamente el proceso de pirolisis consiste en suministrar calor a un reactor al vacío, donde por medio de convección se calientan desechos de polímeros. Algunos gases combustibles se utilizan para ser quemados y calentar el reactor en un proceso auto sustentable. Los materiales poliméricos se calientan hasta su degradación y son procesados por intercambiadores de calor (condensadores) para obtener aceites y ceras con diferentes propiedades como hidrocarburos. Fernandez – Barrios y Col. 2008 Explican la transformación de la masa polimérica en tres fases: La primera una fase sólida negra conformada por compuestos orgánicos e inorgánicos como el óxido de zinc (ZnO) y el Sulfuro de zinc (ZnS). Segunda fase es gaseosa, conteniendo de hidrocarburos y finalmente una fase líquida formada por aceites ligeros y pesados. La materia textil y el acero de la llanta quedan en el reactor para su separación con otros procesos simples. Las plantas de pirolisis tienen un alto control de emisiones, los equipos están automatizados al máximo, lo que permite reducir la mano de obra humana a las operaciones básicas.



Figura 16. Planta de pirolisis (<https://www.doinggroup.com/index.php?u=show-1036.html>)

4.1.1.3. Reciclado por Trituración Para Neumáticos.

Como se menciona en el Manual de Reciclaje de Plástico por (Cadena, 2000) la trituración básicamente consiste en moler las piezas por procedimientos mecánicos hasta obtener diferentes tamaños de partículas (granulometría), en el caso particular de las llantas se requiere una maquinaria más voluminosa y con un motor más potente para poder triturar y posteriormente, un electroimán retira el acero y la fibra textil se separan por diferencia de densidades.

Para la trituración de neumáticos debido a su tamaño y complejidad, existen varios subprocesos y niveles de trituración para distintos tipos de aplicación.

a) Fase 1 corresponde a la remoción del acero radial encontrado dentro de la llanta, Dependiendo de la maquinaria de trituración es recomendable remover el acero. La desventaja de este proceso es que, si no se cuenta con un equipo especializado, la remoción del acero puede llegar a ser muy compleja, y dependiendo la aplicación que se le intente dar a la materia prima reciclada es necesario o no remover este componente.

b) Fase 2 Constituye una fase de trituración inicial, que permite reducir el tamaño de la llanta a trozos ásperos de entre 2 y 6 pulgadas como los mostrados en la siguiente figura, la finalidad

es facilitar su almacenamiento, transporte y proporciona rapidez en la valoración de los trozos como combustible alternativo o bien es necesario para el siguiente nivel de trituración.



Figura 17. Resultado del primer nivel de trituración. (<https://ecogreenequipment.com/>)

c) **Fase 3** es un nivel más de trituración con una maquina llamada rallador o raspador, dicha maquinaria no está diseñada para triturar el neumático entero, es necesario haber retirado el acero previamente y pasar por el primer nivel de trituración para conseguir virutas de caucho de entre 1.5 y 0.625 pulgadas.



Figura 18. Rallador de llanta (<https://ecogreenequipment.com/>)



Figura 19. Resultado del primer nivel de trituración. (<https://ecogreenequipment.com/>)

- a) **Fase 4** Tratamiento de granulación, se obtiene una materia prima con gránulos de goma desde $\frac{1}{4}$ a 2000 micras de pulgada y un 99% de pureza, la maquinaria requerida lleva el nombre de granulador y muele virutas de caucho provenientes del rallador y sin la presencia de acero.



Figura 20. Granulador de caucho y resultado. (<https://ecogreenequipment.com/>)

4.1.1.4. Reciclado por sistemas criogénicos

Es una técnica utilizada para enfriar un material a temperaturas muy bajas con el uso de Nitrógeno. En el caso del reciclaje de neumáticos (Giovanini, 2018) menciona un procedimiento en el que se utiliza la técnica criogénica para congelar la llanta a menos de -120 °C a esta temperatura se fragiliza la composición del caucho y lo hace más fácil de triturar por medio de molinos de martillos, rompiendo la llanta en partículas pequeñas las cuales se separan del acero al ser quebradizas y la fibra textil por medio de separadores magnéticos y de aire respectivamente. Los gránulos conseguidos pueden llegar hasta milésimas de pulgada dependiendo el tiempo de procesamiento en los molinos, resulta más rápido que el proceso regular de trituración, pero es mas costoso y se requiere de equipo especializado para alcanzar bajas temperaturas.

4.1.2. Reciclado de Plásticos.

Una desventaja que presentan los procesos de reciclado de plásticos es la necesidad de segregación de tipo de plástico con el fin de mantener sus características físicas, esto involucra un incremento en el costo de los productos resultantes ya que diferenciar y segregar el plástico requiere conocimiento, experiencia y recursos, y aun contando con estos tres elementos la identificación y separación por tipo de plástico es difícil debido a las mezclas y gran variedad de estos, así se indica en el manual de reciclaje de plásticos (Cadena, 2000).

4.1.2.1. Reciclado por Trituración Para Plástico.

La trituración de plástico para su reciclaje resulta más sencilla que la trituración de neumáticos, porque regularmente los tamaños y las densidades de productos a triturar son menores, además solo requieren de una etapa de triturado, así lo atestigua (Cadena, 2000) en su manual de reciclaje de plásticos. Sin embargo, el proceso completo es complejo, la trituración representa solo un escalón para la obtención de materia prima reciclada. El Instituto de Investigación de Ingenieros de la India, en su obra Plastic Waste Recycling Technology

2017, (Tecnología de reciclaje de residuos plásticos por su traducción en español). muestra un proceso detallado para la obtención de material prima plástica para diferentes tipos de plásticos termoestables y los pasos son los siguientes:

a) Clasificación. – Consiste en la separación o clasificación del plástico por tipo, triturar diversos tipos de plástico sin separarlo crea una variación incontrolable en las propiedades del producto, es necesario separarlo y triturar solo un tipo de plástico, esto puede implicar el primer reto ya que es necesario poseer el conocimiento necesario de técnicas para identificar los diferentes tipos de plástico, por ejemplo, en las botellas de refresco, el material de la botella esta hecho de Teraftalato de polietileno (PET), la tapa se fabrica con Polipropileno (PP), el sello interno de la tapa esta hecho de hule o silicona y la etiqueta regularmente está hecha de Cloruro de polivinilo (PVC). Para su reciclado la botella de refresco requiere una separación minuciosa de sus componentes, existen en el mercado algunas alternativas para la separación especifica de plásticos. En el caso de las botellas de plástico, primero es necesario remover las etiquetas, después remover las tapas manualmente o utilizar otra maquinaria en serie para este fin.

b) Trituración. - Una vez clasificado, el plástico el siguiente proceso es la trituración, hay varios tipos de molinos de varias capacidades, desde algunas decenas de kilogramos hasta toneladas por hora, generalmente el plástico triturado resulta en hojuelas o tiras de plástico de entre 0.5 y 2 centímetros de tamaño, el tamaño de las hojuelas se controla por una malla que mantiene el plástico dentro del molino hasta que logra el nivel de trituración deseado.

b) Lavado. – Después del triturado, es requerido un proceso de limpieza para el triturado de plástico, dependiendo de su aplicación el tipo de lavado varia, con químicos diferentes o el tiempo de lavado se incrementa o disminuye para cumplir requerimientos de uso, por ejemplo, la fabricación de contenedores de alimentos requiere un lavado más intenso que aquel utilizado para la fabricación de escobas. Para este fin existen diversas alternativas en cuanto a maquinaria.

c) Peletizado. - Debido a que la hojuela de plástico tiene un espesor muy pequeño resulta poco conveniente utilizar dicha geometría en procesos de manufactura del plástico. Por

lo cual es necesario convertir la hojuela de plástico en partículas más consistente, la forma de hacerlo es derritiendo las hojuelas de plástico para inyectarlas a través de una boquilla creando hilos de plástico calientes con diámetros específicos para posteriormente cortarlos en pequeñas partes pequeñas (entre 1 y 5 milímetros) conocidas como pellets o “bolitas” por su traducción al español. Estos pellets o bolitas pueden ser sometidos a procesos como inyección y extrusión de plástico para formar piezas u otras materias primas.

4.1.2.2. Reciclado químico de plásticos

El reciclado químico de plásticos se enfoca a ciertos tipos de plásticos, el más común es el teraftalato de polietileno o PET. (Mariano, 2012) El reciclaje químico consiste en descomponer el polímero en sus moléculas primitivas, o monómeros, en el caso del PET, el producto principal es el monómero teraftalato de etileno que pueden ser nuevamente polimerizados para la obtención de PET virgen. Esta “monomerización” se puede llevar a cabo por diferentes procesos: Metanólisis, hidrólisis y glicólisis, donde se utiliza un compuesto específico por ejemplo en el caso de la Metanólisis se utiliza gas metano a altas presiones junto con un catalizador para lograr la despolimerización como se muestra en la siguiente figura.



Figura 21. *Proceso de Metanolisis (<https://tecnologiadelosplasticos.blogspot.com/2011/07/reciclado-quimico-de-pet.html>)*

4.2. Propiedades y Selección de Materiales.

Para la reutilización de plásticos y neumáticos en el sector de la construcción, se busca la combinación con materiales como el ladrillo y el bloque de cemento. A continuación, se presentan algunas características físicas y químicas de los materiales seleccionados en este trabajo de investigación.

4.2.1.1. Ladrillo para Construcción.

El ladrillo construido por barro de arcilla es uno de los materiales más comunes utilizados en la construcción. (Gámez, 2017) en la publicación: “Ventajas y desventajas de construir con ladrillos”, menciona que la principal ventaja del ladrillo son sus propiedades térmicas, ya que resiste al paso del calor.

Los ladrillos están constituidos por arcilla. La arcilla proviene básicamente de la descomposición de rocas y presenta diversas coloraciones según sus impurezas, desde el rojizo, hasta el blanco cuando es más pura, como se muestra en la siguiente figura.



Figura 22. Arcilla diferentes coloraciones según su pureza

(<https://es.wikipedia.org/wiki/Arcilla#:~:text=La%20arcilla%20es%20una%20roca,el%20blanco%20cuando%20es%20pura.>)

Conocida como la primera cerámica elaborada por el hombre, (Shi & L. , 2008). La arcilla se caracteriza por adquirir plasticidad cuando se mezcla con agua, lo que hace una masa

moldeable tornándose firme al secarse. Al someterse a altas temperaturas desde 350 hasta 800 °C dependiendo del tipo de arcilla, aparecen reacciones químicas ocasionando dureza en la arcilla, y transformándose en un material con una rigidez permanente.

El proceso de construcción de ladrillos con arcilla es prácticamente simple, en la siguiente tabla se muestra el proceso de fabricación de los ladrillos comunes.

Tabla 4. Proceso de construcción de ladrillos con arcilla.

Preparación de arcilla.	Maduración	Tratamiento de trituración y homogenización de la arcilla.
	Tratamiento mecánico	Purificación y refinamiento de arcilla con procesos mecánicos de aplastamiento.
	Depósito de materia prima procesada	Depósito de la materia prima en silos especiales para su homogenización final.
Producción de ladrillo	Humidificación	Se agrega agua en un mezclador hasta obtener una humedad precisa.
	Moldeado	Tabla 5. <i>Se utiliza un molde para obtener su forma esperada en caliente utilizando vapor saturado a 130 °C.</i>
	Secado	Eliminación de agua agregada en las fases anteriores para esto se utiliza aire caliente húmedo para evitar un efecto conocido como golpes termo higrométricos que es la disminución de humedad a ritmos diferentes en distintas zonas del material causando fisuras
	Cocción	Se realiza en hornos a temperatura oscilante entre 900 y 1000 °C
	Almacenaje	Almacenaje del producto

(Enciclopedia de la construcción Frederick Merrit 2008)

A continuación, se mencionan propiedades físico-mecánicas del ladrillo común para construcción.

Tabla 6. Características del ladrillo común.

Característica	Valor	Unidades	Fuente
Peso	2.3	Kilogramo	https://www.google.com/search?q=peso+de+un+ladrillo&rlz=1C1NHXL_esMX888US88&oeq=peso+de+un+ladrillo&aq=chrome:69i57.17071j0j15&sourceid=chrome&ie=UTF-8
Conductividad térmica	.6	W/m°K	https://www.google.com/search?q=conductividad+termica+de+un+ladrillo&rlz=1C1NHXL_esMX888US88&xsrf=ALeKk01YkT75P9FKkiRCBcqX2dXHEzfuA%3A1627526175497&ei=HxQCYabkHYmd-gTqtrHIBA&oeq=conductividad+termica+de+un+ladrillo&gs_lcp=Cgnd3Mtd2l6EAMyAggAMgQIABAcOgcIxCwAxAnOgcIABBHELADOGclABCwAxBDogYIABAHEB46CAgAEAgQBxAeSgUIPBIMkoECEEYAFcyk5Y37cOYInCDmgCcAJ4AIAABgAKIAAIGkgEGMC4xOC41mAEAoAEBqgEHZ3dLXdpsgBCsABAQ&scient=gsw-wiz&ved=0ahUKEwjm77W8n4fyAhWJjp4KHwpbDEkQ4dUDCA8&uact=5
Resistencia a la Compresión	100	kg/cm ²	https://www.google.com/search?q=resistencia+a+la+compresi%C3%B3n+de+un+ladrillo&rlz=1C1NHXL_esMX888US88&xsrf=ALeKk03vY8f9HYekuMBoMVPtU0YPeS0iA%3A1627526453208&ei=NRUCYaORDj--gTz9ZzABA&oeq=resistencia+a+la+compresi%C3%B3n+de+un+ladrillo&gs_lcp=Cgnd3Mtd2l6EAMyBggAEAgQHjoGCAAQBxAeOggIABAIEAcQHjoICAAQBxAFEb46AaggAOgQIABAcOgYIABAHEB5KBAbBGABQ7uACWk6AA2CmANoAHACeACAABQCIAgqJIBCDAuMjQuMy4xmAEAoAEBqgEHZ3dLXdpsABAQ&scient=gsw-wiz&ved=0ahUKEwji_-vAofyAhUy54KHfM6B0gQ4dUDCA8&uact=5
Módulo de Young (elástico)	30,000-50,000	Kg/cm ²	https://es.slideshare.net/jaco1957/tabla-de-modulos-de-elasticidad
Sedancia o Fluencia	.2	N/mm ²	https://www.netzsch-thermal-analysis.com/es/materiales-aplicaciones/materiales-de-construccion/ladrillo-refractario-fluencia-en-compresion-cic/
Coefficiente de Poisson	.1-.15	N/A	https://www.google.com/search?q=coeficiente+de+poisson+de+un+ladrillo&rlz=1C1NHXL_esMX888US88&xsrf=ALeKk02rpGie4h0CeflunoVsgR-2dScmDg%3A1627527201105&ei=IRCYyBBYqU-gSrgIPQAw&oeq=coeficiente+de+poisson+de+un+ladrillo&gs_lcp=Cgnd3Mtd2l6EAM6BwgjELADECc6BwgAEeOsAM6BgAEAcOHjoECECQkoFCDwSATJKBAhBGABQgJkBWmW1AWDzvQFoAnACeACAABEBiAGhHJIBBDauMjSYAQCgAOQqAQdnd3Mtd2l6yAEIwAEB&scient=gsw-wiz&ved=0ahUKEwjiH-bulo4fyAhUKip4KHSvAADoQ4dUDCA8&uact=5
Densidad de masa	1300-1450	Kg/m ³	https://www.google.com/search?q=densidad+de+un+ladrillo+de+arcilla&rlz=1C1NHXL_esMX888US88&xsrf=ALeKk00EVBhSpVHX7y8vSPdWRjrGngeIw%3A1627527459434&ei=lxkCYbLzGYnY-gSS06OgBA&oeq=densidad+de+un+ladrillo+de+arcilla&gs_lcp=Cgnd3Mtd2l6EAMyAggAOgcIABBHELADOGYIABAWEB46CAgAEByQChAcSgUIPBIMkoECEEYAFcuuQFY4MMBYOLFawGcCj4AIABoQGIAYoNkgEEMC4xMZgBAKABAaoBB2d3cy13aXrIAQjAAQE&scient=gsw-wiz&ved=0ahUKEwjkNOgplfyAhUJrd4KHZLpCEQQ4dUDCA8&uact=5
Absorción de agua	14-20	%	http://www.inacap.cl/web/material-apoyo-cedem/profesor/Construccion/Materiales-de-Construccion/G07Absorcion-de-agua.pdf
Esfuerzo de rotura	50	kg/cm ²	https://www.google.com/search?rlz=1C1NHXL_esMX888US88&xsrf=ALeKk03stmiXyqfEKNOw%5sa25hhfePlg:1627528291750&q=esfuerzo+de+rotura+de+un+ladrillo&oeq=esfuerzo+de+rotura+de+un+ladrillo&gs_lcp=Cgnd3Mtd2l6EAMyAggAOgcIABBHELADOGYIABAWEB46CAgAEByQChAcSgUIPBIMkoECEEYAFcuuQFY4MMBYOLFawGcCj4AIABoQGIAYoNkgEEMC4xMZgBAKABAaoBB2d3cy13aXrIAQjAAQE&scient=gsw-wiz&ved=0ahUKEwjkNOgplfyAhUJrd4KHZLpCEQQ4dUDCA8&uact=5

			=X&ved=2ahUKewjs3sOtp4fyAhUR3p4KHbZzDTcO7sYoAHoECAEQnw&biw=1366&bih=657
Aislamiento acústico	Bueno	N/A	https://www.google.com/search?q=aislamiento+acustico+de+un+ladrillo&rlz=1C1NHXL_esMX888US888&ssrf=ALeKk011qooZdA_1BorcRZK5ZSgzluqBWw%3A1627528108195&ei=BsCYd-uC86B-wTm95PYAw&oq=aislamiento+acustico+de+un+ladrillo&gs_lcp=Cgnd3Mtd2l6EAM6BggAEAcQHjoICAQAQCBAHEB46BAGAEb5KBAbGABQ69gHWOHvB2DR_QdoAHACeACAAZgCiAH6GZIBBjAuMjAuMZgBAKABAAoBB2d3cy13aXrAAQE&scclient=gws-wiz&ved=0ahUKewjftIDWpofyAhXOwJ4KHeb7BDsQ4dUDCA8&uact=5
Costo	4.5	\$pesos mexicanos/pieza	https://www.construrama.com/materiales-cinco/catalogo/materiales-de-construccion/block-y-derivados/barroblock/ladrillo-rojo-pieza/p/0301020098

(Maldonado, 2021) (Binifi, 2006) Varias fuentes.

4.2.1.2. Bloque de construcción.

El bloque para construcción es una combinación de cemento, gravilla y arena, presenta un interior hueco para ser relleno con mortero y otros materiales. Su fabricación es más sencilla que la de los ladrillos, así lo menciona (Illstone – Domone 2001), su construcción básicamente consta de 4 etapas:

Mezclado. – Consiste en la incorporación de cantidades de arena, grava y cemento, y al finalizar la mezcla se agregar agua.

Moldeado. - La mezcla es compactada sobre moldes para adquirir cierta forma y tamaño.

Curado. - Los bloques son ingresados en hornos a vapor para acelerar su secado y además proporcionar rigidez a la mezcla.

Apilado. - Una vez endurecidos se apilan los bloques para su almacenamiento.



Figura 23. Bloque para construcción. (<https://ideas.mercadolibre.com/ar/home-deco/tipos-de-ladrillos/>)

base de construcción para esta investigación y será combinado con uno o más polímeros reciclados.

Como sabemos el cemento es un material con propiedades de adherencia, pero el cemento por sí solo no tiene dicha capacidad, es necesaria la mezcla con agua y arena para activar su capacidad de fraguar y endurecerse y lograr así la cohesión de elementos minerales, es en este punto el cemento se convierte en concreto, lo que significa que el concreto posee dos fases una vez que se realiza la hidratación. En su publicación: Prospectos y Desafíos de Nano Ingeniería de Materiales de Construcción Usando Dinámica Molecular. Los autores: (Denvi Lau, Wei Jian & David Hui 2018). Describen estas dos etapas del concreto como fase aglutinante o matriz y una fase particulada o árida, presentes antes y después de endurecerse. Las propiedades mecánicas del concreto endurecido dependen fuertemente de la fase aglutinante o de matriz, esto significa que lo que ocurra durante la fase antes de endurecerse impactara después, ya sea la cantidad de cemento añadida, la cantidad de agua o arena añadidas e incluso también otros materiales que sean añadidos a la mezcla y puedan impactar positiva o negativamente a su resistencia y propiedades mecánicas. En la publicación mencionada de (Lau et al 2018), Menciona algunos silicatos de calcio, aluminio y hierro como componentes químicos primitivos del concreto que reaccionan con el agua. Específicamente los compuestos: Silicato tricálcico (C3S), Silicato di cálcico (C2S), Aluminato tricálcico (C3A) y la aluminoferrita tetra-cálcica (C4AF) son los 4 principales minerales en el polvo de cemento ordinario como se muestra en la siguiente figura:

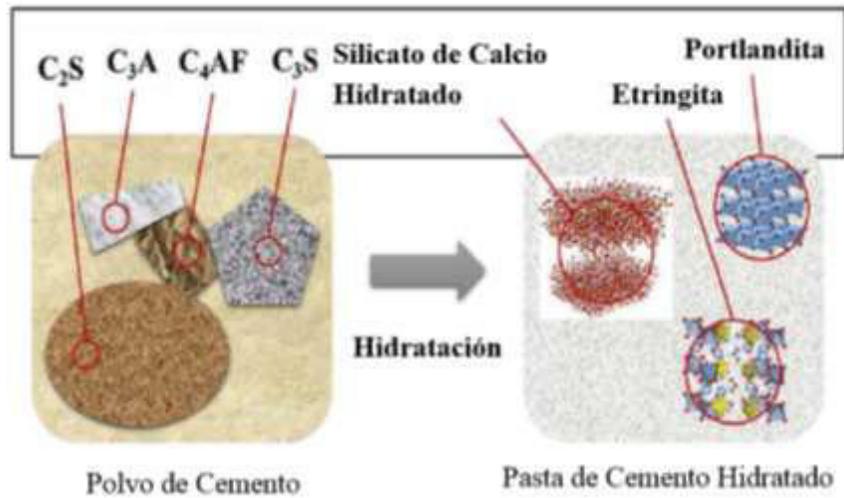


Figura 24. Componentes importantes del cemento, (Lau et al 2018).

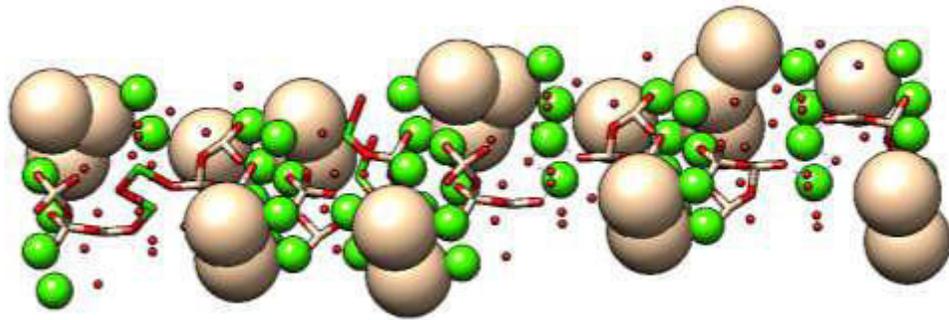


Figura 25. Molécula de concreto hidratada, Átomo/Color Calcio/Blanca esferas, Sílice/Verde, Carbono/ Blancos, Hidrogeno/Rojos, Agua/Rojas esferas. (Diseño con Chimera 1.15).

4.2.2. Materiales poliméricos utilizados en el reciclaje.

La variedad de materiales poliméricos como hules y plásticos es tan grande que intentar abarcar al menos la mayoría, resulta sumamente impráctico, sin embargo, se analizan ciertas características de algunos plásticos y el hule de llanta.

4.2.3. Caucho sintético.

Las propiedades del caucho ya han sido descritas anteriormente, sin embargo, el material como tal es más complejo. El triturado de llanta es un polímero hecho de varios monómeros con base petrolífera, así lo describe (Treloar, 2005) en su libro: La Física de la Elasticidad del Hule. Llamado SBR (Por sus siglas en inglés: Styrene-Butadiene Rubber) que se traduce: Hule de Estireno-Butadieno derivado de la polimerización de estireno y 1,3-Butadieno, en la siguiente imagen se muestra la forma molecular del SBR, seguida de una tabla de propiedades.

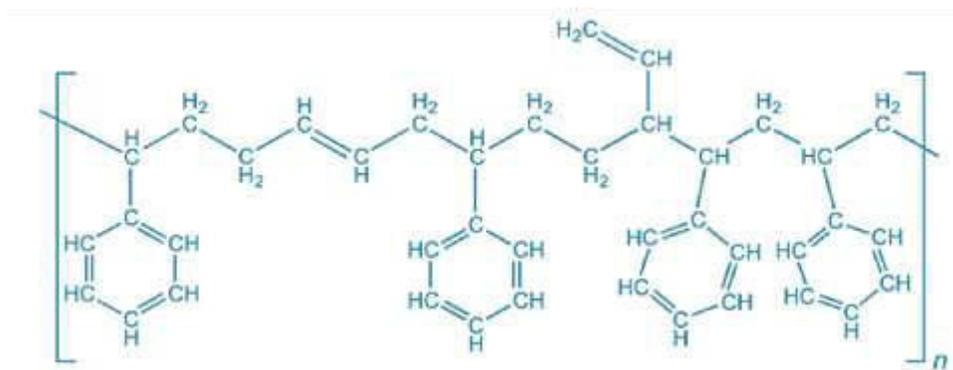


Figura 26. Estructura molecular de SBR. (https://es.wikipedia.org/wiki/Caucho_estireno-butadieno).

Tabla 8. Características del Hule de Estireno-Butadieno.

Propiedades	Valor	Unidades	Fuente
Conductividad térmica	.5	W/m°K	https://material-properties.org/es/caucho-densidad-resistencia-punto-de-fusion-conductividad-termica/
Resistencia a la Compresión	36	MPa	https://es.wikipedia.org/wiki/Styrene-butadiene
Módulo de Young (elástico)	50	MPa	https://material-properties.org/es/caucho-densidad-resistencia-punto-de-fusion-conductividad-termica/
Sedancia o Fluencia	15	Mpa	https://material-properties.org/es/caucho-densidad-resistencia-punto-de-fusion-conductividad-termica/
Coefficiente de Poisson	0.49	N/A	https://www.asom.com/propiedades.aspx?articulo=1844

Densidad de masa	1100	Kg/m ³	https://material-properties.org/es/caucho-densidad-resistencia-punto-de-fusion-conductividad-termica/
Absorción de agua	5	%	https://paperkit.net/stylized/AD0656173.pdf
Esfuerzo de tensión	2.18	MPa	https://repository.usg.edu/cobitram/handle/11965/170/Analysis_propiedades_caucho_ppt/memori/CVAADidos.pdf?sequence=1&isAllowed=1
Aislamiento acústico	Excelente	N/A	https://ba.spm.cu/304/

(Varias fuentes).

4.2.4. Teraftalato de polietileno

El teraftalato de polietileno según (Brydson, 1999) en su libro de Materiales Plásticos, es uno de los termoplásticos más famosos y de mayor producción en el mundo y también un contaminante importante, este plástico transparente con formula $(C_{10}H_8O_4)_n$ es un tipo de poliéster que se produce por una polimerización por condensación del ácido teraftálico y etilenglicol, la siguiente figura muestra la forma molecular de este polímero, y además se presenta una tabla con algunas de sus propiedades físicas y químicas.

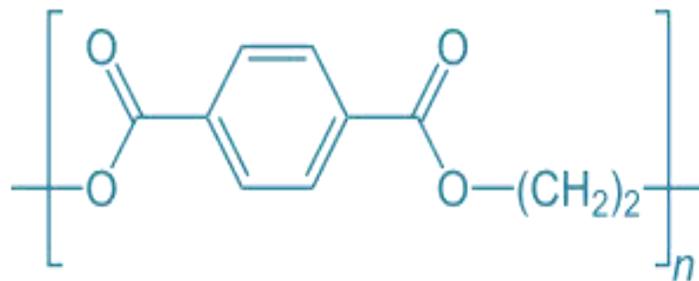


Figura 27. Estructura molecular. (https://es.wikipedia.org/wiki/Tereftalato_de_polietileno).

Tabla 9. Características del Teraftalato de Polietileno.

Característica	Valor	Unidades	Fuente
Conductividad térmica	.24	W/(m·K)	https://es.wikipedia.org/wiki/Tereftalato_de_polietileno

Resistencia a la Compresión	55–75	Mpa	https://es.wikipedia.org/wiki/Tereftalato_de_polietileno https://es.wikipedia.org/wiki/Tereftalato_de_polietileno
Módulo de Young (elástico)	2800–3100	Mpa	https://es.wikipedia.org/wiki/Tereftalato_de_polietileno
Densidad de masa	1,370	g/cm ³	https://es.wikipedia.org/wiki/Tereftalato_de_polietileno
Fusión	260	°C	https://es.wikipedia.org/wiki/Tereftalato_de_polietileno

(Varias fuentes).

Algunas aplicaciones del PET son: Envases plásticos para bebidas, empaque transparente de comida, empaques transparentes para productos, garrafones de agua purificada, etc. El PET se clasifica con el número 1 en la escala de reciclaje.

4.2.5. Polietileno

Conocido como el polímero más simple, también llamado poli-metileno, el polietileno es uno de los plásticos de menor costo, de color lechoso, obtenido de la polimerización del etileno o eteno, siendo químicamente inerte, como lo menciona (Mariano, 2012) genera una producción cercana a los 80 millones de toneladas anuales. Su estructura química es una cadena larga de átomos de carbono, unidos con dos átomos de hidrogeno mostrada en la siguiente figura.

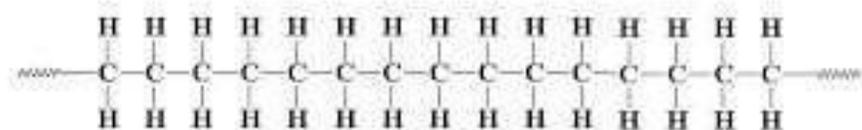


Figura 28. Estructura Molecular del Polietileno
(<https://tecnologiadelosplasticos.blogspot.com/2012/07/polietileno-pe.html>)

Representado por la fórmula $(C_2H_4)_n$ Su producción es prácticamente simple, se obtiene mediante la polimerización del monómero etileno o eteno con formula $(CH_2=CH_2)$ al comprimirlo y añadirle catalizadores altamente reactivos, por esta razón el etileno debe ser de gran pureza, solo algunos contaminantes en pequeñas cantidades son permitidos como el N_2 , etano (precursor del etileno) y metano así lo indica (Crawford, 1998) en: “Ingeniería de los plásticos”.

El polietileno se divide en dos tipos: el polietileno de alta densidad o HDPE por sus siglas en inglés (High Density PolyEthylene) y el polietileno de baja densidad o LDPE por sus siglas en inglés (Low Density PolyEthylene) este segundo es más barato y más fácil de producir, pero al mismo tiempo es menos resistente en varios aspectos. La siguiente figura muestra los tipos de polietileno.

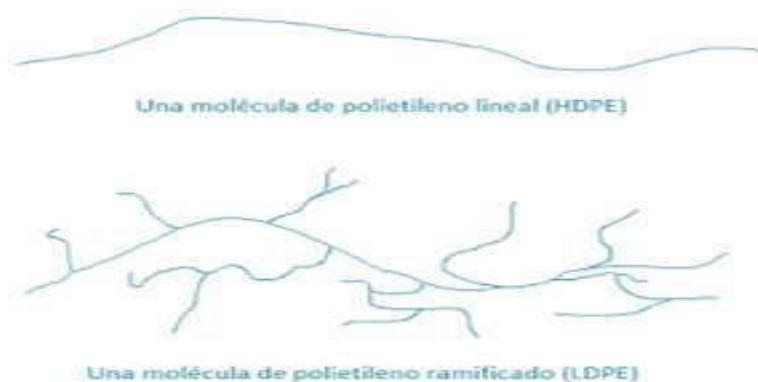


Figura 29. HDPE y LDPE (<https://www.elempaque.com/blogs/Fundamentos-de-extrusion-por-soplado-Parte-2+131394>)

Algunas propiedades físicas del polietileno podrían considerarse su punto de fusión el cual está entre 120 a 130 °C para el polietileno de alta densidad y entre 105 a 115 °C para el polietileno de baja densidad. Su permeabilidad térmica, de .33 W/(m K) para el LDPE y entre .42 - .51W/(m K) para HDPE Entre las propiedades químicas ambos grupos de polietileno presentan una excelente resistencia química, lo que significa que no cede ante ácidos fuertes,

			GABKBahGGABQvgdYhBRgviVoAXABeACAaAlBiAHfCZI BAzAuOJgBAKABAegBCsABAQ&scIent=gws-wiz
Módulo de Young (elástico)	1.07e9 - 1.09e9	Pa	https://dielectricmf.com/knowledge-base/polyethylene/
Densidad de masa	952 - 965	kg/m ³	https://dielectricmf.com/knowledge-base/polyethylene/
Fusión	130 - 137	°C	https://dielectricmf.com/knowledge-base/polyethylene/

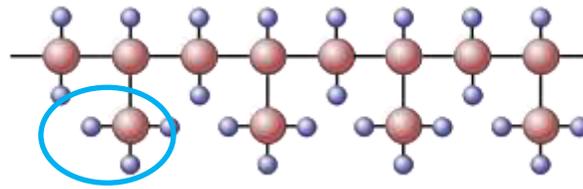
Varias fuentes.

4.2.6. Polipropileno

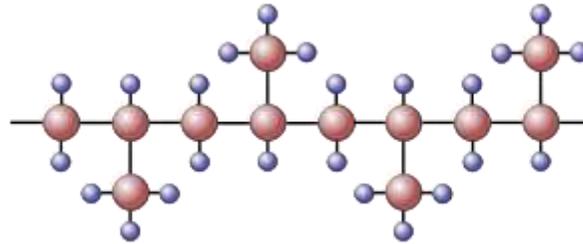
Conocido como el acero de la industria del plástico, debido a sus diversas modificaciones y/o adaptabilidad, (Brydson, 1999) es un termoplástico semi cristalino, obtenido por medio de la polimerización del monómero propileno con la presencia de un catalizador específico, posee estabilidad térmica, su temperatura de fusión es 168 – 175 °C. Su producción ocasiona un menor impacto ambiental, siendo 100 % reciclable y su incineración no tiene efecto contaminante manteniendo los controles necesarios es un material ligero, con alta resistencia a la tensión y la compresión, excelente rigidez resistente a la abrasión, excelentes propiedades dieléctricas, resistencia química a la mayoría de los ácidos y álcalis y muy bajo coeficiente de absorción de humedad, además no es tóxico y no mancha (al no tener colorante añadido).

Como lo indica (Textos Científicos, 2005) la producción media anual de polipropileno asciende a 40 millones de toneladas. Se utiliza en forma de tanques para compuestos químicos, en mobiliario de laboratorio, prótesis, placas de presión para filtros, juguetes etc.

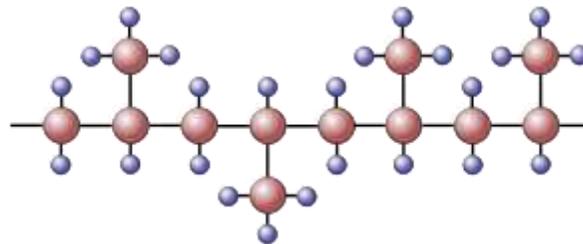
La estructura del polipropileno es similar al polietileno, con la diferencia que uno de sus carbonos de la unidad monomérica tiene unido un grupo de metilo (CH₃), esto permite distinguir tres formas isómeras de polipropileno que se distinguen por la posición del grupo de metilo, como se muestra en la siguiente figura.



Isotáctica



Sindiotáctica



Atáctica

Figura 31. Formas Isómeras del Polipropileno, Átomo/Color: Rojo/Carbono, Azul/Hidrogeno.
(<https://es.wikipedia.org/wiki/Polipropileno>)

Su número de identificación para el reciclado es el “5” y en la siguiente tabla se presenta un resumen de sus propiedades físicas y químicas.

Tabla 11. Características del Polipropileno.

Característica	Valor	Unidades	Fuente
Conductividad térmica	.2	W/(m·K)	https://material-properties.org/polypropylene-density-strength-melting-point-thermal-conductivity/
Resistencia a la Tensión	27	Mpa	https://es.wikipedia.org/wiki/Tereftalato_de_poli-etileno https://es.wikipedia.org/wiki/Tereftalato_de_poli-etileno

Módulo de Young (elástico)	1.3	Gpa	https://material-properties.org/polypropylene-density-strength-melting-point-thermal-conductivity/
Densidad de masa	900	Kg/cm ³	https://material-properties.org/polypropylene-density-strength-melting-point-thermal-conductivity/
Fusión	337	°C	https://es.wikipedia.org/wiki/Tereftalato_de_polielileno

(*Varias fuentes*).

4.2.7. Poliestireno

Con su fórmula $(C_8H_8)_n$ el poliestireno es un polímero económico y resistente, mencionado por James E. Gray en su libro: “Poliestireno: Propiedades, Rendimiento y Aplicaciones”. como el segundo plástico más común en la vida cotidiana después del polietileno, con presentaciones de plástico sólido por debajo de los 100 °C; por encima de esta temperatura es procesable y moldeable, también se presenta en forma de espuma como poliestireno expandido y como poliestireno extruido para envoltorio y como aislante (Gray, 2011).

Su producción se logra calentando el etilbenceno o también conocido como estireno (entre otros); un líquido inflamable incoloro de olor similar a la gasolina.

Al igual que la mayoría de los plásticos cuando se utiliza como materia prima, se presenta en partes pequeñas llamadas pellets (o bolitas en español) de diferentes tamaños. Los procesos para el poliestireno son varios, uno de ellos: extrusión de poliestireno, el cual consiste en la fundición del material hasta volverlo semi- líquido para forzarlo a atravesar un dado o boquilla dándole una geometría específica al endurecerse por el enfriamiento. Con esta técnica se crea una lámina de plástico sólido o bien un rollo de plástico flexible, también es posible fabricarlo como una espuma rígida y uniforme utilizada regularmente como aislante térmico. (Crawford, 1998). Otro proceso para el poliestireno es el conocido como polietileno expandido, el cual consiste en calentar el material para que se libere gas de su interior y se llene con aire al agitar el material caliente, el cual se torna maleable y se expande en tamaño por la temperatura, luego es vertido en un molde, es comprimido y calentado justo por debajo

del punto de fusión para que todas las partículas de poliestireno queden unidas entre sí, otro nombre para esta presentación es la nieve seca, este material sirve para empaçar productos por su absorción de impactos, además es usado como aislante térmico. Una variación del poliestireno se conoce como poliestireno cristal, así lo menciona el doctor en materiales Vikas Mittal de la universidad de Zurich en Suiza, en su libro: “Manufactura de Nanocompuestos con ingeniería de plásticos”, donde indica que dicha preparación de material puede ser extruido e incluso inyectado, producido con estireno de alta pureza, es un sólido transparente duro y frágil, que resulta vítreo por debajo de 100 °C, arriba de esta temperatura es maleable y procesable, utilizado para fabricar un sinfín de productos para electrónicos y electrodomésticos, en la industria automotriz, sector de alimentos, sistemas de aislamiento y sector médico (Mittal, 2015).

La forma molecular del poliestireno se muestra en la siguiente figura, y presenta el número “6” en la escala de reciclaje.

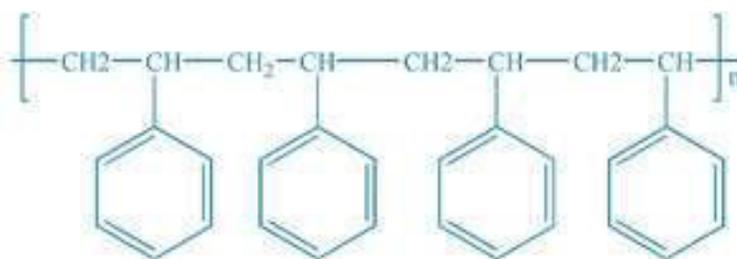


Figura 32. *Molécula de Poliestireno.*

(<https://tecnologiadelosplasticos.blogspot.com/2011/06/poliestireno.html>)

En la siguiente tabla se resumen algunas propiedades físicas y químicas del poliestireno.

Tabla 12. Características del Poliestireno.

Característica	Valor	Unidades	Fuente
Conductividad térmica Expandido	.03	W/(m·K)	https://www.nuclear-power.com/nuclear-engineering/heat-transfer/heat-losses/insulation-materials/thermal-conductivity-of-expanded-polystyrene/#:~:text=Typical%20thermal%20conductivity%20values%20for,low%20thermal%20conductivity%20of%20gases.
Conductividad térmica Extruido	.15	W/(m·K)	https://designerdata.nl/materials/plastics/thermo-plastics/polystyrene
Resistencia a la Tensión	46	Mpa	https://designerdata.nl/materials/plastics/thermo-plastics/polystyrene
Módulo de Young (elástico)	3250	Mpa	https://designerdata.nl/materials/plastics/thermo-plastics/polystyrene
Densidad de masa	1.04	g/cm ³	https://byjus.com/chemistry/polystyrene/
Fusión	240	°C	https://byjus.com/chemistry/polystyrene/

(Varias fuentes).

4.2.8. Policloruro de Vinilo

Descrito como polvo blanco inodoro e insípido por Stuart Patrick en su libro: “Compuestos y Procesamiento de PVC”, quien menciona que su primera utilidad fue en una cortina para baño, el Policloruro de vinilo mejor conocido como PVC por sus siglas en inglés (Poly Vinyl Chloride) es un polímero impermeable producido a base de un gas llamado Acetileno más ácido clorhídrico como activador para producir el monómero Cloruro de Vinilo que con la adición de catalizadores da pie a la polimerización de radicales libres creando así el polímero: policloruro de vinilo (Patrick, 2004).

Con su fórmula: (C₂H₃Cl)_n el Poli cloruro de vinilo es uno de los plásticos más versátiles según (Mariano, 2012) procesado de cuatro diferentes formas: suspensión, emulsión, masa y solución. Su utilización va desde la construcción hasta la industria médica.

Su estructura es muy similar a la del polietileno, solo que cada dos átomos de carbono, uno de los átomos de hidrogeno esta sustituido por un átomo de cloro, la siguiente figura ilustra la forma molecular de este polimero.

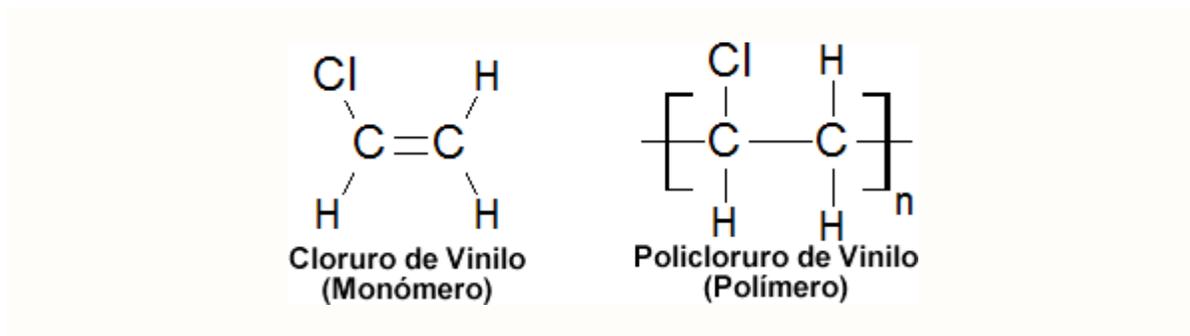


Figura 33. Polimerización del Cloruro de Vinilo.

(<https://tecnologiadelosplasticos.blogspot.com/2011/06/policlorurodevinilo.html>)

El policloruro de vinilo tiene características y propiedades atractivas para su utilización en diferentes industrias:

- Elevada resistencia a la abrasión.
- Baja densidad.
- Buena resistencia mecánica y de impacto.
- Puede tornarse rígido o flexible con el uso de aditivos.

Debido a la presencia de un átomo de cloro en su molécula, tiene muy poca flamabilidad, además de baja estabilidad térmica, causada por su propia estructura molecular, su resistencia a la temperatura es directamente proporcional a su peso molecular (Patrick, 2004).

El PVC puro es una sustancia frágil y quebradiza, se mezcla con diferentes sustancias para obtener propiedades como: Estabilizantes, en piro retardantes, fungicidas y plastificantes.

Debido a estos agentes existen diferentes tipos de PVC:

4.2.9. Poliuretano

En el libro “Química y Tecnología de Polioles para Poliuretanos”, Mihail Ionescu describe al Poliuretano como un material adaptable, ya que puede ser flexible, semirrígido, rígido y hasta líquido. El poliuretano se considera como termo fijos y termo plásticos o termo estables, siendo los primeros aquellos que degradan su composición química antes de fluir cuando son calentados, lo que no ocurre con los termo plásticos que son capaces de fluir sin degradarse al subir su temperatura (Ionescu, 2008).

En la siguiente figura se presenta la forma molecular del poliuretano.

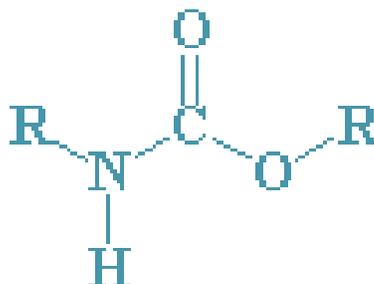


Figura 34. *Enlace de Uretano.*

(<https://polymerdatabase.com/polymer%20classes/Polyurethane%20type.html>)

Los poliuretanos son cristalinos, algunas de sus propiedades son: alta densidad, capacidades de aislamiento eléctrico, baja conductividad térmica, etc. (Ionescu, 2008).

5. MATERIALES Y MÉTODOS

5.1. Equipo de Cómputo y Software

En esta sección se describe a detalle la metodología para llevar a cabo simulaciones computacionales a nivel microscópico (molecular) y macroscópico, para la elaboración de un material compuesto a base de concreto-polímeros, así como la determinación de propiedades estructurales y energéticas.

En la realización de este trabajo de investigación se utilizaron los siguientes equipos de cómputo y paquetes computacionales.

- Computadora Laptop Toshiba Satellite S45-B, procesador Inter® Core™ @ 1.7 GHz 2.4 GHz. Sistema 64 Bits 4GB RAM, Windows 8.1 Lenguaje simple.
- Computadora HP, procesador Intel core 7, 8 nucleos, 32GB RAM y sistema operativo Linux.
- Microsoft office Word 2013.
- Visualizadores de geometrias moleculares como el software Avogadro: an open-source molecular builder and visualization tool. Version 1.15.0. <http://avogadro.cc/>.
- Visualizador de geometrias moleculares UCSF Chimera--a visualization system for exploratory research and analysis. Pettersen EF, Goddard TD, Huang CC, Couch GS, Greenblatt DM, Meng EC, Ferrin TE. *J Comput Chem.* 2004 Oct;25(13):1605-12.
- Paquete computacional para llevar a cabo simulaciones moleculares GROMACS 2020 open source for molecular dynamics. *Comp. Phys. Comm.*, **91** 43–56 (1995).
- Visualizador de geometrías moleculares, VMD Humphrey, W., Dalke, A. and Schulten, K., "VMD - Visual Molecular Dynamics", *J. Molec. Graphics*, 1996, vol. 14, pp. 33-38.

- Interfase web para la preparacion de archivos de simulacion molecular: CHARMM-GUI S. Jo, T. Kim, V.G. Iyer, and W. Im (2008) CHARMM-GUI: A Web-based Graphical User Interface for CHARMM. J. Comput. Chem. 29:1859-1865.
- Paquete computacional para llevar a cabo simulaciones moleculares, LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales, A. P. Thompson, H. M. Aktulga, R. Berger, D. S. Bolintineanu, W. M. Brown, P. S. Crozier, P. J. in 't Veld, A. Kohlmeyer, S. G. Moore, T. D. Nguyen, R. Shan, M. J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott, S. J. Plimpton, Comp Phys Comm, 271 (2022) 10817.
- Paquete para construir sistemas moleculares de cientos de moléculas en una caja, Packmol L. Martínez, R. Andrade, E. G. Birgin, J. M. Martínez. Packmol: A package for building initial configurations for molecular dynamics simulations. Journal of Computational Chemistry, 30(13):2157-2164, 2009.
- Paquete de simulación computacional de materiales a nivel macroscopico, Solid Works by Dassault Systems 2021.

5.2. Metodología

Los avances en la nano ingeniería utilizando simulación computacional han permitido investigaciones que contribuyen al desarrollo de materiales con características únicas. Las investigaciones a nano escala de materiales para la construcción nos permiten predecir y desarrollar características específicas en materiales compuestos como durabilidad y su desempeño en entornos específicos, basados en movimiento molecular en lapsos de tiempo definido. Según Denvid Lau- Wei Jian y Col. el uso de dinámica molecular en el campo de la construcción puede ayudarnos a encontrar varios mecanismos de falla, al predecir las respuestas mecánicas y mejorar así un diseño estructural.

Basado en (Denvid Lau, et al 2018) En las simulaciones de dinámica molecular, los materiales pueden tratarse como agregaciones de átomos. Consideradas como partículas de masa común, es decir no cuánticas, o en otras palabras; aquellas que obedecen a las leyes del movimiento de Newton. Esta simulación se basa en la trayectoria del movimiento molecular, la información obtenida es la evolución de esta molécula en un tiempo, a mayor tiempo mayor información y una mejor apreciación del comportamiento molecular, sin embargo esto conlleva a una desventaja, ya que a mayor tiempo de análisis molecular, se vuelve más tardado el procesamiento computacional.

El uso de DM (Dinámica Molecular) para la predicción de propiedades en diseño de materiales es utilizado ampliamente hoy en día, el estudio en combinaciones de polímeros y cemento se ha realizado con éxito en varios trabajos de investigación, (Hirata, Branicio, Ye, Zheng, Tomike y Col. 2017) en su estudio: “Simulación de Dinámica Atomística Para Determinar Conformación de Súper Plastificantes en Solución de Agua y Cemento”, utiliza la dinámica molecular para estudiar conformaciones de polímeros en diversos ambientes, analizando la evolución temporal de los sistemas proporcionada por la trayectoria de la simulación. (Mohan et al 2014) demostró que la adición de 12% de súper plastificante no tiene ningún efecto sobre las propiedades mecánicas del hidrato de silicato de calcio (Cemento).

5.2.1. Dinámica Molecular.

¿Qué es la dinámica molecular? Es una simulación del movimiento molecular en función del tiempo para el cálculo de diferentes propiedades físico-químicas, como se menciona por Alan Hinchliffe en su libro: “Modelado Molecular para principiantes”. En la dinámica molecular no se toma en cuenta los movimientos de electrones y se considera la energía de las moléculas en función al movimiento de sus núcleos, lo cual se pueden estudiar mediante la segunda ley de Newton que cuya forma diferencial representada a continuación, nos indica que, a partir de coordenadas iniciales determinadas y velocidades iniciales, es posible determinar la energía total del sistema mediante las siguientes ecuaciones (Hinchliffe, 2008):

$$F = m \cdot a \quad \rightarrow \quad d^2y/dt^2 = F_i/m_i$$

$$E_{\text{total}} = E_{\text{energía potencial}}(x_0) + E_{\text{energía Cinética}}(v_0)$$

En donde F es la fuerza sobre los átomos o moléculas, m la masa, a es la aceleración, y la posición atómica, t tiempo y E , es la energía.

Utilizando integración numérica, se obtiene la evolución temporal (posiciones, atómicas, velocidades y fuerzas) del sistema con respecto al tiempo, en donde estas trayectoria de movimiento molecular se encuentra sujetas a diferentes variables externas de presión, temperatura o fuerza.

A diferencia de la mecánica cuántica, basada en el movimiento de electrones, y el cálculo de la función de onda, la mecánica clásica considera a los átomos como esferas solidas unidas mediante resortes.

La dinámica molecular se basa en los principios de Max Born y Robert Oppenheimer, los cuales propusieron que se considere al átomo como únicamente el núcleo ya que su peso es mucho mayor al de los electrones, además los electrones pueden adaptarse a cualquier cambio de posición de los núcleos, por lo tanto se dice que la energía de una molécula en su

estado basal se puede considerar como una función únicamente de las coordenadas de los núcleos atómicos, esta función recibe el nombre de campos de fuerza. (Hinchliffe, 2008)

A la fecha se han desarrollado un gran número de campos de fuerzas que permiten la simulación de proteínas, ácidos nucleicos, lípidos, ligando orgánicos y materiales. Los campos de fuerza están constituidos por una función de energía potencial que incluye términos enlazados y no enlazados, como se indica en la siguiente fórmula:

$$E_{\text{Total}} = E_{\text{Enlace}} + E_{\text{Angulo}} + E_{\text{Torcional}} + E_{\text{total}} + (E_{\text{vdw}} + E_{\text{elec}})$$

Donde los términos de enlace están constituidos por energías de enlace covalente, también debido a los ángulos que se forma entre tres átomos y a los ángulos de torsión. La interacciones de no enlace pueden ser por medio de atracción y repulsión de fuerzas del tipo de Van der Waals, incluyendo las interacciones electrostáticas.

Por otro lado, las condiciones de presión y temperatura juegan un papel decisivo en la simulación de un sistema molecular, en los cuales destacan los sistemas NVT o canónico el cual indica un sistema donde una cantidad de masa “N” mantiene su volumen “V” y temperatura “T” constantes. Como otro escenario también se utiliza el sistema NPT siendo el isotérmico-Isobárico o bien donde una cantidad de masa “N” mantiene su presión “P” y su temperatura “T” como constante (Hinchliffe, 2008).

Para iniciar la dinámica molecular se requiere en primer lugar es necesario preparar el sistema inicial, por lo tanto, es necesario una configuración que puede provenir de fuentes experimentales, teóricas o una combinación de ambas. Jan Jensen menciona en su libro: “Conceptos Básicos de Modelado Molecular” que una vez identificada la estructura molecular del material a analizar, es necesario escoger o/y añadir el campo de fuerza que mejor se adapte al sistema y gracias al uso de uno o más campos de fuerzas se asignan una serie de parámetros de átomos en que se incluyen distancias de enlace, ángulos, ángulos de torsión, etc.

La preparación inicial del sistema a simular, con lleva la creación de varios archivos de entrada. Estos archivos pueden generarse por varios métodos, sin embargo, se requiere saber lo que se necesita simular, que movimiento se requiere observar y estudiar.

5.2.1.1. Archivos PDB

Constituye (Lemkul, 2018) un archivo esencial para el estudio de dinámica molecular, un archivo PDB (Protein Data Bank o Banco de Datos de Proteínas por su traducción al español) contiene las coordenadas atómicas y/o las velocidades del sistema, en otras palabras, es un archivo que contiene la geometría o forma molecular del compuesto a analizar, este tipo de archivos pueden descargarse de internet o se pueden crear utilizando paquetes computacionales como Avogadro: an open-source molecular builder and visualization tool. Version 1.15.0. <http://avogadro.cc/> o la plataforma Charmm-Gui S. Jo, T. Kim, V.G. Iyer, and W.IM (2008) CHARMM-GUI: A Web-based Graphical User Interface for CHARMM. J. Comput. Chem. 29:1859-1865.

Para esta investigación se desarrollaron archivos PDB para Teraftalato de Polietileno (PET), Polipropileno (PP), Poliestireno (PS), hule de Estireno y Butadieno (SBR) y cristales de silicato de calcio o cemento. Cada uno de los archivos se creó manualmente utilizando las herramientas computacionales como Avogadro o Charmm-Gui.

Una vez construida la geometría del sistema molecular, es necesario preparar varios archivos de topología que nos indican los enlaces y ángulos entre los átomos, archivos de parámetros para las interacciones no-enlazantes y enlazantes (campo de fuerza) y el archivo de configuración que especifica el tiempo de simulación, la temperatura y presión del sistema, el tamaño de la caja molecular, archivos que son suministrados al paquete de simulación molecular denominado GROMACS 2020

- Archivo de topología para el sistema
- Archivo que contiene los Parámetros del campo de fuerza
- Archivo de configuración.

5.2.1.2. Archivo de Topología.

El archivo de topología es un archivo de entrada de extensión *.top, el cual contiene la información para definir la molécula, este archivo contiene información del tipo de átomo, cargas, enlaces, ángulos del átomo y como estos están conectados entre sí para formar una sola molécula. El archivo PDB contiene las coordenadas de la molécula, pero no la información de conectividad de los átomos así lo señala el profesor Sumit Sharma, en su publicación: Simulación de Dinámica Molecular de Nanocompuestos Usando BIOVIA Materials Studio, Lammmps y Gromacs (Sharma, 2019).

5.2.1.3. Archivo PSF

El Archivo PSF (Protein Structure File) Contiene la información estructural de todo el sistema, el cual contiene decenas o cientos de moléculas, nos indica el número de enlaces presentes en el sistema, el número de ángulos, el número de interacciones no-enlazantes, etc. (Sharma, 2019).

5.2.1.4. Archivo de Parámetros del campo de Fuerza.

Un archivo de parámetro con extensión: *.par llamado en ingles FFPPF (Force Field Parameter File o archivo de parámetros de campo de fuerza por su traducción del Ingles). El archivo de parámetro define diferentes características como la longitud del enlace entre átomos, valor angular entre tres átomos, valores de los ángulos diedros, valores para las constantes armónicas de los resortes, parámetros de van der waals . Se aconseja utilizar el campo de fuerza OPLS (*J. Am. Chem. Soc.* **110** (6): 1657–1666) para los polímeros y el campo de fuerza CLAYFF *J. Phys. Chem. B* 2004, 108, 4, 1255–1266 para el concreto.

5.2.1.5. Archivo de Configuración.

En el archivo de configuración, es donde se especifican valores como el tiempo de simulación, el paso de tiempo empleado, las variables del termostato y baróstato, la

temperatura, y presión del sistema, el tamaño y tipo de celda utilizada, el nombre de los archivos de salida, la ruta donde se encuentran los archivos de entrada, la frecuencia de impresión de las variables energéticas, coordenadas, fuerzas y velocidades atómicas.

5.2.2. Estructuras Geométricas y Campos de Fuerza moleculares

La estructura molecular cristalográfica del cemento se presenta a continuación (Rejmak y Col).



Figura 35. Estructura de la tobermorita 14 Å. *Izquierda*) vista frontal, *derecha*) vista lateral.
Átomo/color: calcio/rosa, hidrógeno/blanco, oxígeno/rojo, silicio/amarillo.

La estructura molecular fue extraída del archivo cif dentro de la información de soporte utilizando el programa Mercury (Macrae, y otros, 2006) en formato pdb. El campo de fuerza (FF) fue asignado modificando el nombre de cada átomo. La celda unitaria del material cristalino, concreto, se replicó en las direcciones x , y y z en una relación de 4, 2 y 4 para construir una supercelda utilizando el paquete simulación de GROMACS (Abraham, et al., 2015), como se muestra en la siguiente Figura.

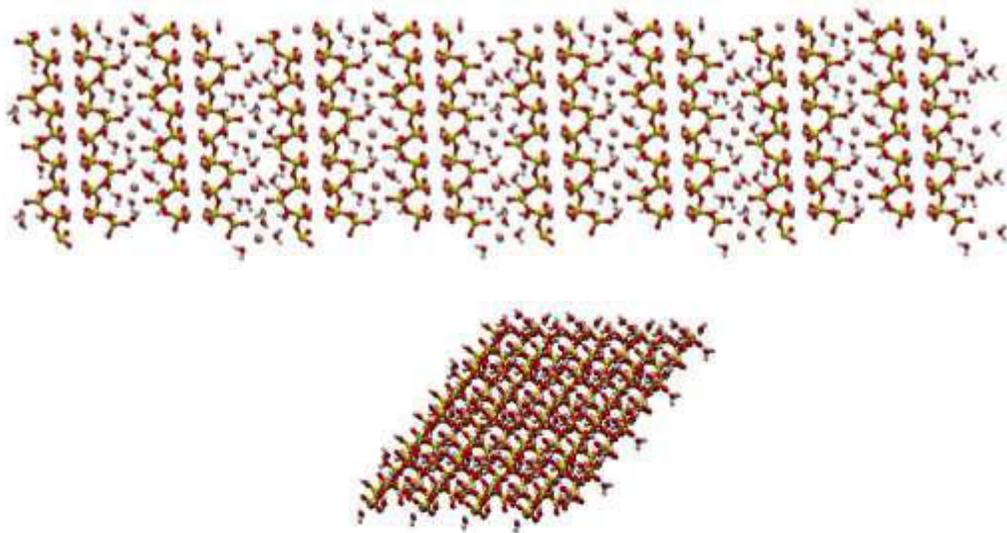


Figura 36. Estructura de la tobermorita 14 Å. Izquierda) vista frontal, derecha) vista lateral.
Átomo/color: calcio/rosa, hidrógeno/blanco, oxígeno/rojo, silicio/amarillo.

El campo de fuerza (FF) que se utilizó para describir al cemento fue el modelo CLAYFF, (Cygan, Liang, & Kalinichev, Molecular Models of Hydroxide, Oxyhydroxide, and Clay Phases and the Development of a General Force Field, 2004) (Mutisya, de Almeida, & Miranda, 2017) (Cygan, Greathouse, & Kalinichev, Advances in Clayff Molecular Simulation of Layered and Nanoporous Materials and Their Aqueous Interfaces, 2021) cuya topología y parámetros se escribieron en formato de archivos para el paquete de simulación molecular GROMACS.

Polímeros:

Los polímeros modelados fueron:

- a) Polietileno tereftalato (PET)
- b) Polipropileno (PPL)
- c) Poliestireno (PES)
- d) Caucho/plástico de butadieno-estireno (SBR)

Las estructuras de los polímeros se presentan en la siguiente figura, y fueron construidas utilizando el software Gaussview 6.0 (Gaussian.com) y almacenadas en archivo en formato pdb.

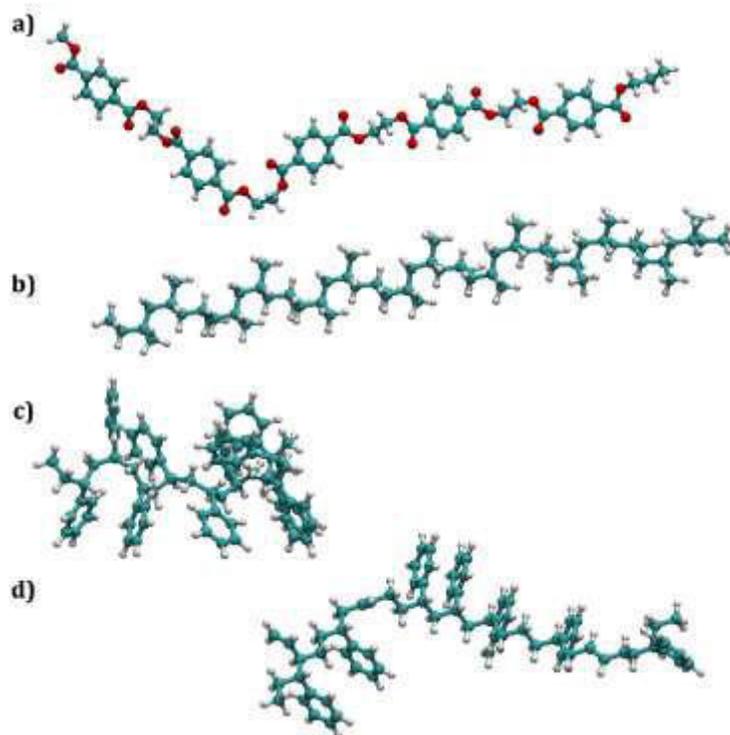


Figura 37. Estructuras de las cadenas de los polímeros: a) polietileno tereftalato (PET), b) polipropileno (PPL), c) poliestireno (PES), d) caucho de butadieno-estireno (SBR). Átomo/color: carbono/gris, hidrógeno/blanco, oxígeno/rojo.

El campo de utilizado para modelar los polímeros fue OPLS-AA, (Jorgensen & Tirado-Rives, Potential Energy Functions for Atomic-Level Simulations of Water and Organic and Biomolecular Systems, 2005) (Dodda, Vilseck, Tirado-Rives, & Jorgensen, 2017) el cual se obtuvo a través de la plataforma *ligpargen*, (Dodda, Cabeza de Vaca, Tirado-Rives, & Jorgensen, 2017) (Jorgensen, LigParGen OPLS/CM1A Parameter Generator for Organic Ligands, s.f.) desarrollada por Jorgensen y col. Los archivos de topología (*top*) y de estructura

(*gro*) se modificaron para definir los diferentes tipos de átomo que existen entre los diversos polímeros.

5.2.3. Equilibración de los Sistemas: Cemento y compuestos a base de Cemento-Polímeros.

Todas las simulaciones en esta sección se llevaron a cabo utilizando el paquete de simulación molecular GROMACS. (Abraham, et al., 2015)

5.2.3.1. Cemento

La estructura inicial del concreto fue minimizada para eliminar todos los choques entre los átomos. Para ello, se llevó a cabo una minimización de 10,000 pasos en GROMACS. El radio de corte (r_{cut}) fue de 11 Å (mitad del lado más pequeño de la caja). Una vez terminada esta etapa:

- a) La equilibración se realizó con las coordenadas de salida en un ensamble NPT (número de moléculas, presión y temperatura constantes) la cual, tuvo una duración de 100 picosegundos (ps) usando un paso de tiempo n (Δt) de un femtosegundo (fs) para integrar las ecuaciones de movimiento a través del algoritmo leap-frog. La temperatura fue constante a 300 K con el termostato v-rescale (Bussi, Donadio, & Parrinello, 2007) y la presión se mantuvo a 1 bar usando el baróstato Berendsen. (Berendsen, Postma, van Gunsteren, Dinola, & Haak, 1984) Se usaron condiciones periódicas de frontera junto con un $r_{cut} = 11$ Å para calcular todas las interacciones no covalentes en el espacio real, mientras que las interacciones no-enlazantes de largo alcance (más allá del radio de corte) fueron calculadas a través del método Particle-Mesh Ewald (PME). (Essmann, et al., 1995) Se aplicó la regla de combinación geométrica para todas las interacciones ϵ_{ij} y σ_{ij} con un factor de escalamiento de 0.5 para todas las interacciones 1-4 electrostáticas y 1-4 Lennard-Jones. Finalmente, las longitudes de todos los enlaces covalentes con hidrógeno ($C - H$ y $O - H$) se mantuvieron fijas usando el algoritmo

LINCS. (Hess, Bekker, Berendsen, & Fraaije, 1997) La estructura del cemento obtenida al finalizar la etapa de equilibración se muestra en la siguiente Figura.

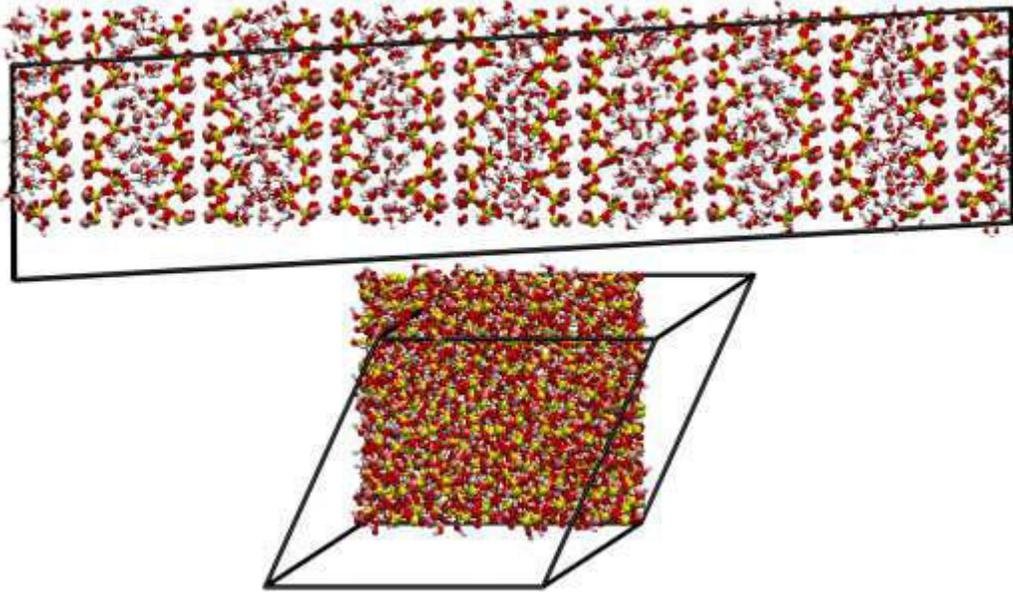


Figura 38. Configuración final del cristal de cemento obtenido luego de 100 ps de simulación en el ensamble NPT. Caja triclínica.

- b) Una segunda etapa de minimización se realizó, eliminando la inclinación, para modelar el sistema pasando de una caja triclínica (como la mostrada en la Figura anterior) a una caja del tipo paralelepípedo. La minimización usó como coordenadas de entrada las obtenidas después de la primera minimización y se emplearon los mismos valores de parámetros que en la simulación previa. La configuración geométrica al final de esta simulación se muestra en la siguiente Figura.

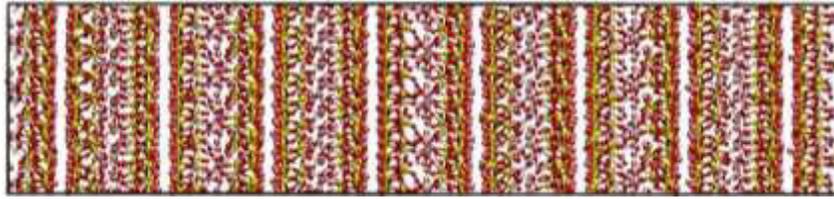


Figura 39. *Configuración final del cristal de cemento obtenido luego de una minimización en caja paralelepípedo.*

- a) Una vez minimizado el sistema en la caja paralelepípedo se llevó a cabo otra etapa de equilibración y la configuración final se muestra en la siguiente Figura.

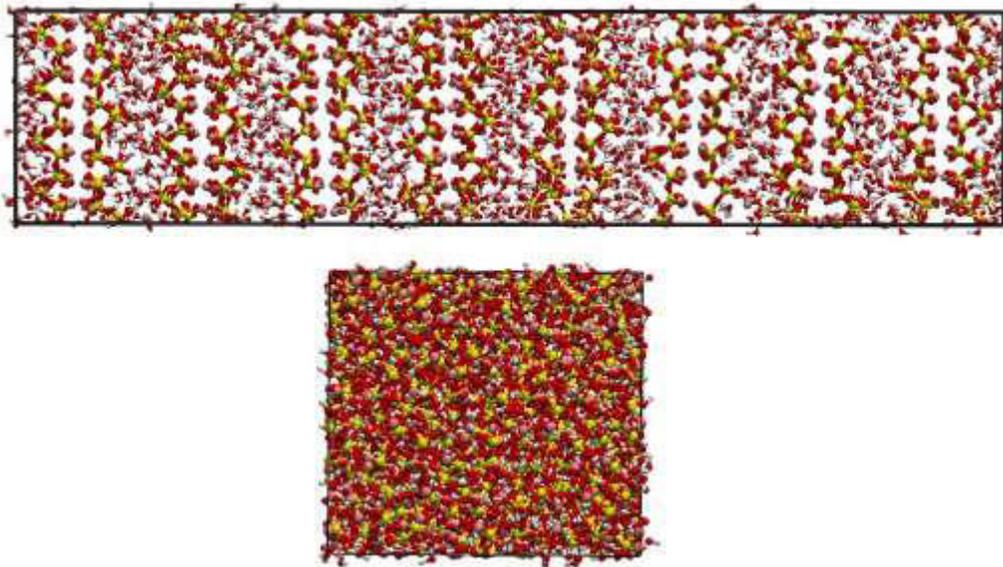


Figura 40. *Configuración final del cristal de cemento obtenido luego de 100 ps de simulación en el ensamble NPT en caja triclínica y 100 ps en caja paralelepípedo.*

5.2.4. Cemento-polímeros: Simulación y propiedades.

El sistema mencionado anteriormente se construyó colocando dos cristales o placas de cemento separados 27 \AA en la dirección z . Luego, en el espacio vacío entre los dos cristales de cemento se colocaron 5 moléculas de cada uno de los polímeros mencionados anteriormente.

Con el uso del paquete computacional Packmol (Martínez, Andrade, Birgin, & Martínez, 2009) se construyó el sistema molecular mostrado en la siguiente figura.

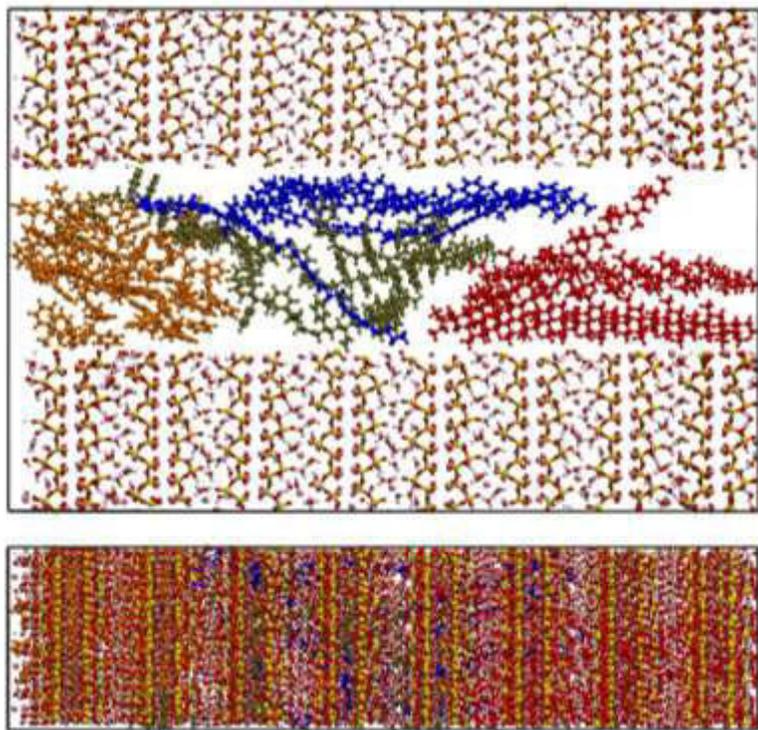


Figura 41. Estructura cemento-polímeros-cemento generada por Packmol. El sistema contiene 5 moléculas de cada uno de los polímeros (5xPET -en color azul-, 5xPPL -en color rojo-, 5xPES -en color naranja- y 5xSBR -en color verde-). Arriba) vista frontal del sistema, abajo) vista superior del sistema.

Una vez construido el sistema cemento-polímeros-cemento, se llevó a cabo una minimización de 10,000 pasos, usando un $r_{cut} = 11 \text{ \AA}$. Posteriormente, una equilibración en ensamble *NVT* (número de moléculas, volumen y temperatura constantes) de 5 nanosegundos (ns). Se usó nuevamente un $\Delta t = 1 \text{ fs}$, así como una temperatura de 300 K que se mantuvo constante usando el termostato v-rescale. Se usaron condiciones periódicas de frontera, así como un $r_{cut} = 11 \text{ \AA}$ para calcular todas las interacciones no covalentes en el espacio real y el método PME para el cálculo de todas las interacciones no covalentes más allá del radio de corte. Se usó la regla de combinación geométrica para todas las interacciones ϵ_{ij} y σ_{ij} así

como un factor de escalamiento de 0.5 para todas las interacciones 1-4 electrostáticas y Lennard-Jones. Todos los enlaces covalentes con hidrógeno ($C - H$ y $O - H$) se mantuvieron fijos usando el algoritmo LINCS. Una vez terminada esta etapa, se llevó a cabo una simulación *NVT* de longitud de 50 ns con los mismos parámetros que la etapa de equilibración de 5 ns. La configuración del sistema fue guardada cada 50 ps para el análisis de energía de interacción. La configuración final del sistema se muestra en la siguiente Figura.

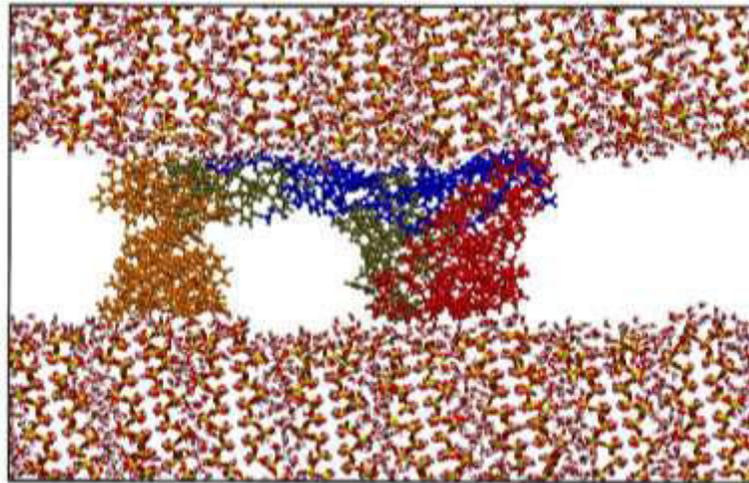


Figura 42. *Figura 8. Estructura equilibrada del sistema cemento-polímeros-cemento luego de 50ns en el ensamble NPT. El sistema contiene 5 moléculas de cada uno de los polímeros (5xPET -en color azul-, 5xPPL -en color rojo-, 5xPES -en color naranja- y 5xSBR -en color verde-).*

6. RESULTADOS

Este trabajo de investigación fue presentado durante el evento académico de MolSSI Workshop en HPC en Química Computacional y Ciencias de los Materiales, en modalidad virtual, realizado del 13 al 15 de diciembre del 2021 en Berkeley California, Estados Unidos (<https://molssi.org/>)

Los resultados de la simulación para el sistema cemento-polímeros, en donde se utilizaron 5 moléculas de cada uno de los siguientes polímeros PET, PPL, PES, SBR a lo largo de los 50 ns se muestra en la figura 43.

También se llevaron a cabo simulaciones individuales de cada uno de los polímeros entre las dos placas de concreto y la configuración final al termino de 50ns se muestran en las Figuras 44 a la 47 para el PET, PPL, PES y SBR, respectivamente. Se observa que el PET se une de manera uniforme a la placa de cemento superior, posiblemente debido a la presencia del oxígeno en la estructura del PET mediante puentes de hidrogeno con el cemento. Para poder determinar si la adición de los polímeros a las placas de concreto es un proceso energéticamente favorable es necesario calcular las energías de interacción.

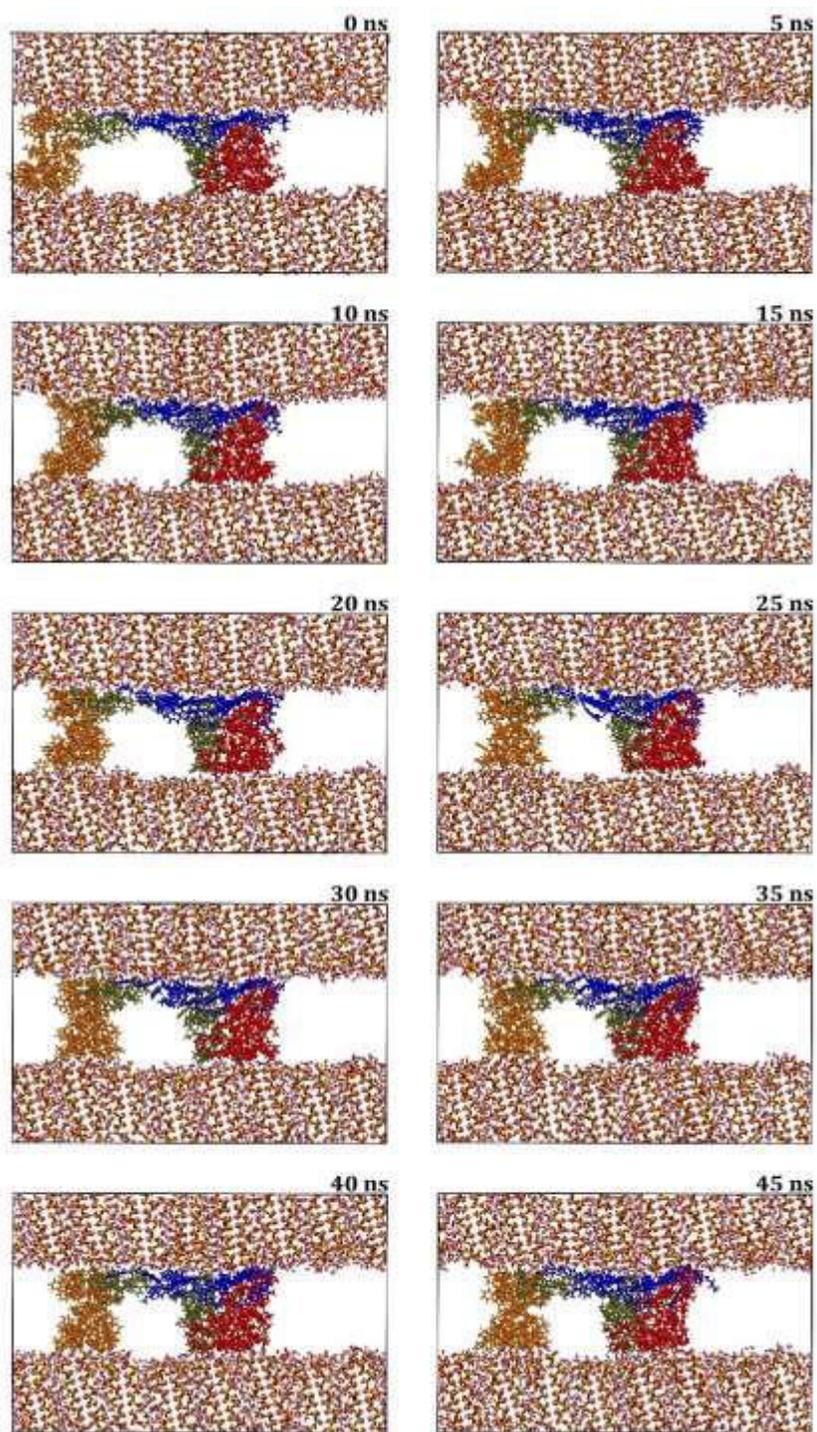


Figura 43. Estructuras del sistema cemento-polímeros-cemento a lo largo de 50ns en el ensamble NVT. El sistema contiene 5 moléculas de cada uno de los polímeros (5xPET -en color azul-, 5xPPL -en color rojo-, 5xPES -en color naranja- y 5xSBR -en color verde-).

6.1.1.1. Energía de interacción.

La energía de interacción (E_{int}) a lo largo de la trayectoria fue calculada con la siguiente ecuación:

$$E_{int,i} = E_{sistema,i} - E_{polímeros,i} - E_{cemento,i} \quad (1)$$

donde $E_{sistema,i}$ corresponde a la energía potencial del sistema en el cuadro i , $E_{polímeros}$ corresponde a la energía potencial de los polímeros en el mismo cuadro i pero sin las placas de cemento y $E_{cemento,i}$ corresponde a la energía potencial del cemento para el mismo cuadro i pero son los polímeros. En otras palabras, la energía de interacción se calculó como la energía potencial del sistema menos las partes que lo componen. Para el cuadro i , se tomó la configuración del sistema y se realizó un cálculo de energía “single point energy” (SPE) en GROMACS. Luego, para ese mismo cuadro i , se extrajo únicamente la configuración de los polímeros y se evaluó el SPE. Finalmente, el mismo procedimiento fue realizado para evaluar el SPE de las placas del cemento a través de un script escrito en bash. Este procedimiento fue evaluado para los 1000 cuadros a lo largo de la trayectoria. El resultado se muestra en la Figura 48.

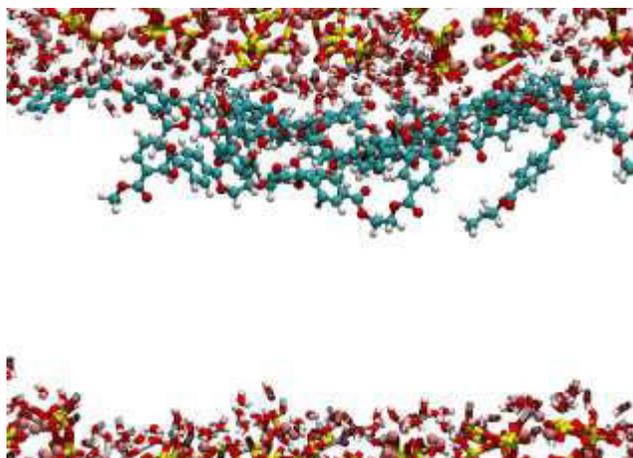


Figura 44. Configuración del PET en el sistema cemento-polímeros-cemento luego de 50 ns de equilibración en NVT.

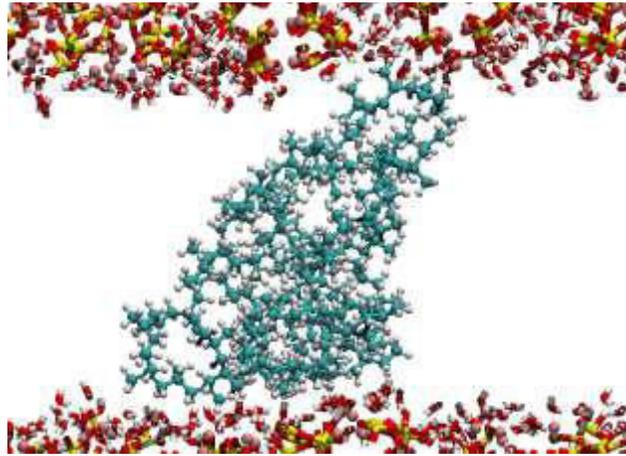


Figura 45. Configuración del PPL en el sistema cemento-polímeros-cemento luego de 50 ns de equilibración en NVT.

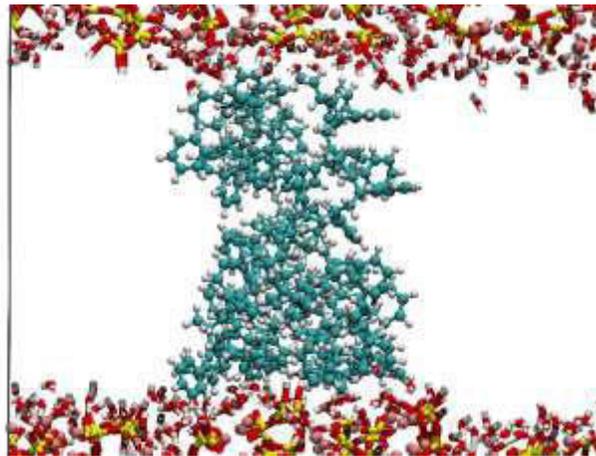


Figura 46. Configuración del PES en el sistema cemento-polímeros-cemento luego de 50 ns de equilibración en NVT.

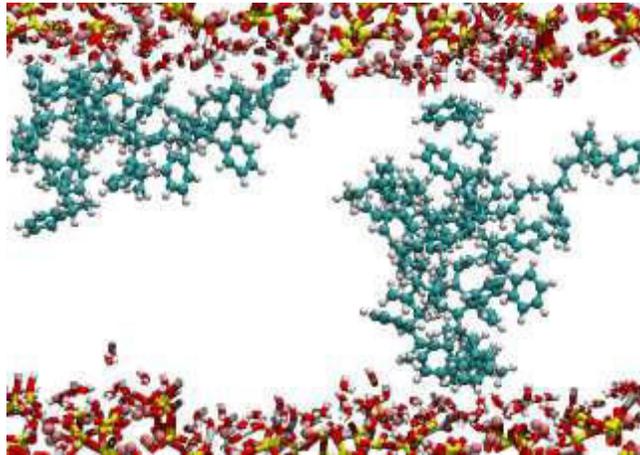


Figura 47. Configuración del SBR en el sistema cemento-polímeros-cemento luego de 50 ns de equilibración en NVT.

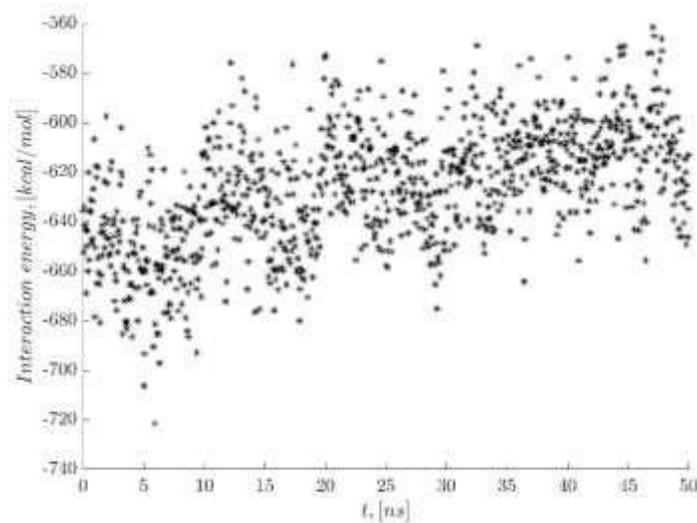


Figura 48. Energía de interacción para el sistema cemento-polímeros-cemento a lo largo de 50 ns.

Se puede observar en la Figura anterior, que la energía de interacción es negativa, lo que indica que el complejo cemento-polímeros es estable en las condiciones de simulación, es decir que la adición de los polímeros a las placas de concreto da lugar a un proceso termodinámicamente favorable.

A continuación, se determinó el módulo de Young del sistema con la finalidad de evaluar su estabilidad mecánica o estructural.

6.1.1.2. Módulo de Young

Se evaluó el módulo de Young para el sistema cemento-polímeros-cemento por medio de la metodología propuesta por Muthoka y col. (Muthoka, y otros, 2020), este procedimiento utiliza la opción PULL (jalón en español) de GROMACS para ejercer una fuerza F sobre un área A en particular (la cual puede ser un conjunto de átomos, un anillo, etc.) a lo largo de una dirección (x , y o z). A continuación, se calcula la distorsión (longitud l) $strain = \left(\frac{l_{final} - l_{inicial}}{l_{inicial}} \right)$ con la cual se desplazó una partícula para obtener una deformación para cada fuerza F aplicada. Posteriormente, se calcula la tensión, por medio de la división de la fuerza sobre el área donde se aplicó la fuerza ($stress = F/A$). El módulo de Young (en GPa) se obtiene como la pendiente en la gráfica de $strain$ (abscisas) vs. $stress$ (ordenadas).

Para el cálculo del módulo de Young, se tomó la configuración del sistema mostrado en la Figura 49 alargando la caja en dirección z , para prevenir choques estéricos entre placas una vez que se aplique la fuerza F en esa dirección. Con esto, se realizó una minimización de 10,000 pasos usando un radio de corte de 11 Å. Una vez terminada esta etapa, se llevó a cabo una equilibración NVT restringiendo las posiciones de las dos placas con una fuerza de 10,000 KJ/mol-nm² (~23.9 kcal/mol-Å²). Para luego crear un archivo de *índices* a través de la utilidad *make_ndx* de GROMACS generando y asignando el nombre “*bottom*” (o fondo en español) a un átomo de una cadena PET localizado cerca de la placa inferior. Así mismo, se generó y asignó el nombre de “*top*” (superior) a un grupo de átomos que se localizaban cerca de la placa superior de cemento. Ambos grupos, *bottom* y *top* se construyeron con átomos de la misma cadena PET, que recorre todo el espacio desde la placa inferior hasta la placa superior del cemento tal y como se observa en la siguiente figura.

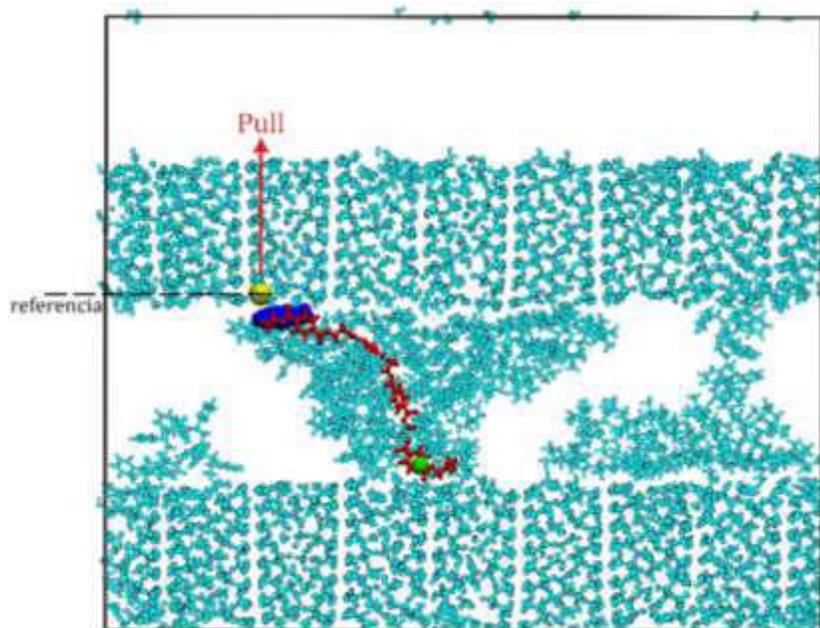


Figura 49. Grupo *bottom* (en verde) y *top* (en azul) seleccionados en el sistema cemento-polímeros-cemento para llevar a cabo las simulaciones *PULL* en GROMACS. Ambos grupos, *bottom* y *top* pertenecen a la misma cadena PET indicada en color rojo. En amarillo, el átomo de azufre del cemento (próximo a *top*) que será usado como referencia para determinar los valores del strain a través de simulaciones *PULL*.

Para determinar el área de aplicación de la fuerza, se utilizó el método de *sonda rodante* de Richard implementado por Voss y Gerstein (Voss & Gerstein, 3V: Cavity, Channel and Cleft Volume Calculator and Extractor, 2010) y disponible en la web. (Voss & Gerstein, 3V: Voss Volume Voxelator, s.f.) Para ello, el grupo de 19 átomos se extrajo del sistema general para formar un archivo *pdb* independiente y así cargarlo como input en la página citada. El método proporciona un área total, sin embargo, tomando en cuenta que:

- a) La molécula de los 19 átomos presenta una forma plana, y
- b) El movimiento del grupo *top* será restringido para mostrar una sola cara hacia el cemento,

el área obtenida por el método de *sonda rodante* de Richard fue dividida por 2, proporcionando un valor de 89.5 \AA^2 .

Se llevó a cabo una simulación *NVT* dejando fija la placa inferior de cemento, así como todos aquellos átomos dentro de una distancia de 5 Å de dicha placa fijos. El tiempo de fue de 100 ps usando un $\Delta t = 1$ fs, así como una temperatura objetivo de 300 K que se mantuvo constante usando el termostato *v-rescale*. Condiciones periódicas de frontera, así como un $r_{cut} = 11$ Å fueron usadas. El método PME fue usado para evaluar todas las interacciones no covalentes más allá del radio de corte. Se usó la regla de combinación geométrica para todas las interacciones de mezcla ϵ_{ij} y σ_{ij} así como un factor de escalamiento de 0.5 para todas las interacciones 1-4 electrostáticas y Lennard-Jones. Todos los enlaces covalentes con hidrógeno (*C – H* y *O – H*) se mantuvieron fijos usando el algoritmo LINCS. La configuración de salida de esta etapa fue usada como coordenadas de entrada para simulaciones PULL en GROMACS.

Las simulaciones PULL en GROMACS permiten aplicar una fuerza sobre un grupo de átomos. Esto se hace con diversos fines, tales como separar dos grupos de átomos, acercad dos grupos de átomos, etc. Para llevar una simulación PULL en GROMACS, se debe de incluir la siguiente información en el archivo de entrada:

```

1  ; PULL
2  pull                = yes
3  pull-nstxout        = 50
4  pull-nstfout        = 50
5  pull_ncoords        = 1           ; solo se usará una coordenada de reacción
6  pull_ngroups        = 2           ; la coordenada de reacción está definida por 2 grupos
7  pull_group1_name    = top         ; el nombre del primer grupo (definido en el *.ndx)
8  pull_group2_name    = bottom      ; el nombre del segundo grupo (definido en el *.ndx)
9  pull_coord1_type    = constant-   ; Usar constant-force
   force
10 pull_coord1_geometry = distance    ; La geometría del US es una distancia definida por
   la coordenada de reacción 1
11 pull_coord1_dim     = N N Y       ; Sólo imprimir los componentes de la distancia en la
   que se está moviendo la coordenada de reacción 1
12 pull_coord1_groups  = 1 2         ; la coordenada de reacción está definida por los dos
   grupos
13 pull_coord1_k       = -0000       ; kJ mol^-1 nm^-2 (dividir por 4.184 para obtener
   kcal/mol-nm2)

```

Analizado esta sección por líneas, tenemos:

- 1 Comentario que indica que las siguientes opciones definen la metodología PULL

- 2 Con la opción *yes* activamos la opción PULL de GROMACS
- 3 Con esta opción, se genera un archivo de trayectoria que guardará la configuración del sistema cada 50 pasos.
- 4 Con esta opción, se guardará a un archivo los resultados de la simulación PULL cada 50 ps.
- 5 En el sistema definiremos solo una coordenada (la cual será definida por los grupos *top* y *bottom*).
- 6 La coordenada (distancia) está definida por dos grupos, los cuales son:
- 7 El grupo *top* (grupo 1) y
- 8 El grupo *bottom* (grupo 2).
- 9 La coordenada será afectada por una *fuerza constante* (o F)
- 10 En esta opción se define el tipo de coordenada, ésta puede ser una distancia, ángulo, etc. Para nuestro caso, la coordenada será una *distancia*.
- 11 Para dicha distancia nos importa determinar su movimiento vertical a lo largo del eje z cuando la fuerza se aplique, por lo que los valores de x y y , no serán tomados en cuenta.
- 12 La distancia está construida por los grupos 1 y 2 definidos en las líneas 7 y 8.
- 13 Valor de la fuerza F en KJ/mol-nm^2 que será aplicada para acercar (si el valor es positivo) o alejar (si el valor es negativo) a la distancia formada por los grupos que hemos definido. El valor que se ha definido aquí es 0 KJ/mol-nm^2 ya que queremos conocer el valor de referencia.

La simulación PULL con fuerza de $F = 0 \text{ KJ/mol-nm}^2$ tuvo una longitud de 50 ps en el ensamble *NVT*. Como se indicó, las coordenadas de placa inferior, así como todos los átomos dentro de un radio de 5 \AA de dicha placa fueron restringidas. Se usó un $\Delta t = 1 \text{ fs}$; la temperatura se mantuvo fija a 300 K usando el termostato v-rescale. Se usaron condiciones periódicas de frontera, un $r_{cut} = 11 \text{ \AA}$ y el algoritmo PME fue usado para evaluar todas las interacciones no covalentes. Para las interacciones de mezcla (ϵ_{ij} y σ_{ij}), se usó combinación geométrica, así como un factor de escalamiento de 0.5 para todas las interacciones 1-4

electrostáticas y Lennard-Jones. Todos los enlaces covalentes con hidrógeno ($C - H$ y $O - H$) se mantuvieron fijos usando el algoritmo LINCS.

El objetivo de la simulación PULL con $F = 0$ KJ/mol-nm² fue el de obtener la distancia del cemento que sería usada para evaluar el módulo de Young. Para ello se seleccionó un átomo próximo al grupo *top* como se observa en la Figura 50. Al término de la simulación PULL con $F = 0$ KJ/mol-nm², la posición del átomo de azufre fue 54.61 Å, por lo que ésta posición será la referencia para calcular el *strain* obtenido con fuerzas diferentes de 0.

Una segunda simulación PULL fue llevada a cabo usando un valor de $F = 1500$ KJ/mol-nm². Finalmente, una tercera simulación PULL con valor de $F = 4000$ KJ/mol-nm² también fue llevada a cabo. Todos los demás detalles de las simulaciones fueron iguales a los utilizados cuando $F = 0$ KJ/mol-nm². En la Tabla 14, se resumen todas las distancias observadas al final de la simulación para el átomo de azufre, así como el valor de *strain* (elongación) del cemento calculado para cuando las fuerzas aplicadas fueron diferentes de cero. La configuración al final de la simulación PULL con $F = 1500$ KJ/mol-nm² se muestra en la siguiente figura.

Tabla 14. Tabla I Valores de la elongación (*strain*) y tensión (*stress*) calculados para el cemento en el sistema cemento-polímeros a 300 K.

Fuerza [KJ/mol-nm ²]	Posición en z del átomo de azufre [Å]	<i>Strain</i> [---]	<i>Stress</i> [GPa]
0	54.61	---	---
1500	57.52	0.053	2.7826
4000	62.76	0.149	7.4203

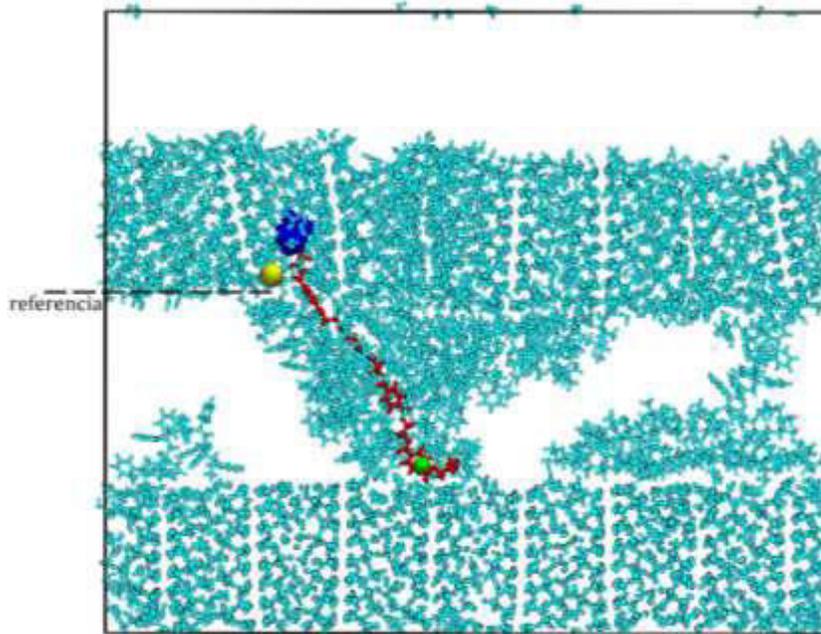


Figura 50. Configuración final al término de la simulación PULL NVT con un valor de $F = 1500 \text{ KJ/mol-nm}^2$. En verde, el grupo bottom; en azul, el grupo top; en amarillo, el átomo de azufre usado para calcular la elongación o deformación del cemento. Finalmente, en color rojo, la cadena PET a la cual pertenecen los grupos bottom y top.

El valor de *stress* fue calculado con los datos de fuerza y área con la relación F/A , y el módulo de Young (Y_M) se calculó como la pendiente entre dos puntos mediante la siguiente ecuación: (Muthoka, y otros, 2020).

$$Y_M = \frac{\Delta \text{Strees}}{\Delta \text{Strain}} = \frac{\text{Stress}_{F=4000} - \text{Stress}_{F=1500}}{\text{Strain}_{F=4000} - \text{Strain}_{F=1500}}$$

Proporcionando un valor de **48.31 GPa**. Valores experimentales para el cemento se reportan entre 30 a 60 GPa. (Jurowski & Grzeszczyk, 2015) Esto sugiere que la introducción de los polímeros en la matriz del cemento, no altera la elasticidad del material puro, más sin embargo incrementa su resistencia estructural lo que implica menos posibilidades de fracturas en el material.

6.1.1.3. Conductividad térmica

La conductividad térmica (k) fue calculada para el cemento (puro) así como para el material compuesto cemento-polímeros.

6.1.1.3.1. Conductividad térmica para el cemento puro

Las coordenadas y la topología del cemento de GROMACS para este sistema, fueron convertidas a los formatos de LAMMPS usando el programa INTERMOL. (Shirts, y otros, 2017) LAMMPS (Plimpton, 1995) requiere de al menos dos archivos para poder llevar a cabo una simulación. Uno de ellos es el archivo de topología (con terminación **.imp*), el cual contiene el número, nombre y tipo de átomos en el sistema, así como sus cargas, coordenadas y las conectividades (enlaces, ángulos, diedros, etc.) entre ellos. El segundo archivo es el configuracional o *input* (con terminación **.lammps*), el cual contiene una serie de indicaciones para que LAMMPS las ejecute y pueda llevar a cabo las simulaciones u otros cálculos y análisis.

Previamente al cálculo de la conductividad, para el sistema del cemento puro se llevo a cabo una minimización de 10,000 pasos usando un radio de corte de 11 Å, seguido de una simulación *NPT* y finalmente una simulación *NVT*. La simulación *NPT* cuya longitud fue de 100 ps usó un $\Delta t = 1$ fs. La temperatura se mantuvo fija a 300 K usando el termostato Nosé-Hoover (Nosé, 1984) (Hoover, 1985) con un parámetro de acoplamiento de 100 fs; por su parte, la presión se mantuvo fija a 1 bar usando el baróstato Nosé-Hoover (Plimpton, 1995) con un parámetro de acoplamiento de 1 ps. Se emplearon condiciones periódicas de frontera en las tres direcciones junto con un radio de corte de 11 Å para calcular todas las interacciones no-enlazantes de corto alcance, así como el mallado Partícula-Partícula-Partícula (Plimpton, 1995) (PPPM) para calcular todas las interacciones no-enlazantes de largo alcance más allá del radio de corte. Para las interacciones de mezcla (ϵ_{ij} y σ_{ij}), se usó combinación geométrica, así como un factor de escalamiento de 0.5 para todas las interacciones 1-4 electrostáticas y Lennard-Jones. Para evitar conflictos con enlaces rígidos y trasferencias de energías cinéticas,

ningún enlace fue restringido. Las coordenadas de salida de la simulación *NPT* fueron utilizadas como coordenadas de entrada para llevar a cabo una simulación *NVT* de 100 ps a 300 K. Las coordenadas de salida de esta etapa se utilizaron para llevar a cabo las simulaciones para el cálculo de la conductividad térmica.

El cálculo de la conductividad térmica (k) está basado en la metodología propuesta por Müller-Plathe. (Müller-Plathe, 1997) En esta metodología, un flujo de calor ($J_z(t)$), es generado por intercambios de energía cinética entre moléculas frías y calientes, a través de la siguiente ecuación: (Müller-Plathe, 1997)

$$\langle J_z(t) \rangle = \frac{\sum_{\text{transferencias}} \frac{m}{2} (v_c^2 - v_h^2)}{2tL_xL_y} \quad (2)$$

Donde m es la masa de las partículas involucradas en el intercambio de velocidades lentas (o “*frías*”, v_c) y rápidas (o “*calientes*”, v_h); L_x y L_y son las dimensiones de la caja perpendiculares a la dirección de flujo de calor. Con el flujo de calor impuesto, se genera un gradiente de temperaturas en la misma dirección de la transferencia de calor, lo que permite calcular la conductividad térmica como:

$$k = \lim_{\partial T / \partial z \rightarrow 0} \lim_{t \rightarrow \infty} - \frac{\langle J_z(t) \rangle}{\langle \partial T / \partial z \rangle} \quad (3)$$

La metodología Müller-Plathe representada para esta investigación se describe en la siguiente figura por (Sanchez Badillo, 2019).

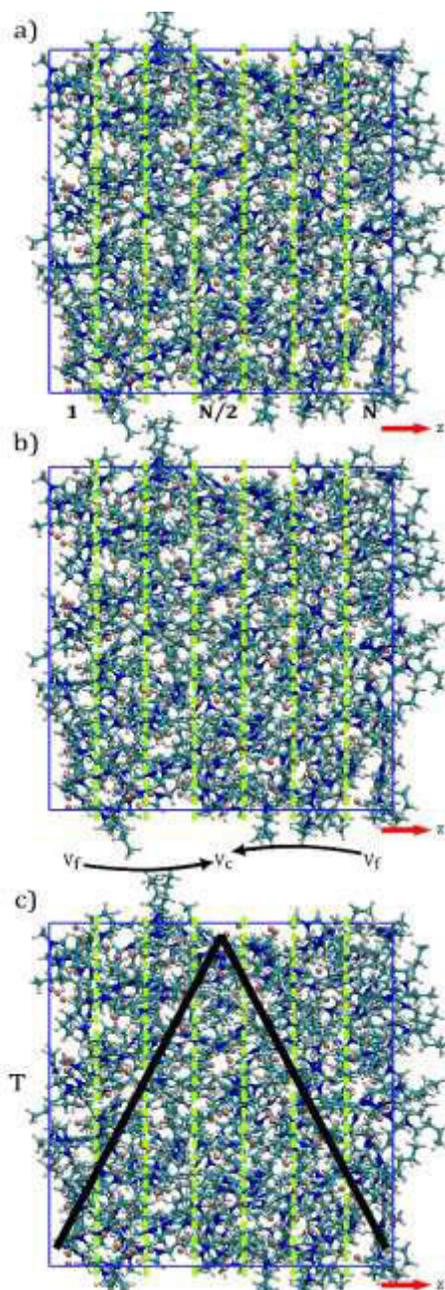


Figura 51. Metodología Müller-Plathe para el cálculo de la conductividad térmica. **a)** El sistema es dividido en N secciones o bloques a lo largo de una de las direcciones, en el caso de la ecuación (2), a lo largo de la dirección z , líneas punteadas color verde. **b)** Se fuerzan intercambios de velocidades entre átomos con la misma masa entre los bloques 1 y $N/2$ así como entre los bloques N y $N/2$ con el objetivo de que la temperatura del bloque $N/2$ (bloque caliente) sea mayor a la de los bloques 1 y N (bloques fríos). La sumatoria de todos los intercambios de velocidad permiten estimar el flujo de calor mediante la ecuación (2). **c)** La temperatura calculada para cada bloque permite generar un perfil de

temperatura simétrico, línea continua color negro, con pendiente positiva a lo largo de los bloques 1 y $N/2$ y negativa a lo largo de los bloques $N/2$ y N . Cualquiera de ambos perfiles puede ser utilizado para calcular la conductividad térmica mediante la ecuación (3). (Sánchez-Badillo, 2019)

La metodología Müller-Plathe, también conocida como simulaciones reversas moleculares fuera del equilibrio, se encuentra implementada en LAMMPS a través de la utilidad (o FIX) llamada **thermal/conductivity**. El archivo de entrada para LAMMPS que realiza este cálculo tiene la siguiente estructura.

```

1  Fix          1 all nve
2  compute     layers all chunk/atom bin/1d z lower ${delta} units reduced
3  fix        2 all ave/chunk 10 100 1000 layers v_temp file perfil_MP.dat
4  fix        3 all thermal/conductivity 10 z ${nbin}
5  variable   tdiff equal f_2[${nmedium}][3]-f_2[1][3]
6  thermo_style custom step temp epair etotal f_3 v_tdiff
7  thermo     ${out}
8  run        ${time}
9
10 #Thermal conductivity calculation
11 # reset fix thermal/conductivity to zero energy accumulation
12 fix        3 all thermal/conductivity 10 z ${nbin}
13 fix        ave all ave/time 1 1 1000 v_tdiff ave running
14 thermo_style custom step temp epair etotal f_3 v_tdiff f_ave
15 run        ${time}

```

Analizado la sección del cálculo para esta propiedad, tenemos:

- 1** Se impone una tarea (FIX) llamada 1 la cual se aplica para todos (*all*) los átomos y es una simulación *NVE* (número de moléculas, volumen y energía total constantes). Esto es importante, ya que, para imponer el flujo de calor a través de la ecuación (2), se requiere que el sistema siempre tenga la misma energía global.
- 2** La caja de simulación es dividida en *secciones* o *rebanadas* a lo largo de la dirección en z . Para ello, la distancia total z representada como 1, se divide rebanadas de espesor *delta*. En este caso, *delta* es de 0.05, por lo que la distancia z se dividirá en 20 secciones (1/0.05).
- 3** Se impone una tarea (FIX) llamada 2, la cual, para cada sección o rebanada, calculará la temperatura promedio y la enviará a un archivo llamado *perfil_MP.dat*.

- 4** Con esta opción, se activa el cálculo de la conductividad térmica a través de las ecuaciones (2) y (3). El 10 le indica a LAMMPS que los intercambios de velocidades se harán cada 10 pasos a lo largo de la dirección z para todas las 20 secciones (*bins*).
- 5** Se genera una variable denominada *tdiff* la cual es calculada como la diferencia de temperatura entre el bloque con la temperatura más alta (el de en medio) y el bloque con la temperatura más baja (el 1).
- 6** En esa línea le indicamos a LAMMPS qué resultados queremos que nos imprima a un archivo de salida cada *out* pasos indicados en la línea **8**.
- 8** Se corre la simulación con *time* pasos.
- 10** Se vuelve a repetir el cálculo, pero ahora en su etapa de producción, es decir, éstos son los datos que serán analizados para obtener la conductividad.
- 12** Se impone una tarea (FIX) llamada 3, que corresponde al cálculo de la conductividad térmica, con las mismas características que la línea **4**.
- 13** Se genera un FIX que permitirá calcular el promedio acumulado de la temperatura que se tenga entre el bloque caliente y el bloque frío a lo largo de la simulación.
- 14** Variables que serán impresas en un archivo de salida. En este caso, *f_3* y *v_tdiff* corresponden al flujo de calor (sin el término $2tL_xL_y$ de la ecuación (2)) y a la diferencia de alcanzada en el sistema en función del tiempo, respectivamente.

Previo al cálculo de la conductividad térmica, el sistema fue nuevamente equilibrado en una simulación *NVT* de 2 ns, con las mismas características que la equilibración *NPT* de 100 ps. Lo anterior, ya que una simulación *NVE* requiere de un sistema equilibrado, pues la energía se mantendrá fija, provocando que la temperatura del sistema aumente en caso de no estar totalmente relajado. Posteriormente se llevaron a cabo las simulaciones *NVE* de equilibración (2 ns) y producción (2 ns) y dentro de éstas etapas se calculó de la conductividad térmica, tal y como se indicó en las líneas **4** y **12**. El sistema se dividió en 20 secciones a lo largo del eje z, forzando cambios de energía cinética (velocidades) cada 10 fs. Los datos fueron guardados cada 1ps para ser analizados.

Los valores de f_3 y v_{tdiff} fueron usados para calcular la conductividad térmica a lo largo del tiempo usando las ecuaciones (2) y (3). Adicionalmente, la variable $temp$ fue graficada en función de la sección para corroborar que un perfil lineal de temperatura haya sido obtenido. Los resultados, mostrados en la Figura 52, muestran un valor de la conductividad térmica de $k = 0.857$ W/m-K al final de los 2 ns de producción. Por otra parte, en la misma figura se puede observar que el cálculo de la conductividad es confiable, pues el perfil alcanzado en el sistema es lineal.

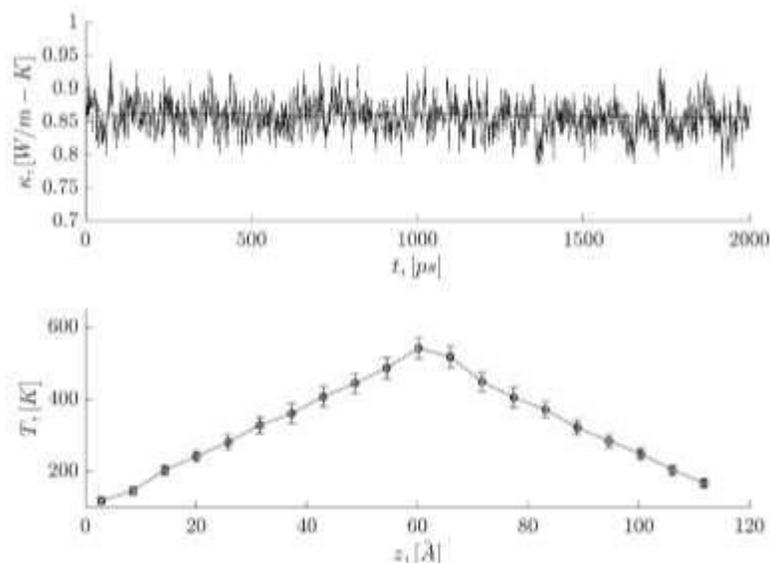


Figura 52. Conductividad térmica y perfil de temperatura obtenido para el sistema cemento en LAMMPS. El valor de k es de 0.857 W/m-K como promedio acumulado (línea sólida) de las fluctuaciones a lo largo del tiempo (línea discontinua).

Experimentalmente se ha reportado que la conductividad térmica del cemento varía desde 0.2 hasta 3.3 W/m-K, dependiendo de su peso. Por otra parte, el cemento estructurado tiene un valor promedio de conductividad térmica de 0.85 W/m-K. (Asadi, Shafigh, Hassan, & Mahyuddin, 2018); El valor calculado de la conductividad térmica (0.857 W/m-K), concuerda con el valor experimental, por lo que no sólo se validó la calidad del campo de fuerza CLAYFF, sino también la metodología Müller-Plathe implementada en LAMMPS. De manera interesante, se puede observar que el cálculo de la conductividad térmica por medio de la metodología Müller-Plathe requiere tiempos de simulación cortos

(siendo una ventaja respecto a las metodologías en equilibrio), pues sólo se requieren de ~150 ps para obtener un valor constante de k .

6.1.1.3.2. Conductividad térmica para el material compuesto cemento-polímeros

La construcción del sistema cemento-polímeros requirió primeramente de una placa de cemento minimizada, por lo que se tomó la configuración del cemento mostrada en la Figura 53, para formar un compuesto cemento-polímeros-cemento. Este sistema contiene 14 cadenas moléculas) de cada uno de los polímeros, para evitar la existencia de grandes volúmenes vacíos entre placas. El sistema, construido con Packmol, como se muestra en la misma figura.

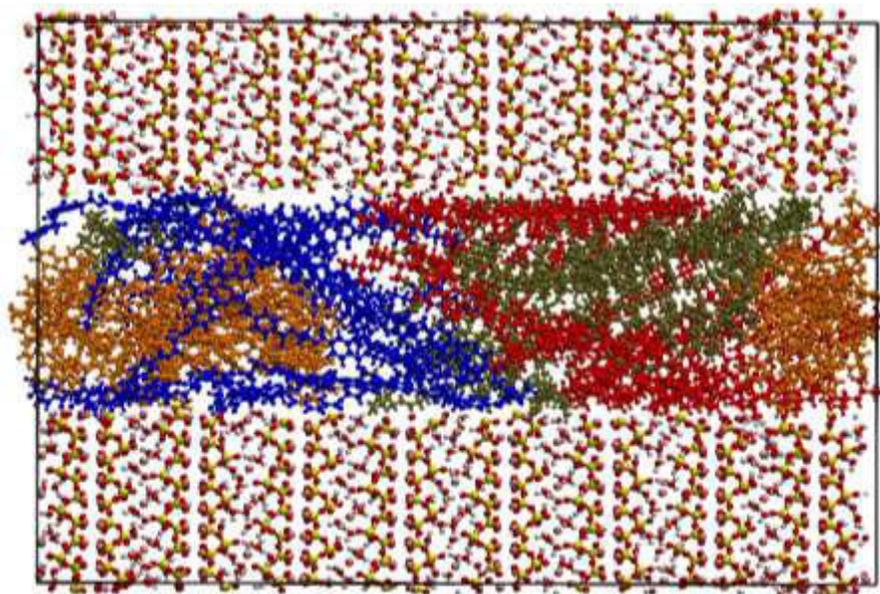


Figura 53. Estructura cemento-polímeros-cemento generada por Packmol. El sistema contiene 14 moléculas de cada uno de los polímeros (14xPET -en color azul-, 14xPPL -en color rojo-, 14xPES -en color naranja- y 14xSBR -en color verde-).

El sistema fue entonces convertido a formato *.gro y luego minimizado (por 10,000 pasos) y equilibrado en una simulación *NVT* de 100 ps a 300 K en GROMACS. Se mantuvieron los mismos detalles que las simulaciones previas en GROMACS, pero se dejó libres (sin restricción de coordenadas) las placas de cemento. Al convertir el sistema

equilibrado a formato LAMMPS a través de INTERMOL, y llevar a cabo las simulaciones de equilibración en LAMMPS, éstas generaban errores de conexión entre los enlaces del cemento. Luego de varias pruebas, se encontró que el problema se podía resolver al eliminar una de las placas de cemento. Por lo anterior, el sistema modelado para la obtención de la conductividad térmica del complejo correspondió, luego de corregir las posiciones de los átomos en la dirección z debido a la eliminación de la placa inferior, al mostrado en la Figura 54.

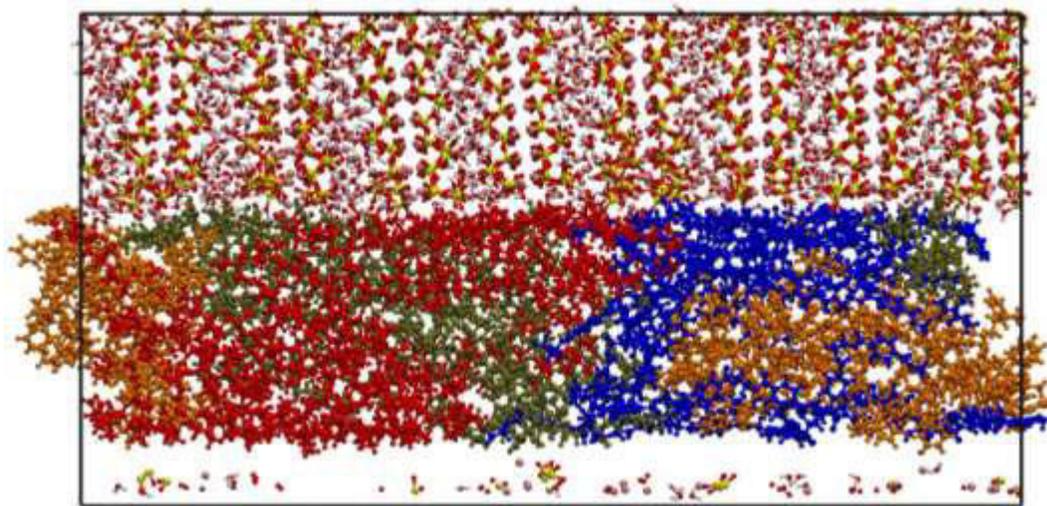


Figura 54. Estructura cemento-polímeros-cemento para el cálculo de la conductividad térmica. El sistema contiene 14 moléculas de cada uno de los polímeros (14xPET -en color azul-, 14xPPL -en color rojo-, 14xPES -en color naranja- y 14xSBR -en color verde-). El sistema cuenta con únicamente una placa de cemento.

La configuración del sistema mostrado en la figura anterior así como la topología *.top en formato GROMACS se convirtieron a formato LAMMPS (*.inp y *.lammps) a través de INTERMOL, después se llevó a cabo una minimización de 10,000 pasos, así como una equilibración *NVT* de 100 ps a 300 K en LAMMPS. La simulación *NVT* usó un $\Delta t = 1$ fs. La temperatura se mantuvo fija a 300 K usando el termostato Nosé-Hoover con un parámetro de acoplamiento de 100 fs. El cálculo de las interacciones no covalentes (de corto y largo alcance) involucraron el uso de condiciones periódicas de frontera junto con un radio de corte de 11 Å,

así como el método PPPM. Para las interacciones de mezcla (ϵ_{ij} y σ_{ij}), se usó combinación geométrica, así como un factor de escalamiento de 0.5 para todas las interacciones 1-4 electrostáticas y Lennard-Jones. Nuevamente, para evitar conflictos con enlaces rígidos y transferencias de energías cinéticas en el cálculo de la conductividad térmica, no hubo enlaces restringidos. Luego de este periodo de equilibración, se realizó una simulación *NPT* de 500 ps seguida de una simulación *NVT* de 500 ps. Las coordenadas de salida de la etapa *NVT* de 500 ps fueron usadas para el cálculo de la conductividad térmica del complejo.

La metodología Müller-Plathe fue usada para el cálculo de la conductividad térmica del complejo cemento-polímeros, a través del FIX **thermal/conductivity** disponible en LAMMPS. En comparación con el cálculo de k para el cemento puro, el cálculo que involucra al complejo sólo requirió del cambio de la dirección de flujo, que corresponde ahora al eje x :

```

1  fix          1 all nve
2  compute     layers all chunk/atom bin/1d x lower ${delta} units reduced
3  fix        2 all ave/chunk 1 10 100 layers v_temp file perfil_MP.dat
4  fix        3 all thermal/conductivity 10 x ${nbin}
5  variable   tdiff equal f_2[${nmedium}][3]-f_2[1][3]
6  thermo_style custom step temp epair etotal f_3 v_tdiff
7  thermo     ${out}
8  run        ${time}
9
10 #Thermal conductivity calculation
11 # reset fix thermal/conductivity to zero energy accumulation
12 fix        3 all thermal/conductivity 10 x ${nbin}
13 fix        ave all ave/time 1 1 100 v_tdiff ave running
14 thermo_style custom step temp epair etotal f_3 v_tdiff f_ave
15 run        ${time}

```

Se procedió a realizar una simulación de 100 ps en el ensamble *NVT*, seguida de dos simulaciones en el ensamble *NVE* de 100 ps cada una para el cálculo de la conductividad térmica. Cabe mencionar, que el cálculo de esta propiedad se realiza dentro de las simulaciones *NVE* usando el FIX **thermal/conductivity**; Se obtuvo un valor de conductividad de 0.479 W/m-K. Las fluctuaciones de la conductividad térmica a lo largo del tiempo, así como el perfil de temperatura alcanzado, se muestra en la siguiente figura.

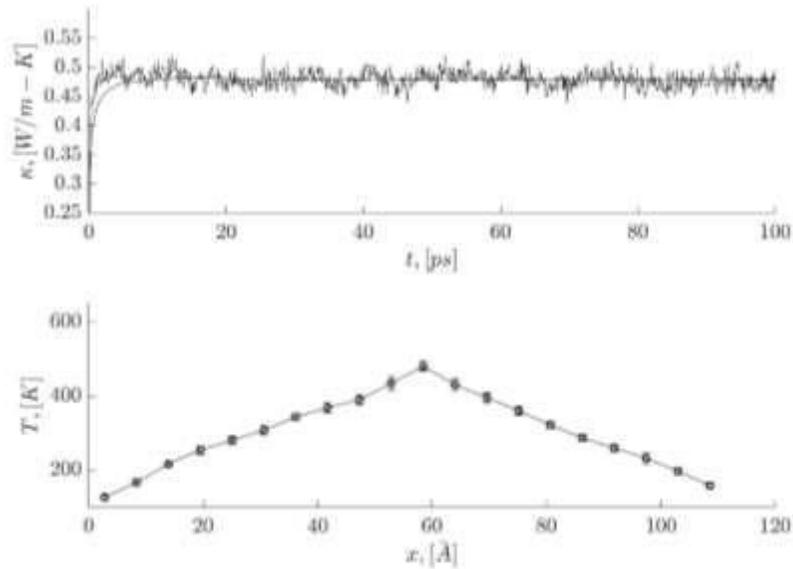


Figura 55. Conductividad térmica y perfil de temperatura obtenido para el sistema cemento-polímeros en LAMMPS. El valor de k es de $0.479 \text{ W/m}\cdot\text{K}$ como promedio acumulado (línea sólida) de las fluctuaciones a lo largo del tiempo (línea discontinua).

6.1.2. Simulación Térmica a Escala Macroscópica

En base a los valores obtenidos de la conductividad térmica en las simulaciones moleculares, se procedió a la realización de una simulación térmica a nivel macroscópico sujeta a una densidad de flujo de calor con la finalidad de determinar el incremento de la temperatura interior en el material compuesto, es decir su capacidad de aislamiento térmico.

Tabla 15. Conductividad térmica resultante promedio para la mezcla de polímeros y concreto.

Material	Conductividad Térmica en $\text{W/m}\cdot\text{K}$
Cemento	.857
Hule de Estireno-Butadieno	.5
Teraftalato de Polietileno	.24

Polietileno	.45-.52
Polipropileno	.2
Poliestireno	.03
Policloruro de Vinilo	0.16
Poliuretano	0.022 - 0.035
Resultado mediante simulación molecular	.479

(Creación original basado en varias fuentes tabla 6-12 y desarrollo de DM).

6.1.3. Simulación Térmica.

Para las siguiente simulaciones se utilizó una conductividad térmica para el cemento de 0.857 y 0.470 W/m·K para la mezcla con polímeros, un coeficiente de convección del aire de 5 W/(m² K) (Holman, 1998), una temperatura ambiente de 25 °C a una cara lateral del bloque y una temperatura de 40 °C en la otra cara del bloque (estas últimas dos temperaturas se escogieron arbitrariamente simulando un espacio fresco al interior de una vivienda y un día de verano al exterior respectivamente). Se pretende conocer el aumento de temperatura en la “Cara fría” a 25°C debido a la transferencia de calor a través del bloque.

6.1.3.1. Simulación Térmica Bloque de Concreto.

Simulación para bloque de concreto, aplicando una temperatura de 40 °C en una cara del bloque con una temperatura ambiente de 25 °C y una malla solida de 5mm por triangulo, utilizando el paquete de simulación de SolidWorks empleando el método de elemento finito.

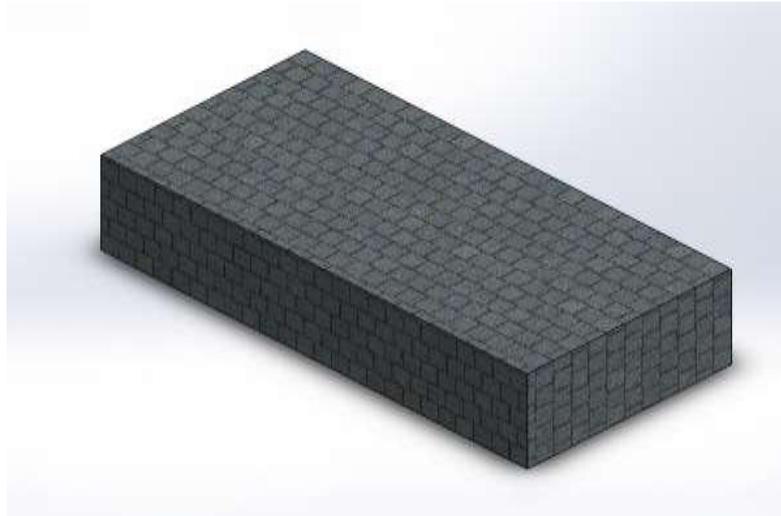


Figura 56. *Bloque de Concreto. (Creación original con SolidWorks)*

Datos físicos para simulación:

Masa de bloque: 2.65 Kg

Volumen: .0012 m³

Peso: 26 N

Densidad: 2,100 Kg/m³

Conductividad térmica: .857 W/(m.K)

Temperatura Exterior: 40°C

Temperatura ambiente: 25°C

Coefficiente de Convección del aire: 5 W/(m².K)

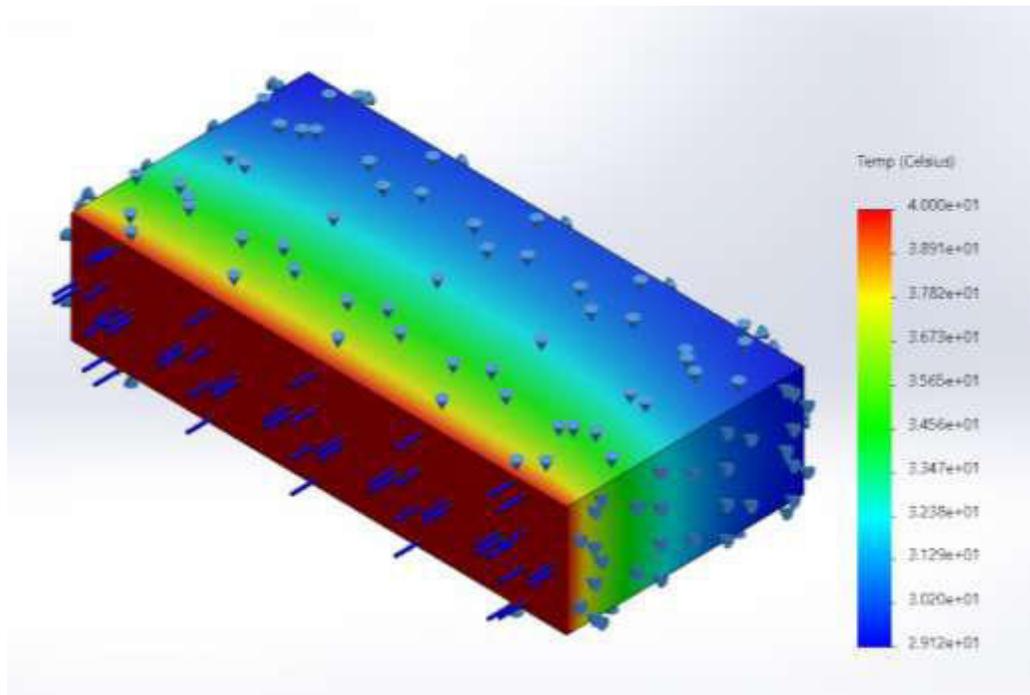


Figura 57. *Diagrama de von Mises para el Diferencial de Temperatura en Bloque de Concreto.*
(Creación original con SolidWorks).

Resultado: Después de aplicar 40°C en el lado rojo o más caliente del bloque, la gráfica de Von Mises indica una temperatura al otro lado del bloque de 29.12°C, al haber considerado una temperatura ambiente de 25°C, el incremento de temperatura es de 4.12°C.

6.1.3.2. Simulación Térmica Bloque de Compuesto Concreto-Polímero.

Simulación para bloque de material compuesto por concreto y polímeros, aplicando una temperatura de 40 °C en una cara del bloque con una temperatura ambiente de 25 °C y una malla solida de 5mm por triangulo, utilizando el valor de la conductividad térmica obtenida mediante simulación molecular.



Figura 58. *Bloque de Compuesto Cemento/Polímero Basado en Simulación. (Creación original con SolidWorks)*

Datos físicos para simulación:

Masa de bloque: 2.65 Kg

Volumen: .0012 m³

Peso: 26 N

Densidad: 2,100 Kg/m³

Conductividad térmica: 0.479 W/(m.K)

Temperatura Exterior: 40°C

Temperatura ambiente: 25°C

Coefficiente de Convección del aire: 5 W/(m².K)

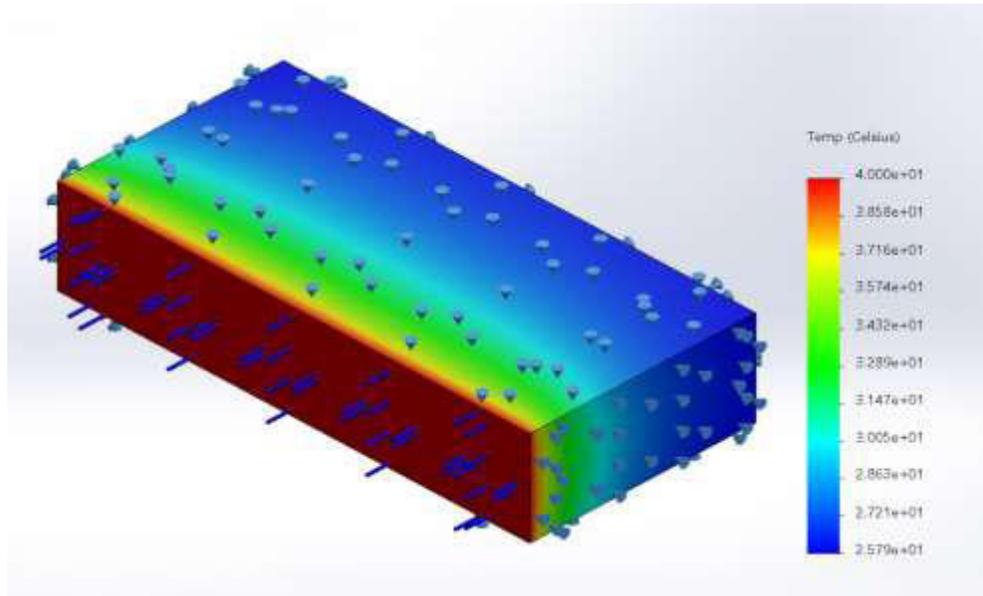


Figura 59. *Diagrama de Von Mises para Diferencial de Temperatura en Bloque de Compuesto Concreto/Polímero. (Creación original con SolidWorks).*

Después de aplicar 40°C en el lado rojo o más caliente del bloque, la gráfica de Von Mises indica una temperatura al otro lado del bloque de 25.79°C, al haber considerado una temperatura ambiente de 25°C, el incremento de temperatura es de 0.79°C.

Conclusiones

Los resultados de las diferentes simulaciones moleculares por medio del cálculo del módulo de Young, así como la energía de interacción, nos indican que es termodinámicamente factible mezclar los desechos de polímeros con concreto, obteniéndose materiales con alta resistencia mecánica y plasticidad en comparación con el concreto puro; El cálculo de la conductividad térmica por medio de la metodología Muller-Plathe dan lugar a valores más bajos para el material compuesto en comparación con el concreto puro.

La obtención del valor de la conductividad térmica para el sistema compuesto concreto-polímeros por medio de simulación molecular nos permitió llevar a cabo una simulación macroscópica para determinar el incremento de la temperatura interior (25 °C) de un material sujeto a un flujo de calor y expuesto a una temperatura exterior de 40 °C, siendo el incremento de temperatura más bajo para el material-compuesto que el concreto-puro.

Los resultados de este trabajo indican que es posible combinar diferentes polímeros sin requerirse una segregación por tipo de plástico en la mezcla, lo cual representa una ventaja para el reciclaje de plásticos ya que se puede someter los diferentes plásticos al mismo procesos de trituración sin separar y procesar hasta lograr la granulometría esperada, debido a sus características, el hule de llanta debería ser procesado por separado y ser agregado al final para enriquecer la mezcla.

Con lo anterior se sugiere el uso de esta mezcla de cemento-polímero para la creación de un producto de construcción con características termoaislantes como un bloque de concreto o bien utilizar una mezcla de cemento-polímero para el enjarre de muros y utilizar las ventajas térmicas que se aportan, además de coadyuvar en la reutilización de los desperdicios plásticos.

7. BIBLIOGRAPHY

- Abraham, M. J., Murtola, T., Schulz, R., Páll, S., Smith, J. C., Hess, B., & Lindahl, E. (2015). GROMACS: High Performance Molecular Simulations Through Multi-Level Parallelism from Laptops to Supercomputers. *SoftwareX*, 1-2, 19-25.
- Angulo Et Al., R. (2005). Modificaciòn de un asfalto modificado con caucho reciclado de llanta para su aplicacion de pavimentos. En R. A. Duarte, *Modificaciòn de un asfalto modificado con caucho reciclado de llanta para su aplicacion de pavimentos* (pág. 94). Bucaramanga: Universidad de Santander.
- Asadi, I., Shafigh, P., Hassan, Z. F., & Mahyuddin, N. B. (2018). Thermal conductivity of concrete - A review. *J. Build. Eng.*, 20, 81-93.
- B.A. Jubran, S. H. (1988). Some mechanical and thermal properties of clay and cement bricks. *Materials and Structures*, 6.
- Berendsen, H. J., Postma, J. P., van Gunsteren, W. F., Dinola, A., & Haak, J. R. (1984). Molecular Dynamics with Coupling to an External Bath. *J. Chem. Phys.*, 81, 3684-3690.
- Binifi, H. (2006). Thermal isolation and mechanical properties of fibre reinforced. *Construction and Building Materials* , 6.
- Brydson, J. (1999). *Plastics Materials*. Boston: Butterworth-Heinemann.
- Bussi, G., Donadio, D., & Parrinello, M. (2007). Canonical sampling through velocity rescaling. *J. Chem. Phys.*, 126, 014101.
- Cadena, F. (2000). *Manual de Reciclaje de Plasticos*. Quito Ecuador: Oikos.
- Capecchi, F. (07 de 07 de 2022). *EcoNoticias*. Obtenido de <https://econoticiasfai.org/el-plastico-un-formidable-enemigo-plastic-a-formidable-enemy/>
- Carrizales, J. (2015). Asfalto modificado. En J. Carrizales, *ASFALTO MODIFICADO CON MATERIAL RECICLADO DE LLANTAS PARA SU APLICACIÓN EN PAVIMENTOS FLEXIBLES*” (pág. 119). Puno Peru: Universidad Nacional del Altiplano .
- Crawford, R. (1998). *Plastics Engineering*. Boston: Butterworth-Heinemann.
- Cygan, R. T., Greathouse, J. A., & Kalinichev, A. G. (2021). Advances in Clayff Molecular Simulation of Layered and Nanoporous Materials and Their Aqueous Interfaces. *J. Phys. Chem. C*, 125, 17573-17589.
- Cygan, R. T., Liang, J. J., & Kalinichev, A. G. (2004). Molecular Models of Hydroxide, Oxyhydroxide, and Clay Phases and the Development of a General Force Field. *J. Phys. Chem. B*, 108, 1255-1266.
- Dennington, R., Keith, T. A., & Millam, J. M. (2016). GaussView, Version 6. Shawnee Mission, KS: Semichem Inc.
- Denvid Lau, W. J. (2018). Composites Part B. *Elsevier*, 10.

- DKV. (2019). *DKV Activistas y Seguros*. Obtenido de DKV: <https://dkv.es/particulares>
- Dodda, L. S., Cabeza de Vaca, I., Tirado-Rives, J., & Jorgensen, W. L. (2017). LigParGen Web Server: An Automatic OPLS-AA Parameter Generator for Organic Ligands. *Nucleic Acids Res.*, *45*, W331-W336.
- Dodda, L. S., Vilseck, J. Z., Tirado-Rives, J., & Jorgensen, W. L. (2017). 1.14*CM1A-LBCC: Localized Bond-Charge Corrected CM1A Charges for Condensed-Phase Simulations. *J. Phys. Chem. B*, *121*, 3864-3870.
- EcoGreen. (22 de 01 de 2018). *¿Conoces cuales peligros pueden ocasionar los Neumáticos Fuera de Uso (NFU)?* Obtenido de Eco Green Co.: <https://ecogreenequipment.com/es/conoce-cuales-peligros-pueden-ocasionar-los-neumaticos-fuera-de-uso-nfu/>
- Essmann, U., Perera, L., Berkowitz, M. L., Darden, T., Lee, H., & Pedersen, L. G. (1995). A Smooth Particle Mesh Ewald Method. *J. Chem. Phys.*, *103*, 8577-8592.
- Fernandez, R., Azamar, A., & Rios, S. (2008). Characterization of the powder obtained from wasted tires reduced by pyrolysis and thermal shock process. *Journal Of applied research and technology*, 95-105.
- Flores, E. A. (2014). Mezclas de cemento y agregados de plastico para la construccion de viviendas. *Universidad Mayor*. Sucre, Boliivia.
- Frenkel, D. (2012). *Simulations: The Dark Side*. Cambridge: University of Cambridge.
- Gámez, F. (2017). Ventajas y desventajas de construir con ladrillos. *Folio tu momento en construcción*, 45.
- Garelli, O. (7 de Febrero de 2020). *Green Peace*. Obtenido de Los graves peligros de la incineración del plástico: <https://www.greenpeace.org/mexico/blog/4047/los-graves-peligros-de-la-incineracion-de-plasticos/>
- Giovanini, K. (9 de Oct de 2018). *Expoknews Comunicación y Sustentabilidad*. Obtenido de <https://www.expoknews.com/>: <https://www.expoknews.com/como-se-reciclan-las-llantas/>
- GobdeMex. (08 de 07 de 19). *Gobierno de Mexico*. Obtenido de Instituto Mexicano de Tecnología del Agua: <https://www.gob.mx/imta/articulos/contaminacion-por-microplasticos-estudio-en-dos-fuentes-de-agua-potable>
- Gómez, L. C. (2011). Aprovechamiento de llantas usadas. En L. C. Gómez, *Aprovechamiento de llantas usadas* (pág. 80). Medellín: Universidad de Medellín.
- Gray, J. (2011). *Polystyrene: Properties, Performance, and Applications*. Nova.
- Groover, M. (1997). *Fundamentals of Modern Manufacturing*. Lehigh: Pearson Education.
- Hagelberg, N. (24 de 08 de 2018). *ONU Programa para el medio ambiente*. Obtenido de Un problema doble: el plástico también emite potentes gases de efecto invernadero: <https://www.unep.org/es/noticias-y-reportajes/reportajes/un-problema-doble-el-plastico-tambien-emite-potentes-gases-de>

- Hess, B., Bekker, H., Berendsen, J. C., & Fraaije, J. G. (1997). LINCS: A Linear Constraint Solver for Molecular Simulations. *J. Comput. Chem.*, *18*, 1463-1472.
- Hinchliffe, A. (2008). *Molecular Modelling for Beginners*. Manchester: Wiley.
- Hirata, T. (2017). Atomistic dynamics simulation to solve conformation of model PCE superplasticisers in water and cement pore solution. *ICE (Institute Od Civil Engineering)*, *11*.
- Holman, J. P. (1998). *Tranferencia de Calor*. Mc Graw Hill.
- Hoover, W. G. (1985). Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-Space Distributions. *Phys. Rev. A*, *31*, 1695-1697.
- Illston, J., & Domone, L. (2001). *Construction Materials their nature and behavior*. London/New York: Spon Press.
- IMTA. (24 de Abril de 2020). *Gobierno De Mexico*. Obtenido de Contaminacion Pro Micro Plasticos: <https://www.gob.mx/imta/articulos/contaminacion-por-microplasticos?idiom=es>
- India, T. T. (Dirección). (2019). *Waste Warriors: This startup turns waste into public good* [Película]. India.
- Institute, E. I. (2016). *Plastic Waste Recycling Technology*. Bombai: Engineers India Research Institute.
- Ioannidou, K. (20 de 09 de 2021). PhD in Physics . (C. O`Sullivan, Entrevistador)
- Ionescu, M. (2008). *Chemistry and Technology of Polyols for Polyurethane*. Smithers Rapra Press.
- Jensen, J. (2010). *Molecular Modeling Basics*. Copenhagen: CRC.
- Jorgensen, W. L. (s.f.). *LigParGen OPLS/CM1A Parameter Generator for Organic Ligands*. (Yale University) Recuperado el 07 de June de 2022, de <http://zarbi.chem.yale.edu/ligpargen/>
- Jorgensen, W. L., & Tirado-Rives, J. (2005). Potential Energy Functions for Atomic-Level Simulations of Water and Organic and Biomolecular Systems. *J. Proc. Nat. Acad. Sci.*, *102*, 6665-6670.
- Jurowski, K., & Grzeszczyk, S. (2015). The Influence of Concrete Composition on Young's Modulus. *Procedia Eng.*, *108*, 584-591.
- Klug, M. (2012). Piròlisis un proceso para derretir la biomasa. *Revista de quimica PUCP*, 37-40.
- Lemkul, J. (01 de 01 de 2018). *Gromacs Tutorials*. Obtenido de <http://www.mdtutorials.com/gmx/lysozyme/index.html>.
- Macrae, C. F., Edgington, P. R., McCabe, P., Pidcock, E., Shields, G. P., Taylor, R., . . . van de Streek, J. (2006). Mercury: Visualization and Analysis of Crystal Structures. *J. Appl. Crystallogr.*, *39*, 453-457.

- Maldonado, Y. (28 de Abril de 2021). *Geologiaweb*. Obtenido de <https://geologiaweb.com/materiales/ladrillo/>
- Mariano, L. (16 de Julio de 2012). *Tecnología de los plasticos*. Obtenido de [https://tecnologiadelosplasticos.blogspot.com/2012/07/polietileno-pe.html#:~:text=Una%20mol%C3%A9cula%20del%20polietileno%20no,representa%20de%20la%20siguiente%20forma%3A&text=El%20polietileno%20se%20obtiene%20a,\(nombre%20IUPAC%3A%20eteno\)](https://tecnologiadelosplasticos.blogspot.com/2012/07/polietileno-pe.html#:~:text=Una%20mol%C3%A9cula%20del%20polietileno%20no,representa%20de%20la%20siguiente%20forma%3A&text=El%20polietileno%20se%20obtiene%20a,(nombre%20IUPAC%3A%20eteno))
- Martinez Et Al., G. (2015). Materiales sustentables y reciclados en la construcción. En J. H. Gonzalo Martínez, *Materiales sustentables y reciclados en la construcción* (pág. 148). Barcelona: OmniaScience.
- Martínez, L., Andrade, R., Birgin, E. G., & Martínez, J. M. (2009). Packmol: A Package for Building Initial Configurations for Molecular Dynamics Simulations. *J. Comput. Chem.*, *30*, 2157-2164.
- Meller, J. (2001). Molecular Dynamics. En J. Meller, *ENCYCLOPEDIA OF LIFE SCIENCES*. New York: Nature Publishing Group .
- Merritt, F. (2008). *Enciclopedia de La Construcción*. Barcelona: Oceano.
- Mexico, G. d. (2015). Plan de Manejo de Neumaticos Usados de Desecho. *Nom-161-SEMARNAT-2011*. Cd. de Mexico, Mexico DF, Mexico: Gobierno de Mexico.
- Meza, E. (3 de Diciembre de 2018). Crean Articulos sutentables con llantas usadas. *El Economista*, pág. N/A.
- Mittal, V. (2015). *Manufacturing of Nanocomposites with Engineering Plastics*. Zurich: Woodhead Publishing.
- Montalvo, S. (2016). *Rubber Cobbles Design Using Polyurethane and Tires Out Of Use*. Ecuador: Universidad Internacional SEK.
- Müller-Plathe, F. (1997). A Simple Nonequilibrium Molecular Dynamics Method for Calculating the Thermal Conductivity. *J. Chem. Phys.* , *106*, 6082-6085.
- Muthoka, R. M., Kim, H. C., Kim, J. W., Zhai, L., Panicker, P. S., & Kim, J. (2020). Steered Pull Simulation to Determine Nanomechanical Properties of Cellulose Nanofiber. *Materials*, *13*, 710.
- Mutisya, S. M., de Almeida, J. M., & Miranda, C. R. (2017). Molecular Simulations of Cement Based Materials: A comparison Between First Principles and Classical Force Field Calculations. *Comput. Mater. Sci.*, *138*, 392-402.
- Noriega, P., & Estrada, O. A. (Marzo de 2018). *MATERIALES PLÁSTICOS: EL RETO DEL RECICLAJE Y LA SOSTENIBILIDAD*. Obtenido de <https://www.catalogodelempaque.com/temas/Materiales-plasticos,-el-reto-del-reciclaje-y-la-sostenibilidad+124742?pagina=2>
- Nosé, S. (1984). A Unified Formulation of the Constant Temperature Molecular Dynamics Methods. *J. Chem. Phys.*, *81*, 511-519.

- Patrick, S. (2004). *PVC Compounds and Processing*. Rapra.
- Pelàez G., Velazquez S. & Giraldo D. (2017). Aplicaciones de caucho reciclado. *Ciencia e Ingeniería Neogranadina*, 27-50.
- Plimpton, S. (1995). Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *J. Comput. Phys.*, 117, 1-19.
- PolymerDatabase. (9 de May de 2016). *Chemical Retrieval on the Web (CROW) polymerdatabase*. Obtenido de Free Encyclopedia of Polymer Science and Technology: <http://polymerdatabase.com/>
- PreciousPlastics (Dirección). (2020). *Why does the world needs recycled Plastic Briks?* [Película].
- Quezada, D. (Diciembre de 2001). Los neumaticos desechados como combustible alternativo. En Q. Denis, *Los neumaticos desechados como combustible alternativo* (pág. 180). Talca, Chile: Universidad de Talca Chile.
- Rejmak, P. D., Sttot, M. J., & Ayuela, A. (2012). 29Si NMR in Cement: A Theoretical Study on Calcium Silicate Hydrates. *Phys. Chem. C*.
- Sánchez-Badillo, J. A. (2019). Estudio de las Propiedades de Transporte y Catalíticas de Líquidos Iónicos del tipo Imidazolio Mediante Cálculos de Simulación Molecular. San Luis Potosí, SLP, México: Tesis de doctorado.
- Schwarz, O. (Agosto de 2002). Ciencia de Los Plasticos. *Plasticos*. Montevideo, Uruguay: Costa Nogal.
- Sharma, S. (2019). *Molecular Dynamics Simulation of Nanocomposites Using BIOVIA Materials Studio, Lammgs and Gromacs*. Jalandhar: Elsevier.
- Shi, C., & L. , M. (2008). *High Performance Construction Materials*. Singapore: World Scientific Publishing Company.
- Shirts, M. R., Klein, C., Swails, J. M., Yin, J., Gilson, M. K., Mobley, D. L., . . . Zhong, E. D. (2017). Lessons Learned from Comparing Molecular Dynamics Engines on the SAMPL5 Dataset. *J. Comput. Aided Mol. Des.*, 31, 147-161.
- Textos Científicos. (14 de agosto de 2005). *Textos Científicos*. Obtenido de <https://www.textoscientificos.com/polimeros/polipropileno>
- Threadingham Et al. (2011). *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. Berlin: VCH.
- Treloar, L. (2005). *The Physics of Rubber Elasticity*. Indianapolis: Oxford University Press.
- Voss, N. R., & Gerstein, M. (2010). 3V: Cavity, Channel and Cleft Volume Calculator and Extractor. *Nucleic Acids Res.*, 38, W555-W562.
- Voss, N. R., & Gerstein, M. (s.f.). *3V: Voss Volume Voxelator*. Recuperado el 24 de November de 2021, de <http://3vee.molmovdb.org/>