



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA EN CIENCIAS E INGENIERÍA DE MATERIALES
INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES
FACULTAD DE QUÍMICA

PREDICCIÓN DEL MÓDULO ELÁSTICO DE MATERIALES COMPUESTOS
BASADOS EN TERMOPLÁSTICOS Y RESIDUOS AGROINDUSTRIALES

TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE
MAESTRA EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

PRESENTA

DIANA ITZEL MENDOZA MEJÍA

TUTOR PRINCIPAL

DR. ALBERTO ROSAS ABURTO
FACULTAD DE QUÍMICA

COMITE TUTOR

DR. EDUARDO VIVALDO LIMA
FACULTAD DE QUÍMICA
DR. HUMBERTO VÁZQUEZ TORRES
UAM IZTAPALAPA

CIUDAD DE MEXICO, JUNIO 2022



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

AGRADECIMIENTOS INSTITUCIONALES

- Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT, México), Beca de Maestría otorgada a la I.Q. Diana Itzel Mendoza Mejía 2020-2021 CVU:1045363.
- Programa de Apoyos a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de DGAPA-UNAM PAPIIT TA102120. Dr. Alberto Rosas Aburto.
- Programa de Apoyos a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de DGAPA-UNAM PAPIIT IV100119. Dr. Eduardo Vivaldo Lima.
- Programa de Apoyos a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de DGAPA-UNAM PAPIIT IG100122. Dr. Eduardo Vivaldo Lima.
- Facultad de Química-UNAM, Dr. Eduardo Vivaldo Lima PAIP 5000–9078.
- Facultad de Química-UNAM, Dr. Alberto Rosas Aburto PAIP 5000–9167.

Índice

| | |
|---|-----------|
| 1. Introducción | 1 |
| 2. Antecedentes | 3 |
| 2.1. Composición de las Fibras vegetales | 4 |
| 2.2. Propiedades de las fibras vegetales | 7 |
| 2.3. Compatibilidad de la fibras naturales con la matriz polimérica . . | 10 |
| 2.4. Predicción de Propiedades Mecánicas de Polímeros y Biopolímeros | 12 |
| 3. Objetivos | 17 |
| 4. Metodología | 18 |
| 4.1. Propuestas de modelos para cálculo de módulo de elástico | 18 |
| 4.1.1. Modelo Matseevich modificado | 18 |
| 4.1.2. Modelos logarítmico semiempírico | 23 |
| 4.1.3. Modelo logarítmico | 24 |
| 4.2. Propuesta de Software de predicción de propiedades mecánicas . . | 25 |
| 5. Resultados y Discusión | 29 |
| 5.1. Resultados del modelo Matseevich modificado (M1) | 29 |
| 5.2. Resultados del modelo logarítmico semiempírico (M2) | 47 |
| 5.3. Resultados del modelo logarítmico | 59 |
| 5.4. Discusión de resultados | 70 |
| 5.5. Propuesta de software de predicción de propiedades mecánicas . . | 73 |
| 6. Conclusiones | 75 |
| Apéndices | 76 |
| A. Datos experimentales Daniel Alcántara Pineda | 76 |
| Referencias | 78 |

Índice de figuras

| | | |
|-----|--|----|
| 1. | Clasificación de Fibras naturales. | 3 |
| 2. | Estructura de la Celulosa. | 5 |
| 3. | Estructura de la hemicelulosa | 6 |
| 4. | Modelo de la estructura de la lignida de abeto [9]. | 7 |
| 5. | Gráfica E a 40°sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1). . | 34 |
| 6. | Gráfica E a 50°sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1). . | 35 |
| 7. | Gráfica E a 60°C sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1). . | 36 |
| 8. | Gráfica E a 70°sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1). . | 37 |
| 9. | Gráfica E a 80°C sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1). . | 38 |
| 10. | Gráfica E a 90°C sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1). . | 39 |
| 11. | Gráfica E sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M1) | 41 |
| 12. | Gráfica E sistema: HDPE+Fibra de agave+Addico (M1). | 42 |
| 13. | Gráfica E sistema: PP+Fibra de agave+Addico (M1) | 43 |
| 14. | Gráfica E a 40°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2). . | 49 |
| 15. | Gráfica E a 50°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2). . | 50 |
| 16. | Gráfica E a 60°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2). . | 51 |
| 17. | Gráfica E a 70°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2). . | 52 |
| 18. | Gráfica E a 80°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2). . | 53 |
| 19. | Gráfica E a 90°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2). . | 54 |
| 20. | Gráfica E sistema: LLDPE+Fibra de Agave (M2). | 56 |
| 21. | Gráfica E sistema: HDPE+Fibra de Agave (M2). | 57 |
| 22. | Gráfica E sistema: PP+Fibra de Agave (M2). | 58 |
| 23. | Gráfica E a 40°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3). . | 61 |
| 24. | Gráfica E a 50°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3). . | 62 |
| 25. | Gráfica E a 60°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3). . | 63 |
| 26. | Gráfica E a 70°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3). . | 64 |
| 27. | Gráfica E a 80°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3). . | 65 |
| 28. | Gráfica E a 90°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3). . | 66 |
| 29. | Gráfica sistema: LLDPE + Fibra de agave (M3). | 67 |
| 30. | Gráfica sistema: HDPE + Fibra de agave (M3) | 68 |
| 31. | Gráfica sistema: PP + Fibra de agave (M3) | 69 |
| 32. | Comparativo de modelos de predicción propuestos y valores de E a 40°C materiales de Daniel Alcántara Pineda. | 70 |
| 33. | Gráfica ln(K) vs parámetro de flujo Flv | 72 |
| 34. | Interfaz del software versión 1.0. | 73 |
| 35. | Interfaz del software versión 1.1. | 74 |

Índice de tablas

| | | |
|-----|--|----|
| 1. | Composición química de fibras naturales comunes. | 4 |
| 2. | Propiedades mecánicas de fibras vegetales comunes. | 9 |
| 3. | Módulo elástico de biocompuestos. | 15 |
| 4. | Composición del Addico. | 29 |
| 5. | Propiedades del Addico. | 30 |
| 6. | Propiedades Celulosa y Hemicelulosa. | 30 |
| 7. | Composición de la fibra de Agave. | 30 |
| 8. | Propiedades fibra de agave. | 30 |
| 9. | Resultados del polímero 2 (Addico-agave). | 31 |
| 10. | Datos de densidades. | 31 |
| 11. | Datos de densidades componentes de Adicco. | 32 |
| 12. | Resultados E a 40°C sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1). | 33 |
| 13. | Resultados E a 50°C sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1). | 35 |
| 14. | Resultados E a 60°C sistema:LLDPE+ Fibra de Agave+Addico (M1). | 36 |
| 15. | Resultados E a 70°C sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1). | 37 |
| 16. | Resultados E a 80°C sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1). | 38 |
| 17. | Resultados E a 90°C sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1). | 39 |
| 18. | Densidades de polímeros de acuerdo al artículo Cindu Annandara- jah et al, Materials MPDI 2019 12 99. | 40 |
| 19. | Resultados E sistema: LLDPE+Fibra de Agave (M1). | 41 |
| 20. | Resultados E sistema: HDPE+Fibra de agave+Addico (M1). | 42 |
| 21. | Resultados E sistema: PP + Fibra de agave (M1). | 43 |
| 22. | Resultado de volumen de Van der Walls. | 44 |
| 23. | Resultado de cálculo de propiedades mecánicas | 45 |
| 24. | Resultado de pesos moleculares. | 46 |
| 25. | Valores de las constantes C_0 y D a diferentes temperaturas. | 47 |
| 26. | Resultados E a 40°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2). | 48 |
| 27. | Resultados E a 50°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico(M2). | 50 |
| 28. | Resultados E a 60°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2). | 51 |
| 29. | Resultados E a 70°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2). | 52 |
| 30. | Resultados E a 80°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2). | 53 |
| 31. | Resultados E a 90°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2). | 54 |
| 32. | Constantes C_0 y D | 55 |
| 33. | Resultados sistema: LLDPE + Fibra de agave (M2). | 56 |
| 34. | Resultados sistema: HDPE + Fibra de agave (M2). | 57 |
| 35. | Resultados sistema: PP + Fibra de agave (M2). | 58 |

| | | |
|-----|--|----|
| 36. | Resultados E a 40°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3). | 60 |
| 37. | Resultados E a 50°C sistema: LLDPE+ Fibra de agave+Addico (M3). | 62 |
| 38. | Resultados E a 60°C sistema: LLDPE+ Fibra de agave+Addico. | 63 |
| 39. | Resultados E a 70°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3). | 64 |
| 40. | Resultados E a 80°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3). | 65 |
| 41. | Resultados E a 90°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3). | 66 |
| 42. | Resultados sistema: LLDPE + Fibra de agave (M3). | 67 |
| 43. | Resultados sistema: HDPE + Fibra de agave (M3). | 68 |
| 44. | Resultados sistema: PP + Fibra de agave (M3). | 69 |
| 45. | Formulaciones de materiales de Daniel Alcántara Pineda. | 76 |
| 46. | Resultados experimentales de E a diferentes temperaturas Daniel Alcántara Pineda | 77 |

1. Introducción

La predicción de propiedades mecánicas en el desarrollo de nuevos materiales juega un papel muy importante, ya que dependen de las características de un material la aplicación de este o en muchos casos se requieren de ciertas propiedades de los materiales para una aplicación ya predestinada.

Es por ello que la predicción de propiedades físicas, como lo son las propiedades mecánicas de materiales compuestos es primordial para la optimización en sus tiempos de diseño y desarrollo, así como en reducir la experimentación a tan solo algunas pruebas de cotejo con los modelos de predicción.

El presente trabajo se centra en el estudio de materiales compuestos de matriz polimérica reforzados con fibras naturales y se basa en la predicción de su módulo de elasticidad que posteriormente se comparan con resultados experimentales de materiales obtenidos por diversos grupos de trabajo, en donde sintetizaron materiales poliméricos y utilizaron fibras naturales de refuerzo.

Entre las fibras más comunes tenemos al sisal, lino, palma, fique, formio, yute, coco, bambú, henequen, cañamo, etc. Estas han sido utilizadas para reforzar polímeros termoplásticos como el poliestireno (PS), polietileno (PE), polipropileno (PP), poli(cloruro de vinilo) (PVC). Durante los últimos años, las fibras han sido objeto de estudio como agente de refuerzo en materiales compuestos, sustituyendo parcialmente las fibras sintéticas [1, 2].

Teniendo en cuenta que la mayoría de estos productos son desechos agroindustriales representan una área de oportunidad para el desarrollo de materiales con un mayor valor agregado y además ayuda al manejo adecuado de estos residuos. Además de ofrecer ciertas ventajas frente a las fibras sintéticas ya que son biodegradables, existe una alta disponibilidad de ellas y tienen un bajo costo [3].

El modelo empleado para la predicción de estos materiales compuestos se basa en un artículo del año 2020 del grupo de trabajo de Tatiana Matseevich [4], el cual emplea la concentración de la celulosa, hemicelulosa y lignina en las fibras de refuerzo para la predicción. Para ello calcula los volúmenes de Van der Waals y peso molecular, además considera las fracciones mol de las fases que constituyen a la fibra. Como aportación original de este trabajo modificamos este modelo, para que se ajuste a valores experimentales, ya que el artículo original presenta una curva creciente en el módulo de Young cuando se incrementa el porcentaje de estas fases. Esto no es del todo cierto, ya que debido a problemas de adhesión-cohesión entre la fibra misma y del cambio entre la composición de las fases (fibra y la

matriz polimérica), el valor del módulo experimentalmente se incrementa hasta cierto valor de concentración de fibra para después decaer como lo demuestran trabajos previos [5].

Se pretende que el modelo presentado en este trabajo sea válido para diversos materiales reforzados con fibras naturales, por lo que puede servir como base en investigaciones similares, como también ayude en el diseño y desarrollo de este tipo de materiales.

2. Antecedentes

Es una práctica frecuente mejorar las propiedades de los materiales poliméricos mediante la incorporación de partículas, tejidos o fibras de diferente naturaleza, obteniendo materiales compuestos de matriz polimérica termoplástica, elastomérica o termoestable.

En los últimos años, las fibras naturales han sido utilizadas como un sustituto de las fibras sintéticas, por su bajo costo y un consumo de energía inferior durante la fase de producción frente a las fibras sintéticas [6], uno de los usos más comunes es en materiales compuestos donde cumplen la función de refuerzos en materiales de matriz polimérica; su desempeño y propiedades mecánicas se compara con fibras sintéticas convencionales como las de vidrio, carbono y aramida. Estos materiales son usados frecuentemente en la industria automotriz, aeroespacial, militar, de construcción, embalaje, calzado, mobiliario, etc [7, 8].

Las fibras naturales se clasifican según su origen vegetal, animal o mineral. A su vez, las fibras de origen vegetal se clasifican de acuerdo con la parte de la planta de la que se extraen, esta clasificación la podemos observar en la *Figura 1* [8].

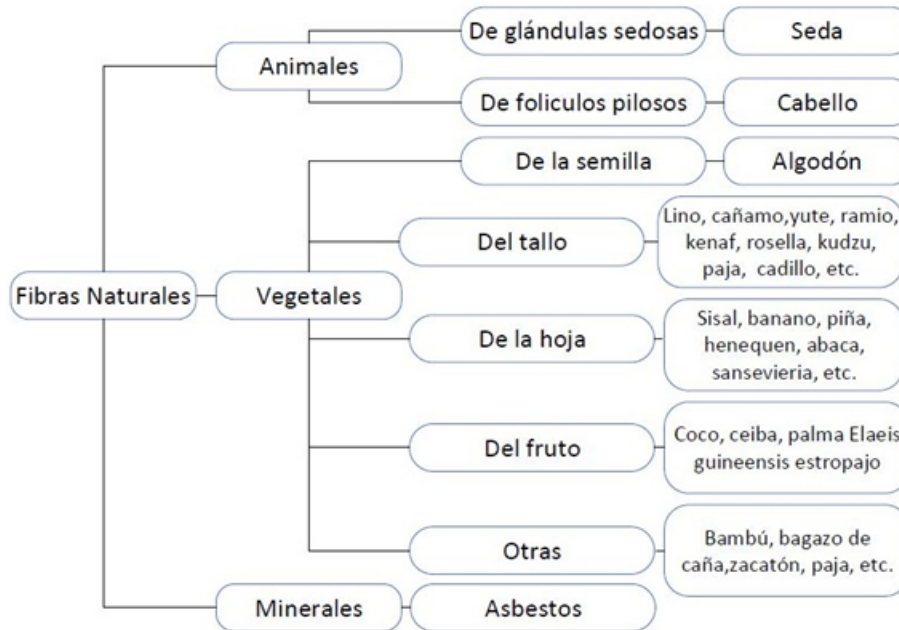


Figura 1. Clasificación de Fibras naturales.

2.1. Composición de las Fibras vegetales

Las fibras vegetales están constituidas principalmente por celulosa, hemicelulosa y lignina, por lo que tienden a ser materiales fuertemente hidrofílicos, estos biopolímeros son los más abundantes en las plantas y conforman su pared celular, su composición de los tres componentes varía dependiendo del tipo de planta [2, 9].

En la *Tabla 1* se muestra la composición de una amplia variedad de fibras vegetales. Estos datos fueron recopilados de las referencias aquí citadas [10, 11, 12].

Tabla 1. *Composición química de fibras naturales comunes.*

| Fibra | Celulosa %m | Hemicelulosa %m | Lignina %m | Cenizas %m |
|------------------|------------------------|----------------------------|-----------------------|-----------------------|
| Yute | 60 | 22.1 | 15.9 | 1 |
| Ramina | 80-85 | 3-4 | 0.5 | - |
| Kenaf | 72 | 20.3 | 9 | 4 |
| Linaza | 71 | 18.6-20.6 | 2.2 | - |
| Cáñamo | 72 | 10 | 3 | 2.3 |
| Sisal | 74-75 | 10-13.9 | 7.6-7.9 | 0.4 |
| Platano | 60-65 | 6-8 | 5-10 | 1.2 |
| Abacá | 56-63 | 20-25 | 7.9 | - |
| Palma Raphia | 44.6 | 13.5 | 2.7 | - |
| Piña | 83 | - | 12 | - |
| Curauá | 70.7 | 21.1 | 7.5 | 0.8 |
| Piassava | 31.6 | - | 48.4 | - |
| Kapok | 50.7 | 49.3 | 13.4 | - |
| Tallo de algodón | 50.6 | 28.4 | 23.1 | - |
| Coco | 43-53 | 14.7 | 38-40 | - |
| Paja de Arroz | 43.2 | 31.7 | 16.9 | 9.9 |
| Paja de Trigo | 43.2 | 34.1 | 22 | 4.99 |
| Cebada | 31-45 | 14-15 | 24-29 | - |
| Paja de Maíz | 39.82 | 23.19 | 11.98 | - |
| Bamboo | 33-45 | 30 | 20-25 | - |
| Bagazo | 69.4 | 21 | 4.4 | 0.6 |

La celulosa es un polisacárido lineal homogéneo con una estructura definida, compuesto únicamente por unidades D-glucopiranosas y unidos por enlaces β -1,4 glucosídicos [13] como se muestra en la *Figura 2*.

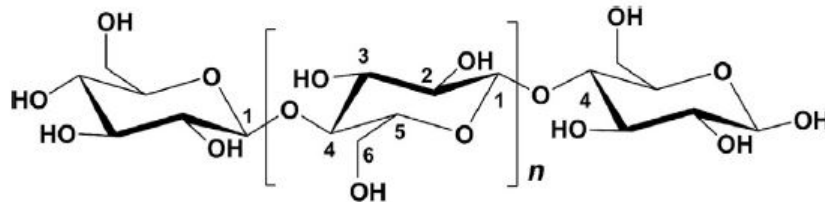


Figura 2. Estructura de la Celulosa. Source: Reproduced with permission from Zhou et al., *Mechanistic Understanding of Thermochemical Conversion of Polymers and Lignocellulosic Biomass*(2016). Copyright © 2016, Elsevier.

Cada unidad repetitiva tiene tres grupos hidroxilos, estos grupos hidroxilos y su capacidad para formar puentes de hidrógeno juegan un papel muy importante en su empaquetamiento cristalino y gobierna las propiedades físicas de la celulosa [8]. Además de que es la que proporciona resistencia y estabilidad a la planta.

La hemicelulosa es el segundo componente más abundante en los materiales lignocelulósicos y representa entre el 20 y 35 % de su peso en seco, los grupos funcionales que la constituyen son pentosas (Xilosa y Arabinosa), hexosas (Manosa, Glucosa y Galactosa, ácido Hexaurónico (Ácido 4-o-metil-d-glucurónico, Ácido galacturónico y ácido glucurónico), pequeñas cantidades de Ramnosa y Fucosa, y el grupo acetilo. Estas estructuras se pueden observar en la *Figura 3*, su estructura puede ser lineal o ramificada. La abundancia, composición química y estructura de cada hemicelulosa es diferente y varía considerablemente dependiendo de la fuente de biomasa [13].

La hemicelulosa difiere de la celulosa en tres aspectos: contiene diferentes estructuras mientras que la celulosa una; segundo tienen un grado de ramificaciones alto que contiene grupos laterales y dan lugar a su naturaleza no cristalina, mientras que la celulosa es un polímero lineal; tercero el grado de polimerización de la celulosa es de 10 a 100 veces mayor que la hemicelulosa. El grado de polimerización de la hemicelulosa es de alrededor de 50-300. La hemicelulosa es hidrofílica, soluble en medio básico y se hidroliza fácilmente en ácidos [14].

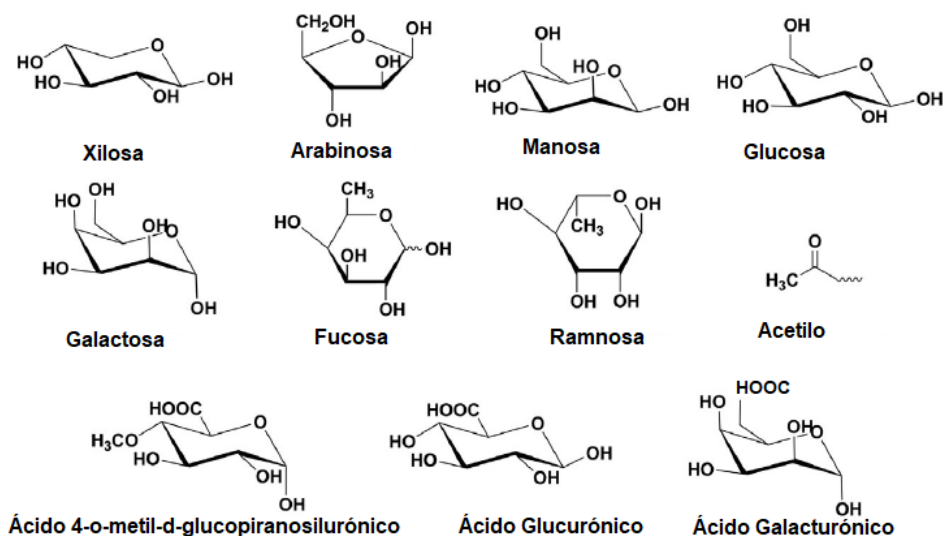


Figura 3. Estructura de la hemicelulosa. Source: Reproduced with permission from Zhou et al., *Mechanistic Understanding of Thermochemical Conversion of Polymers and Lignocellulosic Biomass*(2016). Copyright © 2016, Elsevier.

La lignina es el más complejo de los tres principales componentes de las paredes celulares, tiene constituyentes alifáticos y aromáticos, es totalmente insoluble en la mayoría de solventes y no puede ser dividido en unidades monoméricas. La lignina es de naturaleza totalmente amorfa e hidrofóbica, es considerado un polímero termoplástico y es el componente que le da rigidez a la planta, contiene grupos funcionales como el hidroxido, metoxilo y carbonilo. Se han identificado que la lignina contiene cinco grupos hidroxilos y cinco metoxilos por unidad, se cree que las unidades estructurales de la molécula de lignina son derivados del 4-hidroxil-3-metoxifenilpropano [14], en la *Figura 4* podemos observar el modelo de la estructura de lignina de abeto.

Las diferencias en lignina de maderas duras, blandas y cultivos herbáceos son importantes. Hasta la fecha, la estructura exacta de la lignina, no se comprende a pesar de los años de estudio, en parte por la heterogeneidad y naturaleza compleja de la lignina, y en parte debido a la falta de herramientas analíticas necesarias para analizar el polímero complejo [13].

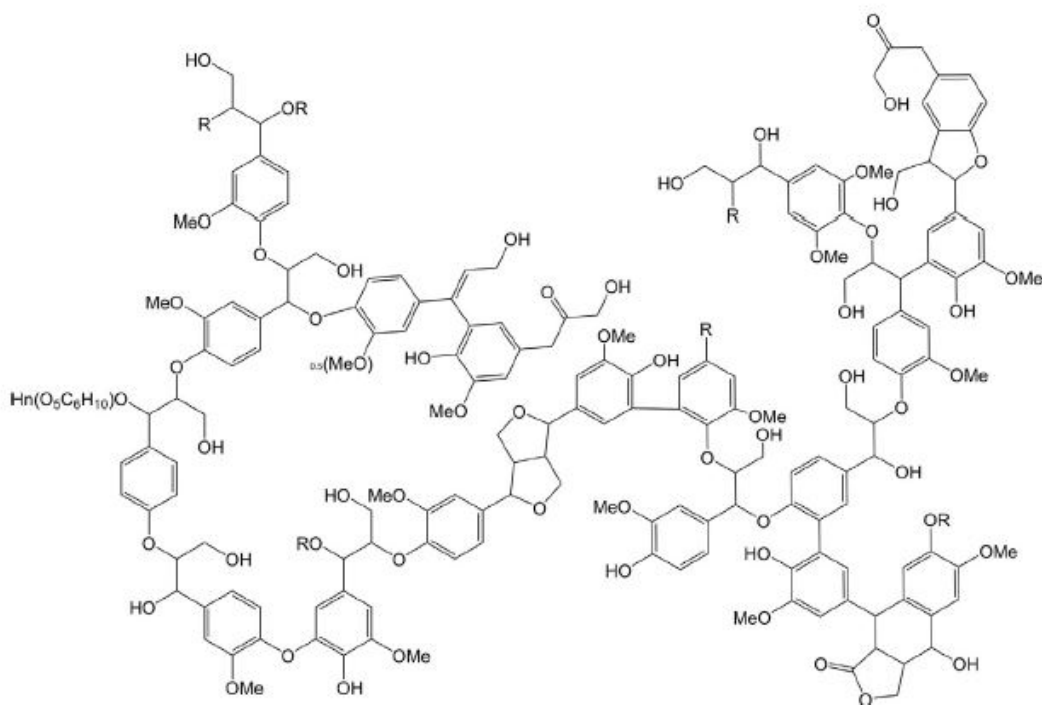


Figura 4. Modelo de la estructura de la lignina de abeto [9].

2.2. Propiedades de las fibras vegetales

La estructura, el ángulo microfibrilar, los defectos y la composición química de las fibras son las variables más importantes que determinan las propiedades de las fibras, diversos autores evalúan la viabilidad de las fibras como material de refuerzo a través de sus propiedades mecánicas, estabilidad térmica y morfología [6, 15].

Propiedades mecánicas

La resistencia varía en todas las fibras naturales lignocelulósicas debido a su estructura, formada por microfibrillas de celulosa acopladas dentro de una matriz amorfa de lignina y hemicelulosa, que se distribuyen a lo largo de la longitud de la fibra, cada fibra tiene una compleja estructura estratificada, con una delgada

pared primaria que rodea una capa más gruesa y secundaria [16].

Otra característica importante que tiene influencia en las propiedades mecánicas es el ángulo microfibrilar, que es el comprendido entre el eje de la fibra y las microfibrillas, cuyo diámetro está entre 10 y 30 nm de tal manera que, mientras más agudo sea el ángulo mayor resistencia y rigidez presentan las fibras, y a medida que se incrementa el ángulo lo hace la ductilidad, es decir, el ángulo determina en gran medida la rigidez de las fibras. Las Fibras vegetales son más dúctiles si las microfibrillas tienen una orientación en espiral al eje de la fibra. Si las microfibrillas están orientadas en paralelo al eje de la fibra, las fibras serán rígidas, inflexibles y tendrán alta resistencia a la tracción [7].

En general se sabe que la resistencia a la tracción y el módulo de Young aumentan con la longitud de cadena de celulosa en la fibra [14]. Varios autores han investigado el comportamiento de tracción de las fibras naturales y se observan grandes discrepancias en los valores reportados de resistencia y módulo de Young en la literatura, esto debido a que las fibras naturales presentan generalmente secciones transversales variables e irregulares. Los principales errores de medición se presentan en el cálculo del esfuerzo y en valores como la longitud de la fibra, la velocidad de deformación, el método de agarre, la resolución de la celda de carga y la precisión del actuador, así como la metodología que utiliza cada máquina para medir el módulo de elasticidad [17]. En la *Tabla 2* se muestran algunas propiedades mecánicas de fibras naturales comunes [6, 2, 18].

Tabla 2. *Propiedades mecánicas de fibras vegetales comunes.*

| Fibra | Módulo de elasticidad GPa | Resistencia a la tracción MPa | Elongación hasta la rotura % |
|--------------|----------------------------------|--------------------------------------|-------------------------------------|
| Yute | 10-30 | 393-800 | 1.5-1.8 |
| Sisal | 9-20 | 468-700 | 2-14 |
| Cáñamo | 70 | 690 | 1.6 |
| Linaza | 27.6 | 345-1500 | 2.7-3-2 |
| Bamboo | 11-17 | 140-230 | - |
| Bagazo | | 290 | 17 |
| Kenaf | 4.3 | 250 | |
| Ramina | 24.5-128 | 400-1000 | 1.2-4 |
| Piña | 34.5-82.5 | 400-1627 | 0.8-1 |
| Coco | 4-6 | 108-252 | 15-40 |

Propiedades térmicas

Las propiedades térmicas de las fibras generalmente son evaluadas a través de análisis térmico via TGA (análisis termogravimétrico), donde la primera pérdida de masa en el rango de temperatura de 25°C a 125°C es asociada a la humedad; la segunda pérdida de masa generalmente de 250°C a 550°C es asociada a la degradación de la celulosa. La descomposición a temperaturas mayores a 367°C se asocia a la lignina hasta valores superiores a 700°C. Finalmente se contabiliza el carbono producto de la degradación de los componentes iniciales. La estabilidad térmica evaluada en diversas fibras naturales generalmente supera los 200°C, esta temperatura influye en las condiciones del proceso de transformación [6, 1, 19].

Morfología

La microscopía electrónica de barrido es ampliamente utilizada para el análisis de la microestructura en las fibras naturales, permitiendo determinar la influencia de su estructura en sus propiedades mecánicas [6].

2.3. Compatibilidad de la fibras naturales con la matriz polimérica

Hay varios retos que enfrentan las fibras naturales para ser útiles como refuerzo en biocompuestos, debido a su carácter hidrófilo, y en consecuencia se genera una adhesión débil en matrices hidrófobas. Por otro lado, su temperatura máxima de degradación oscila alrededor de los 200°C, limitando el uso de matrices con requerimientos de mayor temperatura.

Como ya se mencionó, una desventaja que presentan las fibras vegetales es su carácter hidrofílico lo que las hace incompatibles con el polímero al incorporarlas a la matriz polimérica. Esto se debe a la presencia de grupos hidroxilo en su estructura, por lo tanto, son fuertemente hidrofílicas. El problema importante de la compatibilidad entre la fibra natural y la matriz es el área interfacial y su diferente polaridad. Para disminuir el carácter hidrofóbico de la matriz polimérica es necesario recurrir a procedimientos físicos, químicos o combinados que permitan mejorar la compatibilidad con la fibra [2, 1].

En algunos casos se emplean sustancias reactivas con el polímero, o en otras se retiran componentes que no permiten su fácil compatibilidad. Mediante tratamientos físicos, químicos o enzimáticos es posible modificar la composición de la pared celular compuesta principalmente por celulosa, hemicelulosa y lignina, consecuentemente mejorando la adhesión a la superficie de la matriz polimérica y aumentando los valores de las propiedades mecánicas del nuevo material en algunos casos.

Es extensa la literatura que describe procedimientos físicos, químicos y enzimáticos tanto para la remoción de la lignina y la hemicelulosa como para modificar la superficie de las fibras y así mejorar la interacción en la interfase fibra-matriz. Las mejores opciones de pretratamiento existentes son aquellas que combinan la modificación química y física del material lignocelulósico [1].

los pretratamientos de la fibra natural tienen como objetivo limpiar la superficie de la fibra, modificar químicamente la superficie, detener la absorción de humedad y aumentar la rugosidad de la superficie. Los tratamientos más comunes se enlistan a continuación.

- Blanqueo
- Maceración
- Acetilación
- Esterificación
- Benzolación
- Agentes de acoplamiento
- Acrilación
- Copolimerización por injertos

Los tratamientos químicos como el blanqueo, la acetilación y el tratamiento con álcalis pueden mejorar la adhesión interfacial entre la fibra y la matriz mediante la limpieza removiendo las impurezas de la superficie de las fibras. Como resultado, la rugosidad de la superficie de las fibras aumenta e interrumpe el proceso de absorción de humedad al eliminar de la superficie la capa de grupos OH en la fibra.

Los métodos físicos se aplican para separar las fibras en filamentos individuales o alterar la morfología de las fibras, generando poros o mayor rugosidad, y con ello mejorar el anclaje mecánico con la matriz. Entre los métodos reportados destacan la explosión de vapor que satura las fibras y abre sus filamentos constituyentes y métodos termomecánicos como el estiramiento, el calandrado, extrusión, moldeo por compresión y moldeo por inyección.

Para mejorar la afinidad y la adhesión entre las fibras y las matrices poliméricas también se emplean agentes químicos de acoplamiento o compatibilización. Los agentes de acoplamiento químico son sustancias que se clasifican en tres grupos: orgánicos, inorgánicos y orgánicos-inorgánicos. Los agentes orgánicos incluyen isocianatos, anhídridos, amidas, imidas, acrilatos, clorotriazinas, epóxidos, ácidos orgánicos, monómeros, polímeros y copolímeros. Los inorgánicos silicatos y los orgánicos-inorgánicos titanatos. Los agentes de acoplamiento se usan en pequeñas cantidades, para tratar la superficie de una molécula que permite la unión entre la superficie de la fibra y la matriz del polímero [7, 2, 8, 20].

2.4. Predicción de Propiedades Mecánicas de Polímeros y Biopolímeros

Existen metodologías para predecir propiedades físicas de polímeros que se basan en la estructura química de la unidad repetitiva del polímero, como son Van Krevelen, Bicerano y Askadskii-Matveev, además de software basados en estas metodologías PDTools, SYNTHIA y Cascade respectivamente.

Van Krevelen se basa en el concepto de aditividad de la contribucion de grupos de su unidad repetitiva del polímero y es un enfoque empírico.

Bicerano se basa en los denominados índices de conectividad, que son los principales descriptores de la topología de las unidades repetitivas de los polímeros. Las propiedades del polímero se correlacionan con estos índices de conectividad. Sin embargo, es necesario aplicar correcciones simples para grupos y estructuras particulares para mejorar la precisión de los cálculos; como resultado, se establecen varias correlaciones entre propiedades, y estas correlaciones que permiten estimar las propiedades físicas de los polímeros. Este enfoque es aplicable a polímeros que contienen los siguientes elementos: C, H, N, O, F, S, Cl, Br.

La metodología Askadskii-Matveev considera a la unidad de repetición de una red polimérica un conjunto de osciladores anarmónicos que describen el movimiento térmico de átomos en la región de fuerzas intramoleculares e intermoleculares. La temperatura crítica de este conjunto de osciladores anarmónicos se correlaciona con la temperatura de transición vítrea o con la temperatura de inicio de la degradación. Emplea un conjunto de constantes atómicas y métodos empíricos, parámetros que son independientes de la estructura química del polímero. En sentido estricto, este método no se puede asignar a los métodos de aditividad, ya que muchas de las propiedades calculadas no son aditivas con respecto a los átomos o grupos constituyentes del polímero. Sin embargo, para una pequeña cantidad de propiedades, como las propiedades volumétricas y la energía de cohesión, también se utiliza el enfoque de aditividad. Esta metodología es aplicable a polímeros constituidos por los siguientes elementos: H, F, Cl, Br, I, O, S, N, P, C, Si, Sn, Pb, B.

Gracias a estas metodologías es posible estimar alrededor de 120 propiedades de polímeros, incluyendo sus propiedades volumétricas, térmicas, mecánicas, termofísicas, ópticas, dieléctricas y de barrera. Actualmente se tiene un particular

interés en las propiedades de solubilidad y miscibilidad de polímeros así como también propiedades de copolímeros y mezcla de polímeros [21, 4, 22, 23].

Por otra parte, existen metodologías que predicen el comportamiento del módulo elástico de materiales compositos (Fibra-matriz polimérica) una de ella es la basada en la regla de mezclas, el modelo ROM y es descrita por la *Ecuación 1* y el modelo IROM regla de mezclas inversas descrita por la *Ecuación 2*.

$$E = E_F * V_F + E_M * V_M \quad (1)$$

$$E = \frac{E_F * E_M}{E_F * V_F + E_M * V_M} \quad (2)$$

Donde E_F , V_F , E_M y V_M son los módulos y fracción volumen de la fibra y la matriz, respectivamente.

Estas metodologías consideran a la fibra y matriz como sistemas separados por lo que no consideran interacción entre los sistemas.

Otra metodología es el enfoque de analogía laminada (LAA) basada en "Shear-lag theory", se ha utilizado para predecir el módulo de compuestos poliméricos reforzados con fibras cortas, este modelo considera la longitud y ancho de las fibras y es descrito por la *Ecuación 3*.

$$E = E_f * \left[\frac{1 - \tanh(BL/2)}{BL/2} \right] V_f + E_m(1 - V_f) \quad (3)$$

Donde E_f , E_m , son los módulos de la fibra y de la matriz, respectivamente, V_f la fracción volumen de la fibra, L es la longitud de la fibra y el parámetro B está dado por la *Ecuación 4*.

$$B = \left(\frac{2G_m}{E_f * r f^2 * Ln\left(\frac{R}{r f}\right)} \right)^{1/2} \quad (4)$$

Donde G_m es el módulo de corte de la matriz, $r f$ es el radio de la fibra y R es la principal separación de la fibra con su longitud para un arreglo hexagonal o cuadrado y está dado por las *Ecuaciones 5 y 6*, respectivamente [24].

$$Ln \frac{R}{rf} = \frac{1}{2} * Ln \frac{2 * \pi}{\sqrt{3} V_f} \quad (5)$$

$$Ln \frac{R}{rf} = \frac{1}{2} * Ln \frac{\pi}{V_f} \quad (6)$$

La metodología Halpin–Tsai es otro modelo de predicción que de igual manera considera la geometría de la fibra y está dado por la *Ecuación 7*.

$$Ln E = E_M \left(\frac{1 + \xi \eta * V_F}{1 - \eta * V_F} \right) \quad (7)$$

Donde el parámetro η está dado por la *Ecuación 8*:

$$\eta = \frac{(E_F/E_M) - 1}{(E_F/E_M) + \xi} \quad (8)$$

Donde ξ es un parámetro de ajuste para el modelo Halpin– Tsai considerando datos experimentales y tomado en consideración el arreglo y la geometria de las fibras, si las fibras tienen geometría rectangular o circular, ξ está dado por las *Ecuaciones 9 y 10, respectivamente*.

$$\xi = 2 * \frac{L}{T} \quad (9)$$

$$\xi = 2 * \frac{L}{D} \quad (10)$$

Donde L es la longitud de la fibra en una dirección, T es el espesor de la fibra y D es diametro de la fibra [25].

Sin embargo, en el caso específico de la predicción del módulo de elasticidad en mezclas reales no se comportan como se predicen en las metodologías descritas anteriormente. Un ejemplo de lo descrito anteriormente son los materiales biocompositos, donde los modelos de predicción existentes tienen una tendencia creciente al aumentar el contenido de fibra en el biocompuesto, sin embargo, en el comportamiento real hay un punto donde esta tendencia decrece debido a la generación de condominios, inversión de fases o compatibilidad de la fibra con la

matriz polimérica.

Un ejemplo de lo anterior se observa en la *Tabla 3* [5] que presenta los valores que toma el módulo elástico en 3 biocompuestos (materiales de matriz polimérica de polietileno de alta y baja densidad y polipropileno reforzados con fibra de agave) fabricados por Cindu Annandarajah et al. 2018, donde se presenta una tendencia creciente al aumentar el contenido de fibra en los materiales, sin embargo, después de 30 %m de fibra los módulos de elasticidad decrecen, comportamiento típico de estos materiales.

Tabla 3. *Módulo elástico de biocompuestos.*

| Biocompuesto | %m | Módulo Elástico (MPa) |
|---------------------|-----------|------------------------------|
| | 0 | 88.4 |
| LLDPE: | 5 | 241.5 |
| Fibra de Agave | 10 | 266.7 |
| | 20 | 370.7 |
| | 30 | 324.2 |
| | 0 | 435.1 |
| HDPE: | 5 | 617.6 |
| Fibra de Agave | 10 | 657.6 |
| | 20 | 735 |
| | 30 | 640.3 |
| | 0 | 560.4 |
| PP: | 5 | 766.7 |
| Fibra de Agave | 10 | 829.7 |
| | 20 | 882.7 |
| | 30 | 738.8 |

De acuerdo con el modelo de Tatiana Matseevich et al. 2020 que se basan en la metodología Askadskii-Matveev, donde predice el comportamiento del módulo elástico de una mezcla de dos polímeros sólidos (PVC reforzado con fibras lignocelulósicas Moso Bamboo y coníferas), a través de la fracción másica, volumen de Van der Waals, peso molecular y valores de módulo elástico de los componentes del material compuesto. En donde en ambos casos se presenta una tendencia creciente, si se replica este modelo a los datos experimentales de Cindu Annandajah et al. 2018 se observaría que no presentan este comportamiento, por lo que es necesario realizar modificaciones o desarrollar modelos que predigan esta propiedad de manera más acertada a su comportamiento.

3. Objetivos

Objetivo General

Generar un modelo matemático para la predicción del módulo elástico de materiales compuestos de matriz polimérica reforzados con fibras vegetales, a través de características físicas y composición de los componentes de estos materiales.

Objetivos Particulares

1. Basados en el modelo presentado por Tatiana Matseevich et al. 2020 IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 869 032009, del cálculo de módulo elástico a partir de volumen de Van der Waals y la composición de los materiales, mejorar el modelo, considerando una composición crítica donde se tenga una inversión de fases y extenderlas a otras mezclas de polímeros.
2. Validar el modelo generado con datos experimentales de trabajos previos de nuestro grupo de trabajo (datos no publicados de Daniel Alcántara Pineda, tesista de licenciatura) y datos experimentales obtenidos de otras referencias (Cindu Annandarajah et al., Materials MDPI 2019 12 99).

Hipótesis

Es posible establecer un modelo que prediga el comportamiento del módulo de elasticidad de materiales basados en una matriz polimérica y reforzados con fibras lignocelulósicas, a través de establecer una concentración crítica a partir de la cual el módulo decrece en función del contenido de fibra lignocelulósica como lo observado en resultados experimentales.

4. Metodología

4.1. Propuestas de modelos para cálculo de módulo de elástico

4.1.1. Modelo Matseevich modificado

Para el desarrollo de este modelo de predicción del módulo de elasticidad inicialmente se replicó el modelo considerado en el artículo Tatiana Matseevich et al. 2020 IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 869 032009, posteriormente se extendió a otros materiales compósitos de matriz polimérica reforzados con fibras naturales y finalmente se modificó el modelo donde se considera una fracción másica crítica.

El modelo de Tatiana Matseevich y colaboradores considera para el cálculo de módulo elástico una mezcla de dos polímeros sólidos y utiliza el volumen de Van der Waals, sus pesos moleculares y fracción másica, además del valor de los módulos elásticos de cada polímero, a continuación se detalla el cálculo de estos parámetros.

Cálculo de módulo elástico para una mezcla de dos componentes de polímeros sólidos

Para el cálculo del módulo elástico de una mezcla de polímeros sólidos de n componentes se emplea la *Ecuación 11*.

$$E = \frac{\alpha_{m,p1}(\sum_i \Delta V_i)_{p,1} + \alpha_{m,p2}(\sum_i \Delta V_i)_{p,2} + \dots + \alpha_{m,pn}(\sum_i \Delta V_i)_{p,n}}{\frac{\alpha_{m,p1}(\sum_i \Delta V_i)_{p,1}}{E_1} + \frac{\alpha_{m,p2}(\sum_i \Delta V_i)_{p,2}}{E_2} + \dots + \frac{\alpha_{m,pn}(\sum_i \Delta V_i)_{p,n}}{E_n}} \quad (11)$$

Donde $(\sum_i \Delta V_i)_{p,1}$, $(\sum_i \Delta V_i)_{p,2}$, $(\sum_i \Delta V_i)_{p,n}$ son los volúmenes de Van der Waals de la unidad repetitiva, $\alpha_{m,p1}$, $\alpha_{m,p2}$ y $\alpha_{m,pn}$ son las fracciones molares y E_1 , E_2 y E_n los módulos elásticos de los polímeros 1, 2 y n respectivamente.

Si se considera la mezcla de dos polímeros sólidos y la suma de $\alpha_{m,p1} + \alpha_{m,p2} = 1$, la *Ecuación 11* se puede escribir como:

$$E = \frac{1 + \alpha_{m,2} \left[\frac{\sum_i \Delta V_i)_{p2}}{\sum_i \Delta V_i)_{p1}} - 1 \right]}{\frac{1}{E_1} + \alpha_{m,2} \left[\frac{\sum_i \Delta V_i)_{p2}}{\sum_i \Delta V_i)_{p1}} - \frac{1}{E_1} \right]} \quad (12)$$

Con la finalidad de obtener la dependencia de la fracción másica con respecto al módulo elástico, se uso la relación de fracción molar-fracción masa de la mezcla de dos componentes *Ecuación 13* y se substituyó en *Ecuación 12*.

$$\alpha_{w,2} = \frac{1}{1 + \frac{M_{p2}}{M_{p1}} \left(\frac{1}{\alpha_{m,2}} - 1 \right)} \quad (13)$$

Donde M_{p1}, M_{p2} , son los pesos moleculares del polímero 1 y 2 respectivamente, $\alpha_{m,2}$ es la fracción molar y $\alpha_{w,2}$ la fracción másica del polímero 2. Por lo tanto, el módulo elástico de la mezcla de dos polímeros sólidos puede ser expresado mediante la *Ecuación 14*.

$$E = \frac{1 + \frac{[(\sum_i \Delta V_i)_{p2} - 1]}{(\sum_i \Delta V_i)_{p1}}}{1 + \frac{M_{p2}}{M_{p1}} \left(\frac{1}{\alpha_{w2}} - 1 \right)} \quad (14)$$

$$\frac{1}{E_1} + \frac{\frac{(\sum_i \Delta V_i)_{p2}}{(\sum_i \Delta V_i)_{p1}} - \frac{1}{E_1}}{1 + \frac{M_{p2}}{M_{p1}} \left(\frac{1}{\alpha_{w2}} - 1 \right)}$$

Donde $(\sum_i \Delta V_i)_{p,1}$, $(\sum_i \Delta V_i)_{p,2}$, son los volumen de Van der Waals de la unidad repetitiva, y E_1 , E_2 los módulos elásticos de los polímeros 1, 2 respectivamente y $\alpha_{w,2}$ es la fracción másica del polímero 2.

Cálculo de volumen de Van der Waals

Para el cálculo del volumen de Van der Waals de los componentes fue calculado a través de la metodología de Van Krevelen o de Askadskii–Matveev, donde ambas se basan en la contribución de grupos, cada grupo contenido en la unidad repetitiva del polímero contribuye a la propiedad de polímero y la suma de estas contribuciones multiplicado por la cantidad que se repite el grupo en la unidad corresponde al volumen de Van der Waals (*Ecuación 15*). Las contribuciones de los grupos fueron tomados de la tabla 4.2 del libro de Van Krevelen cuarta edición [22], en el caso de Askadskii–Matveev las contribuciones fueron tomadas de

la tabla 8 del artículo "Latest developments of models and calculation schemes for the quantitative analysis of the physical properties of polymers" [26].

$$V = c \sum_i^n \Delta V_i \quad (15)$$

Donde c corresponde a la cantidad del grupo presente en la unidad repetitiva del polímero y ΔV_i , a la contribución del grupo al volumen de Van der Waals.

El resultado de Van Krevelen los resultados estan dados en cm^3/mol y los resultados de Askadskii–Matveev en $\text{Å}^3/molecula$, por lo que es necesario multiplicarlo por el número de Avogadro y el factor de conversión de Å^3 a cm^3 , para que las unidades sean congruentes a continuación se detalla el factor de conversión utilizado.

$$\left(\frac{cm^3}{mol}\right)\left(\frac{1 \times 10^8 \text{Å}}{cm}\right)^3 \left(\frac{mol}{6,022 \times 10^{23} \text{moleculas}}\right) = 1,6605 \frac{\text{Å}^3}{molecula}$$

Cálculo de peso molecular y volumen de Van der Waals de fibras lignocelulosicas

En el caso de los materiales de refuerzos es decir, las fibras lignocelulósicas es necesario considerar los porcentajes de lignina, hemicelulosa y celulosa para realizar el cálculo de volumen de Van der Waals y peso molecular.

Para el cálculo del peso molecular se utiliza la *Ecuación 16*.

$$M_2 = \alpha_c M_c + \alpha_h M_h + \alpha_l M_l \quad (16)$$

Donde α_c, α_h y α_l corresponden a la fracción másica y M_c, M_h y M_l al peso molecular de celulosa, hemicelulosa y lignina, respectivamente.

De manera análoga se realiza el cálculo del volumen de Van der Waals para los materiales lignocelulosicos con la *Ecuación 17*.

$$\left(\sum_i \Delta V_i\right)_2 = \alpha_C \left(\sum_i \Delta V_i\right)_C + \alpha_H \left(\sum_i \Delta V_i\right)_H + \alpha_L \left(\sum_i \Delta V_i\right)_L \quad (17)$$

Donde $(\sum_i \Delta V_i)_C, (\sum_i \Delta V_i)_H$ y $(\sum_i \Delta V_i)_L$ corresponden al volumen de Van der Waals de celulosa, hemicelulosa y lignina, respectivamente.

Cálculo de propiedades mecánicas

Las propiedades mecánicas de los polímeros son controladas por los parámetros elásticos: los tres módulos y la relación de Poisson, estos cuatro parámetros son relacionados teóricamente, si se conocen dos de ellos es posible calcular los otros dos.

En materiales sólidos, los parámetros elásticos son relacionados con las funciones de velocidad de propagación del sonido; se considera que se tiene un material sólido elástico isotrópico al cual se le hace pasar una onda sonora, si cumple este requisito el material prácticamente no deberá absorber las ondas sonoras. Sin embargo, el material propagará las ondas sonoras de manera diferente en dirección longitudinal y transversal.

Por lo tanto, las propiedades mecánicas son calculadas a través de las funciones molares de la velocidad de sonido, es decir, la función Hartmann U_H y la función de Rao U_R .

Las funciones U_H y U_R son calculadas a través de la metodología de contribución de grupos de la unidad repetitiva del polímero. los valores de U_H y U_R fueron tomados de la tabla 14.4 de Van Krevelen 4 edición [22].

$$U_x = c \sum_i^n \Delta U_i \quad (18)$$

Donde c corresponde a la cantidad del grupo presente en la unidad repetitiva del polímero y ΔU_i a la contribución de la función molar correspondiente.

Cálculo del módulo de compresión

$$K = \rho \left(\frac{U_R}{V} \right)^6 \quad (19)$$

Donde K es el módulo de compresión, ρ es la densidad del polímero, V el volumen molar del polímero y U_R es la función de Rao.

Cálculo del módulo de corte

$$G = \rho \left(\frac{U_H}{V} \right)^6 \quad (20)$$

Donde G es el módulo de corte, ρ es la densidad del polímero, V el volumen molar del polímero y U_H es la función de Hartmann.

Cálculo del módulo elástico

$$E = 3G / [1 + G / (3K)] \quad (21)$$

Donde E es el módulo elástico o módulo de Young, G es el módulo de corte y K es el módulo de compresión.

Modificaciones al modelo

En este modelo se utiliza la fracción volumen de los componentes por lo que es necesario realizar la conversión de fracción másica a fracción volumen utilizando la *ecuación 22*.

$$\alpha_{V,2} = \frac{\alpha_{w,2}}{\alpha_{w,2} + \frac{\rho_{p2}}{\rho_{p1}}(1 - \alpha_{w,2})} \quad (22)$$

Donde $\alpha_{V,2}$ es la fracción volumétrica del polímero 2, $\alpha_{w,2}$ es la fracción másica del polímero 2 y ρ_{p1} , ρ_{p2} son las densidades del polímero 1 y 2 respectivamente.

El modelo propuesto utiliza los resultados de los módulos de elasticidad obtenidos del modelo de Tatiana Matseevich y colaboradores, descrito por la *Ecuación 14*. Este modelo recalcula estos valores de módulo y se considera una concentración volumétrica crítica y la fracción volumétrica del porcentaje de material lignocelulósico mediante la *Ecuación 23*.

$$E = E_{Matseevich} \left(1 - \frac{\alpha_{V,2}}{\alpha_{Vc,2}} \right)^{-\alpha_{Vc,2}} \quad (23)$$

Donde E es el módulo de elasticidad del compuesto, $\alpha_{V,2}$ es la fracción volumétrica del polímero 2, $E_{Matseevich}$ es el módulo elástico del modelo de Tatiana y colaboradores y $\alpha_{Vc,2}$ es la fracción volumétrica crítica.

4.1.2. Modelos logarítmico semiempírico

Los modelos logarítmicos son empleados cuando se pretende representar medidas que toman valores muy dispares, desde valores muy pequeños hasta valores muy grandes, por esta razón y por las características de las funciones logarítmicas como son: continua, definida solo en números positivos, funciones que crecen lento conforme el valor de su base aumenta, se propone un modelo semiempírico para el modelo de predicción de módulo elástico.

Este modelo es descrito por la *Ecuación 24*.

$$\ln\left(\frac{E}{E_0}\right) = C(\ln(1 - X))^2 \quad (24)$$

Donde E es el módulo de elasticidad del compuesto, E_0 es el módulo elástico de la matriz polimérica, C es una función que depende de la fracción del componente lignocelulósico y tiene la forma de una función exponencial descrita por la *Ecuación 25*.

$$C = C_0 e^{Dx} \quad (25)$$

Donde C_0 y D corresponden a las constantes resultantes del ajuste de regresión considerando datos experimentales y, x es la fracción de componente lignocelulósico presente en el material. Si sustituimos la función de C y aplicamos leyes de los logaritmos en la *Ecuación 26* obtenemos:

$$\ln(E) = \ln(E_0) + (C_0 e^{Dx}) * (\ln(1 - X))^2 \quad (26)$$

Si posteriormente la función C la pasamos como exponente por las propiedades de las funciones logarítmicas tenemos:

$$\ln(E) = \ln(E_0) + (\ln(1 - X))^{2(C_0 e^{Dx})} \quad (27)$$

Finalmente reduciendo terminos obtenemos la forma linealizada, la cual se muestra en la *Ecuación 28*.

$$\ln(E) = \ln(E_0) + (\ln(1 - X))^{2C} \quad (28)$$

4.1.3. Modelo logarítmico

El último modelo propuesto también corresponde a un modelo logarítmico por las razones mencionadas con anterioridad, pero con la diferencia de que pretende ser un modelo teórico y no con un enfoque empírico.

Se propone un modelo descrito por la *Ecuación 29* que consiste en el logaritmo del módulo de elasticidad del compuesto igual a la suma de dos funciones logarítmicas: una correspondiente a la contribución de la matriz polimérica y la otra a la contribución de la fibra lignocelulósica y el compatibilizante utilizado.

$$\ln(E) = \ln(f_{matriz}) + \ln(f_{Lignocelulosica}) \quad (29)$$

Donde las funciones f dependen del módulo de elasticidad de la matriz o la fibra, la fracción del componente presente en el compuesto y una constante (C o d) que dependen de propiedades del componente (*Ecuación 30*).

$$\ln(E) = \ln(f(E, x, C)) + \ln(f(E, x, D)) \quad (30)$$

Durante el desarrollo de los datos experimentales se noto que C toma un valor constante, mientras que d tiene la forma de una función exponencial de la forma Ae^{Bx} y para obtenerla se sigue el siguiente procedimiento.

Se calcula K mediante la *Ecuación 30* que es factor que relaciona los porcentajes de celulosa, hemicelulosa y lignina presentes en la fibra y su volumen molar, respectivamente.

$$K = \frac{X_c * V_c + X_H * V_H + X_l * V_l}{V_c + V_H + V_l} \quad (31)$$

Donde X_c , X_H y X_l son las fracciones másicas de celulosa, hemicelulosa lignina presentes en la fibra respectivamente, V_c , V_H y V_l son los volúmenes de Van der Waals de celulosa, hemicelulosa y lignina de la fibra, respectivamente.

Posteriormente se calcula D mediante la *Ecuación 32*.

$$D = K * c \quad (32)$$

Donde K es la variable calculada por la *Ecuación 31* y c es una función exponencial.

Finalmente se realiza una regresión donde se considera los valores de c y la fracción másica de componente lignocelulósico presente en el compuesto, de esta

manera se obtienen las constantes A y B de la función exponencial que describen D , de tal manera que la (Ecuación 30) la podemos reescribir como:

$$\ln(E) = \ln(E_m * X_m * C) + \ln(E_f * X_f * K A e^{Bx}) \quad (33)$$

Donde E es el módulo de elasticidad del compuesto, E_m es el módulo de la matriz polimérica, E_f es el módulo de la fibra, X_m y X_f son las fracciones másicas de la matriz y la fibra, respectivamente; C es constante y el termino de f descrito a través de la función exponencial correspondiente y el factor K .

Cálculo de error experimental

En todos las metodologías se realizó un comparativo con datos experimentales y cálculo el error experimental mediante la Ecuación 34.

$$E = \frac{V_E - V_C}{V_E} \quad (34)$$

Donde V_E es el valor experimental y V_C corresponde al valor calculado.

4.2. Propuesta de Software de predicción de propiedades mecánicas

Se realizó un software donde incluyen los modelos propuestos para predicción de módulo elástico. Este software predice el módulo elástico de materiales compuestos, es decir, diferentes matrices poliméricas y fibras lignocelulosicas con diferentes contenidos de celulosa, hemicelulosa y lignina.

Se utilizo el lenguaje de programación de Python y las paqueterias, tkinter para interfaces gráficas, matplotlib para graficación y numpy para los cálculos necesarios.

A continuación se detalla el código de programación utilizado.

Paqueterias utilizadas

```
import tkinter as tk
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.backends.backend_tkagg
import FigureCanvasTkAgg
```


Definición de variables y cálculo de funciones

En este apartado se colocaron las metodologías de cada modelo con sus respectivas variables y propiedades de cada componente de los materiales involucrados (polímero-fibra). Esto se realizó con cada matriz polimérica y en la interfaz del software se ejecuta con el botón correspondiente a la matriz polimérica después de ingresar los datos solicitados.

```
def función():
Vp1=
Pp1=
e1=float(txt9.get())
E2=float(txt8.get())
Xp2=float(txt10.get())
Xc=float(txt3.get())
Xh=float(txt4.get())
Xl=float(txt5.get())
E1=float(txt7.get())
Vwp1=
PMp1=
ρP1=
ρP2=
Xc=
Xp1=1-Xp2
Vwp2=Xc*132+Xh*203+Xl*302
PMp2=Xc*162+Xh*292+340*Xl
VP2=Vwp2*Xp2+Xp1*Vp1
MP2=PMp2*Xp2+Xp1*Pp1
g=(1+((Vwp2/Vp1)-1)/(1+((PMp2/Pp1)*((1/Xp2)-1))))/((1/e1)+(((Vwp2/Vp1)/E2)-(1/e1))/(1+((PMp2/Pp1)*((1/Xp2)-1))))
X = np.linspace(0,0.3,100)
y=(1+((VP2/Vwp1)-1)/(1+((MP2/PMp1)*((1/X)-1))))/((1/E1)+(((VP2/Vwp1)/g)-(1/E1))/(1+((MP2/PMp1)*((1/X)-1))))
Xv=X/(X+((1-X)*(rhoP2/ρP1)))
E=y*(1-(Xv/Xc)**-Xc
Co=
D=
E3=E1*(np.exp(Co*np.exp(D*X)*(np.log(1-X)**2)))
B = np.linspace(0.03,0.3,100)
```

```

C1=
A=
C2=
Z=
E4=np.exp(np.log(E1*(1-B)*C1)+np.log(B*E2*A*C2*np.exp(Z*B)))

```

Graficación

En esta sección se colocó el título de la gráfica, ejes y títulos de las gráficas de acuerdo al modelo correspondiente.

```

ax.clear()
ax.plot(X,E,label='Modelo Matseevich modificado')
ax.plot(X,y,label='Modelo Matseevich')
ax.plot(X,E3,label='Modelo semiempírico logarítmico')
ax.plot(B,E4,label='Modelo logarítmico')
ax.set_xlabel('Xw')
ax.set_ylabel('Módulo elástico')
ax.set_title('Predicción del módulo elástico')
ax.legend(loc='right')
line.draw()

```

Ventana principal

En esta sección corresponde a la distribución de la ventana principal.

```

root = tk.Tk()
root.geometry('950x500')
root.title("Nombre de la ventana")
arriba_frame = tk.Frame(root)
arriba_frame.place(relx=0.03, rely=0.05, relwidth=0.9, relheight=0.5)
left_frame = tk.Frame(root)
left_frame.place(relx=0.03, rely=0.5, relwidth=0.25, relheight=0.5)
right_frame = tk.Frame(root, bg='#C0C0C0', bd=1.5)
right_frame.place(relx=0.3, rely=0.5, relwidth=0.65, relheight=0.5)

```

Cajas de texto y entradas

En esta sección se muestra la codificación para cajas de textos y entradas para los datos que se solicitan dentro de la interfaz del software.

```
lb4=tk.Label(arriba_frame,text="(Texto de la caja de texto)")
lb4.place(relx=0.03, rely=0.45, relwidth=0.20, relheight=0.1)
txt7=tk.Entry(arriba_frame)
txt7.place(relx=0.25, rely=0.45, relwidth=0.15, relheight=0.1)
```

Botones

Codificación utilizada para los botones de cada matriz polímerica.

```
B0 = tk.Button(left_frame,text="leyenda del botón",command = Función a
ejecutar)
B0.place(rely=0,relheight=0.2,relwidth=1)
```

Código para añadir gráfica

Codificación para añadir la gráfica de resultados a la ventana principal.

```
figure = plt.Figure(figsize=(8,6), dpi=65)
ax = figure.add_subplot(111)
line = FigureCanvasTkAgg(figure, right_frame)
line.get_tk_widget().pack(side=tk.LEFT, fill=tk.BOTH,expand=1)
```

Comando de ejecución

```
root.mainloop()
```

5. Resultados y Discusión

5.1. Resultados del modelo Matseevich modificado (M1)

Resultados del cálculo de E para los materiales de Daniel Alcántara Pineda (M1)

Los primeros materiales analizados fueron materiales compuestos de matriz de polietileno de baja densidad reforzados con fibra de agave, donde utilizaron un agente compatibilizante (Addico) que es una mezcla de estireno, metacrilato de metilo (MMA) y metacrilato de glicidilo (GMA), la información de condiciones de procesamiento y formulaciones se encuentran descritos en el apéndice a.

Para la predicción del módulo elástico por medio de la metodología de Matseevich modificado de estos materiales primero se definió como polímero 1 al polietileno y el polímero 2 a la fibra de agave-Addico. Posteriormente se calculó las propiedades mecánicas, volumen de Van der Waals y peso molecular de cada polímero .

Como primera etapa se calcularon las propiedades de todos los compuestos involucrados, de acuerdo a las metodologías descritas anteriormente. Los resultados se encuentran en las *Tablas 22, 23 y 24*. Estas tablas incluyen los resultados del polietileno (polimero 1) y las propiedades del polímero 2 (fibra de agave-Addico) fueron calculadas de la siguiente manera:

Dado que el Addico es una mezcla de estireno, metacrilato de metilo y metacrilato de glicidilo , el módulo elástico fue calculado con la *Ecuación 11*, considerando la composición molar del Addico descrita en la *Tabla 4* y los módulos elásticos descritos en la *Tabla 23*.

Tabla 4. *Composición del Addico.*

| Componente | MMA | MGA | Estireno |
|---------------------------|--------|--------|----------|
| Composición molar | 0.4525 | 0.4350 | 0.1125 |
| Composición másica | 0.425 | 0.425 | 0.150 |

El peso molecular y volumen de Van der Waals del Addico fue calculado considerando los pesos moleculares y la fracción másica de cada componente, los valores

considerados se encuentran en las *Tablas 4,24 y 22*. En la *Tabla 5* se muestran los valores obtenidos de las propiedades del Addico.

Tabla 5. *Propiedades del Addico.*

| Addico | |
|---|---------|
| Módulo elástico (MPa) | 3039.50 |
| Volumen de Van der Waals (g/mol) | 104.33 |
| Peso molecular (g/mol) | 108.06 |

Posteriormente a la caracterización del Addico, se obtuvieron las propiedades de la fibra de agave considerando los contenidos de celulosa, hemicelulosa y lignina presente en la fibra, el peso molecular mediante la *Ecuación 16*, y el volumen de Van der Waals mediante la *Ecuación 17* utilizando la composición descrita en la *Tabla 7* y las características de las *Tablas 24,22 y 6*. Los resultados obtenidos se muestran en la *Tabla 8*.

Tabla 6. *Propiedades Celulosa y Hemicelulosa.*

| | Peso molecular g/mol | Volumen de Van der Waals °A/molecula |
|--------------|---------------------------------|---|
| Hemicelulosa | 292 | 203 |
| Lignina | 240 | 302 |

Tabla 7. *Composición de la fibra de Agave.*

| Componente | Celulosa | Hemicelulosa | Lignina |
|--------------------------|-----------------|---------------------|----------------|
| Composición molar | 0.4206 | 0.2115 | 0.1350 |

Tabla 8. *Propiedades fibra de agave.*

| Fibra de agave | |
|--|----------|
| Peso Molecular (g/mol) | 175.7952 |
| Volumen de Van der Waals (cm³/mol) | 139.2237 |

El cálculo de propiedades del polimero 2 finalmente se obtuvo considerando la relación presente de Addico-Agave(3:7) y el módulo de elasticidad con la *Ecuación*

14 considerando el módulo de elasticidad de la fibra de agave de 3290MPa dato extraído de la *Tabla 3* del artículo "Up-cycling of agave tequilana bagasse-fibres: A study on the effect of fibre-surface treatments on interfacial bonding and mechanical properties" [27] y considerando las propiedades previamente calculados de agave y Addico, los propiedades obtenidos se muestran en la *Tabla 9*.

Tabla 9. *Resultados del polímero 2 (Addico-agave).*

| Polímero 2 (Addico-Agave) | |
|--|---------|
| Módulo elástico (MPa) | 3199.51 |
| Volumen de Van de Waals (g/mol) | 128.76 |
| Peso molecular (g/mol) | 155.48 |

Posterior a caracterizar los polímeros 1 y 2, se replicó el modelo de Tatiana Matseevich y colaboradores de acuerdo a la *Ecuación 14*, considerando fracciones máxicas del polímero 2 en el intervalo de [0,1], como ya se mencionó con anterioridad, este modelo no sigue la tendencia experimental (al principio una tendencia creciente y posteriormente decreciente), por lo que se modificó el modelo proponiendo una concentración crítica considerando $Xv = 0,40$ (fracción volumen del polímero 2). Para poder realizar los cálculos de esta propuesta fue necesario utilizar la *Ecuación 22* y considerar las densidades de los polímeros reportados en la *Tabla 10*.

Tabla 10. *Datos de densidades.*

| | Densidad g/ml | Referencia |
|--------------------|----------------------|-----------------|
| LLDPE (polímero 1) | 0.926 | Ficha técnica |
| (polímero 2) | 1.182 | Cálculo interno |

La densidad del polímero 2 fue calculada considerando la densidad de agave reportada en "Effect of volume fraction and aspect ratio of Agave fiber Cantula Roxb against compressive strength and direct tensile strength" con un valor de 1.2 g/ml [28] y la densidad de Addico, la cual fue calculada considerando su composición máxica descrita en la *Tabla 4* y las respectivas densidades de sus componentes reportadas en la *Tabla 11*.

Tabla 11. *Datos de densidades componentes de Adicco.*

| Componente | Densidad (g/ml) | Referencia |
|--------------|-----------------|-------------------|
| PGMA | 1.08 | ¹ |
| PMMA | 1.17 | [22] ² |
| Poliestireno | 1.13 | [22] ³ |

$$\rho_{adicco} = (1,08 * 0,15) + (1,17 * 0,425) + (1,13 * 0,425) = 1,14g/ml$$

Posteriormente se consideró la cantidad presente de Agave: Addico(7:3) en el polímero 2. El resultado de la densidad del polimero 2 se muestra a continuación.

$$\rho_{P2} = (1,14 * 0,3) + (1,2 * 0,7) = 1,182g/ml$$

Finalmente, los valores obtenidos de módulo elástico por el modelo Matsevich et al. y Matsevich modificado (modelo 1 propuesto) se muestran junto con el error porcentual respecto al valor experimental del compuesto. Los resultados son mostrados en las *Tablas 12,13,14,15,16 y 17* y con sus comportamientos gráficos en las *Figuras 5,6,7,8,9 y 10*, estos resultados considera resultados experimentales a diferentes temperaturas.

¹Dato tomado de la hoja de seguridad del compuesto

²Dato tomado de la Tabla 4.7 del libro de Van Krevelen cuarta edición.

³Dato tomado de la Tabla 4.9 del libro de Van Krevelen cuarta edición

Tabla 12. Resultados E a 40°C sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1).

| Xw ² | Módulo de elasticidad (MPa) | | | Error ¹ | |
|-----------------|-----------------------------------|---|--------------------------------------|--------------------|--------------------------|
| | Modelo ³ Matseevich | Modelo ⁴ Matseevich modificado | Datos ⁵ Experimentales | Matseevich | Matseevich modificado |
| 0 | 417.591 | 417.591 | 417.591 | 0 % | 0 % |
| 0.05 | 430.497 | 448.830 | 430.206 | 0 % | -4 % |
| 0.1 | 444.697 | 486.267 | 499.32 | 11 % | 3 % |
| 0.15 | 460.397 | 532.119 | 528.807 | 13 % | -1 % |
| 0.2 | 477.846 | 589.924 | 525.44 | 9 % | -12 % |
| 0.25 | 497.355 | 665.803 | | | |
| 0.3 | 519.311 | 771.653 | 526.78 | 1 % | -46 % |
| 0.35 | 544.206 | 935.339 | | | |
| 0.4 | 572.672 | 1249.517 | | | |
| 0.5 | 643.905 | | | | |
| 0.6 | 743.793 | | | | |
| 0.7 | 893.983 | | | | |
| 0.8 | 1145.256 | | | | |
| 0.9 | 1651.422 | | | | |
| 1 | 3199.509 | | | | |

El modelo Matseevich et al. se basa en la aditividad de sus propiedades mecánicas, por lo que presenta una tendencia creciente de E a medida que el contenido de fibra aumenta en el material compuesto, el M1 propuesto es una modificación a este modelo que incorpora una Xv crítica, donde al rebasar este valor el modelo se vuelve inconsistente, debido a que a esta Xv, la fibra empieza a tener problemas de adhesión y compatibilidad con la matriz polimérica debido a su naturaleza física ya comentada. Cabe mencionar que la tendencia se replica en todos los casos de estudio con los diversos materiales, además de que este modelo en la mayoría de los caso presenta cálculos más precisos comparado con el modelo de referencia y considerando los datos experimentales de los materiales.

¹ %Error de E con respecto al valor experimental del material y valor de predicción

²Fracción másica del componente lignocelulósico

³Valores de E obtenidos con el modelo de Matseevich et al.

⁴Valores de E obtenidos con el modelo 1 propuesto

⁵Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

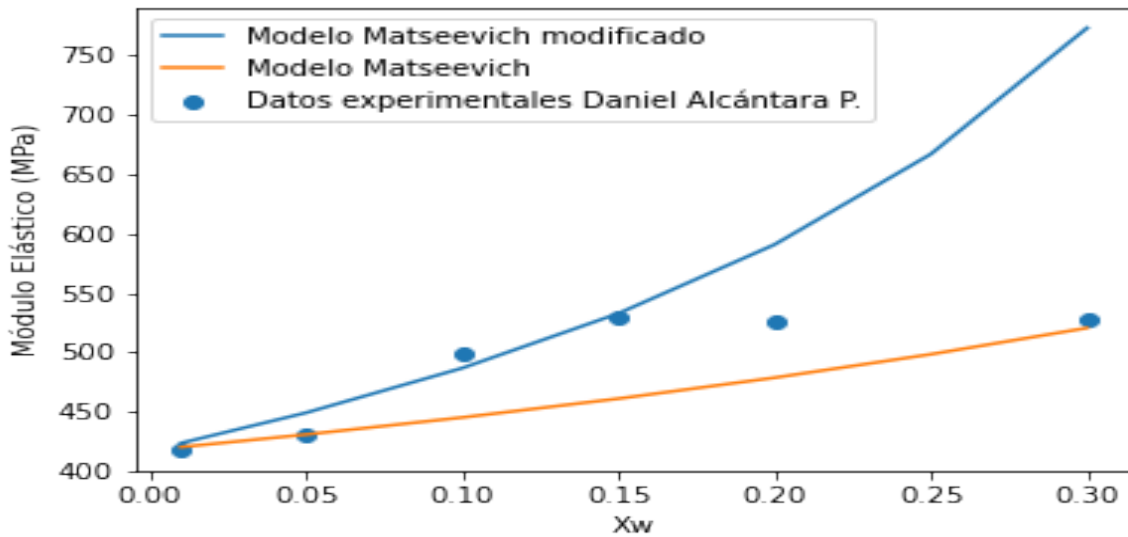


Figura 5. Gráfica E a 40° sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1).

En esta gráfica y posteriores se observan las tendencias de los modelos Matseevich et al., el M1 que corresponde a la propuesta del modelo de Matseevich modificado y los datos experimentales de los materiales, se aprecia las tendencias crecientes ya comentadas y se aprecia una mayor precisión en las predicciones con el M1 en los primeros valores.

Tabla 13. Resultados E a 50°C sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | | Error | |
|------|-----------------------------|------------------------------|-----------------------------------|------------|-----------------------|
| | Modelo Matseevich | Modelo Matseevich modificado | Datos ¹ Experimentales | Matseevich | Matseevich modificado |
| 0 | 381.873 | 381.873 | 381.873 | 0 % | 0 % |
| 0.05 | 393.831 | 410.603 | 407.461 | 3 % | -1 % |
| 0.1 | 407.000 | 445.046 | 496.7 | 18 % | 10 % |
| 0.15 | 421.572 | 487.246 | 496.7 | 15 % | 2 % |
| 0.2 | 437.785 | 540.467 | 473.097 | 7 % | -14 % |
| 0.3 | 476.383 | 707.865 | 489.987 | 3 % | -44 % |
| 0.35 | 499.603 | 858.679 | | | |
| 0.4 | 526.199 | 1148.116 | | | |
| 0.45 | 556.962 | 2500.893 | | | |
| 0.5 | 592.956 | | | | |
| 0.6 | 687.065 | | | | |
| 0.7 | 829.670 | | | | |
| 0.8 | 1071.266 | | | | |
| 0.9 | 1569.718 | | | | |
| 1 | 3199.509 | | | | |

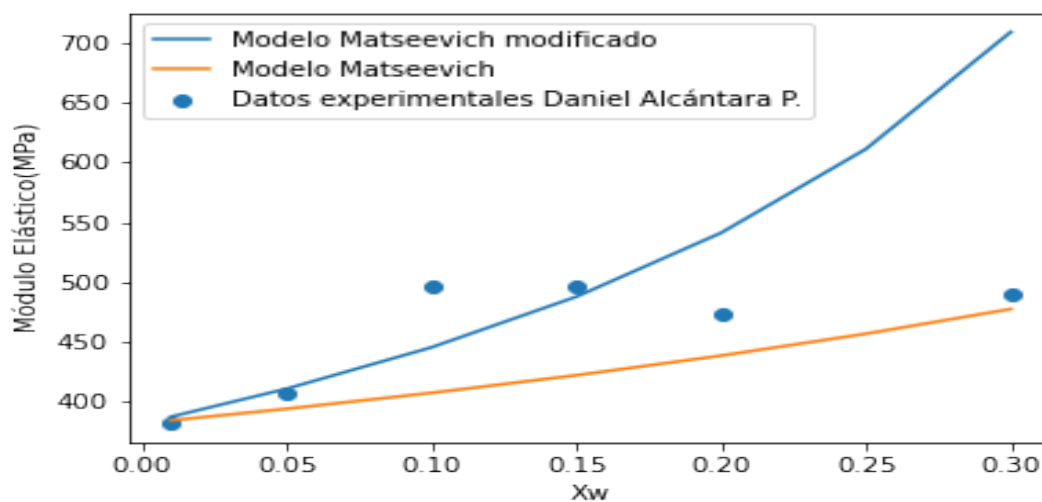


Figura 6. Gráfica E a 50°sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1).

¹Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

Tabla 14. Resultados E a 60°C sistema: LLDPE+ Fibra de Agave+Addico (M1).

| Xv | Módulo de elasticidad (MPa) | | | Error | |
|------|-----------------------------|------------------------------|-----------------------------------|------------|-----------------------|
| | Modelo Matseevich | Modelo Matseevich modificado | Datos ¹ Experimentales | Matseevich | Matseevich modificado |
| 0 | 308.407 | 308.407 | 308.407 | 0% | 0% |
| 0.05 | 318.325 | 331.881 | 347.714 | 8% | 5% |
| 0.1 | 329.265 | 360.044 | 416.278 | 21% | 14% |
| 0.15 | 341.394 | 394.578 | 416.278 | 18% | 5% |
| 0.2 | 354.917 | 438.163 | 389.275 | 9% | -13% |
| 0.3 | 387.233 | 575.397 | 414.823 | 7% | -39% |
| 0.4 | 429.196 | 936.466 | | | |
| 0.5 | 485.883 | | | | |
| 0.6 | 566.694 | | | | |
| 0.7 | 691.188 | | | | |
| 0.8 | 907.908 | | | | |
| 0.9 | 1379.624 | | | | |
| 1 | 3199.509 | | | | |

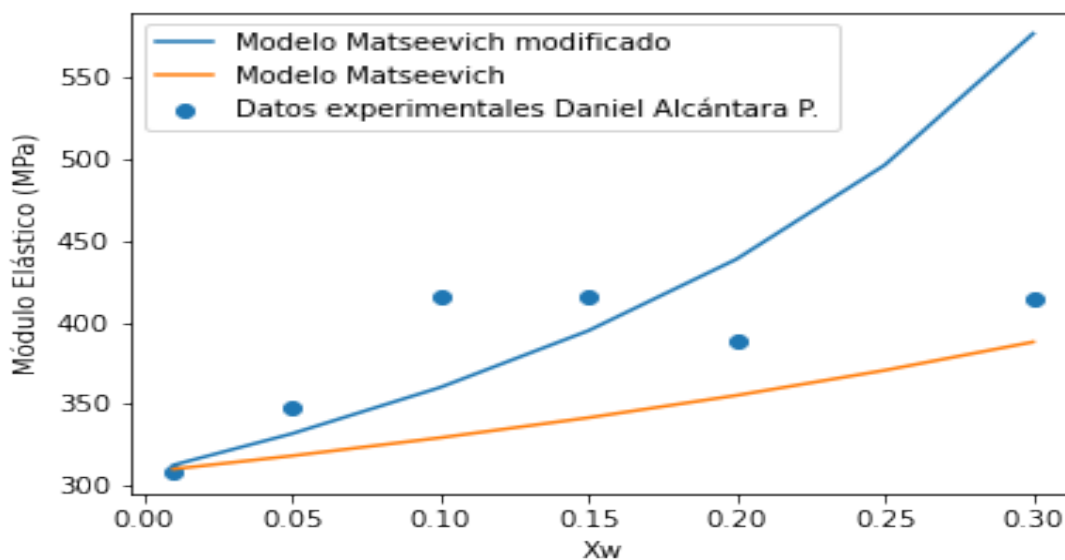


Figura 7. Gráfica E a 60°C sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1).

¹Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

Tabla 15. Resultados E a 70°C sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | | Error | |
|------|-----------------------------|------------------------------|-----------------------------------|------------|-----------------------|
| | Modelo Matseevich | Modelo Matseevich modificado | Datos ¹ Experimentales | Matseevich | Matseevich modificado |
| 0 | 239.351 | 239.351 | 239.351 | 0 % | 0 % |
| 0.05 | 247.238 | 257.767 | 278.958 | 11 % | 8 % |
| 0.1 | 255.952 | 279.878 | 332.977 | 23 % | 16 % |
| 0.15 | 265.630 | 307.011 | 332.977 | 20 % | 8 % |
| 0.2 | 276.443 | 341.283 | 313.932 | 12 % | -9 % |
| 0.3 | 302.373 | 449.301 | 338.1 | 11 % | -33 % |
| 0.35 | 318.103 | 546.730 | | | |
| 0.4 | 336.240 | 733.643 | | | |
| 0.45 | 357.382 | 1604.731 | | | |
| 0.5 | 382.344 | | | | |
| 0.6 | 448.782 | | | | |
| 0.7 | 552.812 | | | | |
| 0.8 | 738.925 | | | | |
| 0.9 | 1167.577 | | | | |
| 1 | 3199.509 | | | | |

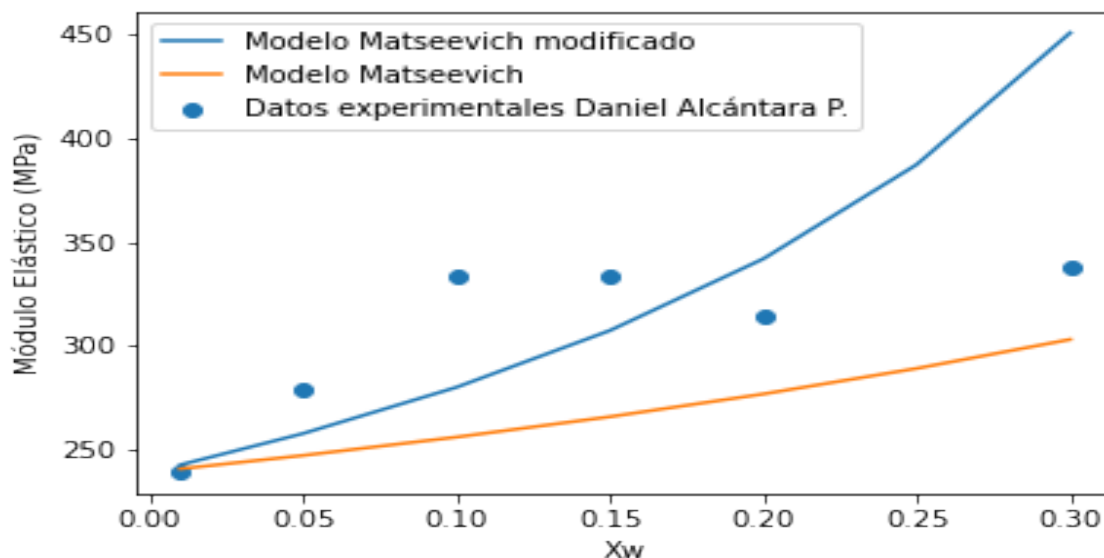


Figura 8. Gráfica E a 70° sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1).

¹Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

Tabla 16. Resultados E a 80°C sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | | Error | |
|------|-----------------------------|------------------------------|-----------------------------------|------------|-----------------------|
| | Modelo Matseevich | Modelo Matseevich modificado | Datos ¹ Experimentales | Matseevich | Matseevich modificado |
| 0 | 179.900 | 179.900 | 179.9 | 0 % | 0 % |
| 0.05 | 185.951 | 193.870 | 216.11 | 14 % | 10 % |
| 0.1 | 192.646 | 210.654 | 260.1 | 26 % | 19 % |
| 0.15 | 200.093 | 231.265 | 258.375 | 23 % | 10 % |
| 0.2 | 208.428 | 257.314 | 246.873 | 16 % | -4 % |
| 0.3 | 228.477 | 339.497 | 266.671 | 14 % | -27 % |
| 0.4 | 254.794 | 555.938 | | | |
| 0.5 | 290.866 | | | | |
| 0.6 | 343.345 | | | | |
| 0.7 | 426.726 | | | | |
| 0.8 | 579.688 | | | | |
| 0.9 | 951.693 | | | | |
| 1 | 3199.509 | | | | |

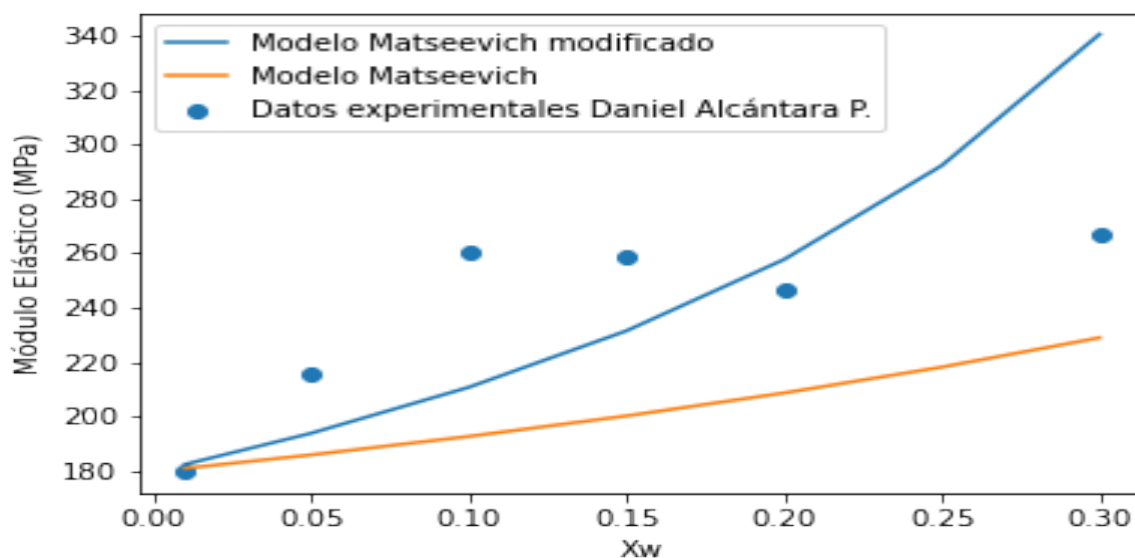


Figura 9. Gráfica E a 80°C sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1).

¹Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

Tabla 17. Resultados E a $90^{\circ}C$ sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | | Error | |
|------|-----------------------------|------------------------------|-----------------------------------|------------|-----------------------|
| | Modelo Matseevich | Modelo Matseevich modificado | Datos ¹ Experimentales | Matseevich | Matseevich modificado |
| 0 | 131.149 | 131.149 | 131.149 | 0 % | 0 % |
| 0.05 | 135.634 | 141.410 | 161.038 | 16 % | 12 % |
| 0.1 | 140.602 | 153.745 | 168.816 | 17 % | 9 % |
| 0.15 | 146.135 | 168.900 | 195.131 | 25 % | 13 % |
| 0.2 | 152.336 | 188.066 | 189.811 | 20 % | 1 % |
| 0.3 | 167.291 | 248.581 | 204.713 | 18 % | -21 % |
| 0.4 | 187.005 | 408.027 | | | |
| 0.5 | 214.177 | | | | |
| 0.6 | 254.028 | | | | |
| 0.7 | 318.135 | | | | |
| 0.8 | 438.325 | | | | |
| 0.9 | 745.425 | | | | |
| 1 | 3199.509 | | | | |

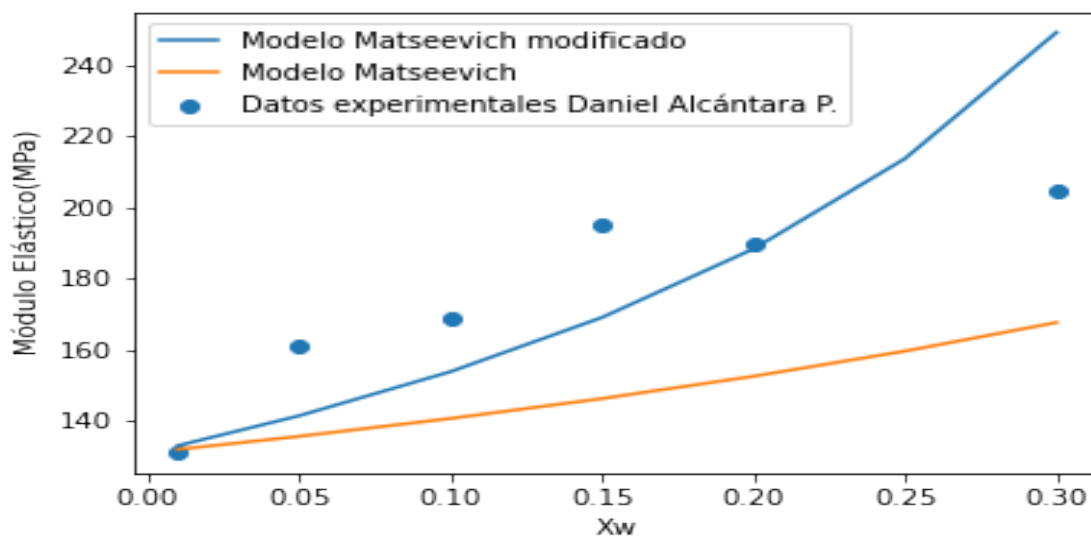


Figura 10. Gráfica E a $90^{\circ}C$ sistema: LLDPE+Fibra de Agave+Addico (M1).

¹Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

Resultados del cálculo E para los materiales de Cindu Annandarajah et al. (M1)

Otros de los datos experimentales analizados por este modelo fueron los publicado por Cindu Annandarajah et al., Materials MDPI 2019 12 99 en su artículo "Study of Agave Fiber-Reinforced Biocomposite Films" donde se sintetizaron materiales compuestos de matriz polimérica (Polietileno de baja y alta densidad y polipropileno) con fibra de agave, de igual manera se siguió el procedimiento descrito con anterioridad; se utilizó la *Ecuación 14* para el cálculo de módulo de elástico y posteriormente se utilizó las densidades de la *Tabla 18* para el cálculo de X_v . Los resultados del modelo de Matseevich fueron tratados con la *Ecuación 23*. Los resultados del modelo de Matseevich modificado se reportan a continuación en las *Tablas 19, 20 y 21* y su comportamiento gráfico en las *Figuras 11, 12, y 13*.

Al igual que con los datos analizados anteriormente los modelos de predicción no describen el comportamiento experimental de los compuestos y, en este caso, existe un mayor error de cálculo con respecto a los datos experimentales. Sin embargo, el modelo con mayor acercamiento a los datos experimentales es el modelo de Matseevich modificado.

Tabla 18. *Densidades de polímeros de acuerdo al artículo Cindu Annandarajah et al, Materials MPDI 2019 12 99.*

| | Densidad g/ml |
|-------|---------------|
| LLDPE | 0.925 |
| HDPE | 0.952 |
| PP | 0.868 |
| Agave | 1.182 |

Tabla 19. Resultados E sistema: LLDPE+Fibra de Agave (M1).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | | Error | |
|------|-----------------------------|------------------------------|-----------------------------------|------------|-----------------------|
| | Modelo Matseevich | Modelo Matseevich modificado | Datos ¹ Experimentales | Matseevich | Matseevich modificado |
| 0 | 88.400 | 88.400 | 88.4 | 0 % | 0 % |
| 0.05 | 91.378 | 95.265 | 241.5 | 62 % | 61 % |
| 0.1 | 94.684 | 103.525 | 266.7 | 64 % | 61 % |
| 0.2 | 102.523 | 126.538 | 370.7 | 72 % | 66 % |
| 0.3 | 112.574 | 167.184 | 324.2 | 65 % | 48 % |
| 0.4 | 125.929 | 274.296 | | | |
| 0.6 | 172.252 | | | | |
| 0.8 | 307.429 | | | | |
| 1 | 6778.000 | | | | |

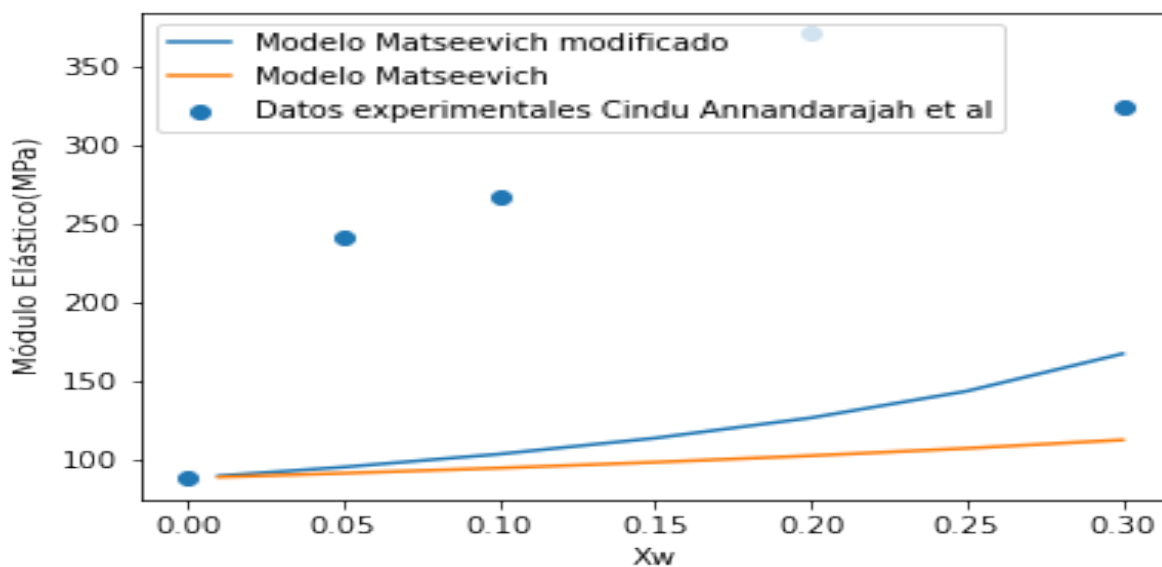


Figura 11. Gráfica E sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M1)

¹Datos experimentales Cindu Annandarajah et al, Materials MPDI 2019 12 99.

Tabla 20. Resultados E sistema: HDPE+Fibra de agave+Addico (M1).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | | Error | |
|------|-----------------------------|------------------------------|-----------------------------------|------------|-----------------------|
| | Modelo Matseevich | Modelo Matseevich modificado | Datos ¹ Experimentales | Matseevich | Matseevich modificado |
| 0 | 435.100 | 435.100 | 435.1 | 0 % | 0 % |
| 0.05 | 448.975 | 468.665 | 617.6 | 27 % | 24 % |
| 0.1 | 464.320 | 509.075 | 657.6 | 29 % | 23 % |
| 0.2 | 500.468 | 622.011 | 735 | 32 % | 15 % |
| 0.3 | 546.340 | 823.888 | 640.3 | 15 % | -29 % |
| 0.4 | 606.471 | 1388.322 | | | |
| 0.6 | 808.088 | | | | |
| 0.8 | 1340.955 | | | | |
| 1 | 6778.000 | | | | |

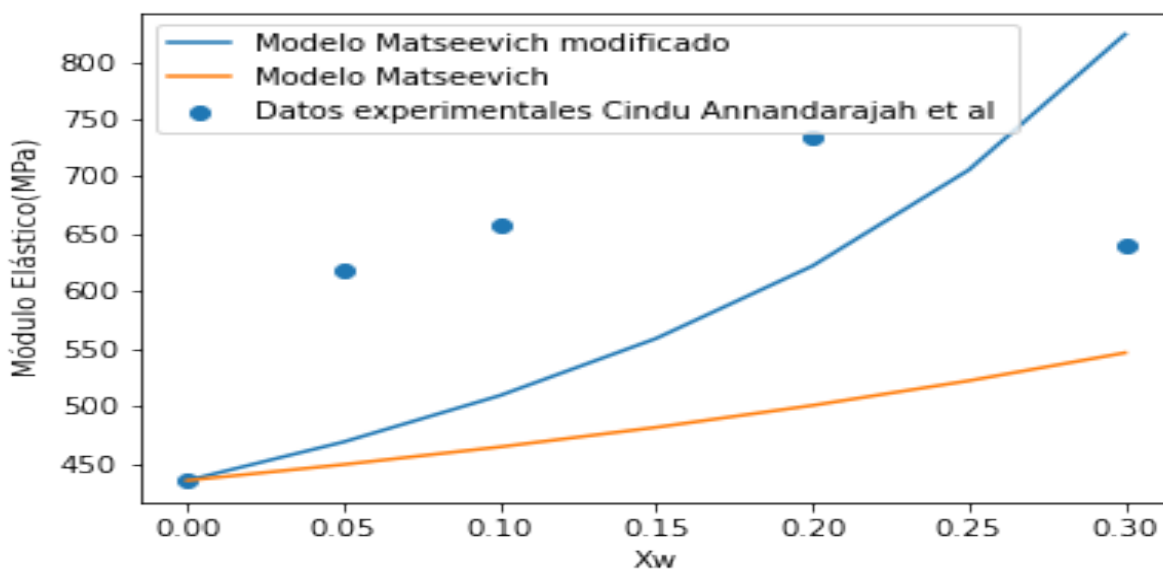


Figura 12. Gráfica E sistema: HDPE+Fibra de agave+Addico (M1).

¹Datos experimentales Cindu Annandarajah et al, Materials MPDI 2019 12 99.

Tabla 21. Resultados E sistema: PP + Fibra de agave (M1).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | | Error | |
|------|-----------------------------|------------------------------|-----------------------------------|------------|-----------------------|
| | Modelo Matseevich | Modelo Matseevich modificado | Datos ¹ Experimentales | Matseevich | Matseevich modificado |
| 0 | 560.400 | 560.400 | 560.4 | 0 % | 0 % |
| 0.05 | 597.314 | 621.108 | 766.7 | 22 % | 19 % |
| 0.1 | 642.844 | 698.901 | 829.7 | 23 % | 16 % |
| 0.2 | 700.406 | 852.311 | 882.7 | 21 % | 3 % |
| 0.3 | 775.496 | 1117.150 | 738.8 | -5 % | -51 % |
| 0.4 | 1024.306 | 2041.724 | | | |
| 0.6 | 1253.310 | | | | |
| 0.8 | 1660.662 | | | | |
| 1 | 6778.000 | | | | |

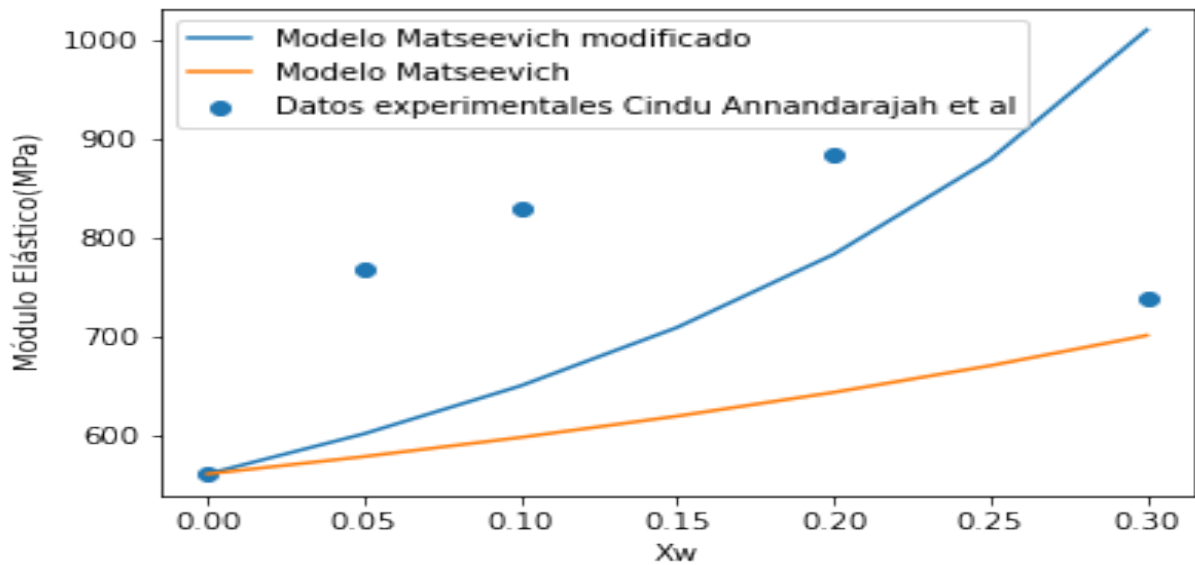


Figura 13. Gráfica E sistema: PP+Fibra de agave+Addico (M1)

¹Datos experimentales Cindu Annandarajah et al., Materials MPDI 2019 12 99.

Tabla 22. Resultado de volumen de Van der Walls.

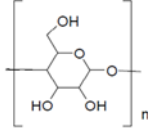
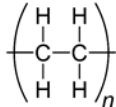
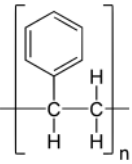

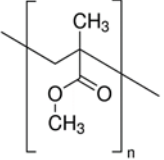
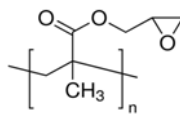

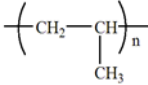
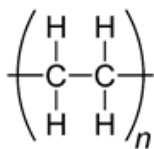
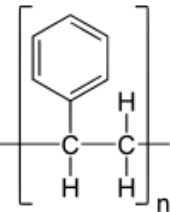
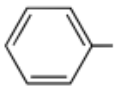
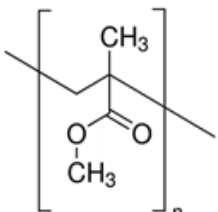
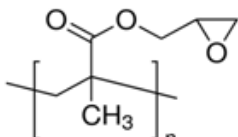
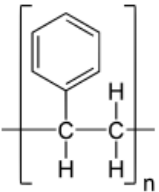
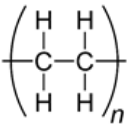
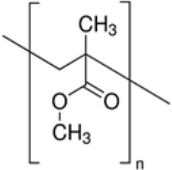
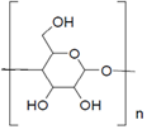
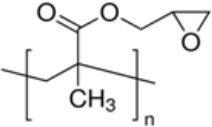
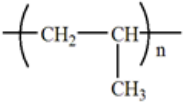
| Unidad repetitiva | Grupo | Cantidad | Contribución (cm ³ /mol) |
|---|---|----------------------|-------------------------------------|
| Celulosa | | | |
|  | OH | 3 | 8 |
| | -O- | 2 | 5.5 |
| | -CH ₂ - | 1 | 10.23 |
| | -CH< | 5 | 6.8 |
| | V _{wc} | | 79.23 |
| Polietileno | | | |
|  | -CH ₂ - | 2 V _{wp} | 10.23 20.46 |
| Poliestireno | | | |
|  | -CH ₂ - | 1 | 10.23 |
| | -CH< | 1 | 6.8 |
| |  | 1 V _{ws} | 45.85 62.88 |
| | V _{ws} | | |
| Poli(metacrilato de metilo) | | | |
|  | -CH ₂ - | 1 | 10.23 |
| | C(CH ₃)(COOCH ₃)- | 1 | 46.7 |
| | V _{wm} | | 56.93 |
| Poli(metacrilato de glicidilo) | | | |
|  |  | 1 | 11.7 |
| | -O- | 1 | 5.5 |
| | -CH ₂ - | 3 | 10.23 |
| | -C- | 1 | 3.3 |
| | -CH ₃ - | 1 | 13.67 |
| | V _{wc} | | 64.86 |
| Polipropileno | | | |
|  | -CH ₂ - | 1 | 10.23 |
| | -CH(CH ₃)- | 1 | 20.45 |
| | V _{wc} | | 30.68 |

Tabla 23. Resultado de cálculo de propiedades mecánicas¹.

| Unidad repetitiva | Grupo | Cantidad | UR (m/s) | U H (m/s) | |
|---|---|----------|----------|-----------|-------|
| Polietileno | | | | | |
|  | -CH2- | 2 | 880 | 675 | |
| | | | K | 2.0390 | |
| | | | G | 0.4153 | |
| | | | E | 1.1667 | |
| Poliestireno | | | | | |
|  | -CH2- | 1 | 880 | 675 | |
| | -CH< | 1 | 460 | 370 | |
| |  | | 1 | 4500 | 3650 |
| | | | | K | 4.430 |
| | | | | G | 1.196 |
| | | | | E | 3.292 |
| | Poli(metacrilato de metilo) | | | | |
|  | -CH2- | 1 | 880 | 675 | |
| | C(CH3)(COOCH3)- | 1 | 4220 | 3650 | |
| | | | K | 5.723 | |
| | | | G | 2.129 | |
| | | | E | 5.682 | |
| Poli(metacrilato de glicidilo) | | | | | |
|  | -CH2- | 1 | 880 | 675 | |
| | -CH3- | 1 | 1400 | 1130 | |
| | -O- | 1 | 400 | 300 | |
| | >C< | 1 | 40 | 35 | |
| | >CH- | 1 | 460 | 370 | |
| | =COO- | 1 | 1225 | 900 | |
| | | | K | 1.768 | |
| | | | G | 0.369 | |
| | | E | 1.037 | | |

¹Los valores de K,G y E están dados en GPa

Tabla 24. Resultado de pesos moleculares.

| Polímero | Unidad repetitiva | Peso molecular g/mol |
|--------------------------------|---|-------------------------|
| Poliestireno |  | 104.08 |
| Polietileno |  | 28.02 |
| Poli(metacrilato de metilo) |  | 100.05 |
| Celulosa |  | 162 |
| Poli(metacrilato de glicidilo) |  | 142.04 |
| Polipropileno |  | 42.03 |

5.2. Resultados del modelo logarítmico semiempírico (M2)

Posterior al tratamiento de datos con el modelo de Tatiana Matseevich y el modelo Matseevich modificado (M1) es necesario buscar nuevas alternativas que nos modelen de una manera más precisa el compartamiento del módulo elástico, por lo que se propuso un modelo semiempírico.

El modelo propuesto es descrito por la *Ecuación 24*, donde es necesario determinar el valor de C . Al analizar los datos experimentales, C toma la forma de una función exponencial y depende de la fracción másica del componente lignocelulósico, por lo que fue necesario calcular las constantes C_0 y D de la *Ecuación 25*.

Resultados del cálculo de E para los materiales de Daniel Alcántara Pineda (M2)

Para los datos a diferentes temperaturas, la *Tabla 25* nos muestra los valores de las constantes C_0 y D .

Tabla 25. Valores de las constantes C_0 y D a diferentes temperaturas.

| Temperatura | Constantes | |
|-------------|------------|----------|
| °C | C_0 | D |
| 40 | 45.5612 | -10.9009 |
| 50 | 67.0725 | -12.3048 |
| 60 | 80.26484 | -12.4901 |
| 70 | 95.6539 | -12.6539 |
| 80 | 110.6096 | -12.7328 |
| 90 | 98.0239 | 11.8451 |

En las *Tablas 26,27,28,29,30 y 31* se encuentran los resultados obtenidos, con su error respecto a los valores experimentales y su comportamiento gráfico en las *Figuras 14,15,16,17,18 y 19*.

Se puede observar que la constante C_0 incrementa y D disminuye con el incremento de temperatura, los valores calculados de módulo de elasticidad por este modelo de predicción son más preciso a los valores experimentales de los materiales en comparación con los modelos anteriores. Esto se atribuye a que es un modelo semiempírico que considera el comportamiento experimental de los materiales.

Tabla 26. Resultados E a $40^{\circ}C$ sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | |
|------|---------------------------------------|--------------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico semiempírico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 417.591 | 417.591 | 0 % |
| 0.05 | 447.647 | 430.206 | -4 % |
| 0.1 | 494.989 | 499.32 | 1 % |
| 0.15 | 527.988 | 528.807 | 0 % |
| 0.2 | 539.642 | 525.44 | -3 % |
| 0.3 | 520.471 | 526.78 | 1 % |
| 0.4 | 486.078 | | |
| 0.5 | 458.750 | | |
| 0.6 | 441.301 | | |
| 0.7 | 431.193 | | |
| 0.8 | 425.710 | | |
| 0.9 | 423.161 | | |

Este modelo es semiempírico que considera una constante C , durante el desarrollo del modelo se observó que C disminuye conforme la fracción de fibra aumentaba, por lo que es dependiente componente lignocelulósico y adapta la forma de una función exponencial. En todos los casos se obtuvo esta función basándose en los valores experimentales de E de los materiales analizados. Al ser un modelo semiempírico las predicciones en los valores de E son más exactas y los resultados nos confirman que los valores de E son afectados por la cantidad de lignocelulósico presente en estos materiales. En modelo si presenta una tendencia creciente y posteriormente decrece tal y como ocurre experimentalmente. Este comportamiento se replica en todos los casos analizados con este modelo.

¹Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

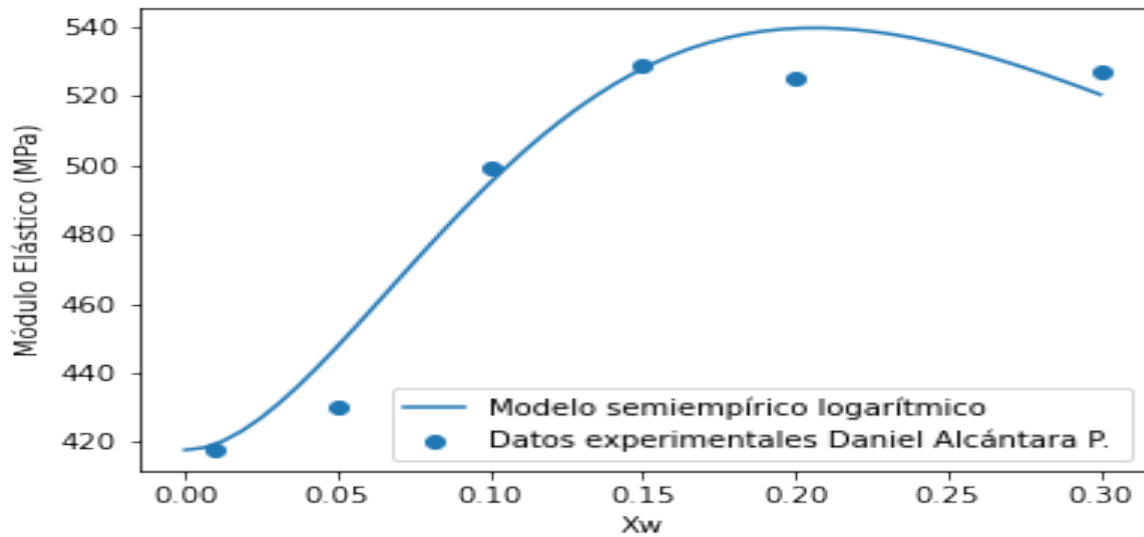


Figura 14. Gráfica E a 40°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2).

En esta gráfica y posteriores se observa la tendencia del modelo logarítmico semiepírico, también se graficaron los valores de E experimentales; se puede observar en todos los casos que las gráficas siguen la tendencia experimental y los valores del modelo predicen de manera adecuada los valores experimentales.

Tabla 27. Resultados E a 50°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico(M2).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | |
|------|---------------------------------------|--------------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico semiempírico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 381.873 | 381.873 | 0 % |
| 0.05 | 420.091 | 407.461 | -3 % |
| 0.1 | 474.667 | 496.7 | 4 % |
| 0.15 | 505.140 | 496.7 | -2 % |
| 0.2 | 507.829 | 473.097 | -7 % |
| 0.3 | 472.417 | 489.987 | 4 % |
| 0.4 | 433.804 | | |
| 0.5 | 408.984 | | |
| 0.6 | 395.482 | | |
| 0.7 | 388.678 | | |
| 0.8 | 385.410 | | |
| 0.9 | 383.984 | | |

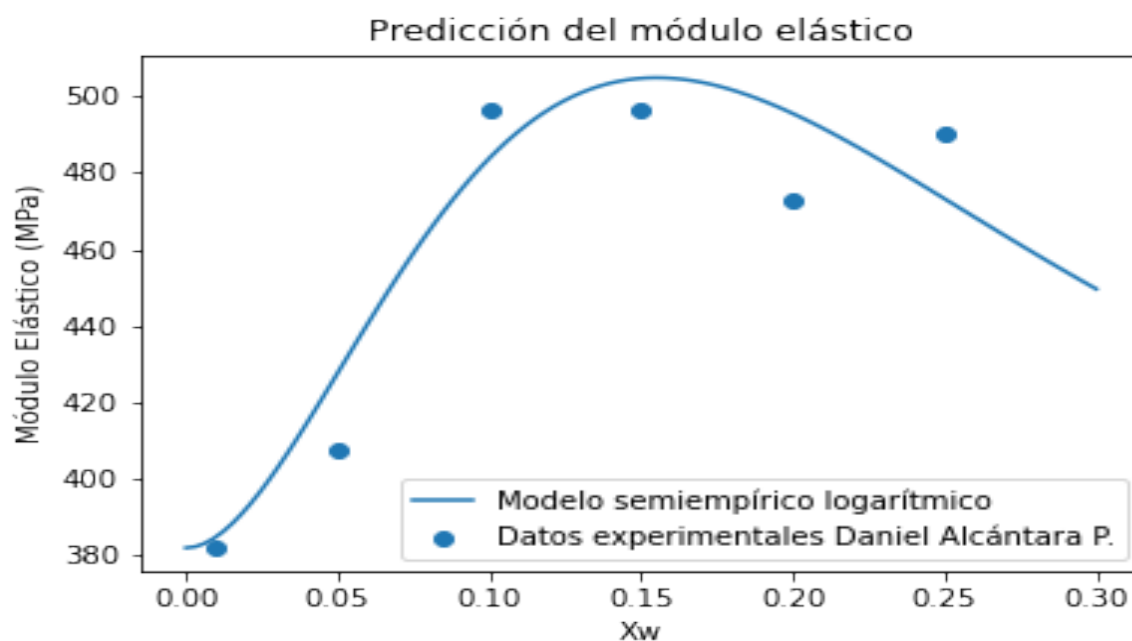


Figura 15. Gráfica E a 50°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2).

¹Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

Tabla 28. Resultados E a 60°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | |
|------|---------------------------------------|--------------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico semiempírico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 308.407 | 308.407 | 0 % |
| 0.05 | 345.334 | 347.714 | 1 % |
| 0.1 | 398.199 | 416.278 | 4 % |
| 0.15 | 427.098 | 416.278 | -3 % |
| 0.2 | 428.433 | 389.275 | -10 % |
| 0.3 | 392.398 | 414.823 | 5 % |
| 0.4 | 355.350 | | |
| 0.5 | 332.365 | | |
| 0.6 | 320.190 | | |
| 0.7 | 314.186 | | |
| 0.8 | 311.355 | | |
| 0.9 | 310.134 | | |

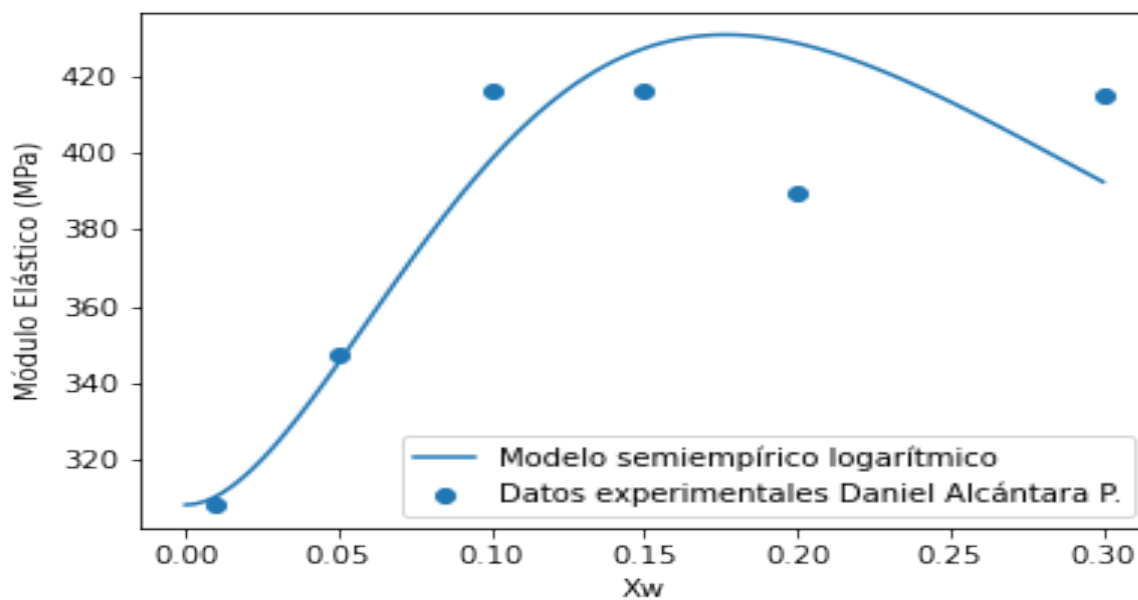


Figura 16. Gráfica E a 60°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2).

¹Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

Tabla 29. Resultados E a 70°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | |
|------|---------------------------------------|--------------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico semiempírico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 239.351 | 239.351 | 0 % |
| 0.05 | 273.551 | 278.958 | 2 % |
| 0.1 | 322.867 | 332.977 | 3 % |
| 0.15 | 349.393 | 332.977 | -5 % |
| 0.2 | 349.571 | 313.932 | -11 % |
| 0.3 | 314.492 | 338.1 | 7 % |
| 0.4 | 280.320 | | |
| 0.5 | 259.824 | | |
| 0.6 | 249.235 | | |
| 0.7 | 244.115 | | |
| 0.8 | 241.741 | | |
| 0.9 | 240.728 | | |

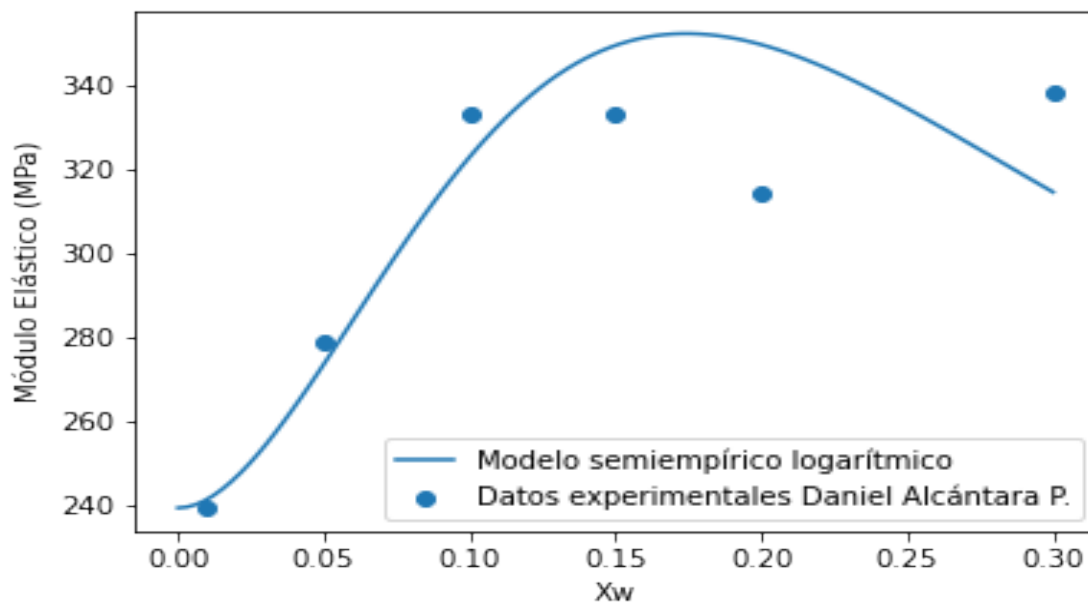


Figura 17. Gráfica E a 70°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2).

¹Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

Tabla 30. Resultados E a 80°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | |
|------|---------------------------------------|--------------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico semiempírico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 179.900 | 179.9 | 0 % |
| 0.05 | 209.845 | 216.11 | 3 % |
| 0.1 | 253.685 | 260.1 | 2 % |
| 0.15 | 277.285 | 258.375 | -7 % |
| 0.2 | 276.974 | 246.873 | -12 % |
| 0.3 | 244.938 | 266.671 | 8 % |
| 0.4 | 214.774 | | |
| 0.5 | 197.101 | | |
| 0.6 | 188.118 | | |
| 0.7 | 183.826 | | |
| 0.8 | 181.853 | | |
| 0.9 | 181.016 | | |

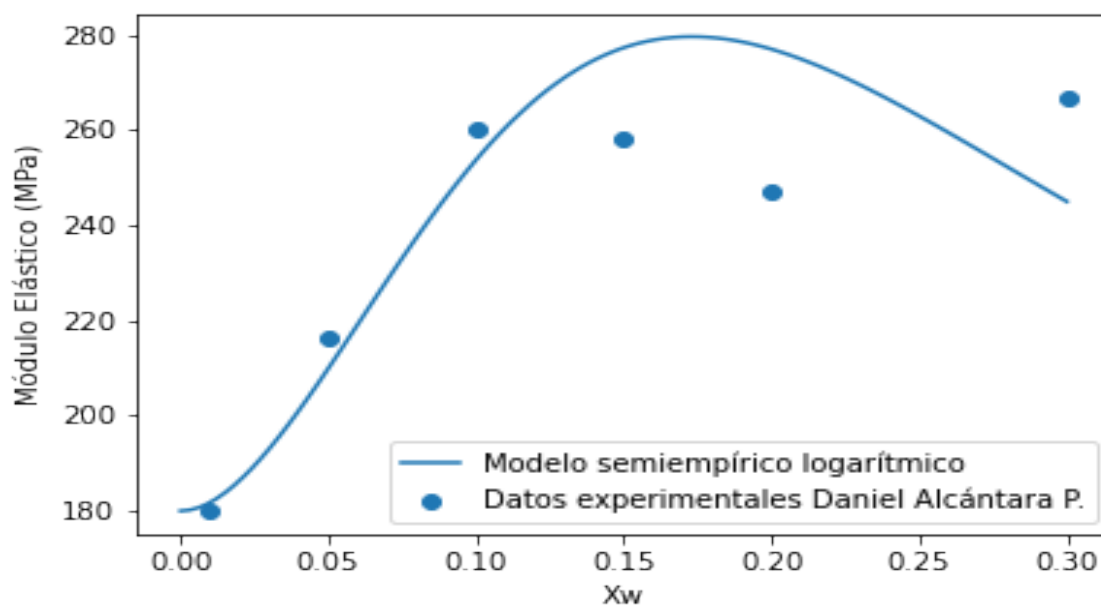


Figura 18. Gráfica E a 80°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2).

¹Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

Tabla 31. Resultados E a 90°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | |
|------|---------------------------------------|--------------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico semiempírico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 131.149 | 131.149 | 0 % |
| 0.05 | 151.256 | 161.038 | 6 % |
| 0.1 | 182.947 | 168.816 | -8 % |
| 0.15 | 203.235 | 195.131 | -4 % |
| 0.2 | 207.069 | 189.811 | -9 % |
| 0.3 | 187.406 | 204.713 | 8 % |
| 0.4 | 164.070 | | |
| 0.5 | 148.781 | | |
| 0.6 | 140.297 | | |
| 0.7 | 135.903 | | |
| 0.8 | 133.727 | | |
| 0.9 | 132.757 | | |

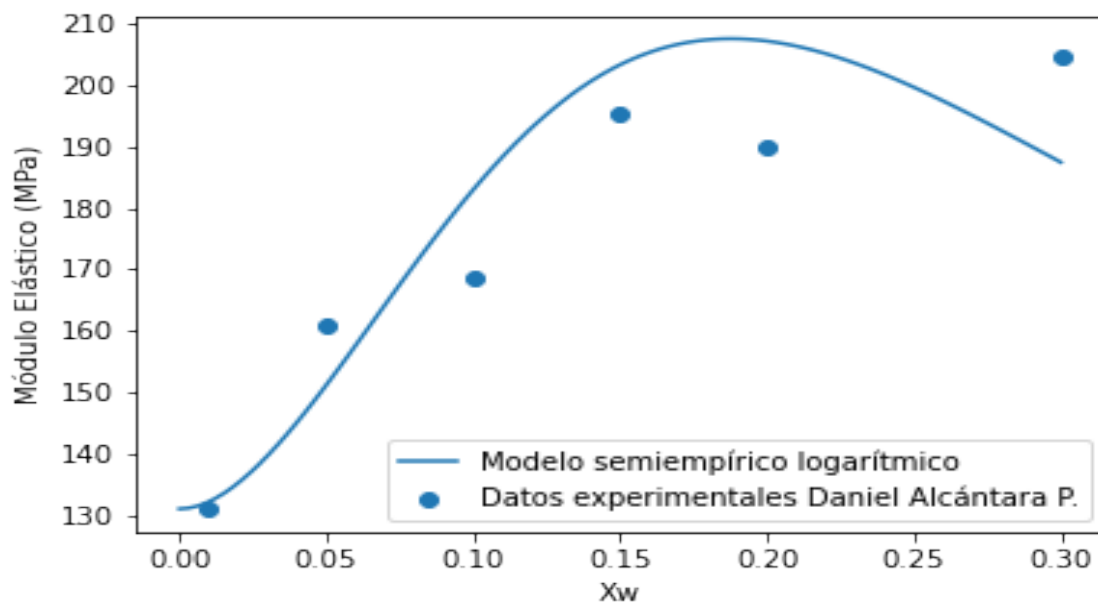


Figura 19. Gráfica E a 90°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M2).

¹Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

Resultados del cálculo de E para los materiales de Cindu Annandarajah et al. (M2)

Los datos de el artículo de Cindu Annandarajah et al. también fueron tratados con este modelo a continuación se muestran los resultados *Tablas 33,34 y 35* y su comportamiento gráfico en las *Figuras 20,21y 22*.

Los valores de las constantes C_0 y D se muestran en la *Tabla 32* para cada matriz polimérica.

Tabla 32. *Constantes C_0 y D .*

| Matriz polimérica | Constantes | |
|-------------------|------------|----------|
| | C_0 | D |
| LLDPE | 549.1427 | -13.8528 |
| HDPE | 211.0428 | -14.5159 |
| PP | 234.4932 | -16.6164 |

En este caso los valores de las constantes no presentan una tendencia dado que se trata de materiales compósitos de distinta naturaleza, sin embargo, los resultados obtenidos de módulo de elasticidad de igual manera son más acercados a comportamiento experimental.

Tabla 33. Resultados sistema: LLDPE + Fibra de agave (M2).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | |
|------|---------------------------------------|--------------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico semiempírico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 88.400 | 88.4 | 0 % |
| 0.05 | 182.115 | 241.5 | 25 % |
| 0.1 | 406.427 | 266.7 | -52 % |
| 0.2 | 489.953 | 370.7 | -32 % |
| 0.3 | 264.216 | 324.2 | 19 % |
| 0.4 | 155.073 | | |
| 0.6 | 99.000 | | |
| 0.7 | 92.833 | | |
| 0.8 | 90.356 | | |
| 0.9 | 89.396 | | |

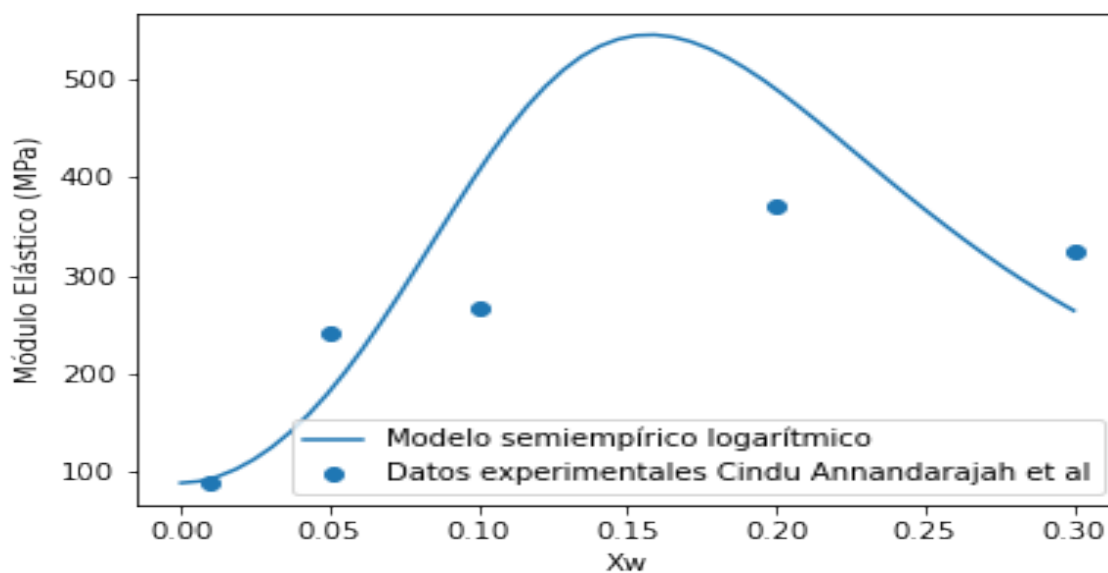


Figura 20. Gráfica E sistema: LLDPE+Fibra de Agave (M2).

¹Datos experimentales Cindu Annandarajah et al, Materials MPDI 2019 12 99.

Tabla 34. Resultados sistema: HDPE + Fibra de agave (M2).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | |
|------|---------------------------------------|--------------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico semiempírico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 435.100 | 435.1 | 0 % |
| 0.05 | 569.230 | 617.6 | 8 % |
| 0.1 | 753.131 | 657.6 | -15 % |
| 0.2 | 774.285 | 735 | -5 % |
| 0.3 | 614.276 | 640.3 | 4 % |
| 0.4 | 513.496 | | |
| 0.6 | 448.008 | | |
| 0.7 | 440.274 | | |
| 0.8 | 437.258 | | |
| 0.9 | 436.133 | | |

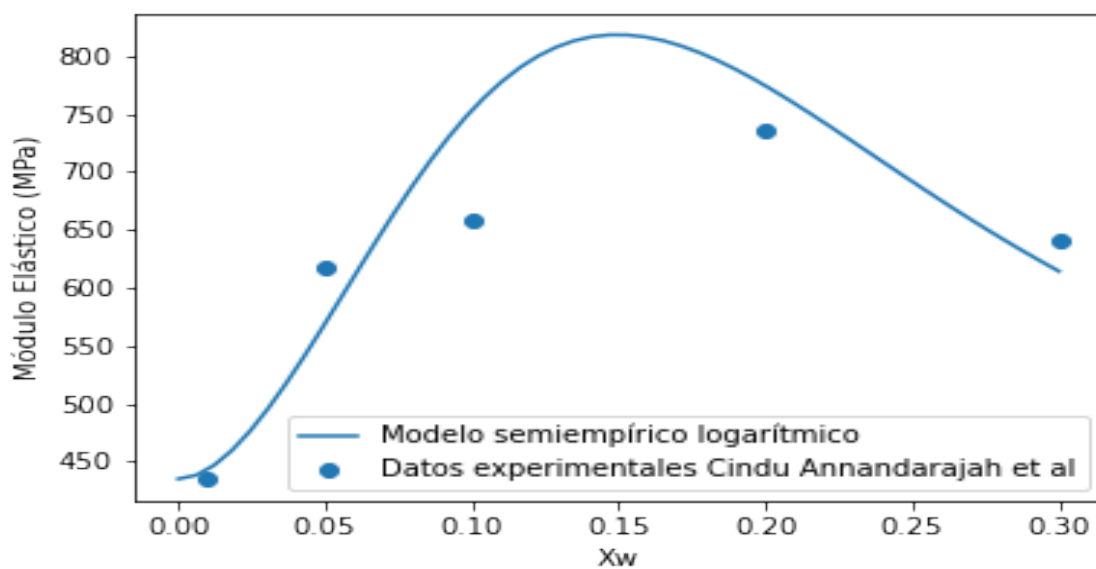


Figura 21. Gráfica E sistema: HDPE+Fibra de Agave (M2).

¹Datos experimentales Cindu Annandarajah et al, Materials MPDI 2019 12 99.

Tabla 35. Resultados sistema: PP + Fibra de agave (M2).

| Xw | Módulo de elasticidad (Mpa) | | |
|------|---------------------------------------|--------------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico semiempírico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 560.400 | 560.4 | 0 % |
| 0.05 | 733.224 | 766.7 | 4 % |
| 0.1 | 918.540 | 829.7 | -11 % |
| 0.2 | 853.541 | 882.7 | 3 % |
| 0.3 | 687.257 | 738.8 | 7 % |
| 0.4 | 606.742 | | |
| 0.6 | 565.586 | | |
| 0.7 | 562.094 | | |
| 0.8 | 560.974 | | |
| 0.9 | 560.623 | | |

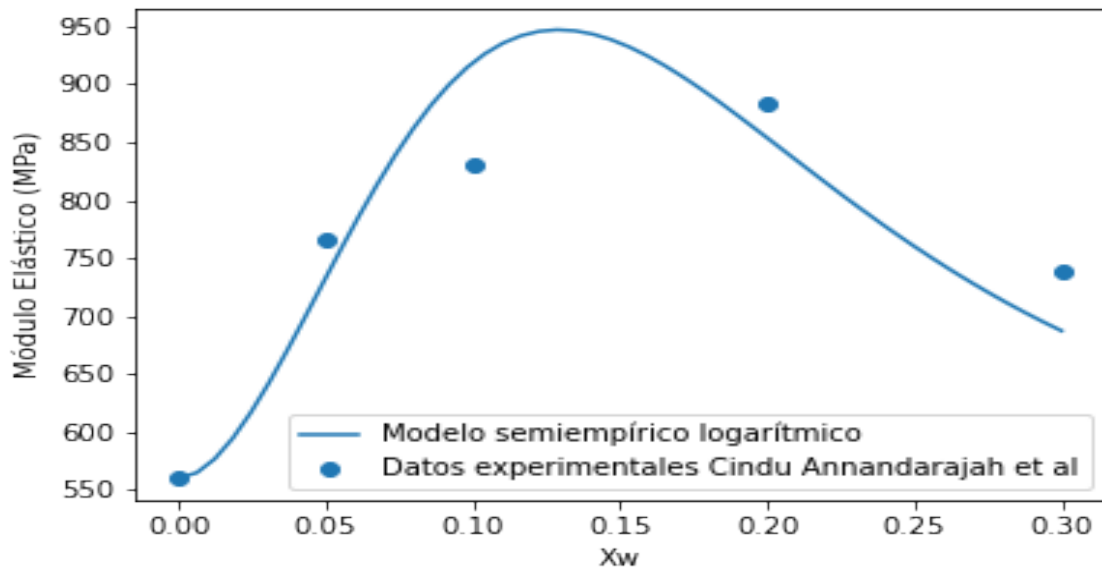


Figura 22. Gráfica E sistema: PP+Fibra de Agave (M2).

¹Datos experimentales Cindu Annandarajah et al, Materials MPDI 2019 12 99.

5.3. Resultados del modelo logarítmico

Se propone otro modelo descrito por la *Ecuación 30*. Para determinar el valor del parámetro d es necesario el cálculo del factor adimensional K . Para este cálculo se consideraron las composiciones de la *Tabla 7* de la fibra de agave y los volúmenes de Van der Waals de la *Tabla 22*; se utilizó la *Ecuación 31* y posteriormente este factor se multiplica por C , donde C toma la forma de una función exponencial y es dependiente de X_w . Los valores A y B , son obtenidos por un ajuste de regresión.

Para el cálculo de módulo de elasticidad cuando $X=0$ de la fracción de fibra lignocelulósica, la *Ecuación 30* toma la forma siguiente y el valor de $C=1$.

$$\ln(E) = \ln(E_m * X_m * C)$$

Resultados cálculo E para los materiales de Daniel Alcántara Pineda (M3)

Los resultados a las diferentes temperaturas los encontramos en las *Tablas 36,37,38,39,40 y 41* y sus comportamientos gráficos en *Figuras 23,24,25,26,27 y 28*.

Se puede notar que los resultados obtenidos por este modelo presentan errores experimentales intermedios entre los modelos comentados con anterioridad, este modelo no pretende tener un enfoque empírico, sin embargo, es muy susceptible a los valores que toman las constantes en los modelos.

Tabla 36. Resultados E a 40°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | |
|------|-----------------------------|--------------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 417.591 | 417.591 | 0 % |
| 0.05 | 341.975 | 430.206 | -26 % |
| 0.1 | 501.833 | 499.320 | 1 % |
| 0.15 | 550.608 | 528.807 | 4 % |
| 0.2 | 535.141 | 525.440 | 2 % |
| 0.3 | 421.308 | 526.780 | -25 % |
| 0.4 | 288.818 | | |
| 0.5 | 180.462 | | |
| 0.6 | 103.917 | | |
| 0.7 | 54.542 | | |
| 0.8 | 24.926 | | |
| 0.9 | 8.410 | | |

El modelo logarítmico, suma las contribuciones al módulo elástico de la fibra y la matriz polimérica, en la función de contribución de la matriz emplea una constante y en la función de contribución de la fibra toma en cuenta las cantidades de lignina, celulosa y hemicelulosa presentes en la fibra, este modelo sigue la tendencia experimental pero presenta valores menos precisos que el modelo semiempírico. Este comportamiento es replicado en todos los materiales analizados.

¹Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

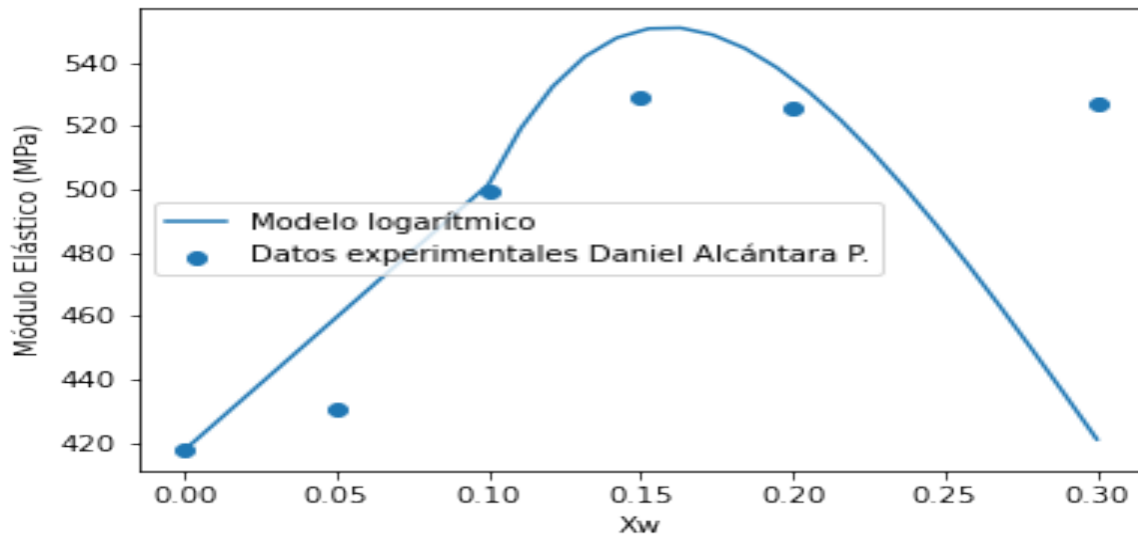


Figura 23. Gráfica E a 40°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3).

En esta gráfica y en las siguientes se presenta el comportamiento del modelo de predicción logarítmico, como ya se mencionó este modelo sigue la tendencia experimental pero los valores obtenidos presentan valores con un porcentaje de error mayor con respecto al modelo semiempírico.

Tabla 37. Resultados E a 50°C sistema: LLDPE+ Fibra de agave+Addico (M3).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | |
|------|-----------------------------|--------------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 381.873 | 381.873 | 0 % |
| 0.05 | 342.891 | 407.461 | -19 % |
| 0.1 | 503.177 | 496.700 | 1 % |
| 0.15 | 552.083 | 496.700 | 10 % |
| 0.2 | 536.575 | 473.097 | 12 % |
| 0.3 | 422.437 | 489.987 | -16 % |
| 0.4 | 289.591 | | |
| 0.5 | 180.945 | | |
| 0.6 | 104.196 | | |
| 0.7 | 54.688 | | |
| 0.8 | 24.993 | | |
| 0.9 | 8.433 | | |

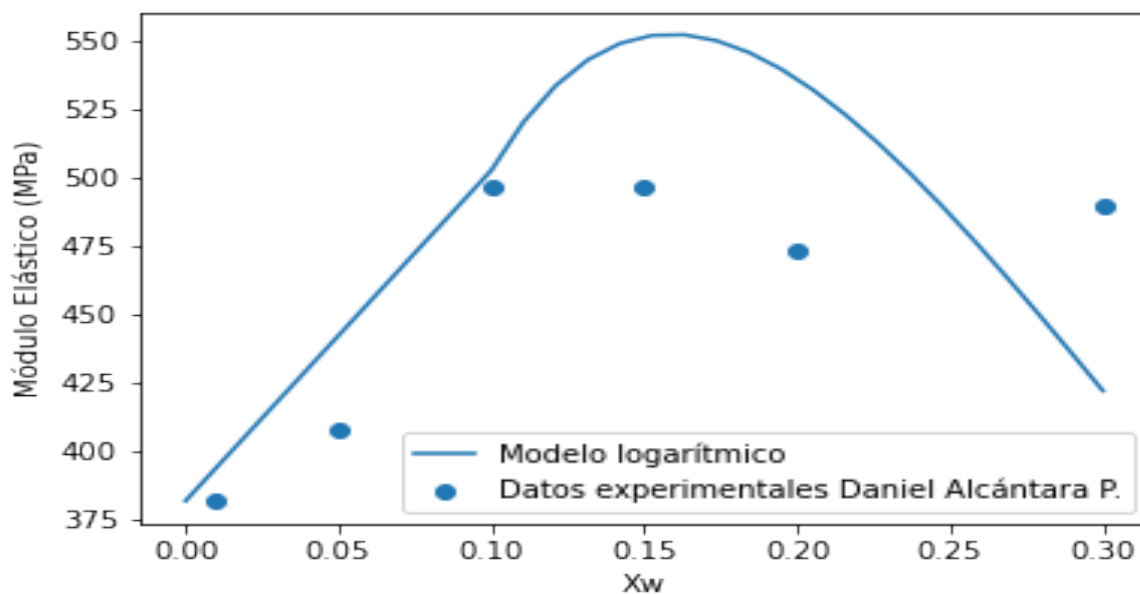


Figura 24. Gráfica E a 50°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3).

¹Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

Tabla 38. Resultados E a 60°C sistema: LLDPE+ Fibra de agave+Addico.

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | |
|------|-----------------------------|--------------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 308.407 | 308.407 | 0 % |
| 0.05 | 307.257 | 347.714 | -13 % |
| 0.1 | 404.850 | 416.278 | -3 % |
| 0.15 | 398.845 | 416.278 | -4 % |
| 0.2 | 348.062 | 389.275 | -12 % |
| 0.3 | 220.923 | 414.823 | -88 % |
| 0.4 | 122.101 | | |
| 0.5 | 61.508 | | |
| 0.6 | 28.555 | | |
| 0.7 | 12.083 | | |
| 0.8 | 4.452 | | |
| 0.9 | 1.211 | | |

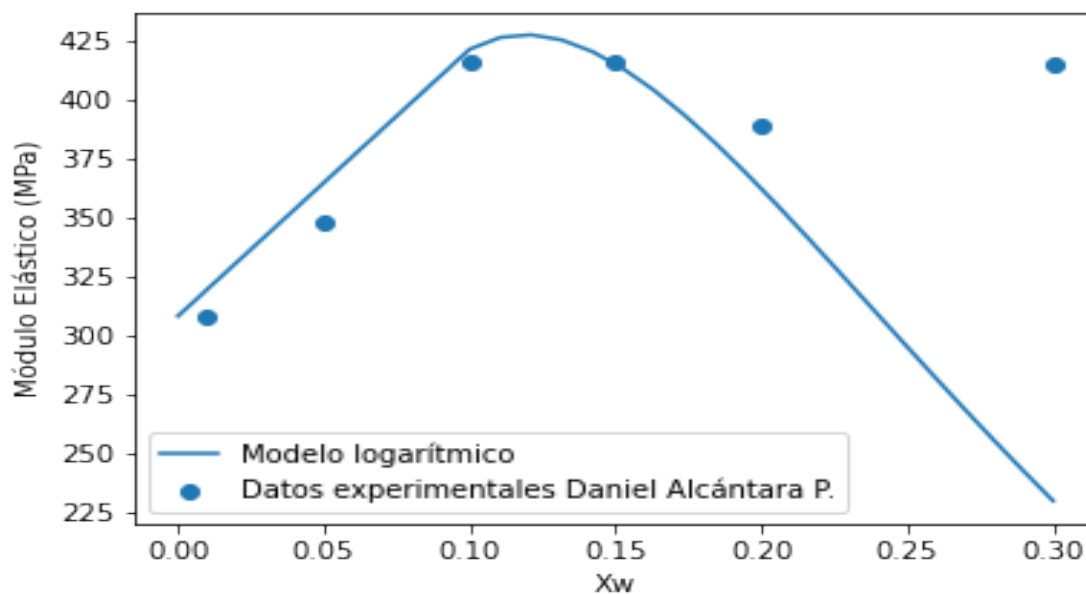


Figura 25. Gráfica E a 60°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3).

¹Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

Tabla 39. Resultados E a 70°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | |
|------|-----------------------------|--------------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 239.351 | 239.351 | 0 % |
| 0.05 | 240.879 | 278.958 | -16 % |
| 0.1 | 317.634 | 332.977 | -5 % |
| 0.15 | 313.165 | 332.977 | -6 % |
| 0.2 | 273.503 | 313.932 | -15 % |
| 0.3 | 173.868 | 338.100 | -94 % |
| 0.4 | 96.243 | | |
| 0.5 | 48.558 | | |
| 0.6 | 22.578 | | |
| 0.7 | 9.569 | | |
| 0.8 | 3.531 | | |
| 0.9 | 0.962 | | |

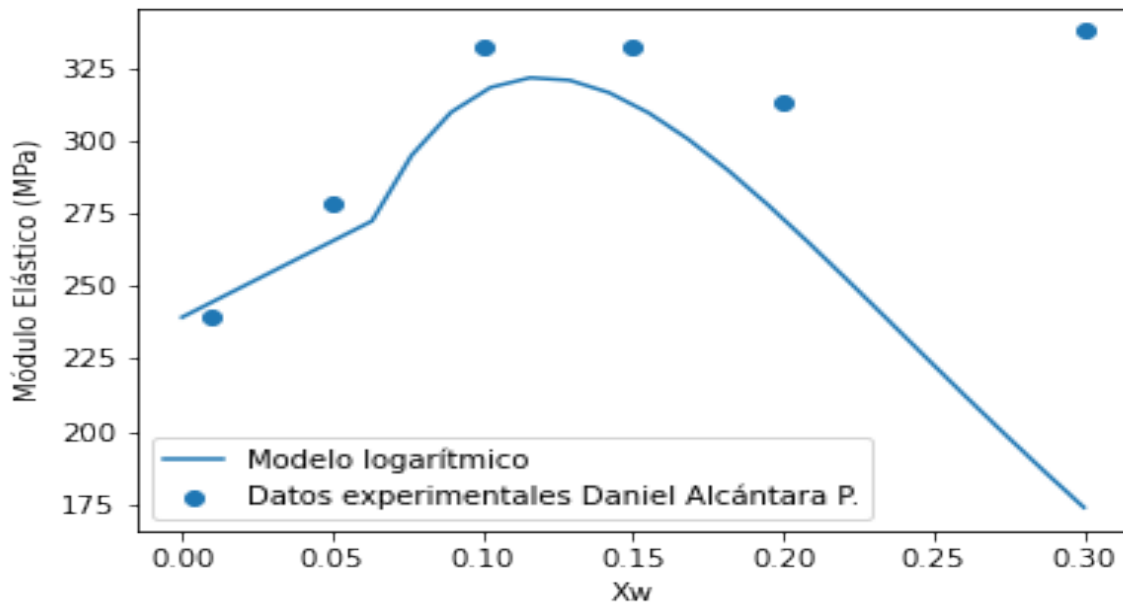


Figura 26. Gráfica E a 70°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3).

Tabla 40. Resultados E a 80°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | |
|------|-----------------------------|--------------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 179.900 | 179.900 | 0% |
| 0.05 | 194.916 | 216.110 | -11% |
| 0.1 | 265.311 | 260.100 | 2% |
| 0.15 | 270.012 | 258.375 | 4% |
| 0.2 | 243.417 | 246.873 | -1% |
| 0.3 | 164.881 | 266.671 | -62% |
| 0.4 | 97.248 | | |
| 0.5 | 52.279 | | |
| 0.6 | 25.901 | | |
| 0.7 | 11.696 | | |
| 0.8 | 4.599 | | |
| 0.9 | 1.335 | | |

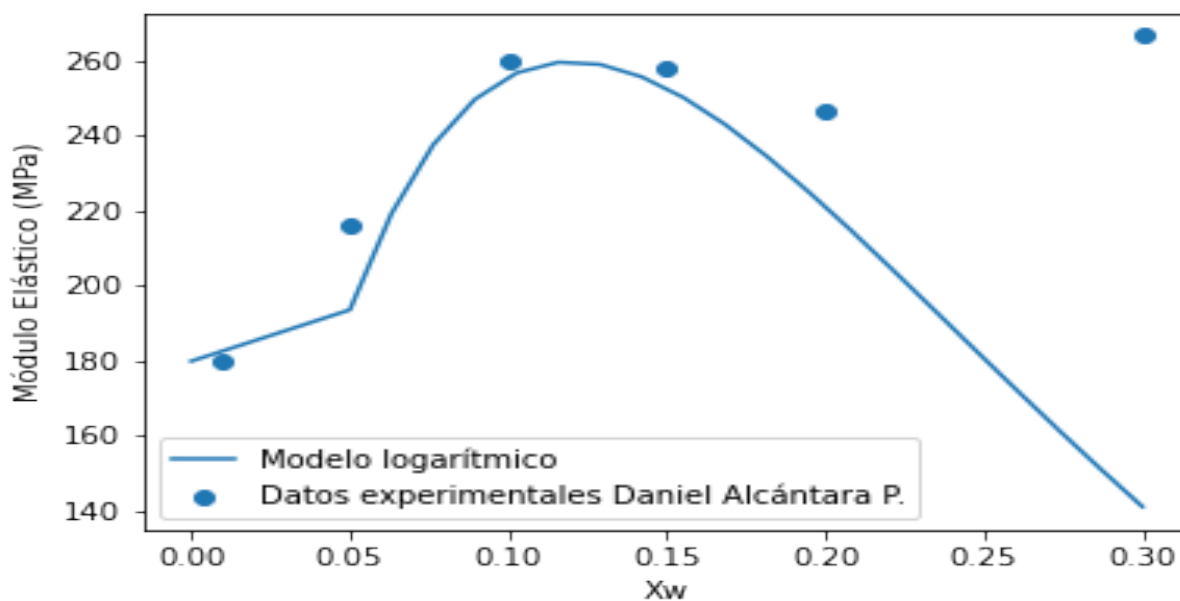


Figura 27. Gráfica E a 80°C sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3).

¹Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

Tabla 41. Resultados E a $90^{\circ}C$ sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | |
|------|-----------------------------|--------------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 131.149 | 131.149 | 0 % |
| 0.05 | 142.633 | 161.038 | -13 % |
| 0.1 | 190.767 | 168.816 | 12 % |
| 0.15 | 190.768 | 195.131 | -2 % |
| 0.2 | 168.986 | 189.811 | -12 % |
| 0.3 | 110.515 | 204.713 | -85 % |
| 0.4 | 62.934 | | |
| 0.5 | 32.665 | | |
| 0.6 | 15.625 | | |
| 0.7 | 6.812 | | |
| 0.8 | 2.586 | | |
| 0.9 | 8.410 | | |

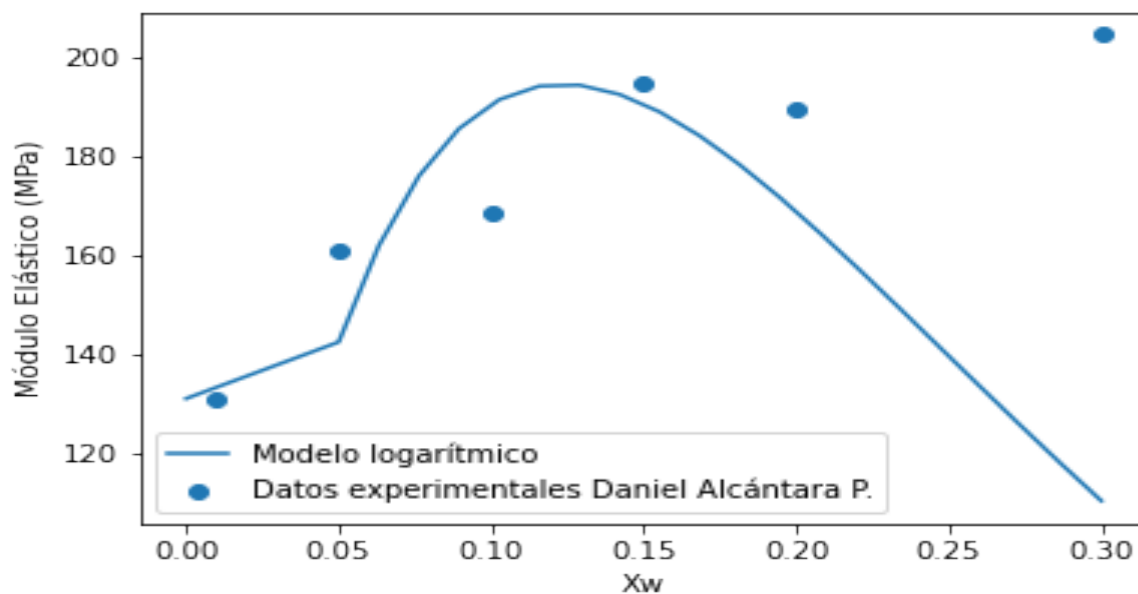


Figura 28. Gráfica E a $90^{\circ}C$ sistema: LLDPE+Fibra de agave+Addico (M3).

¹Datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda.

Resultados cálculo E para materiales de Cindu Annandarajah et al. (M3)

De igual manera que con los modelos anteriores se trabajo con los datos del articulo de Cindu Annandarajah et al., los resultados se muestran en las *Tablas 42, 43, y 44* y sus comportamientos gráficos en *Figuras 29, 30, y 31*.

Tabla 42. *Resultados sistema: LLDPE + Fibra de agave (M3).*

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | |
|------|-----------------------------|-----------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 88.4 | 88.400 | 0 % |
| 0.05 | 225.775 | 241.500 | -7 % |
| 0.1 | 361.359 | 266.700 | 26 % |
| 0.15 | 458.397 | 370.700 | 19 % |
| 0.2 | 429.305 | 324.200 | 24 % |
| 0.3 | 350.093 | | |
| 0.4 | 178.252 | | |
| 0.7 | 60.506 | | |
| 0.8 | 24.285 | | |
| 0.9 | 10.827 | | |

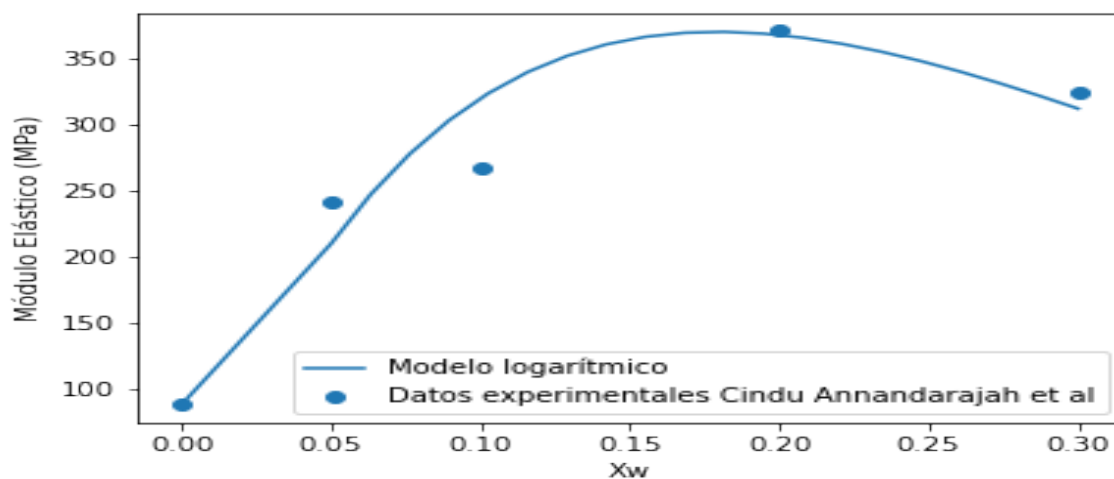


Figura 29. *Gráfica sistema: LLDPE + Fibra de agave (M3).*

¹Datos experimentales Cindu Annandarajah et al, Materials MPDI 2019 12 99.

Tabla 43. Resultados sistema: HDPE + Fibra de agave (M3).

| Xw | Módulo de elasticidad (MPa) | | |
|------|-----------------------------|-----------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 435.100 | 435.1 | 0 % |
| 0.05 | 619.220 | 617.6 | 0 % |
| 0.1 | 849.663 | 657.6 | 23 % |
| 0.2 | 792.192 | 735.0 | 7 % |
| 0.3 | 545.301 | 640.3 | -17 % |
| 0.4 | 326.840 | | |
| 0.6 | 128.853 | | |
| 0.7 | 62.786 | | |
| 0.8 | 5.112 | | |

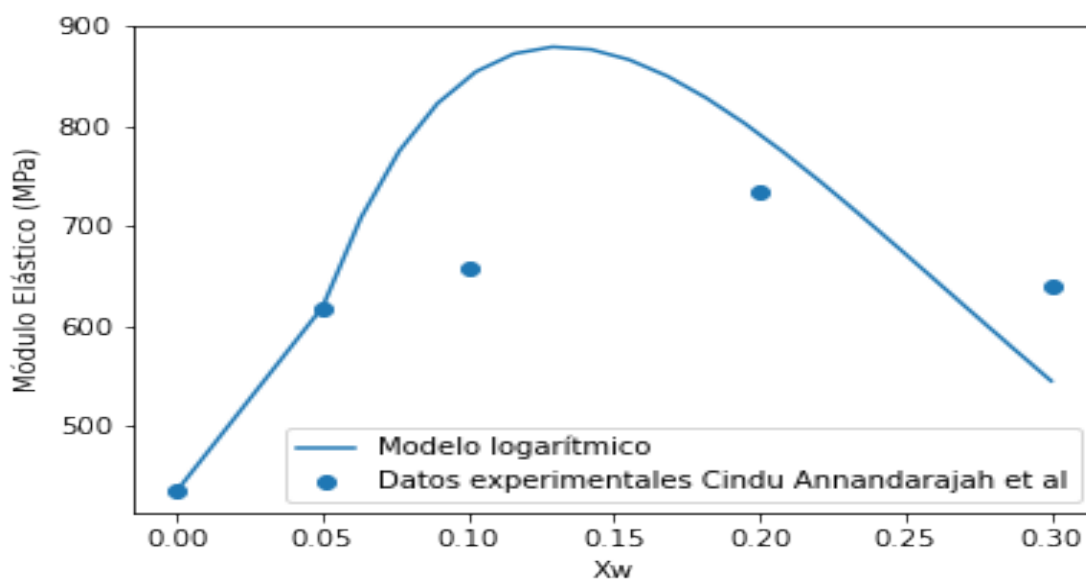


Figura 30. Gráfica sistema: HDPE + Fibra de agave (M3)

¹Datos experimentales Cindu Annandarajah et al, Materials MPDI 2019 12 99.

Tabla 44. Resultados sistema: PP + Fibra de agave (M3).

| Xw | Módulo de elasticidad (Mpa) | | |
|------|-----------------------------|--------------------------------------|-------|
| | Modelo logarítmico | Datos ¹ Experimentales | Error |
| 0 | 560.4 | 560.4 | 0 % |
| 0.05 | 713.331 | 766.7 | 7 % |
| 0.1 | 959.356 | 829.7 | -16 % |
| 0.2 | 804.510 | 882.7 | 9 % |
| 0.3 | 495.666 | 738.8 | 33 % |
| 0.4 | 263.913 | | |
| 0.6 | 126.466 | | |
| 0.8 | 20.328 | | |

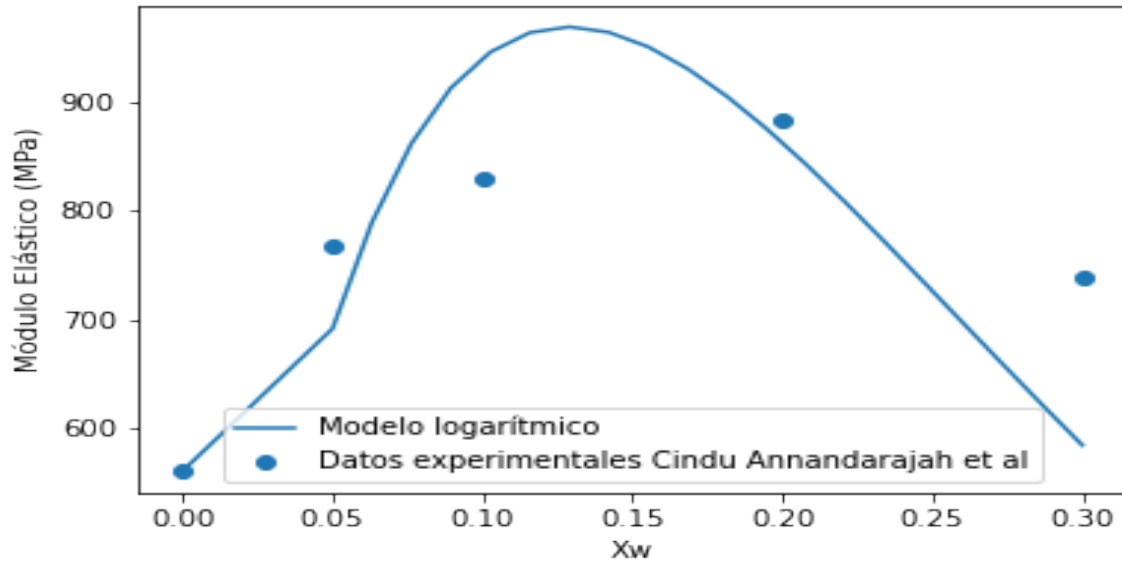


Figura 31. Gráfica sistema: PP + Fibra de agave (M3)

¹Datos experimentales Cindu Annandarajah et al, Materials MPDI 2019 12 99.

5.4. Discusión de resultados

En la *Figura 32*, se presenta un comparativo de los modelos propuestos en el presente trabajo y se realiza un comparativo datos experimentales a 40°C de los materiales de Daniel Alcántara Pineda, se puede apreciar que la tendencia de módulo elástico que estabamos buscando la describen los modelos logarítmicos, el que mejor describe el comporamiento es el modelo semiempírico y posteriormente el modelo logarítmico. Este comportamiento se replica con todos los datos analizados en este trabajo.

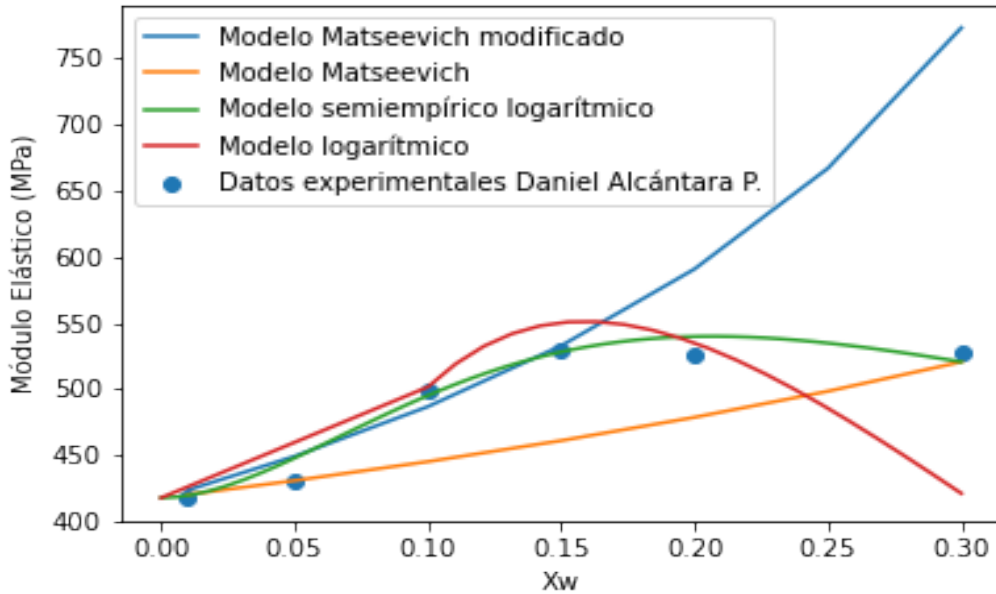


Figura 32. Comparativo de modelos de predicción propuestos y valores de E a 40°C materiales de Daniel Alcántara Pineda.

El modelo de Matseevich original de su artículo [4] se basa solo en la adición de las propiedades mecánicas de los materiales. Es matemáticamente correcto el incremento del módulo con el aumento de la composición de la fibra en el material compuesto, ya que esta presenta un mayor valor del módulo de Young. Al llevar a cabo una “regla de mezclas sencilla” se tiene como consecuencia una función monótona ascendente. Sin embargo, como se ve en los datos del artículo de Cindu [5], experimentalmente los valores del módulo caen después de cierta concentración entre el 20 y el 30%. Experimentalmente lo que se observa es que las fases de fibra y resina termoplástica se delaminan o se separan. Esto debido a

que la fracción volumen de la fibra empieza a ser mayoritaria en comparación con la fracción volumen de la resina, a pesar de que su fracción peso no rebasa el 30 %.

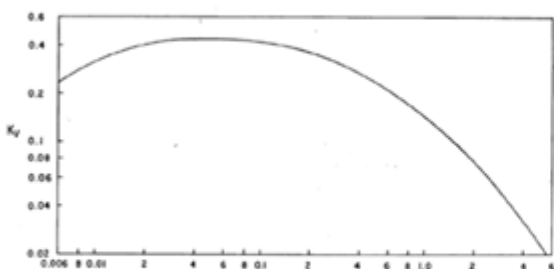
Al ser un problema de volúmenes ocupados, se propuso un modelo modificado del propuesto por Matseevich. Este modelo calculaba el módulo elástico del material compuesto $E_{matseevich}$ y se multiplicaba por un parámetro donde se tenía la fracción volumen del polímero y una fracción crítica. Este modelo modificado se obtuvo como un análogo a las variantes de los modelos de viscosidad de Einstein para sistemas con partículas dispersas. En donde se busca predecir un valor de viscosidad crítica asociada a una concentración, asociada a la inversión de fases entre las partículas dispersas y el medio dispersante. De esta manera se observó una mejora en relación al modelo de Matseevich original, para la predicción de los valores a bajas concentraciones. Sin embargo, este modelo seguía sin predecir la caída del módulo a concentraciones altas.

A partir de estos datos se propuso un modelo semiempírico logarítmico. Este modelo se tomó de un tipo de predicción muy diferente al ámbito del desarrollo de los materiales. Se observó la forma de la función (gráfica) y se comparó con distintas gráficas de forma similar, hasta encontrar una relación gráfica que se emplea en Ingeniería Química para el dimensionamiento de tanques para destilación. La gráfica relaciona el logaritmo natural de un parámetro conocido como K , que involucra el diámetro de una gota de líquido cayendo a través de una corriente o fase gaseosa, las densidades de las dos fases (líquida y gaseosa), la constante de la gravedad y la viscosidad del gas. Este parámetro $\ln(K)$ surge del problema de Stokes para el flujo alrededor de una esfera [29], donde del balance de fuerzas se puede obtener una expresión de la velocidad de sedimentación de una gota de líquido. Esta expresión de la velocidad se reduce a una expresión de la constante K que multiplica a una relación de las densidades del líquido y del gas. La gráfica se ve como lo muestra *Figura 33* [30].

La función que describe dicha gráfica es una expansión del logaritmo natural del parámetro de flujo [30]. Al probar este modelo completo a nuestros datos experimentales, observamos que las constantes B , D y E debían valer cero. Por ello nuestra expresión final solo cuenta con dos constantes $A = \ln(E^\circ)$ y C que se estima a partir de otras constantes a las cuales se les aplica una regresión.

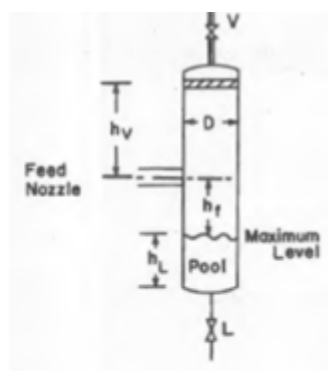
Permitted velocity

$$v_{perm} = K \sqrt{\frac{(\rho_L - \rho_V)}{\rho_V}}$$



$$K = e^{A+B \ln F_{lv} + C (\ln F_{lv})^2 + d (\ln F_{lv})^3 + E (\ln F_{lv})^4}$$

$$F_{lv} = \frac{W_L}{W_V} \sqrt{\frac{\rho_L}{\rho_V}}$$



$$\begin{aligned} A &= -1.877478 \\ B &= -0.814580 \\ C &= -0.187074 \\ D &= -0.014523 \\ E &= -0.001015 \end{aligned}$$

Figura 33. Gráfica $\ln(K)$ vs parámetro de flujo F_{lv} , análoga a las curvas reportadas experimentalmente por Cindu [5].

Este es el mejor modelo que describe los resultados experimentales de Cindu [5]. Sin embargo, queda fuera del alcance de este trabajo la interpretación física de la constante C dentro de esta ecuación. Pero si se observa el problema del tanque de destilación, *Figura 33*, estamos hablando de un fenómeno de separación de dos fases. Esto mismo le podría estar sucediendo a las mezclas de poliolefinas y fibras que experimentalmente llevó a cabo Cindu [5]. Ya que como se mencionó previamente con la disminución del módulo para mezclas con mayor contenido de fibra encontramos delaminación (formación de laminas o capas de polímero fibra separadas) o segregación de ambas fases de forma completa.

Por último, el modelo logarítmico se propuso como la suma de dos contribuciones al módulo. Una contribución de la resina termoplástica y una contribución de la fibra, donde cada una de estas funciones de contribución incorporan propiedades de los componentes y parámetros de ajuste. Al ser la suma de dos contribuciones, estas se propusieron como logarítmicas (suma de logaritmos). Si bien el modelo pudo predecir la caída en el valor del módulo, los datos del modelo no predicen con precisión a los datos experimentales. Se obtiene un modelo que ajusta ade-

cuadramente los datos experimentales, como el semiempírico logarítmico, no nos permite tener una explicación fenomenológica de las constantes y el modelo en sí, más que es un modelo que describe la separación de dos fases.

5.5. Propuesta de software de predicción de propiedades mecánicas

Se realizó la programación de dos versiones del software una considerando un material compuesto de matriz polimérica y reforzado con fibra lignocelulósica, en donde los datos a ingresar para la predicción del módulo elástico son los contenidos de celulosa, hemicelulosa y lignina de la fibra y los módulos de elasticidad de ambos componentes. El software es capaz de predecir el módulo elástico del compuesto con diferentes matrices polimericas (polietileno, poliestireno, polipropileno y policloruro de vinilo). La interfaz se muestra en la *Figura 34*.

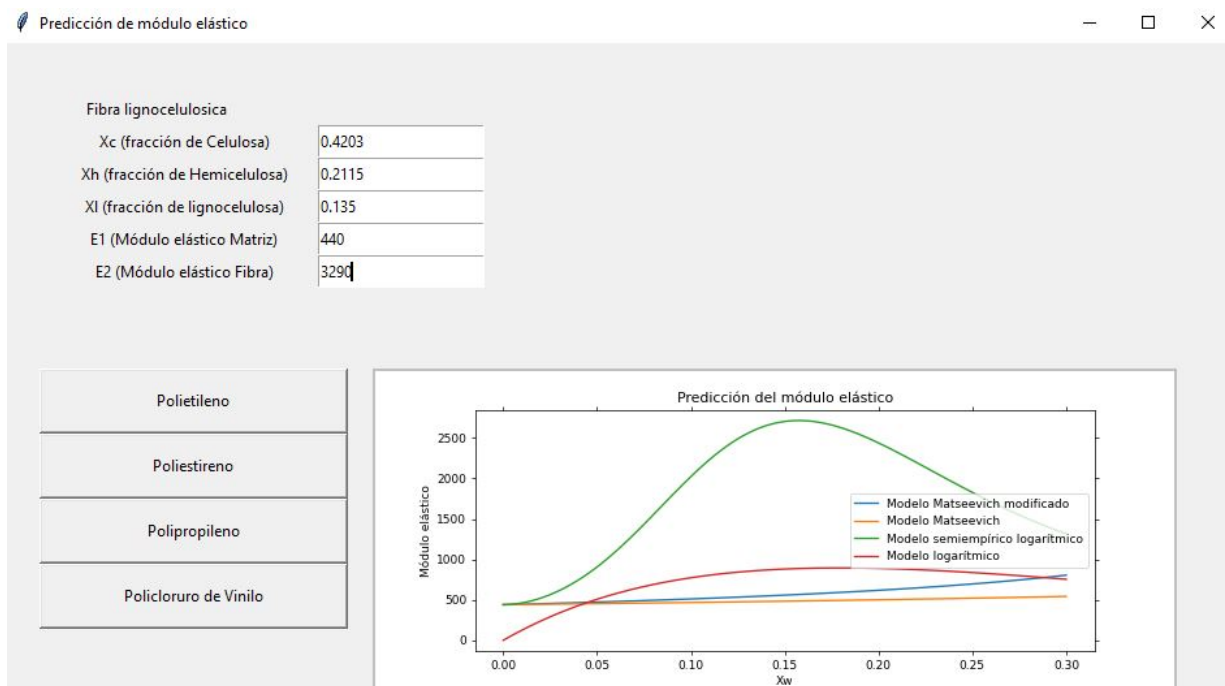


Figura 34. Interfaz del software versión 1.0.

La otra versión es muy similar a la primera con la diferencia que considera al polímero 2 (fibra-compatibilizante) por lo que en este caso el usuario tendrá que ingresar el módulo elástico de compatibilizante y su composición respecto a la fibra. La interfaz se muestra en la *Figuras 35*.

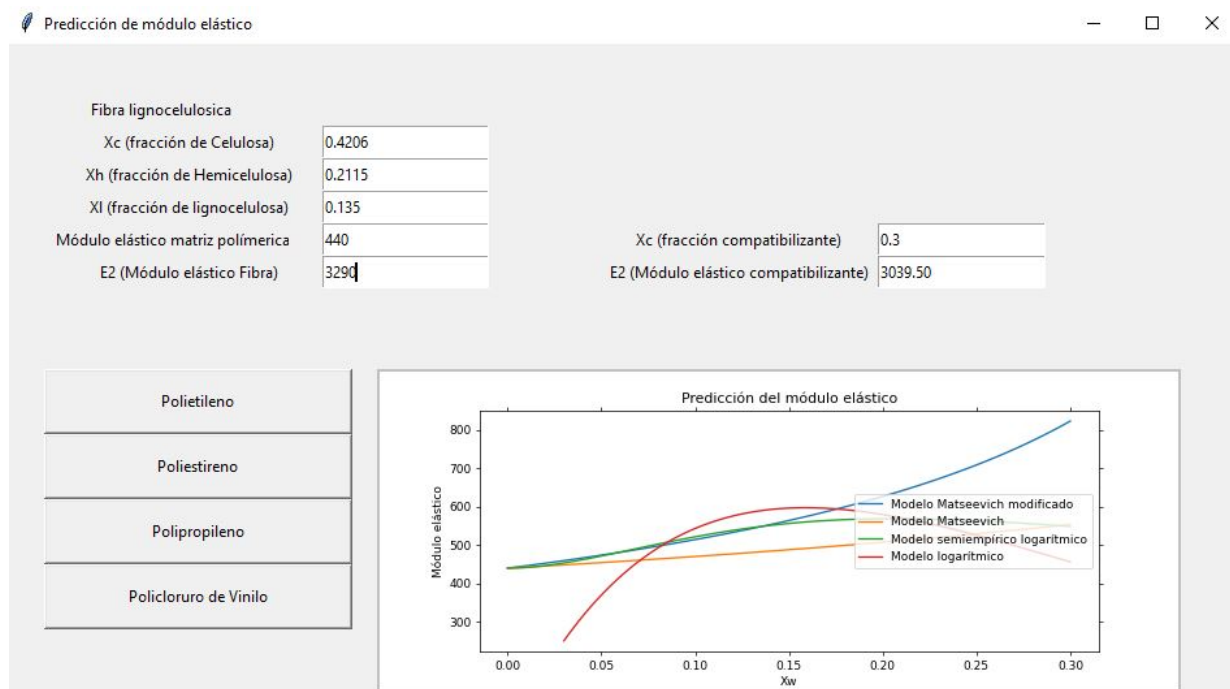


Figura 35. *Interfaz del software versión 1.1.*

6. Conclusiones

Se logró modificar el modelo de Matsevich et al, se considero una composición critica y propiedades físicas de los componentes, el cual predicie el módulo elástico de una manera más precisa el comportamiento experimental pero no sigue su tendencia.

Se proponen dos modelos logarítmicos, uno con un enfoque semiempírico y otro teórico que predican el comportamiento del módulo elástico de una manera más precisa que los modelos de Matsevich et al y Matsevich modificado.

Los modelos propuestos fueron validados con datos experimentales no publicados de Daniel Alcántara Pineda, tesista de Licenciatura y los datos publicados por Cindu Annandarajah et al.

Se concluye que el mejor modelo que describe el comportamiento de módulo elástico es el modelo logarítmico con enfoque teórico, sin embargo, cabe mencionar que está sujeto a cambios para mejorar su precisión respecto a los datos experimentales.

Se realizo un software con dos versiones que es capaz de predecir el comportamiento del módulo elástico de materiales compositos de matriz polimérica y reforzados con fibras lignocelulósicas, que incluye los modelos presentados en este trabajo y puede ser mejorado y extendido a otras propiedades de mezcla de polímeros.

Apéndices

A. Datos experimentales Daniel Alcántara Pineda

Los materiales de Daniel Alcántara Pineda, fueron procesados bajo las siguientes condiciones:

Temperatura: 180°C-190°C

Velocidad de extrusión: 20 rpm

La fibra de agave no tuvo ningún tratamiento previo y el polietileno lineal (PETROTHENE GA574189 de baja densidad fabricado por Lyondell Chemical Company), en forma de pellets fue mezclado con la fibra de agave previamente molida y se utilizó como compatibilizante el Addico 9320 (fabricado por Addico the additive company), se colocó en el extrusor a las condiciones de pruebas previamente mencionadas. Este proceso se realizó dos veces con la finalidad de homogenizar los materiales.

Los materiales extruidos fueron con la formulaciones descritas en la *Tabla 45* y posteriormente estos materiales fueron caracterizados por DMA, de este análisis se obtuvieron los valores de E, descritos en la *Tabla 46*.

Tabla 45. *Formulaciones de materiales de Daniel Alcántara Pineda.*

| Material | Formulación | | |
|----------|-------------|---------|--------|
| | %Agave | %Addico | %LLDPE |
| DAPEX001 | 7 | 3 | 90 |
| DAPEX002 | 10.5 | 4.5 | 85 |
| DAPEX003 | 3.5 | 1.5 | 95 |
| DAPEX004 | 14 | 6 | 80 |
| DAPEX005 | 21 | 9 | 70 |

Tabla 46. *Resultados experimentales de E a diferentes temperaturas Daniel Alcántara Pineda¹.*

| Xw | Temperatura | | | | | |
|-----------|--------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| | 44°C | 50°C | 60°C | 70°C | 80°C | 90°C |
| 0 | 417.591 | 381.873 | 308.407 | 239.351 | 179.9 | 131.149 |
| 0.05 | 430.206 | 407.461 | 347.714 | 278.958 | 216.11 | 161.038 |
| 0.1 | 499.32 | 496.7 | 416.278 | 332.977 | 260.1 | 168.816 |
| 0.15 | 528.807 | 496.7 | 416.278 | 332.977 | 258.375 | 195.131 |
| 0.2 | 525.44 | 473.097 | 389.275 | 313.932 | 246.873 | 189.811 |
| 0.3 | 526.78 | 489.987 | 414.823 | 338.1 | 266.671 | 204.713 |

¹Los resultados de E están dados en MPa

Referencias

- [1] ALNEIRA CUÉLLAR e Ismael Muñoz Cuervo. “Bamboo fiber reinforcement for polymer matrix”. En: *DYNA* 77 (jun. de 2010), págs. 137-142.
- [2] Mohd Nurazzi Norizan y Mohamed Rahmah. “A Review: Fibres, Polymer Matrices and Composites”. En: *Pertanika Journal of Science and Technology* 25 (oct. de 2017), págs. 1085 -1102.
- [3] N. Saba y col. “A review on dynamic mechanical properties of natural fibre reinforced polymer composites”. En: *Construction and Building Materials* 106 (2016), págs. 149-159. ISSN: 0950-0618. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2015.12.075>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0950061815307479>.
- [4] Tatiana Matseevich y col. “Prediction of the modulus of elasticity of building materials based on wood-polymer composites”. En: *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 869 (jul. de 2020), pág. 032009. DOI: 10.1088/1757-899X/869/3/032009.
- [5] Cindu Annandarajah y col. “Study of Agave Fiber-Reinforced Biocomposite Films”. En: *Materials* 12 (dic. de 2019), pág. 99. DOI: 10.3390/ma12010099.
- [6] William Javier Mora, Bladimir Azdrubal Ramón y Gonzalo G Moreno. “Fibras Naturales como alternativa de refuerzo en materiales compuestos. Una revisión”. En: *Bistua* 17 (2019), págs. 60-72. DOI: <http://dx.doi.org/10.24054/01204211.v2.n2.2019.3523>.
- [7] Sandra Velásquez, Gabriel Peláez Arroyave y Diego Giraldo. “Uso de fibras vegetales en materiales compuestos de matriz polimérica: una revisión con miras a su aplicación en el diseño de nuevos productos”. En: *Informador Técnico* 80 (jun. de 2016), pág. 77. DOI: 10.23850/22565035.324.
- [8] Susheel Kalia, Balbir Singh Kaith e Inderjeet Kaur. “Pretreatments of Natural Fibers and their Application as Reinforcing Material in Polymer Composites- A Review”. En: *Polymer Engineering Science* 49 (jul. de 2009), págs. 1253 -1272. DOI: 10.1002/pen.21328.
- [9] Marvin Chávez-Sifontes y Marcelo Dómine. “Lignina, estructura y aplicaciones: Métodos de despolimerización para la obtención de derivados aromáticos de interés industrial”. En: *Avances en Ciencias e Ingeniería* 4 (ene. de 2013), págs. 15-46.
- [10] Paulo Pereira y col. “Vegetal fibers in polymeric composites: A review”. En: *Polímeros* 25 (mar. de 2015), pág. 9. DOI: 10.1590/0104-1428.1722.

- [11] Susana Cano y col. "Determination of the Composition of Lignocellulosic Biomasses from Combined Analyses of Thermal, Spectroscopic, and Wet Chemical Methods". En: *Industrial Engineering Chemistry Research* 60 (feb. de 2021). DOI: 10.1021/acs.iecr.0c05243.
- [12] Julia Wenger y col. *Natural Fibers and Fiber-based Materials in Biorefineries Status Report 2018*. Dic. de 2018. ISBN: ISBN 978-1-910154-53-3.
- [13] Xiaowei Zhou, L.J. Broadbelt y Ravikrishnan Vinu. "Mechanistic Understanding of Thermochemical Conversion of Polymers and Lignocellulosic Biomass". En: nov. de 2016. DOI: 10.1016/bs.ache.2016.09.002.
- [14] Maya Jacob John y Sabu Thomas. "Biofibres and biocomposites". En: *Carbohydrate Polymers* 71.3 (2008), págs. 343-364. ISSN: 0144-8617. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2007.05.040>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0144861707002974>.
- [15] K.G. Satyanarayana y col. "Materials science of some lignocellulosic fibers". En: *Metallography* 19.4 (1986), págs. 389-400. ISSN: 0026-0800. DOI: [https://doi.org/10.1016/0026-0800\(86\)90073-X](https://doi.org/10.1016/0026-0800(86)90073-X). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002608008690073X>.
- [16] K. Murali Mohan Rao y K. Mohana Rao. "Extraction and tensile properties of natural fibers: Vakka, date and bamboo". En: *Composite Structures* 77.3 (2007), págs. 288-295. ISSN: 0263-8223. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2005.07.023>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0263822305001923>.
- [17] Maria Fidelis y col. "The effect of fiber morphology on the tensile strength of natural fibers". En: *Journal of Materials Research and Technology* 2 (abr. de 2013), págs. 149-157. DOI: 10.1016/j.jmrt.2013.02.003.
- [18] B Ravi y Siva Boyapati. "Plant Fiber Reinforced Polymer Matrix Composites: A Review". En: oct. de 2017.
- [19] V. Fiore, A. Valenza y G. Di Bella. "Artichoke (*Cynara cardunculus* L.) fibres as potential reinforcement of composite structures". En: *Composites Science and Technology* 71.8 (2011), págs. 1138-1144. ISSN: 0266-3538. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2011.04.003>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0266353811001357>.
- [20] John Lu, Q. Wu y H.S. Jr. "Chemical coupling in wood fiber and polymer composites: A review of coupling agents and treatments". En: *Wood and Fiber Science* 32 (ene. de 2000), págs. 88-104.

- [21] A. Askadskii. “Methods for calculating the physical properties of polymers”. En: *Review Journal of Chemistry* 5 (abr. de 2015), págs. 83-142. DOI: 10.1134/S2079978015020016.
- [22] D.W. van Krevelen, D.W. Krevelen y K. te Nijenhuis. *Properties of Polymers: Their Correlation with Chemical Structure; Their Numerical Estimation and Prediction from Additive Group Contributions*. Elsevier, 2009. ISBN: 9780080548197. URL: <https://books.google.com.mx/books?id=GQ1P1QEACAAJ>.
- [23] Andre A.A.Askadskii y Aleksandrovich. *Computational materials science of polymers*. Cambridge Int Science Publishing, 2003.
- [24] Shao-Yun Fu, Guanshui Xu y Yiu-Wing Mai. “On the elastic modulus of hybrid particle/short-fiber/polymer composites”. En: *Composites Part B: Engineering* 33.4 (2002), págs. 291-299. ISSN: 1359-8368. DOI: [https://doi.org/10.1016/S1359-8368\(02\)00013-6](https://doi.org/10.1016/S1359-8368(02)00013-6). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359836802000136>.
- [25] H. Ku y col. “A review on the tensile properties of natural fiber reinforced polymer composites”. En: *Composites Part B: Engineering* 42.4 (2011), págs. 856-873. ISSN: 1359-8368. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2011.01.010>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359836811000382>.
- [26] T.A.Matseevich A.A.Askadskii. “Latest developments of models and calculation schemes for the quantitative analysis of the physical properties of polymers”. En: *UFN* 190 (2020), págs. 179-210.
- [27] Omar Huerta-Cardoso y col. “Up-cycling of agave tequilana bagasse-fibres: A study on the effect of fibre-surface treatments on interfacial bonding and mechanical properties”. En: *Results in Materials* 8 (2020), pág. 100158. ISSN: 2590-048X. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.rinma.2020.100158>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2590048X2030100X>.
- [28] Edy Purwanto, Stefanus Kristiawan y Febiana Kartika. “Effect of volume fraction and aspect ratio of Agave fiber *Cantula Roxb* against compressive strength and direct tensile strength”. En: *AIP Conference Proceedings* 2114 (jun. de 2019), pág. 030020. DOI: 10.1063/1.5112424.
- [29] Edwin N. Lightfoot Daniel J. Klingenberg R. Byron Bird Warren E. Stewart. “Introductory Transport Phenomena”. En: ed. por John Wiley y Sons. 2015.

- [30] James R. Fair Stanley M. Walas James R. Couper W. Roy Penney. *Chemical Process Equipment Selection and Design*. Ed. por Elsevier. 3rd. 2012.