

# Actividad 03: Estructura Atómica y Enlaces

Julian Avila

jlavilam@udistrital.edu.co

Universidad Distrital Francisco José de Caldas

12 de octubre de 2025

## 1. Actividad 02 – Diagramas de Ashby

**Problema 1.1** (Física de los Hornos). Explicar el principio físico de un horno de fundición (ferrería), reverbero, horno Bessemer, horno de arco, inducción, inducción al vacío y horno de tratamiento térmico para la metalurgia.

### 1.1. Alto Horno

El alto horno es un reactor químico diseñado para la reducción carbotérmica de minerales de hierro. Su principio operativo se fundamenta en una gestión rigurosa del flujo de materia y energía en contracorriente. Una carga sólida (mineral, coque, fundente) desciende por gravedad, mientras que gases calientes ascienden desde la base.

La generación de energía térmica es iniciada por la combustión de coque con aire precalentado ( $T > 1200\text{ K}$ ), inyectado por toberas:  $\text{C} + \text{O}_2 \longrightarrow \text{CO}_2$ . Esta reacción eleva la temperatura por encima de  $2000\text{ K}$ . El  $\text{CO}_2$  reacciona inmediatamente con carbono incandescente en la reacción endotérmica de Boudouard,  $\text{C} + \text{CO}_2 \rightleftharpoons 2\text{CO}$ , generando el principal agente reductor, el monóxido de carbono.

Desde una perspectiva termodinámica, el proceso es viable porque la energía libre de Gibbs ( $\Delta G$ ) para la oxidación del carbono se vuelve más negativa que la de los óxidos de hierro a altas temperaturas. La reducción del hierro ocurre secuencialmente a medida que la carga desciende a zonas de mayor temperatura:  $3\text{Fe}_2\text{O}_3 \longrightarrow 2\text{Fe}_3\text{O}_4 \longrightarrow \text{FeO} \longrightarrow \text{Fe}$ .

El transporte de calor es un proceso complejo que involucra convección forzada, donde el número de Péclet es elevado, y radiación térmica desde las zonas incandescentes hacia la carga porosa.

### 1.2. Horno de Reverbero

A diferencia del alto horno, este diseño aísla la carga del combustible para evitar su contaminación. El principio físico fundamental es la maximización de la transferencia de calor por radiación. Una llama y gases calientes fluyen a lo largo de un techo refractario abovedado, que se calienta hasta la incandescencia.

Este techo actúa como un cuerpo radiante secundario, emitiendo energía hacia la carga metálica situada en la solera. El flujo de calor radiante ( $q$ ) se rige por la ley de Stefan-Boltzmann,  $q = \sigma \epsilon F_{1-2}(T_1^4 - T_2^4)$ , donde  $T_1$  es la temperatura del techo,  $T_2$  la de la carga,  $\epsilon$  la emisividad y  $F_{1-2}$  es el factor de forma (o de visión), un término geométrico que cuantifica la fracción de

energía que intercepta la carga. La geometría del horno es, por tanto, un parámetro de diseño crítico.

### 1.3. Convertidor Bessemer

La física del convertidor Bessemer es la de un reactor químico autógeno, cuya energía proviene de reacciones de oxidación exotérmicas *in situ*. No requiere fuente de calor externa. Se inyecta aire u oxígeno a presión a través del arrabio fundido, induciendo la oxidación selectiva de impurezas.

La termodinámica dicta la secuencia de oxidación: elementos con mayor afinidad por el oxígeno, como el silicio ( $\text{Si} + \text{O}_2 \longrightarrow \text{SiO}_2$ ) y el manganeso ( $2 \text{Mn} + \text{O}_2 \longrightarrow 2 \text{MnO}$ ), reaccionan primero, formando una escoria. Finalmente, se oxida el carbono,  $2 \text{C} + \text{O}_2 \longrightarrow 2 \text{CO}$ , cuya violenta formación gaseosa provoca una ebullición característica.

Desde la fluidodinámica, la inyección del gas genera una turbulencia extrema y un área interfacial gas-líquido inmensa, lo que resulta en una cinética de transferencia de masa extraordinariamente rápida, completando el afino del acero en minutos.

### 1.4. Horno de Arco Eléctrico

Su principio físico es la generación de un arco voltaico de alta potencia entre electrodos de grafito y la carga metálica. El arco es un plasma, un gas ionizado estable cuyas temperaturas pueden exceder los 6000 K.

La transferencia de energía al metal es un proceso multifísico:

1. **Radiación térmica:** Es el mecanismo dominante. La columna de plasma irradia energía intensamente según la ley de Stefan-Boltzmann.
2. **Transferencia en los electrodos:** Bombardeo directo de electrones e iones en los puntos de anclaje del arco con el baño metálico.
3. **Convección:** Transferencia de calor desde el plasma caliente al metal.

La potencia eléctrica disipada,  $P = V_{\text{arc}} I_{\text{arc}}$ , se controla con precisión para optimizar la fusión de la chatarra.

### 1.5. Calentamiento por Inducción

Este horno opera bajo los principios del electromagnetismo. Una corriente alterna ( $I(t)$ ) fluye por una bobina que envuelve un crisol con la carga metálica. Por la ley de Ampère, esta corriente genera un campo magnético variable en el tiempo,  $B(t)$ .

La ley de Faraday,  $\nabla \wedge E = -\partial_t B$ ,<sup>1</sup> dicta que  $B(t)$  induce un campo eléctrico  $E$ . Este campo impulsa la circulación de corrientes parásitas (Eddy currents),  $J = \sigma_e E$ .

El calentamiento se produce por efecto Joule, con una densidad de potencia volumétrica dada por  $p = J \cdot E = J^2 \sigma_e^{-1}$ . Un fenómeno clave es el efecto piel (*skin effect*), que confina a  $J$  a una capa superficial de profundidad  $\delta = \sqrt{2\rho_e(\omega\mu)^{-1}}$ , donde  $\rho_e$  es la resistividad,  $\omega$  la frecuencia angular y  $\mu$  la permeabilidad magnética.

Adicionalmente, la interacción del campo  $B$  con las corrientes  $J$  genera una fuerza de Lorentz ( $F = J \cdot B$ ), que induce un flujo de agitación (stirring) en el metal líquido, garantizando una homogeneización térmica y química superior.

---

<sup>1</sup>Se emplea uso del formalismo del álgebra de Clifford  $\mathcal{Cl}_3(\mathbb{R})$ , donde  $E$  es un vector y  $B$  un bivector.

## 1.6. Inducción al Vacío (VIM)

El horno VIM acopla la física de la inducción con los principios de la termodinámica en baja presión. Al operar en vacío, la presión parcial de gases ( $p_i$ ) sobre el metal se reduce drásticamente.

Según la ley de Sieverts, la solubilidad de gases diatómicos como  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$  y  $\text{H}_2$  en el metal es proporcional a  $\sqrt{p_i}$ . Una disminución de  $p_i$  reduce el potencial químico del gas en la atmósfera, impulsando su desorción del metal fundido para alcanzar un nuevo equilibrio.

El vacío también facilita la eliminación de elementos volátiles con alta presión de vapor y desplaza equilibrios de desoxidación como  $[C] + [O] \rightleftharpoons CO_{(g)}$ . La extracción continua del producto gaseoso CO, conforme al principio de Le Châtelier, lleva la reacción a completarse.

### 1.7. Tratamiento Térmico: Física del Estado Sólido

Estos hornos manipulan la microestructura del material en estado sólido. El principio físico subyacente es la cinética de las transformaciones de fase, controlada por ciclos térmicos precisos.

El calentamiento de una pieza se rige por la ecuación de difusión del calor,  $\partial_t T = \alpha \nabla^2 T$ , donde  $\alpha$  es la difusividad térmica. El objetivo es llevar el material a una región de su diagrama de fases donde una nueva estructura cristalina sea estable (e.g., austenización del acero).

La etapa crítica es el enfriamiento. La velocidad,  $D_t T$ , determina la transformación de fase resultante.

- **Enfriamiento lento:** Permite transformaciones por difusión (nucleación y crecimiento), formando microestructuras como ferrita, perlita o bainita.
- **Enfriamiento rápido (temple):** Suprime la difusión. La transformación ocurre de forma displaciva (sin difusión), mediante un mecanismo de cizallamiento de la red cristalina, dando lugar a fases metaestables como la martensita.

**Problema 1.2** (Diagrama de Ashby). Interprete el diagrama de Ashby presentado en la figura 1.

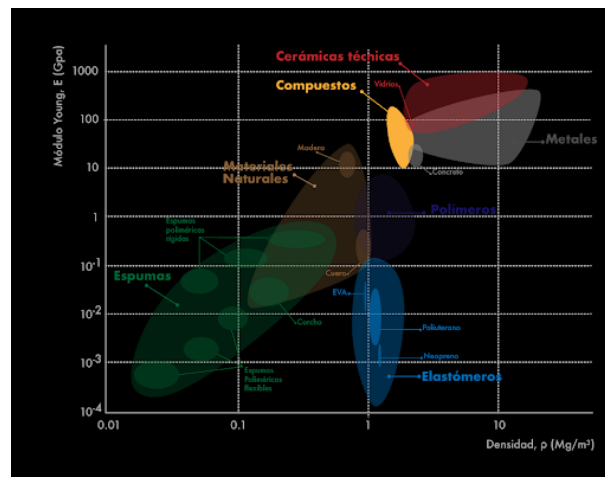


Figura 1: Diagrama de Ashby (Módulo de Young y Densidad).

### 1.7.1. Eje Y: Módulo de Young, $E$ (GPa)

Esta propiedad cuantifica la rigidez de un material en el régimen elástico. Se define como la constante de proporcionalidad entre el esfuerzo uniaxial ( $\sigma$ ) y la deformación unitaria ( $\epsilon$ ) según la Ley de Hooke,  $\sigma = E\epsilon$ .

El módulo de Young está determinado por la naturaleza de los enlaces interatómicos. Es proporcional a la curvatura del potencial de energía interatómica  $U(r)$  en la distancia de equilibrio  $r_0$ :

$$E \propto \left( D_r^2 U \right)_{r=r_0}$$

Un valor de  $E$  elevado implica enlaces fuertes y una gran resistencia a la deformación elástica. El rango logarítmico del eje abarca siete órdenes de magnitud, evidenciando la vasta diversidad de materiales.

### 1.7.2. Eje X: Densidad, $\rho$ ( $\text{Mg m}^{-3}$ )

La densidad es la masa por unidad de volumen. Microscópicamente, está determinada por tres factores:

1. La masa atómica ( $A$ ) de los elementos constituyentes.
2. El factor de empaquetamiento atómico (APF), una propiedad geométrica de la estructura cristalina o molecular.
3. La porosidad presente en el material.

## 1.8. Interpretación de las Familias de Materiales

Las regiones en el diagrama agrupan materiales con características físicas y estructurales similares.

### 1.8.1. Metales (Gris)

Se ubican en la región superior derecha: alta rigidez y alta densidad. Su enlace metálico, caracterizado por un gas de electrones deslocalizados, proporciona una fuerte cohesión no direccional. Esto, sumado a sus estructuras cristalinas compactas (e.g., FCC, BCC con APF elevados), resulta en módulos de Young altos y densidades notables.

### 1.8.2. Cerámicas Técnicas (Rojo)

Ocupan la cúspide del diagrama, exhibiendo la máxima rigidez. Sus enlaces, predominantemente iónicos (fuertes, no direccionales) y/o covalentes (muy fuertes y direccionales), exigen una energía muy alta para deformarse. Su densidad es moderada, menor que la de muchos metales, pues suelen componerse de átomos más ligeros (O, Si, Al, C).

### 1.8.3. Polímeros y Elastómeros (Azul)

Se localizan en la región central e inferior, con baja rigidez y densidad. Su comportamiento mecánico no está dominado por el estiramiento de enlaces primarios, sino por interacciones secundarias (fuerzas de van der Waals) y por la rotación de enlaces en las largas cadenas moleculares. En los elastómeros, la rigidez es particularmente baja y su origen es fundamentalmente entrópico: la fuerza restauradora proviene de la tendencia del sistema a maximizar su entropía conformacional (retorno al estado de ovillo estadístico).

#### 1.8.4. Compuestos (Amarillo)

Estos materiales de ingeniería se posicionan estratégicamente para optimizar la relación rigidez-peso. Combinan una matriz (usualmente polimérica, de baja densidad) con un refuerzo de alta rigidez (e.g., fibras de carbono, vidrio). Su objetivo es maximizar el módulo específico,  $E\rho^{-1}$ , un índice de rendimiento clave. Por ello, se ubican en la deseable región superior izquierda del diagrama.

#### 1.8.5. Materiales Naturales (Marrón)

Exhiben una gran diversidad, a menudo como compuestos jerárquicos optimizados por la evolución. La madera, un compuesto celular de fibras de celulosa en una matriz de lignina, logra una excelente rigidez específica.

#### 1.8.6. Espumas (Verde)

Ocupan la esquina inferior izquierda: densidad y rigidez extremadamente bajas. Son estructuras celulares con una alta fracción de volumen de gas. Su respuesta mecánica no está dictada por las propiedades del material base, sino por la arquitectura de la espuma. La deformación se produce por la flexión y el pandeo de las paredes celulares.

**Problema 1.3** (Material para una taza). Para fabricar una taza, ¿qué se debe tener en cuenta en la selección del material desde una perspectiva de la física de materiales?

La selección de un material para una taza es un problema de diseño que requiere satisfacer un conjunto de restricciones termofísicas, mecánicas y químicas.

#### 1.8.7. Restricciones Termofísicas

**Resistencia al Choque Térmico.** El material debe soportar gradientes de temperatura abruptos sin fracturarse. Al verter un líquido caliente, la superficie interna se expande repentinamente, generando un esfuerzo de tracción en la superficie externa (más fría).

**Aislamiento Térmico.** Para mantener la bebida caliente y el exterior a una temperatura manejable, se requiere una baja conductividad térmica,  $k$ . A nivel microscópico, esto implica una baja eficiencia en la propagación de fonones (cuantos de vibración de la red). Materiales con estructuras cristalinas complejas, desorden atómico (vidrios) o grandes diferencias de masa atómica favorecen la dispersión de fonones y, por tanto, poseen un bajo valor de  $k$ .

#### 1.8.8. Restricciones Mecánicas

**Rigidez y Resistencia a la Compresión.** El material debe ser suficientemente rígido ( $E$  elevado) y resistente a la compresión para soportar su propio peso y el del líquido sin deformarse. Las cerámicas y vidrios, con sus fuertes enlaces iónicos/covalentes, cumplen excelentemente este requisito.

**Fragilidad y Tenacidad a la Fractura.** La contrapartida de los enlaces cerámicos es su fragilidad. La estructura atómica inhibe el deslizamiento de dislocaciones, impidiendo la deformación plástica como mecanismo de disipación de energía. Por tanto, la energía de un impacto se invierte en la propagación de grietas. La propiedad que cuantifica esta resistencia es la tenacidad a la fractura,  $K_{Ic}$ . Las cerámicas tienen valores de  $K_{Ic}$  muy bajos en comparación con los metales, lo que las hace susceptibles a la fractura catastrófica ante un defecto o impacto.

**Dureza Superficial.** Se requiere una alta dureza para resistir la abrasión y el rayado por el uso de utensilios (e.g., cucharas) y durante la limpieza. La dureza está directamente relacionada con la fuerza de los enlaces interatómicos, por lo que las cerámicas son ideales en este aspecto.

### 1.8.9. Restricciones Químicas y de Biocompatibilidad

**Inercia Química.** El material debe ser químicamente inerte. No debe reaccionar, corroerse ni degradarse en contacto con bebidas que pueden ser ácidas (café,  $\text{pH} \approx 5$ ) o alcalinas. La elevada energía de los enlaces en óxidos cerámicos (e.g.,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) les confiere una estabilidad termodinámica excepcional en estos entornos.

**Biocompatibilidad.** El material debe ser apto para el contacto con alimentos. Esto significa que no debe haber lixiviación (leaching) de especies iónicas tóxicas hacia la bebida. En el caso de cerámicas esmaltadas, es crucial que el vidriado se haya procesado a una temperatura adecuada para garantizar la completa vitrificación y evitar la liberación de metales pesados (e.g., Pb, Cd) que pudieran estar presentes en los pigmentos.

## 2. Actividad 02 – Enlaces Atómicos

**Problema 2.1** (Números Cuánticos y Propiedades Físicas). ¿Cómo los números cuánticos, gobiernan las propiedades físicas de un material?

Las partículas elementales son excitaciones de campos cuánticos fundamentales, clasificadas por su espín. El Teorema Espín-Estadística establece una correspondencia fundamental: partículas de espín semientero (e.g., electrones, espín  $\frac{\hbar}{2}$ ) son fermiones, descritos por una función de onda total  $\Psi$  que debe ser antisimétrica bajo el intercambio de las coordenadas (espaciales y de espín) de dos partículas idénticas:  $\Psi(x_1, x_2, \dots) = -\Psi(x_2, x_1, \dots)$ . Esta exigencia de antisimetría orquesta, desde el nivel más elemental, la vasta diversidad de propiedades de los materiales.

La antisimetría de  $\Psi$  implica directamente el Principio de Exclusión de Pauli. El espacio de estados de un sistema de dos fermiones no es el producto tensorial completo  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$  del espacio de Hilbert de una partícula, sino su subespacio antisimétrico,  $\Lambda^2(\mathcal{H})$ . Un estado de dos partículas  $|\alpha\rangle$  y  $|\beta\rangle$  se representa por su producto exterior:

$$|\Psi\rangle = |\alpha\rangle \wedge |\beta\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle - |\beta\rangle \otimes |\alpha\rangle)$$

Por la propiedad antisimétrica del producto exterior ( $a \wedge b = -b \wedge a$ ), si intentamos colocar ambos fermiones en el mismo estado cuántico  $|\alpha\rangle$ , el estado del sistema es necesariamente el vector nulo:

$$|\alpha\rangle \wedge |\alpha\rangle = 0$$

Un estado nulo tiene probabilidad cero de existir. Esta restricción prohíbe la “condensación” de fermiones en un mismo estado, forzándolos a apilarse en una jerarquía de estados energéticos.

Al formar un sólido, los orbitales atómicos discretos se solapan, y según modelos como el de “tight-binding”, sus niveles de energía se hibridan en cuasi-continuos energéticos: las bandas de energía. Los electrones, obedeciendo la estadística de Fermi-Dirac, llenan estas bandas hasta una energía máxima a  $T = 0\text{ K}$ , la energía de Fermi ( $E_F$ ). La topología de estas bandas cerca de  $E_F$  define las propiedades electrónicas del material.

- **Aislantes/Semiconductores:**  $E_F$  se sitúa dentro de una brecha energética (*band gap*,  $E_g$ ) que separa una banda de valencia llena de una banda de conducción vacía. Se requiere una energía  $\geq E_g$  para excitar un electrón y permitir la conducción.

- **Metales:**  $E_F$  cruza una o más bandas, resultando en una banda parcialmente llena. Esto garantiza una densidad de estados finita en la energía de Fermi,  $g(E_F) > 0$ , permitiendo la excitación de electrones a estados vacíos con una energía infinitesimal y, por ende, una alta conductividad eléctrica.

El magnetismo surge de la interacción de intercambio, un efecto sin análogo clásico, fruto de la interacción entre la repulsión de Coulomb y el principio de antisimetría. La antisimetría impone una correlación entre las coordenadas espaciales y de espín de los electrones. Con la minimización de su energía de repulsión electrostática, los electrones pueden adoptar una configuración espacial que los separe, lo cual, satisfaciendo el teorema, puede forzar a sus espines a alinearse. Este fenómeno se modela con un término en el Hamiltoniano efectivo,  $H_{\text{ex}} = -2JS_i \cdot S_j$ , donde  $J$  es la integral de intercambio. Si  $J > 0$ , se favorece el ferromagnetismo (espines paralelos).

Así, propiedades macroscópicas como la conductividad, la transparencia o el magnetismo son manifestaciones directas de la naturaleza fermiónica del electrón y la simetría fundamental de su función de onda.

**Problema 2.2** (Familias de la tabla periódica). Ubique las familias de elementos en la tabla periódica y describa su utilidad.

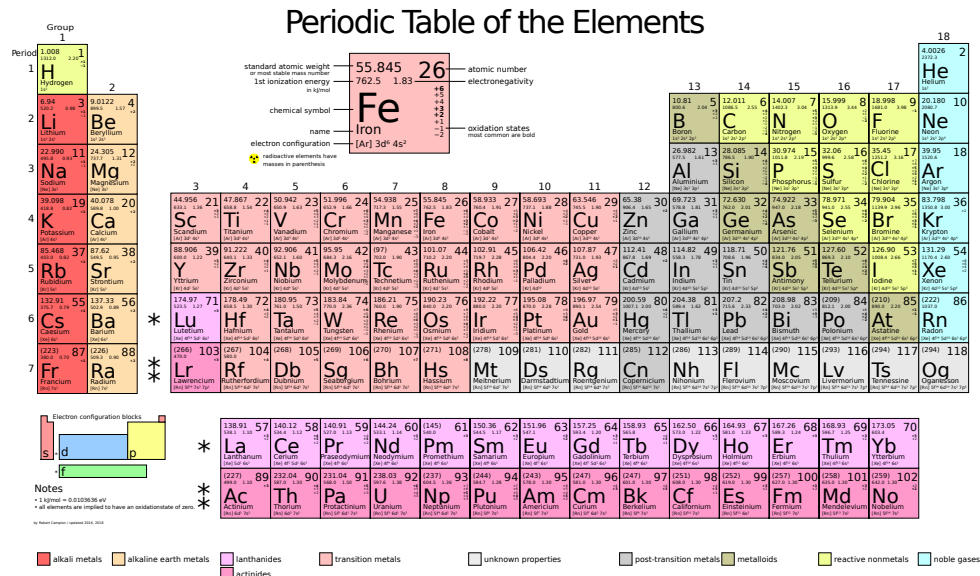


Figura 2: Tabla Periódica. [4]

## 2.1. Metales Alcalinos y Alcalinotérreos

**Ubicación.** Grupos 1 y 2, el bloque  $s$  de la tabla periódica.

Configuración de valencia  $ns^1$  y  $ns^2$ . El apantallamiento eficaz del núcleo por las capas internas y su gran radio atómico resulta en las energías de ionización más bajas de todos los elementos. Esto los convierte en agentes reductores extremadamente potentes y químicamente muy reactivos. Su enlace metálico es relativamente débil, al contribuir con solo uno o dos electrones al “mar” de Fermi, lo que explica su baja densidad y blandura.

## 2.2. Metales de Transición

**Ubicación.** Grupos 3 al 12, el bloque  $d$ .

Caracterizados por el llenado de los orbitales  $(n-1)d$ . La pequeña diferencia de energía entre los niveles  $ns$  y  $(n-1)d$  permite múltiples estados de oxidación, propiedad que los convierte en excelentes catalizadores. En presencia de un campo ligando, la degeneración de los orbitales  $d$  se rompe. Las transiciones electrónicas  $d-d$  entre estos niveles absorben fotones en el espectro visible, generando compuestos coloreados. El llenado de orbitales  $d$ , a menudo deja electrones desapareados. La interacción de intercambio entre estos espines puede alinear sus momentos magnéticos, dando lugar al ferromagnetismo (Fe, Co, Ni).

### 2.3. Lantánidos y Actínidos

**Ubicación.** Bloque  $f$ , las dos filas inferiores.

Se caracterizan por el llenado de los orbitales  $4f$  (lantánidos) y  $5f$  (actínidos). Los orbitales  $4f$  están espacialmente contraídos y apantallados por las capas externas ( $5s^2$ ,  $5p^6$ ), por lo que participan poco en el enlace químico. Esto provoca que todos los lantánidos tengan propiedades químicas muy similares. Su configuración  $f$  les confiere propiedades magnéticas y ópticas únicas. Los actínidos son todos radiactivos debido a la inestabilidad nuclear de sus isótopos.

### 2.4. Metaloides y No Metales

**Ubicación.** Región derecha de la tabla, separados por una línea diagonal.

Los metaloides (Si, Ge) son semiconductores. Su estructura de bandas presenta una brecha energética ( $E_g$ ) pequeña, lo que permite controlar su conductividad mediante dopaje (introducción de impurezas) para crear portadores de carga (electrones o huecos). Los no metales (C, N, O, S) tienen altas energías de ionización y afinidades electrónicas; forman enlaces covalentes fuertes y direccionales. El Carbono (C) es excepcional por su capacidad de hibridación ( $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$ ), base de la química orgánica y de alótropos como el diamante y el grafeno.

### 2.5. Halógenos y Gases Nobles

**Ubicación.** Grupos 17 y 18, extremo derecho de la tabla.

**Halógenos:** Configuración de valencia  $ns^2np^5$ . Les falta un electrón para alcanzar una capa llena, lo que se traduce en una afinidad electrónica muy alta. Son los elementos más electronegativos y reactivos.

**Gases Nobles:** Configuración  $ns^2np^6$ . Esta capa de valencia cerrada es una configuración de mínima energía, lo que les confiere una excepcional estabilidad e inercia química.

## 3. Actividad 03 – Enlaces Atómicos II

**Problema 3.1** (Propiedades según tipo de Enlace). ¿Qué propiedades fisicoquímicas se originan en cada tipo de enlace atómico y cuáles son direccionales?

### 3.1. Enlace Covalente (Direccional)

Este enlace se origina en la interacción de intercambio, un efecto puramente cuántico que disminuye la energía de un sistema de electrones cuando sus funciones de onda se solapan constructivamente. Es altamente direccional porque la maximización de este solapamiento, y por ende la minimización de la energía, depende críticamente de la geometría y orientación de los orbitales atómicos de valencia ( $s$ ,  $p$ ,  $d$ ,  $f$ ). La hibridación de orbitales, como la  $sp^3$  en el carbono, genera orbitales orientados en ángulos específicos (e.g.,  $109,5^\circ$  en una geometría tetraédrica), fijando la estructura molecular y cristalina.



### Propiedades Fisicoquímicas.

- **Mecánicas:** Si los enlaces forman una red tridimensional (e.g., diamante,  $\text{SiO}_2$ ), el material es extremadamente duro, con un módulo de compresibilidad elevado. La energía para deformar el cristal es la energía necesaria para distorsionar estos fuertes enlaces localizados.
- **Electrónicas:** Generalmente son aislantes o semiconductores. En el lenguaje de la teoría de bandas, los orbitales moleculares enlazantes forman una banda de valencia llena, mientras que los antienlazantes forman una banda de conducción vacía. La fuerte localización de los electrones crea una gran brecha de energía ( $E_g$ ) entre ambas, impidiendo la conductividad.
- **Solubilidad:** Suelen ser insolubles en disolventes polares. Es energéticamente desfavorable romper los fuertes enlaces de hidrógeno de un solvente como el agua para solvatar una molécula que solo puede interactuar mediante débiles fuerzas de van der Waals.

### 3.2. Enlace Iónico (No Direccional)

Se produce por la transferencia de electrones, creando cationes y aniones que interactúan mediante la fuerza de Coulomb. Esta fuerza es central e isotrópica ( $F \propto r^{-2}$ ), por lo que es no direccional. Un ion atrae a todos los iones de carga opuesta en su vecindad con igual intensidad. La estructura cristalina resultante es aquella que maximiza el empaquetamiento y la energía de cohesión.

### Propiedades Fisicoquímicas.

- **Mecánicas:** Son duros pero frágiles. La dureza proviene de la fuerte atracción electrostática. La fragilidad se debe a que un deslizamiento de planos atómicos (movimiento de una dislocación) enfrentaría iones de la misma carga, generando una repulsión que fractura el cristal.
- **Eléctricas:** Son aislantes en estado sólido, pues los iones están fijos en la red. Sin embargo, en estado fundido o en disolución, los iones ganan movilidad y se convierten en excelentes conductores iónicos.
- **Térmicas:** Poseen puntos de fusión muy elevados, ya que se requiere una gran energía térmica para superar la energía de red del cristal.

### 3.3. Enlace Metálico (No Direccional)

Se describe como una red de cationes inmersa en un “gas” o “mar” de electrones de valencia deslocalizados. Cuánticamente, los electrones de valencia ocupan estados deslocalizados (ondas de Bloch) que se extienden por todo el cristal. La atracción entre el gas de electrones (negativo) y los núcleos iónicos (positivos) es de naturaleza electrostática y, por tanto, no direccional.

### Propiedades Fisicoquímicas.

- **Conductividad:** Excelente conductividad eléctrica y térmica. Los electrones en estados cercanos a la energía de Fermi son libres de acelerarse en un campo eléctrico. Estos mismos electrones móviles son portadores muy eficientes de energía térmica, una correlación descrita por la Ley de Wiedemann-Franz.
- **Mecánicas:** Son dúctiles y maleables. La naturaleza deslocalizada y no direccional del enlace permite que los planos atómicos se deslicen unos sobre otros sin que se rompa la cohesión del material. El “mar” de electrones se adapta a la nueva configuración.

- **Ópticas:** Son opacos y lustrosos. El gas de electrones libres se comporta como un plasma. Por debajo de una frecuencia característica (la frecuencia de plasma,  $\omega_p$ ), la luz es eficientemente reflejada. Por encima de  $\omega_p$  (en el UV para muchos metales), se vuelven transparentes.

### 3.4. Enlaces Secundarios (Intermoleculares)

#### 3.4.1. Enlace por Puente de Hidrógeno (Direccional)

Es una interacción fuerte que ocurre cuando un H unido a un átomo muy electronegativo (N, O, F; el “donador”) es atraído por otro átomo electronegativo (el “aceptor”). Es altamente direccional porque no es puramente electrostático; posee un carácter covalente parcial, modelado como una interacción entre el par solitario del aceptor y el orbital antienlazante  $\sigma^*$  del enlace donador-H. La fuerza es máxima con una alineación donador-H-aceptor de  $\approx 180^\circ$ .

#### Propiedades Fisicoquímicas.

- **Térmicas:** Causa un aumento anómalo en los puntos de ebullición. La energía extra para romper estos enlaces explica por qué el  $\text{H}_2\text{O}$  (P.E.  $100^\circ\text{C}$ ) es líquido, mientras que el  $\text{H}_2\text{S}$  (P.E.  $-60^\circ\text{C}$ ) es un gas.
- **Estructurales:** Define la doble hélice del ADN y las estructuras secundarias de proteínas. En el hielo (fase Ih), fuerza una estructura hexagonal abierta que es menos densa que el agua líquida.

#### 3.4.2. Interacciones de Van der Waals (No Direccionales)

Son fuerzas universales pero débiles, originadas por correlaciones en las fluctuaciones de las nubes electrónicas. Se componen de:

1. Interacciones dipolo-dipolo (Keesom).
2. Interacciones dipolo-dipolo inducido (Debye).
3. Interacciones dipolo inducido-dipolo inducido (dispersión de London), que son dominantes y de origen cuántico ( $U \propto -r^{-6}$ ).

Aunque algunas componentes tienen dependencia angular, en fases condensadas se promedian, resultando en una cohesión no direccional que favorece el empaquetamiento denso.

#### Propiedades Fisicoquímicas.

- **Térmicas:** Los sólidos moleculares (yodo, hielo seco) tienen puntos de fusión y ebullición muy bajos, ya que la energía térmica ( $k_B T$ ) supera fácilmente estas débiles interacciones.
- **Mecánicas:** Son materiales blandos y compresibles, con baja resistencia mecánica.

**Problema 3.2** (Grafito y Diamante). El grafito es buen conductor eléctrico (solo en el plano de sus láminas), mientras que el diamante es un aislante. Explique esta diferencia en función de sus enlaces covalentes y la estructura electrónica.

La abismal diferencia en la conductividad eléctrica entre estos dos alótropos del carbono es una manifestación directa de sus distintas estructuras de bandas electrónicas, que a su vez son consecuencia de la hibridación de los orbitales de valencia.

### 3.5. Diamante: Aislante de Banda Prohibida Ancha ( $sp^3$ )

En la estructura del diamante, cada átomo de carbono presenta una hibridación  $sp^3$ , formando cuatro orbitales híbridos idénticos orientados tetraédricamente ( $109,5^\circ$ ). Cada uno de estos orbitales forma un enlace covalente simple (enlace  $\sigma$ ) con un átomo vecino, creando una red tridimensional rígida y continua.

Desde la perspectiva de la física del estado sólido, la totalidad de los cuatro electrones de valencia de cada átomo está fuertemente localizada en estos enlaces  $\sigma$ . Estos estados electrónicos enlazantes constituyen la banda de valencia, la cual está completamente llena. Los estados antienlazantes ( $\sigma^*$ ) forman la banda de conducción, que está completamente vacía.

La clave es que entre ambas bandas existe una brecha de energía prohibida (band gap,  $E_g$ ) muy grande, del orden de 5,5 eV. A temperatura ambiente, la energía térmica disponible ( $k_B T \approx 0,025$  eV) es insignificante en comparación con  $E_g$ , por lo que es prácticamente imposible excitar un electrón de la banda de valencia a la de conducción. Sin portadores de carga móviles, el diamante es uno de los mejores aislantes eléctricos conocidos.

### 3.6. Grafito: Semimetal Anisotrópico ( $sp^2$ )

En el grafito, cada átomo de carbono utiliza una hibridación  $sp^2$ , formando tres enlaces  $\sigma$  con sus vecinos en un plano, lo que da lugar a una estructura de láminas hexagonales. El cuarto electrón de valencia reside en un orbital  $p$  no hibridado ( $p_z$ ), perpendicular a dicho plano.

Los orbitales  $p_z$  de todos los átomos en una lámina se solapan lateralmente, formando bandas  $\pi$  (enlazante) y  $\pi^*$  (antienlazante) deslocalizadas a lo largo de todo el plano bidimensional. Aquí reside la diferencia fundamental con el diamante: en el grafito, la banda  $\pi$  (de valencia) y la banda  $\pi^*$  (de conducción) no están separadas por una brecha de energía. De hecho, se tocan en puntos específicos (los puntos de Dirac) de la zona de Brillouin hexagonal.

Esto significa que la energía de Fermi ( $E_F$ ) se encuentra precisamente en la energía donde estas bandas se degeneran. El material no tiene brecha energética ( $E_g = 0$ ), lo que lo clasifica como un semimetal. Con una densidad de estados finita en la energía de Fermi, una cantidad infinitesimal de energía es suficiente para excitar electrones a estados conductores. Estos electrones deslocalizados en el sistema  $\pi$  se mueven libremente a lo largo de las láminas, otorgando al grafito una alta conductividad eléctrica en el plano.

Entre las láminas, la unión se debe a débiles fuerzas de Van der Waals, lo que resulta en un muy mal solapamiento de las funciones de onda en la dirección perpendicular. Esto impide el movimiento de electrones entre capas, haciendo que el grafito sea un aislante en esa dirección y, por tanto, un material con una alta anisotropía en su conductividad eléctrica.

**Problema 3.3** (Potencial Lennard-Jones). Interprete el gráfico del Potencial Lennard-Jones presentado en la figura 3.

El potencial de Lennard-Jones es un modelo fenomenológico fundamental en la física de la materia condensada. Describe la energía potencial de interacción  $V(r)$  entre un par de átomos o moléculas neutras y esféricamente simétricas en función de su separación  $r$ . Su forma funcional captura la física esencial de las interacciones no enlazantes y sirve como pilar en la simulación de dinámica molecular.

La expresión matemática del potencial es:

$$V(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

donde  $\epsilon$  es la profundidad del pozo de potencial y  $\sigma$  es la distancia a la cual el potencial es nulo.

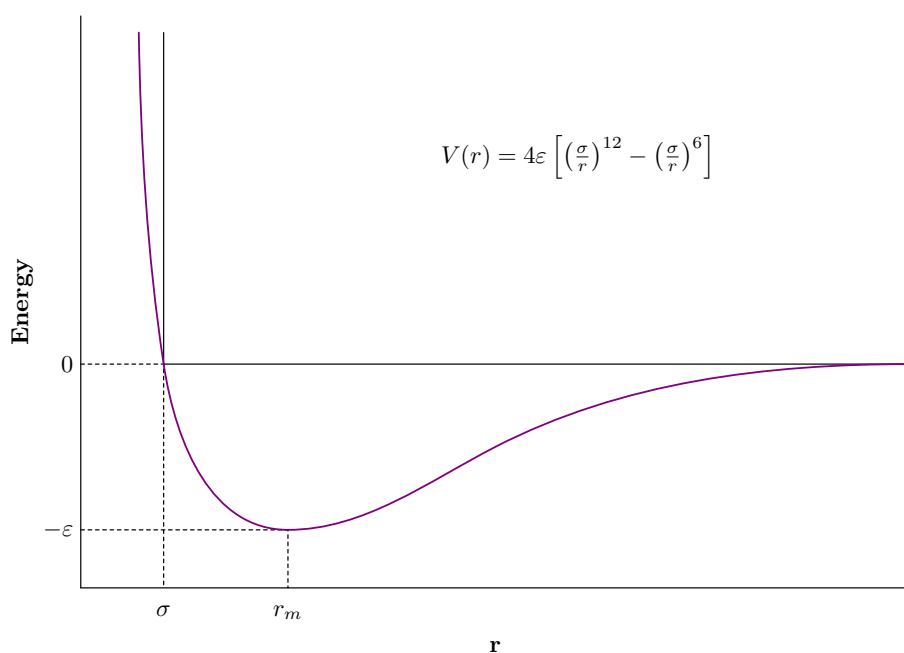


Figura 3: Potencial Lennard-Jones.

### 3.7. Interpretación de los Términos Físicos

El potencial se compone de dos términos que representan un balance entre atracción y repulsión.

**Término Atractivo ( $-\sigma^6 r^{-6}$ ).** Dominante a distancias intermedias y largas. Este término modela la fuerza de dispersión de London, una interacción de van der Waals de origen puramente cuántico. Surge de las correlaciones entre fluctuaciones cuánticas en la distribución de carga de los átomos. Un dipolo instantáneo en un átomo induce un dipolo en el vecino, y la interacción entre estos dipolos fluctuantes resulta en una atracción. La dependencia  $r^{-6}$  es el término de orden más bajo derivado de la teoría de perturbaciones de segundo orden para la interacción dipolo-dipolo en el régimen no retardado.

**Término Repulsivo ( $+\sigma^{12} r^{-12}$ ).** Dominante a distancias muy cortas ( $r \ll \sigma$ ). Este término representa la repulsión de Pauli. Cuando las nubes electrónicas de dos átomos comienzan a solaparse, el Principio de Exclusión de Pauli obliga a los electrones a ocupar orbitales de mayor energía (antienlazantes), resultando en un drástico aumento de la energía total. La elección del exponente 12, aunque físicamente menos rigurosa que un potencial exponencial (tipo Buckingham), es una aproximación matemáticamente conveniente que modela una “pared” de potencial extremadamente abrupta.

### 3.8. Análisis de la Gráfica y sus Parámetros

**Comportamiento Asintótico.** Para  $r \rightarrow \infty$ ,  $V(r) \rightarrow 0$ , lo que refleja correctamente la ausencia de interacción a grandes distancias.

**Punto de Cruce ( $r = \sigma$ ).** A esta distancia,  $V(\sigma) = 4\epsilon[1 - 1] = 0$ . El parámetro  $\sigma$  se interpreta como el diámetro de colisión efectivo de las partículas. Para  $r < \sigma$ , la interacción es repulsiva

( $V > 0$ ), y para  $r > \sigma$ , es atractiva ( $V < 0$ ).

**Mínimo del Potencial y Distancia de Equilibrio.** La posición de equilibrio,  $r_m$ , corresponde al mínimo de  $V(r)$ , donde la fuerza neta es nula,  $F(r_m) = -D_r V|_{r_m} = 0$ . Derivando el potencial e igualando a cero:

$$D_r V = 4\epsilon \left[ -12\sigma^{12}r^{-13} + 6\sigma^6r^{-7} \right] = 0 \implies 2\sigma^6 = r_m^6$$

se obtiene  $r_m = 2^{1/6}\sigma \approx 1,122\sigma$ . Esta es la distancia de separación más estable.

**Profundidad del Pozo ( $-\epsilon$ ).** El valor del potencial en el mínimo es  $V(r_m) = -\epsilon$ . Este valor representa la energía de cohesión o la energía de enlace del par. Es la energía requerida para separar las dos partículas desde su posición de equilibrio hasta el infinito.

**Vibraciones y Estabilidad.** Cerca del mínimo, el potencial puede aproximarse por una parábola (desarrollo de Taylor de segundo orden), análogo a un oscilador armónico. La “constante de resorte” efectiva del enlace,  $k$ , está dada por la curvatura del potencial en el mínimo:  $k = D_r^2 V|_{r_m}$ . Esta curvatura determina la frecuencia de vibración de las partículas alrededor de su posición de equilibrio.

## Referencias

- [1] Michael F. Ashby. *Materials selection in mechanical design*. 4th ed. Burlington, MA: Butterworth-Heinemann, 2011. ISBN: 978-1-85617-663-7.
- [2] Neil W. Ashcroft y N. David Mermin. *Solid state physics*. Fort Worth Philadelphia San Diego [etc.]: Saunders college publ, 1976. ISBN: 978-0-03-083993-1.
- [3] D.R. Askeland y W.J. Wright. *The Science and Engineering of Materials, Enhanced, SI Edition*. Cengage Learning, 2015. ISBN: 978-1-305-44633-5. URL: <https://books.google.com.co/books?id=vTFBBAAQBAJ>.
- [4] Wikimedia Commons. *File:Periodic table large.svg* — *Wikimedia Commons, the free media repository*. 2025. URL: [https://commons.wikimedia.org/w/index.php?title=File:Periodic\\_table\\_large.svg&oldid=1065922829%7D](https://commons.wikimedia.org/w/index.php?title=File:Periodic_table_large.svg&oldid=1065922829%7D).
- [5] Robert T. DeHoff. *Thermodynamics in materials science*. 2. ed. Boca Raton, Fla.: Taylor & Francis, 2006. 605 págs. ISBN: 978-0-8493-4065-9.
- [6] P. A. M. Dirac. *The principles of quantum mechanics*. 4. ed. (rev.), repr. International series of monographs on physics 27. Oxford: Clarendon Press, Oxford University Press, 2010. 314 págs. ISBN: 978-0-19-852011-5.
- [7] D.R. Gaskell. *Introduction to the Thermodynamics of Materials, Fifth Edition*. CRC Press, 2008. ISBN: 978-0-203-42849-8. URL: <https://books.google.com.co/books?id=3xfgBQAAQBAJ>.
- [8] Charles Kittel. *Introduction to solid state physics*. 8. ed., [repr.] Hoboken, NJ: Wiley. 680 págs. ISBN: 978-0-471-41526-8.
- [9] Michael P. Marder. *Condensed Matter Physics*. 1.<sup>a</sup> ed. Wiley, 25 de oct. de 2010. ISBN: 978-0-470-61798-4 978-0-470-94995-5. DOI: [10.1002/9780470949955](https://doi.org/10.1002/9780470949955). URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/9780470949955>.

- [10] Ganpathy Murthy y R. Shankar. «Hamiltonian theories of the fractional quantum Hall effect». En: *Reviews of Modern Physics* 75.4 (3 de oct. de 2003), págs. 1101-1158. ISSN: 0034-6861, 1539-0756. DOI: [10.1103/RevModPhys.75.1101](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.75.1101). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.75.1101>.
- [11] W. Pauli. «On the Connection between Spin and Statistics». En: *Progress of Theoretical Physics* 5.4 (1 de jul. de 1950), págs. 526-543. ISSN: 0033-068X, 1347-4081. DOI: [10.1143/ptp/5.4.526](https://doi.org/10.1143/ptp/5.4.526). URL: <https://academic.oup.com/ptp/article-lookup/doi/10.1143/ptp/5.4.526>.
- [12] Wolfgang Pauli. *General Principles of Quantum Mechanics*. Col. de P. Achuthan y K. Venkatesan. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin / Heidelberg, 1980. ISBN: 978-3-540-09842-3.
- [13] F.N. Rhines. *Phase Diagrams in Metallurgy: Their Development and Application*. McGraw-Hill series in material science and engineering. McGraw-Hill, 1956. ISBN: 978-0-07-052070-7. URL: <https://books.google.com.co/books?id=IJNTAAAAMAAJ>.
- [14] Julian Schwinger. «The Theory of Quantized Fields. I». En: *Physical Review* 82.6 (15 de jun. de 1951), págs. 914-927. ISSN: 0031-899X. DOI: [10.1103/PhysRev.82.914](https://doi.org/10.1103/PhysRev.82.914). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.82.914>.
- [15] James F. Shackelford. *Introduction to materials science for engineers*. Always learning. Boston Munich: Pearson, 2016. ISBN: 978-0-273-79340-3.
- [16] Saul Tapia y J. Antonio del Rio. *One temperature model for effective ovens*. Version Number: 1. 2011. DOI: [10.48550/ARXIV.1109.0664](https://doi.org/10.48550/ARXIV.1109.0664). URL: <https://arxiv.org/abs/1109.0664>.