

VOLI

Ramon González Calvet  
(Organizador)

PESQUISA  
E DOCENCIA  
EM  
CIENCIAS  
EXATAS  
E NATURAIS



EDITORA  
ARTEMIS  
2026

VOLI

Ramon González Calvet  
(Organizador)

PESQUISA  
E DOCENCIA  
EM  
CIENCIAS  
EXATAS  
E NATURAIS



EDITORA  
ARTEMIS

2026

2026 by Editora Artemis  
Copyright © Editora Artemis  
Copyright do Texto © 2026 Os autores  
Copyright da Edição © 2026 Editora Artemis



O conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição Creative Commons Atribuição-Não-Comercial Não-Derivativos 4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0). Direitos para esta edição cedidos à Editora Artemis pelos autores.

Permitido o download da obra e o compartilhamento, desde que sejam atribuídos créditos aos autores, e sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

A responsabilidade pelo conteúdo dos artigos e seus dados, em sua forma, correção e confiabilidade é exclusiva dos autores. A Editora Artemis, em seu compromisso de manter e aperfeiçoar a qualidade e confiabilidade dos trabalhos que publica, **conduz a avaliação cega pelos pares de todos manuscritos publicados, com base em critérios de neutralidade e imparcialidade acadêmica.**

<b>Editores</b>	Antonella Carvalho de Oliveira
<b>Editora Executiva</b>	M. <sup>a</sup> Viviane Carvalho Mocellin
<b>Direção de Arte</b>	M. <sup>a</sup> Bruna Bejarano
<b>Diagramação</b>	Elisangela Abreu
<b>Organizador</b>	Prof. Dr. Ramon González Calvet
<b>Imagem da Capa</b>	sharuzzaman/123RF
<b>Bibliotecário</b>	Maurício Amormino Júnior – CRB6/2422

#### Conselho Editorial

Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Ada Esther Portero Ricol, *Universidad Tecnológica de La Habana “José Antonio Echeverría”*, Cuba  
Prof. Dr. Adalberto de Paula Paranhos, Universidade Federal de Uberlândia, Brasil  
Prof. Dr. Agustín Olmos Cruz, *Universidad Autónoma del Estado de México*, México  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Amanda Ramalho de Freitas Brito, Universidade Federal da Paraíba, Brasil  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Ana Clara Monteverde, *Universidad de Buenos Aires*, Argentina  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Ana Júlia Viamonte, Instituto Superior de Engenharia do Porto (ISEP), Portugal  
Prof. Dr. Ángel Mujica Sánchez, *Universidad Nacional del Altiplano*, Peru  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Angela Ester Mallmann Centenaro, Universidade do Estado de Mato Grosso, Brasil  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Begoña Blandón González, *Universidad de Sevilla*, Espanha  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Carmen Pimentel, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Brasil  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Catarina Castro, Universidade Nova de Lisboa, Portugal  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Cirila Cervera Delgado, *Universidad de Guanajuato*, México  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Cláudia Neves, Universidade Aberta de Portugal  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Cláudia Padovesi Fonseca, Universidade de Brasília-DF, Brasil  
Prof. Dr. Cleberton Correia Santos, Universidade Federal da Grande Dourados, Brasil  
Dr. Cristo Ernesto Yáñez León – New Jersey Institute of Technology, Newark, NJ, Estados Unidos



Prof. Dr. David García-Martul, *Universidad Rey Juan Carlos de Madrid*, Espanha  
Prof.ª Dr.ª Deuzimar Costa Serra, *Universidade Estadual do Maranhão*, Brasil  
Prof.ª Dr.ª Dina Maria Martins Ferreira, *Universidade Estadual do Ceará*, Brasil  
Prof.ª Dr.ª Edith Luévano-Hipólito, *Universidad Autónoma de Nuevo León*, México  
Prof.ª Dr.ª Eduarda Maria Rocha Teles de Castro Coelho, *Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro*, Portugal  
Prof. Dr. Eduardo Eugênio Spers, *Universidade de São Paulo (USP)*, Brasil  
Prof. Dr. Eloi Martins Senhoras, *Universidade Federal de Roraima*, Brasil  
Prof.ª Dr.ª Elvira Laura Hernández Carballido, *Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo*, México  
Prof.ª Dr.ª Emilias Darlene Carmen Lebus, *Universidad Nacional del Nordeste*, Argentina  
Prof.ª Dr.ª Erla Mariela Morales Morgado, *Universidad de Salamanca*, Espanha  
Prof. Dr. Ernesto Cristina, *Universidad de la República*, Uruguay  
Prof. Dr. Ernesto Ramírez-Briones, *Universidad de Guadalajara*, México  
Prof. Dr. Fernando Hitt, *Université du Québec à Montréal*, Canadá  
Prof. Dr. Gabriel Díaz Cobos, *Universitat de Barcelona*, Espanha  
Prof.ª Dr.ª Gabriela Gonçalves, *Instituto Superior de Engenharia do Porto (ISEP)*, Portugal  
Prof.ª Dr.ª Galina Gumovskaya – *Higher School of Economics*, Moscow, Russia  
Prof. Dr. Geoffroy Roger Pointer Malpass, *Universidade Federal do Triângulo Mineiro*, Brasil  
Prof.ª Dr.ª Gladys Esther Leoz, *Universidad Nacional de San Luis*, Argentina  
Prof.ª Dr.ª Glória Beatriz Álvarez, *Universidad de Buenos Aires*, Argentina  
Prof. Dr. Gonçalo Poeta Fernandes, *Instituto Politécnico da Guarda*, Portugal  
Prof. Dr. Gustavo Adolfo Juarez, *Universidad Nacional de Catamarca*, Argentina  
Prof. Dr. Guillermo Julián González-Pérez, *Universidad de Guadalajara*, México  
Prof. Dr. Håkan Karlsson, *University of Gothenburg*, Suécia  
Prof.ª Dr.ª Lara Lúcia Tescarollo Dias, *Universidade São Francisco*, Brasil  
Prof.ª Dr.ª Isabel del Rosario Chiyon Carrasco, *Universidad de Piura*, Peru  
Prof.ª Dr.ª Isabel Yohena, *Universidad de Buenos Aires*, Argentina  
Prof. Dr. Ivan Amaro, *Universidade do Estado do Rio de Janeiro*, Brasil  
Prof. Dr. Iván Ramon Sánchez Soto, *Universidad del Bío-Bío*, Chile  
Prof.ª Dr.ª Ivânia Maria Carneiro Vieira, *Universidade Federal do Amazonas*, Brasil  
Prof. Me. Javier Antonio Albornoz, *University of Miami and Miami Dade College*, Estados Unidos  
Prof. Dr. Jesús Montero Martínez, *Universidad de Castilla - La Mancha*, Espanha  
Prof. Dr. João Manuel Pereira Ramalho Serrano, *Universidade de Évora*, Portugal  
Prof. Dr. Joaquim Júlio Almeida Júnior, *UNIFIMES - Centro Universitário de Mineiros*, Brasil  
Prof. Dr. Jorge Ernesto Bartolucci, *Universidad Nacional Autónoma de México*, México  
Prof. Dr. José Cortez Godinez, *Universidad Autónoma de Baja California*, México  
Prof. Dr. Juan Carlos Cancino Diaz, *Instituto Politécnico Nacional*, México  
Prof. Dr. Juan Carlos Mosquera Feijoo, *Universidad Politécnica de Madrid*, Espanha  
Prof. Dr. Juan Diego Parra Valencia, *Instituto Tecnológico Metropolitano de Medellín*, Colômbia  
Prof. Dr. Juan Manuel Sánchez-Yáñez, *Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo*, México  
Prof. Dr. Juan Porras Pulido, *Universidad Nacional Autónoma de México*, México



Prof. Dr. Júlio César Ribeiro, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Brasil  
Prof. Dr. Leiníg Antonio Perazolli, Universidade Estadual Paulista (UNESP), Brasil  
Prof.ª Dr.ª Livia do Carmo, Universidade Federal de Goiás, Brasil  
Prof.ª Dr.ª Luciane Spanhol Bordignon, Universidade de Passo Fundo, Brasil  
Prof. Dr. Luis Fernando González Beltrán, *Universidad Nacional Autónoma de México*, México  
Prof. Dr. Luis Vicente Amador Muñoz, *Universidad Pablo de Olavide*, Espanha  
Prof.ª Dr.ª Macarena Esteban Ibáñez, *Universidad Pablo de Olavide*, Espanha  
Prof. Dr. Manuel Ramiro Rodriguez, *Universidad Santiago de Compostela*, Espanha  
Prof. Dr. Manuel Simões, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Portugal  
Prof.ª Dr.ª Márcia de Souza Luz Freitas, Universidade Federal de Itajubá, Brasil  
Prof. Dr. Marcos Augusto de Lima Nobre, Universidade Estadual Paulista (UNESP), Brasil  
Prof. Dr. Marcos Vinicius Meiado, Universidade Federal de Sergipe, Brasil  
Prof.ª Dr.ª Mar Garrido Román, *Universidad de Granada*, Espanha  
Prof.ª Dr.ª Margarida Márcia Fernandes Lima, Universidade Federal de Ouro Preto, Brasil  
Prof.ª Dr.ª María Alejandra Arecco, *Universidad de Buenos Aires*, Argentina  
Prof.ª Dr.ª Maria Aparecida José de Oliveira, Universidade Federal da Bahia, Brasil  
Prof.ª Dr.ª Maria Carmen Pastor, *Universitat Jaume I*, Espanha  
Prof.ª Dr.ª Maria da Luz Vale Dias – Universidade de Coimbra, Portugal  
Prof.ª Dr.ª Maria do Céu Caetano, Universidade Nova de Lisboa, Portugal  
Prof.ª Dr.ª Maria do Socorro Saraiva Pinheiro, Universidade Federal do Maranhão, Brasil  
Prof.ª Dr.ª MªGraça Pereira, Universidade do Minho, Portugal  
Prof.ª Dr.ª Maria Gracinda Carvalho Teixeira, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Brasil  
Prof.ª Dr.ª María Guadalupe Vega-López, *Universidad de Guadalajara*, México  
Prof.ª Dr.ª Maria Lúcia Pato, Instituto Politécnico de Viseu, Portugal  
Prof.ª Dr.ª Maritza González Moreno, *Universidad Tecnológica de La Habana*, Cuba  
Prof.ª Dr.ª Mauriceia Silva de Paula Vieira, Universidade Federal de Lavras, Brasil  
Prof. Dr. Melchor Gómez Pérez, Universidad del Pais Vasco, Espanha  
Prof.ª Dr.ª Ninfa María Rosas-García, Centro de Biotecnología Genómica-Instituto Politécnico Nacional, México  
Prof.ª Dr.ª Odara Horta Boscolo, Universidade Federal Fluminense, Brasil  
Prof. Dr. Osbaldo Turpo-Gebera, *Universidad Nacional de San Agustín de Arequipa*, Peru  
Prof.ª Dr.ª Patrícia Vasconcelos Almeida, Universidade Federal de Lavras, Brasil  
Prof.ª Dr.ª Paula Arcoverde Cavalcanti, Universidade do Estado da Bahia, Brasil  
Prof. Dr. Rodrigo Marques de Almeida Guerra, Universidade Federal do Pará, Brasil  
Prof. Dr. Saulo Cerqueira de Aguiar Soares, Universidade Federal do Piauí, Brasil  
Prof. Dr. Sergio Bitencourt Araújo Barros, Universidade Federal do Piauí, Brasil  
Prof. Dr. Sérgio Luiz do Amaral Moretti, Universidade Federal de Uberlândia, Brasil  
Prof.ª Dr.ª Silvia Inés del Valle Navarro, *Universidad Nacional de Catamarca*, Argentina  
Prof.ª Dr.ª Solange Kazumi Sakata, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN)- USP, Brasil  
Prof.ª Dr.ª Stanislava Kashtanova, *Saint Petersburg State University*, Russia  
Prof.ª Dr.ª Susana Álvarez Otero – Universidad de Oviedo, Espanha

Prof.ª Dr.ª Teresa Cardoso, Universidade Aberta de Portugal

Prof.ª Dr.ª Teresa Monteiro Seixas, Universidade do Porto, Portugal

Prof. Dr. Valter Machado da Fonseca, Universidade Federal de Viçosa, Brasil

Prof.ª Dr.ª Vanessa Bordin Viera, Universidade Federal de Campina Grande, Brasil

Prof.ª Dr.ª Vera Lúcia Vasilévski dos Santos Araújo, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Brasil

Prof. Dr. Wilson Noé Garcés Aguilar, *Corporación Universitaria Autónoma del Cauca*, Colômbia

Prof. Dr. Xosé Somoza Medina, *Universidad de León*, Espanha

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)  
(eDOC BRASIL, Belo Horizonte/MG)**

P475 Pesquisa e docência em ciências exatas e naturais [livro eletrônico] / Organizador Ramon González Calvet. – 1. ed. – Curitiba, PR: Editora Artemis, 2026.

Formato: PDF

Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader

Modo de acesso: World Wide Web

Edição bilíngue

Inclui bibliografia.

ISBN 978-65-82858-10-9

DOI 10.37572/EdArt\_270626109

1. Ciências exatas. 2. Ciências naturais. 3. Pesquisa científica. 4. Docência. I. González Calvet, Ramon.

CDD 500

**Elaborado por Maurício Amormino Júnior – CRB6/2422**



## PRÓLOGO

La producción del conocimiento científico y educativo en el campo de las ciencias exactas y naturales se caracteriza, cada vez más, por su capacidad de articular fundamentos teóricos, desarrollos tecnológicos, prácticas formativas y compromisos sociales. En este contexto, el primer volumen de ***Pesquisa e Docência em Ciências Exatas e Naturais*** reúne un conjunto plural de trabajos que evidencian la vitalidad de la investigación contemporánea y la importancia de repensar la docencia como espacio de construcción, mediación y circulación del saber.

Los capítulos que integran esta obra permiten percibir la amplitud de un campo que no se limita a la transmisión de contenidos de disciplinas científicas, sino que se abre a problemas complejos, metodologías diversas y experiencias docentes. La investigación matemática, físico-química y computacional convive aquí con la ingeniería aplicada, la inteligencia artificial, la ética profesional, la educación matemática, la enseñanza de las ciencias, la formación superior y la preservación del conocimiento paleontológico. Esta diversidad temática refleja una visión amplia de las ciencias exactas y naturales, entendidas no solo como áreas de formulación abstracta y experimentación técnica, sino también como prácticas humanas, educativas e institucionales.

El volumen se inicia con trabajos dedicados a la modelización matemática, físico-química y al estudio de sistemas complejos. En este primer conjunto, se abordan problemas relacionados con operadores diferenciales, semigrupos de contracciones, isothermas de adsorción, gases reales, potenciales de Lennard-Jones y Morse, nanoestructuras y configuraciones de mínimo potencial. Estos capítulos destacan la importancia de la modelización, la abstracción y la simulación en la comprensión de fenómenos naturales y materiales.

En un segundo momento, la obra se orienta hacia las tecnologías aplicadas, la ingeniería y los medios digitales en la formación científica. Los trabajos reunidos en esta parte muestran cómo el desarrollo tecnológico puede contribuir tanto a la creación de dispositivos y soluciones aplicadas como a la transformación de los procesos formativos. La presencia de estudios sobre electroestimulación, generación de gráficos vectoriales mediante reconocimiento de voz, aprendizaje profundo e inteligencia artificial en contextos universitarios evidencia la necesidad de repensar la innovación técnica junto con sus implicaciones educativas, epistemológicas y profesionales.

La tercera parte concentra investigaciones orientadas a la docencia, el aprendizaje y la equidad en contextos educativos diversos. Los capítulos analizan cuestiones vinculadas a la ética en ingeniería, a la inclusión en educación matemática,

al liderazgo y desempeño docente, a las actitudes hacia la estadística, al aprendizaje basado en proyectos, a la relación entre sueño y aprendizaje, y a la calidad educativa en la formación superior en odontología. En conjunto, estos trabajos subrayan que enseñar ciencias y matemáticas exige mucho más que dominio de la disciplina: requiere sensibilidad pedagógica, reflexión institucional, innovación metodológica y atención a las condiciones reales de aprendizaje de los estudiantes.

Finalmente, el volumen se cierra con una contribución singular dedicada a las ciencias naturales, los acervos fósiles y la preservación del conocimiento paleontológico. A partir de una trayectoria de décadas en la prospección, colección y exhibición de fósiles, este capítulo invita a reflexionar sobre la colaboración entre iniciativas privadas, museos, universidades e instituciones científicas. Su presencia al final de la obra ofrece un cierre significativo, al recordar que la ciencia también depende de la conservación, documentación y accesibilidad de los materiales que permiten reconstruir la historia natural.

De este modo, ***Pesquisa e Docência em Ciências Exatas e Naturais*** propone una lectura que avanza desde los fundamentos científicos y matemáticos hacia las aplicaciones tecnológicas, los medios digitales, los desafíos de la enseñanza y la preservación del patrimonio natural. La obra evidencia que investigar y enseñar están profundamente interrelacionadas: toda investigación produce nuevas preguntas para la formación, y toda práctica docente comprometida puede convertirse en espacio de investigación, innovación y transformación. De hecho, solo se puede enseñar bien a los estudiantes aquel conocimiento que los investigadores antes comprendieron bien.

Esperamos que este volumen contribuya al diálogo entre investigadores, docentes, estudiantes y profesionales interesados en las ciencias exactas y naturales, fortaleciendo una perspectiva integradora, crítica y colaborativa del conocimiento. Que los trabajos aquí reunidos sirvan como punto de partida para nuevas investigaciones, nuevas prácticas pedagógicas y nuevas formas de aproximarse a los desafíos científicos y educativos de nuestro tiempo.

**Ramon González Calvet**

## SUMARIO

### MODELACIÓN MATEMÁTICA, FÍSICO-QUÍMICA Y ESTRUCTURAS EN SISTEMAS COMPLEJOS

#### **CAPÍTULO 1.....1**

CONTRAST WITH THE HILLE-YOSIDA'S THEOREM AND THE CONTRACTION SEMIGROUP FOR AN ODD-ORDER DIFFERENTIAL OPERATOR

Yolanda Silvia Santiago Ayala

 [https://doi.org/10.37572/EdArt\\_2706261091](https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261091)

#### **CAPÍTULO 2.....17**

ISOTERMA DE ADSORCIÓN DEDUCIDA DEL MODELO DEL BILLAR Y ECUACIÓN DE ESTADO APLICADA A LOS GASES REALES

Ramon González Calvet

 [https://doi.org/10.37572/EdArt\\_2706261092](https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261092)

#### **CAPÍTULO 3.....32**

VERDADERAS NANOESTRUCTURAS DE MÍNIMO POTENCIAL GLOBAL DE LENNARD JONES Y MORSE

Carlos Barrón Romero

 [https://doi.org/10.37572/EdArt\\_2706261093](https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261093)

#### **CAPÍTULO 4..... 48**

NUEVAS PEQUEÑAS NANOESTRUCTURAS DE MÍNIMO POTENCIAL DE LENNARD JONES Y MORSE

Carlos Barrón Romero

 [https://doi.org/10.37572/EdArt\\_2706261094](https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261094)

### TECNOLOGÍAS APLICADAS, INGENIERÍA Y MEDIOS DIGITALES EN LA FORMACIÓN CIENTÍFICA

#### **CAPÍTULO 5..... 66**

DISEÑO Y GENERACIÓN DE UN ELECTROESTIMULADOR TENS CON DIFERENTES TIPOS DE PULSOS

Eduardo García Sánchez

Luis Eduardo Bañuelos García

Mario Molina Almaraz  
Osbaldo Vite Chávez  
José Manuel Cervantes Viramontes  
María del Rosario Martínez Blanco  
Luis Octavio Solís Sánchez  
Irerí Aydee Sustaita Torres  
Pilar Cecilia Godina González  
Francisco Javier Martínez Ruíz  
Sahara Araceli Pereyra López  
Ana Lourdes Aracely Borrego Elías

 [https://doi.org/10.37572/EdArt\\_2706261095](https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261095)

**CAPÍTULO 6..... 84**

GRÁFICOS VECTORIALES SVG GENERADOS A PARTIR DE INSTRUCCIONES POR VOZ MEDIANTE LA LIBRERÍA *SPEECH RECOGNITION*

Moisés García Villanueva  
Salvador Ramírez Zavala

 [https://doi.org/10.37572/EdArt\\_2706261096](https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261096)

**CAPÍTULO 7 ..... 99**

DE LAS REDES NEURONALES RECURRENTES A LOS TRANSFORMADORES: EVOLUCIÓN Y ANÁLISIS CRÍTICO DE LOS PARADIGMAS FUNDAMENTALES DEL APRENDIZAJE PROFUNDO

Adolfo Melendez Ramirez  
Francisco Jacob Avila Camacho  
Juan Manuel Stein Carrillo  
Leonardo Miguel Moreno Villalba

 [https://doi.org/10.37572/EdArt\\_2706261097](https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261097)

**CAPÍTULO 8..... 116**

DISRUPCIÓN ALGORÍTMICA Y CONFIGURACIÓN DEL SABER INVESTIGATIVO: LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL COMO DISPOSITIVO EPISTEMOLÓGICO EN ESTUDIANTES UNIVERSITARIOS DE ICA, PERÚ

José Ángel Meneses Jiménez  
Pedro Julián Ormeño Carmona  
Manuel Rocha Gonzales  
Beny Pasquel Flores  
Jorge Luis Arrué Flores

 [https://doi.org/10.37572/EdArt\\_2706261098](https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261098)

## DOCENCIA, APRENDIZAJE Y EQUIDAD EN MATEMÁTICAS, CIENCIAS Y FORMACIÓN SUPERIOR

### **CAPÍTULO 9.....129**

INCLUSIÓN Y EQUIDAD EN EDUCACIÓN MATEMÁTICA: PERSPECTIVAS TEÓRICAS Y DEBATES ACTUALES

Carmen Cecilia Espinoza Melo

Erich Leighton Vallejos

 [https://doi.org/10.37572/EdArt\\_2706261099](https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261099)

### **CAPÍTULO 10.....138**

PERCEPCIÓN ESTUDIANTIL SOBRE EL LIDERAZGO Y DESEMPEÑO DOCENTE DE PROFESORES DE MATEMÁTICAS Y SU RELACIÓN CON LOS RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Francisco Javier Saavedra Álvarez

Raúl Arnaldo Fuentes Fuentes

Paola Ramírez González

 [https://doi.org/10.37572/EdArt\\_27062610910](https://doi.org/10.37572/EdArt_27062610910)

### **CAPÍTULO 11.....165**

ELIMINANDO ACTITUDES NEGATIVAS HACIA LA ESTADÍSTICA EN PSICOLOGÍA: EFECTOS DEL APRENDIZAJE DEL ANÁLISIS DE TEXTOS

Luis Fernando González Beltrán

Olga Rivas García

 [https://doi.org/10.37572/EdArt\\_27062610911](https://doi.org/10.37572/EdArt_27062610911)

### **CAPÍTULO 12.....175**

¿QUÉ FUNCIONA (Y QUÉ NO) PARA INCORPORAR LA ÉTICA COMO COMPETENCIA TRANSVERSAL EN ESTUDIOS DE INGENIERÍA?

Ester Gimenez-Carbo

Lourdes Soriano Martínez

 [https://doi.org/10.37572/EdArt\\_27062610912](https://doi.org/10.37572/EdArt_27062610912)

### **CAPÍTULO 13.....183**

DEL AULA AL ENTORNO: EL APRENDIZAJE BASADO EN PROYECTOS COMO ESTRATEGIA PARA LA ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA AMBIENTAL

Elizabeth Gonzalez Sepúlveda

Victor Neira

Felipe Neira

 [https://doi.org/10.37572/EdArt\\_27062610913](https://doi.org/10.37572/EdArt_27062610913)

**CAPÍTULO 14..... 194**

CORRELACIÓN ENTRE EL SUEÑO Y EL APRENDIZAJE EN ESTUDIANTES DE MEDICINA: UNA REVISIÓN SISTEMÁTICA

Juan Camilo González Torres

Orlando Miguel González Torres

Irina Tirado Ballestas

 [https://doi.org/10.37572/EdArt\\_27062610914](https://doi.org/10.37572/EdArt_27062610914)

**CAPÍTULO 15.....206**

HABLANDO DE CALIDAD EDUCATIVA EN LA FORMACIÓN SUPERIOR EN ODONTOLOGÍA: DESAFÍOS EN LA DOCENCIA DE LAS CIENCIAS DE LA SALUD

Martha Patricia de la Rosa-Basurto

Jesús Rivas-Gutiérrez

Nelly Alejandra Rodríguez Guajardo

Christian Starlight Franco-Trejo

Luz Patricia Falcón-Reyes

Alejandra Estefania Esquivel-Lozano

Zitzingore Janitzi López-Aguilar

 [https://doi.org/10.37572/EdArt\\_27062610915](https://doi.org/10.37572/EdArt_27062610915)

**CIENCIAS NATURALES, ACERVOS Y PRESERVACIÓN DEL CONOCIMIENTO PALEONTOLÓGICO**

**CAPÍTULO 16.....220**

40 YEARS AS A FOSSIL PROSPECTOR, COLLECTOR, AND EXHIBITION MAKER

H.J. "Kirby" Siber

 [https://doi.org/10.37572/EdArt\\_27062610916](https://doi.org/10.37572/EdArt_27062610916)

**ACERCA DEL ORGANIZADOR.....231**

**ÍNDICE ALFABÉTICO..... 232**

## CAPÍTULO 2

# ISOTERMA DE ADSORCIÓN DEDUCIDA DEL MODELO DEL BILLAR Y ECUACIÓN DE ESTADO APLICADA A LOS GASES REALES<sup>1</sup>

Data de submissão: 18/05/2026

Data de aceite: 03/06/2026

**Ramon González Calvet**

Doctor en Química Fundamental

<https://orcid.org/0009-0000-0617-5918>

**RESUMEN:** El billar y sus bolas moviéndose libremente sobre una mesa se toman como modelo de la adsorción de moléculas esféricas sobre una superficie. La función de área libre (la proporción entre el área disponible para el centro de una molécula que se quiera añadir a la superficie y el área total) en función del recubrimiento se obtiene a partir de simulaciones. Mediante termodinámica estadística se deduce la isoterma de adsorción y la presión superficial a partir de la función de área libre. La isoterma de adsorción del billar difiere de la isoterma de Langmuir en que considera la entropía translacional en lugar de la entropía configuracional. Su generalización a tres dimensiones es el gas de esferas rígidas. La dependencia de la función

de volumen libre con la densidad en un gas de esferas duras no es lineal, como supuso Van der Waals, sino que puede aproximarse por un polinomio de grado superior o por una ley potencial. Las moléculas de los gases reales solo se comportan como esferas duras a muy bajas temperaturas. A temperaturas más altas se comportan como esferas blandas, es decir, como bolas elásticas. El potencial de Lennard-Jones permite modelar las fuerzas de atracción, así como la disminución del radio de exclusión y el aumento del volumen libre con la temperatura. A partir de aquí, se obtiene una ecuación de estado reducida que es universal para todos los gases.

**PALABRAS CLAVE:** isoterma del billar; gas de esferas duras; potencial de Lennard-Jones; coeficientes del virial; gas de esferas blandas.

## ISOTERMA DE ADSORÇÃO DERIVADA DO MODELO DE BILHAR E EQUAÇÃO DE ESTADO APLICADA A GASES REAIS

**RESUMO:** O bilhar, com suas bolas movendo-se livremente sobre uma mesa, serve como modelo para a adsorção de moléculas esféricas em uma superfície. A função de área livre (a razão entre a área disponível para o centro de uma molécula a ser adicionada à superfície e a área total) em função do recobrimento é obtida a partir de simulações. Usando a termodinâmica estatística, a isoterma de adsorção e a pressão superficial são derivadas da função de área livre. A

<sup>1</sup> Versión en castellano del artículo presentado en inglés al congreso 4<sup>th</sup> International Conference on Recent Trends in Material Science & Devices 2026 (ICRTMD-2026) celebrado del 6 al 8 de abril de 2026 en Charkhi Dadri, Haryana, India.

isoterma de adsorção do bilhar difere da isoterma de Langmuir por considerar a entropia translacional em vez da entropia configuracional. Sua generalização para três dimensões é o gás de esferas rígidas. A dependência da função de volume livre com a densidade em um gás de esferas rígidas não é linear, como assumido por Van der Waals, mas pode ser aproximada por um polinômio de grau superior ou uma lei de potência. Moléculas em gases reais comportam-se como esferas rígidas apenas em temperaturas muito baixas. Em temperaturas mais altas, elas se comportam como esferas macias, ou seja, como bolas elásticas. O potencial de Lennard-Jones permite modelar as forças atrativas, a diminuição do raio de exclusão e o aumento do volume livre com a temperatura. A partir disso, obtemos uma equação de estado reduzida que é universal para todos os gases.

**PALAVRAS-CHAVE:** isoterma de bilhar; adsorção; gás de esferas rígidas; potencial de Lennard-Jones; coeficientes viriais; gás de esferas macias.

## 1. INTRODUCCIÓN

Se han propuesto diversas isotermas de adsorción para describir la adsorción de iones y compuestos neutros sobre superficies. Con el objetivo de describir la adsorción de algunos gases (nitrógeno, metano, monóxido de carbono, argón, oxígeno y dióxido de carbono) sobre vidrio a 90K y sobre mica a 155 K, Langmuir [Langmuir 1918] propuso la isoterma  $\theta/(1-\theta) = \beta a$  asumiendo que  $N$  moléculas se adsorben en  $M$  sitios fijos sobre la superficie ( $N \leq M$ ). Aquí,  $\theta = N/M$  es el *recubrimiento*,  $a$  es la actividad en el volumen adyacente (generalmente aproximada por la concentración), y  $\beta$  es el coeficiente de adsorción que sólo depende de la naturaleza del compuesto, de la naturaleza de la superficie y de la temperatura. La entropía configuracional de la capa de adsorción se obtiene del número de combinaciones como  $S = k \ln C_M^N$  [Hill 1986, p. 127], donde  $k$  es la constante de Boltzmann. Frumkin [Frumkin 1925] añadió a la isoterma de Langmuir un término de interacción intermolecular similar al término atractivo de la ecuación de Van der Waals

$$\frac{\theta}{1-\theta} \exp(-B\theta) = \beta a \quad (1)$$

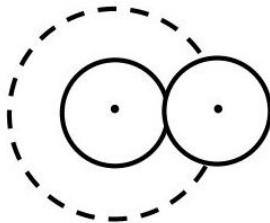
Frumkin ya demostró que, para  $B > 4$ , su isoterma de adsorción predecía una transición de fase entre una fase muy diluida y una fase con recubrimiento cercano a la unidad. Desde entonces se han propuesto muchas otras isotermas, catorce de las cuales fueron listadas por Damaskin y otros. [Damaskin 1971, pp. 86-88]. En el caso de la adsorción iónica, la isoterma del virial  $\ln \Gamma + B\Gamma = \ln \beta + \ln a$  ha sido ampliamente utilizada porque no tiene como parámetro el exceso superficial máximo  $\Gamma_{\max}$ , que es generalmente desconocido y cuyo valor es muy incierto en el caso de los iones. El *exceso superficial* viene dado por  $\Gamma = N/(N_0 A)$  donde  $A$  es el área de la superficie y  $N_0$  es el número de

Avogrado. Con una isoterma de Frumkin modificada con dos factores relativos al campo eléctrico interfacial que no se explicarán aquí por falta de espacio, fuimos capaces [Sanz y González 1989] de reproducir bien la adsorción de cloruro y yoduro sobre el electrodo de mercurio desde soluciones acuosas y sus curvas de capacidad eléctrica pero con extraños valores del exceso superficial máximo. Para el cloruro utilizamos una carga de adsorción máxima de  $\sigma_1^{\max} = -0,40 \text{ C} \cdot \text{m}^{-2}$  y  $B = 0$  mientras que la carga de un empaquetamiento hexagonal compacto de iones cloruro deducida a partir del radio iónico es  $\sigma_1^{\text{comp}} = -1,4118 \text{ C} \cdot \text{m}^{-2}$ . Para el yoduro utilizamos  $\sigma_1^{\max} = -0,40 \text{ C} \cdot \text{m}^{-2}$  y  $B = -7,16$ , mientras que la carga de un empaquetamiento hexagonal compacto de iones yoduro es  $\sigma_1^{\text{comp}} = -0,9556 \text{ C} \cdot \text{m}^{-2}$ . Esta paradoja permaneció sin resolver durante muchos años hasta que una partida de billar jugada con un amigo reveló la solución.

## 2. SIMULACIONES DEL MODELO DEL BILLAR

Los iones haluro son esféricos y tienen capas electrónicas cerradas. Su adsorción se estudió por primera vez en disoluciones acuosas sobre el electrodo de gotas de mercurio [Grahame 1955]. El mercurio es un metal líquido con una superficie homogénea sin estructura que debe considerarse plana. Por otro lado, los estudios de adsorción de haluros fueron realizados a temperatura ambiente [Payne 1968, Sears y Lyons 1973, Dutkiewicz y Parsons 1966], que es mucho más alta que los rangos de temperatura estudiados por Langmuir. La hipótesis de adsorción localizada no es realista para los iones haluro sobre mercurio, pues muy probablemente están deslocalizados. Por lo tanto, las bolas de billar sobre una mesa parecen ser un buen modelo para ellos. Supondremos que los iones haluro son esferas rígidas con radios iguales a sus radios iónicos que solo interactúan por contacto (como la colisión de bolas de billar) y electrostáticamente (ya que están cargados). Pueden moverse libremente sobre la superficie, tienen energía translacional como las bolas de billar rodando sobre la mesa, y pueden alcanzar cualquier punto a menos que ya esté ocupado por otra bola. Cuando la superficie está vacía, el área total está disponible para la primera bola. Si una bola ya está presente en la superficie, el área disponible para el centro de la segunda bola es  $A - 4\pi R^2$  ( $R$  es el radio de las bolas) porque no puede acercarse al primer centro a una distancia menor que  $2R$  (Figura 1).

Figura 1. Los centros de dos esferas no pueden aproximarse a una distancia menor que su diámetro.



Si hay  $N$  bolas sobre la superficie, el *área libre* accesible es aproximadamente  $A_{\text{libre}} \cong A - 4\pi NR^2$  si  $4\pi NR^2 \ll A$ . Es decir, el área de exclusión de cada esfera es cuatro veces su proyección sobre la superficie, y el exceso superficial máximo parece ser mucho menor que el correspondiente al empaquetamiento hexagonal compacto. Este es el desconcertante fenómeno observado en la adsorción de cloruro y yoduro.

La fracción del área ocupada y el recubrimiento ya no coinciden como en la isoterma de Langmuir y hay que dar definiciones distintas de cada concepto. Definimos el *recubrimiento* como una fracción molar igual a la proporción del número de bolas sobre la superficie con respecto al número de bolas del empaquetamiento hexagonal compacto. El área de la celda rómbica que contiene una bola en un empaquetamiento hexagonal compacto,  $A_{\text{celda}} = 2\sqrt{3}R^2 \cong 3,4641R^2$ , es más grande que el área  $\pi R^2$  de la proyección de la bola sobre la superficie debido a los espacios intersticiales. Así pues, el recubrimiento es  $\theta = \Gamma / \Gamma_{\text{comp}} = A_{\text{celda}} N / A = 2\sqrt{3} NR^2 / A$ . También definimos la *sombra*  $\varphi$  [González Calvet 2026] como la fracción de área sombreada cuando una luz cenital ilumina la mesa de billar, esto es,  $\varphi = \pi NR^2 / A$ . La sombra es proporcional al recubrimiento ya que  $\varphi = \pi \theta / (2\sqrt{3})$ . Mientras  $0 \leq \theta \leq 1$ , la sombra no alcanza la unidad porque  $0 \leq \varphi \leq \pi / (2\sqrt{3}) = 0,9069$  debido a los agujeros intersticiales entre esferas.

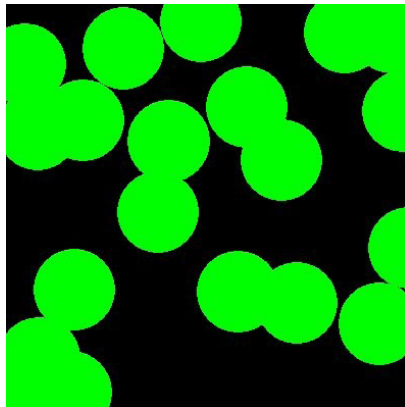
Definimos la *función de área libre* como el cociente del área accesible al centro de una nueva bola que se quiere añadir a la superficie dividida por el área total. A recubrimientos bajos

$$f(\theta) = \frac{A_{\text{libre}}}{A} \cong 1 - \frac{4\pi NR^2}{A} = 1 - 4\varphi = 1 - \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \theta \quad \text{si } \theta \ll 1 \quad (2)$$

Cuando el recubrimiento aumenta, las intersecciones entre los círculos de exclusión con radio  $2R$  de distintas esferas son más frecuentes y la función de área libre se desvía de esta ley lineal. Puesto que no existe una forma sencilla de calcular la función de área libre, recurrimos a simulaciones.

Llevamos a cabo simulaciones de una distribución aleatoria de bolas de billar sobre una mesa dibujando círculos de exclusión de radio  $2R$  en un cuadrado de lado unidad en la pantalla del ordenador (Figura 2) y comprobando que todas las distancias entre sus centros fueran mayores que  $2R$ .

Figura 2. A media simulación. Los círculos de radio  $2R = 0,1$  en verde, y el área libre en negro.

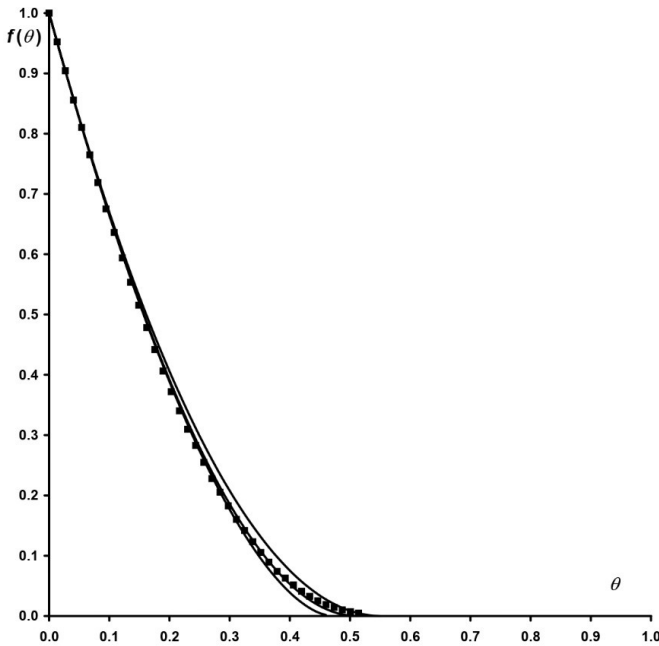


Los píxeles del cuadrado se barren cada vez que se añade un nuevo círculo de exclusión hasta agotar el área libre. Dado que las condiciones de contorno periódicas pueden generar patrones periódicos, elegimos condiciones de contorno aleatorias: los círculos de exclusión se dibujan con centros dentro del cuadrado  $[0, 1]^2$ , pero los píxeles barridos solo pertenecen al cuadrado  $[2R, 1-2R]^2$ . El marco con anchura  $2R$  establece un contorno aleatorio pero no es útil para el recuento de píxeles (en [González 2025-I] tomamos una anchura  $R$  insuficiente). La función de área libre es el cociente de los píxeles no pintados entre los píxeles barridos. El radio elegido fue  $R=0,05$  y el tamaño de la cuadrícula de barrido fue  $0,005$ . Otros valores de  $R$  solo significan ampliar o reducir la escala con la que observamos la superficie, pero no cambian los resultados. La variabilidad en los valores de la función de área libre se reduce promediando muchas simulaciones. La función obtenida del promedio de 100 simulaciones se muestra en la Figura 3. De media, el área libre se agota para  $\theta_{\max} \cong 0,57$ , aunque este valor depende de cada simulación. Se pueden encontrar más detalles de las simulaciones en [González 2025-I y 2025-II].

### 3. ISOTERMA DE ADSORCIÓN Y PRESIÓN SUPERFICIAL

La función de partición translacional de una partícula  $i$  adsorbida sobre una superficie que tenga área  $A_i$  es  $z_i = A_i / \Lambda^2$ , donde  $\Lambda = h / \sqrt{2\pi mkT}$  es la longitud de onda térmica,  $h$  es la constante de Planck,  $m$  la masa de la partícula,  $k$  la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura absoluta.

Figura 3. Función de área libre frente al recubrimiento obtenida promediando 100 simulaciones (cuadrados) comparada con las aproximaciones cuadrática (curva superior) y cúbica (curva media), y con la ley potencial (curva inferior).



Toda el área  $A$  es accesible a la primera partícula añadida a la superficie, pero el área libre accesible a una nueva partícula se reduce progresivamente conforme más partículas se adsorben. El área libre accesible a la partícula  $i$  viene dada por  $A_i = Af(\theta_i)$ , donde  $\theta_i = iA_{\text{celda}} / A = 2i\sqrt{3}R^2 / A$ . La función de partición translacional de un sistema de  $N$  partículas independientes que tienen diferentes áreas accesibles  $A_i$  es [Speedy 1977]

$$Z_N = \frac{\prod_{i=1}^N z_i}{N!} = \frac{A^N}{N! \Lambda^{2N}} \prod_{i=1}^N f(\theta_i) \quad (3)$$

que ya incluye la corrección de Gibbs para partículas indistinguibles. La energía libre de Helmholtz es proporcional al logaritmo de la función de partición del sistema.

$$F = -kT \ln Z_N = kT \left( N \ln \frac{\Lambda^2}{A} + N \ln N - N - \sum_{i=1}^N \ln f(\theta_i) \right) \quad (4)$$

Aproximando la suma por una integral se obtiene

$$F = NkT \left( h \frac{\Lambda^2}{A_{\text{celda}}} + h \theta - 1 \right) - \frac{kTA}{A_{\text{celda}}} \int_0^\theta h f(\theta_i) d\theta_i \quad (5)$$

donde  $\theta = NA_{\text{celda}} / A$ . Puesto que  $dF = -SdT - p dA + \mu dN$ , el potencial químico de la capa de adsorción es

$$\mu = \left( \frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,A} = kT \left( \ln \frac{\Lambda^2}{A_{\text{celda}}} + \ln \theta - \ln f(\theta) \right) \quad (6)$$

que es igual al de la disolución  $\mu = \mu_0 + kT \ln a$  lo que da lugar a la isoterma de adsorción

$$\frac{\theta}{f(\theta)} = \beta a \quad \text{con} \quad \beta = \frac{A_{\text{celda}}}{\Lambda^2} \exp \frac{\mu_0}{kT} \quad (7)$$

Análogamente, la presión superficial  $p = \gamma_0 - \gamma$  (la diferencia entre la tensión superficial en ausencia y en presencia de adsorción) se obtiene como

$$p = - \left( \frac{\partial F}{\partial A} \right)_{N,T} = \frac{NkT}{A} \left( 1 - \frac{1}{\theta} \int_0^\theta \frac{\theta_i f'(\theta_i)}{f(\theta_i)} d\theta_i \right) \quad (8)$$

y el factor de compresibilidad de este gas bidimensional de esferas duras es

$$\frac{pA}{NkT} = 1 - \frac{1}{\theta} \int_0^\theta \frac{\theta_i f'(\theta_i)}{f(\theta_i)} d\theta_i = 1 - \frac{1}{\varphi} \int_0^\varphi \frac{\varphi_i f'(\varphi_i)}{f(\varphi_i)} d\varphi_i \quad (9)$$

Los coeficientes del virial  $B_{2,\rho}$  son los coeficientes del desarrollo  $p/kT = \rho + B_{2,\rho}\rho^2 + B_{3,\rho}\rho^3 + \dots$  en términos de la densidad numérica  $\rho = N/A$ . Los coeficientes del virial  $B_{n,\rho}$  tienen dimensiones de  $(\text{m}^3)^{n-1}$ . Para un gas de esferas duras, los coeficientes del virial adimensionales del desarrollo

$$\frac{pA}{NkT} = 1 + B_2\varphi + B_3\varphi^2 + \dots \quad (10)$$

en términos de la sombra  $\varphi = \pi R^2 \rho$  son  $B_n = B_{n,\rho} / (\pi R^2)^{n-1}$ . Durante el pasado siglo, unos cuantos de ellos fueron calculados en distintos trabajos. Un resumen de estos resultados dados como los cocientes  $B_{n,\rho} / B_{2,\rho}^{n-1}$  puede encontrarse en [Janse van Rensburg 1993]. Puesto que  $B_{2,\rho} = 2\pi R^2$  y  $B_2 = 2$ , correspondiente a la ley lineal  $f(\varphi) \cong 1 - 4\varphi$  a recubrimientos bajos, los coeficientes del virial adimensionales se obtienen de los

anteriores cocientes como  $B_n = 2^{n-1} B_{n,\rho} / B_{2,\rho}^{n-1}$ . La identificación de (9) y (10) nos permite encontrar la función de área libre a partir de los coeficientes del virial

$$f(\varphi) = \exp\left(-\sum_{n=2}^{+\infty} \frac{n}{n-1} B_n \varphi^{n-1}\right) \quad (11)$$

#### 4. APROXIMACIÓN POLINÓMICA A LA FUNCIÓN DE ÁREA LIBRE

La función de área libre promediada a partir de simulaciones se ajusta muy bien a una función cuadrática, pero sus coeficientes varían con cada conjunto de simulaciones. Por ello, propusimos una función cuadrática que fuera tangente al eje de abcisas. Puesto que recubrimientos mayores que 0,57 no son imposibles, solo improbables y pueden ocurrir, cualquier expresión algebraica aproximada de la función de área libre debería tener como asíntota el eje de abcisas igual que (11), o por lo menos debería ser tangente a este eje. Así pues, no es admisible una función de área libre que corte el eje de abcisas con un cierto ángulo. La función cuadrática que es tangente al eje de abcisas y tiende a la ley lineal (2) a bajos recubrimientos es única

$$f(\theta) = \left(1 - \frac{\pi}{\sqrt{3}} \theta\right)^2 = (1 - 2\varphi)^2 = 1 - 4\varphi + 4\varphi^2 \quad (12)$$

y se anula para  $\theta_{\max} = \sqrt{3}/\pi \cong 0,5513$  o  $\varphi_{\max} = 0,5$ . Una mejor aproximación es una cúbica. El desarrollo de la exponencial (11) de la serie virial con  $B_2 = 2$ , y  $B_3 = 16/3 - 4\sqrt{3}/\pi$  hasta segundo orden es

$$f(\varphi) = \exp\left(-2B_2\varphi - \frac{3B_3}{2}\varphi^2 - \dots\right) = 1 - 4\varphi + \frac{6\sqrt{3}}{\pi}\varphi^2 + \dots \quad (13)$$

El coeficiente del término de segundo orden es ahora menor que 4, dado por la función cuadrática (12). Cualquier aproximación realista a  $f(\varphi)$  debe satisfacer las condiciones  $f(\varphi_{\max}) = f'(\varphi_{\max}) = 0$ , lo que determina el coeficiente del término de tercer orden

$$f(\varphi) \cong 1 - 4\varphi + \frac{6\sqrt{3}}{\pi}\varphi^2 + 1,439544\varphi^3 = 1 - \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\theta + \frac{\pi\sqrt{3}}{2}\theta^2 + 1,073748\theta^3 \quad (14)$$

con  $\varphi_{\max} \cong 0,464039$  o  $\theta_{\max} \cong 0,511676$ . Esta cúbica ajusta mejor los datos de simulación pero predice un recubrimiento máximo menor que el determinado a partir de las

simulaciones ( $\theta_{\max} \cong 0,57$ ). En la Figura 3 se compara la función de área libre obtenida de las simulaciones con las aproximaciones cuadrática y cúbica. A recubrimientos medios, la función cuadrática sobreestima ligeramente la función de área libre obtenida a partir de las simulaciones pero para propósitos prácticos, es bastante precisa y mucho mejor que  $f(\theta) = 1 - \theta$  predicha por la isoterma de Langmuir.

Otra posible aproximación es una ley potencial. Identificando los dos primeros coeficientes del desarrollo en potencias de  $\varphi$ , se encuentra una ley potencial con un exponente más pequeño que el de la ley cuadrática

$$f(\varphi) = \left(1 - \frac{4\varphi}{t}\right)^t = \left(1 - \frac{2\pi}{t\sqrt{3}}\theta\right)^t \quad \text{con} \quad t = \frac{4\pi}{4\pi - 3\sqrt{3}} = 1.705020 \dots \quad (15)$$

que predice  $\varphi_{\max} \cong 0,426255$  o  $\theta_{\max} \cong 0,470013$ , bastante menor que el obtenido en las simulaciones.

## 5. LA FUNCIÓN DE VOLUMEN LIBRE PARA UN GAS DE ESFERAS DURAS

Cuando una partícula se añade a un volumen vacío, puede moverse libremente por todo del volumen. Cuando una segunda partícula se añade al volumen, los dos centros no pueden acercarse a una distancia menor que  $\sigma = 2R$ , de manera que la esfera de exclusión de la primera partícula es ocho veces su volumen. En consecuencia, la función de volumen libre para un gas de esferas duras diluido es

$$f(\eta) \cong 1 - \frac{32\pi NR^3}{3} = 1 - 8\eta \quad \text{si} \quad \eta \ll 1 \quad (16)$$

donde a  $\eta = 4\pi NR^3/3 = N\pi\sigma^3/6$  se le llama la *fracción de empaquetamiento*, que es similar a la sombra  $\varphi$ . Un empaquetamiento tridimensional compacto de esferas duras puede formar una red cristalina hexagonal o cúbica centrada en las caras. Ambas tienen la misma densidad. El volumen de la celda romboédrica que contiene una esfera de radio  $R$  en ambas redes es  $V_{\text{celda}} = 4\sqrt{2}R^3 \cong 5,6568R^3$ , que es mayor que el volumen de la esfera  $4\pi R^3/3 \cong 4,1888R^3$  debido a los espacios intersticiales. Definimos el *relleno* como el cociente del número de esferas en un volumen dado dividido entre el número en una red compacta, es decir,  $\psi = NV_{\text{celda}}/V = 4\sqrt{2}NR^3/V$ . El relleno es una fracción molar que generaliza el recubrimiento a tres dimensiones y satisface  $0 \leq \psi \leq 1$ . El relleno y la fracción de empaquetamiento son proporcionales según  $\eta = \pi\psi/(3\sqrt{2})$ . La fracción de empaquetamiento satisface  $0 \leq \eta \leq \pi/(3\sqrt{2}) \cong 0,7405$ .

La función de volumen libre representa la probabilidad de que cualquier punto sea accesible al centro de una nueva esfera [Speedy 1977], y esta probabilidad puede estimarse mediante la frecuencia relativa de puntos disponibles en cualquier subconjunto del espacio tridimensional. Por lo tanto, se realizaron tres tipos diferentes de simulaciones para determinar la función de volumen libre mediante el barrido de un cubo, un cuadrado o un segmento. El barrido de un cubo es lento y no permite dibujar esferas de exclusión en la pantalla del ordenador, mientras que en los otros dos casos sí se pueden barrer píxeles. El barrido de un segmento es rápido, pero los resultados son muy variables. En [González 2025-II] se describe el funcionamiento de los tres programas. El programa que consideramos óptimo consiste en emplazar al azar centros de esferas duras en la caja  $[0,1]^2 \times [-2\sigma, 2\sigma]$  mostrada en la Figura 4, siempre asegurando que cualquier centro adicional esté a una distancia no menor que  $\sigma = 2R$  de los otros centros previamente colocados en la caja. Anteriormente habíamos tomado la caja  $[0,1]^2 \times [-\sigma, \sigma]$  [González 2025-II], pero después nos dimos cuenta de que las condiciones de contorno aleatorias requerían una caja mayor, lo que corregimos en [González Calvet 2026]. Si  $(x, y, z)$  son las coordenadas validadas de un centro de una nueva esfera, entonces se pinta en la pantalla del ordenador (Figura 5) el círculo de radio  $\sqrt{\sigma^2 - z^2}$  y centro  $(x, y)$ , que es la intersección de la esfera de exclusión con el plano  $z = 0$ . El barrido de los píxeles del cuadrado  $[\sigma, 1 - \sigma]^2$  da la función de volumen libre. La deducción de la ecuación de estado de un gas de esferas duras en un volumen dado es la misma que para dos dimensiones pero con función de partición  $Z_i = V_i / \Lambda^3$ . En consecuencia

$$f(\eta) = \exp\left(-\sum_{n=2}^{+\infty} \frac{n}{n-1} B_n \eta^{n-1}\right) \quad (17)$$

Figura 4. Caja de simulación que contiene los centros de las esferas de exclusión. Sólo aquellas cuyo centros están dentro de la caja gris cortan el plano  $z=0$ .

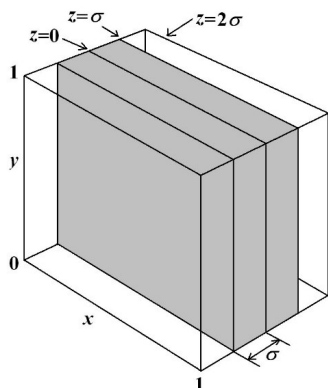
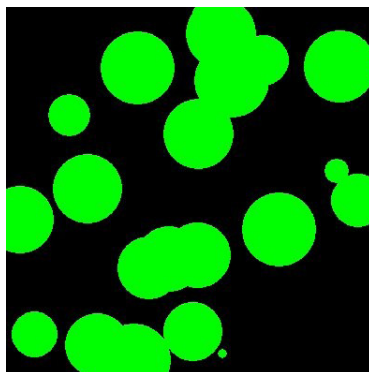


Figura 5. Plano central  $z=0$  de la caja en la figura 4. Las esferas de exclusión con radio  $\sigma=0.1$  intersecan este plano en los círculos verdes.



Tian y otros [Tian 2019] dieron los coeficientes del virial hasta  $B_{12}$  con elevada precisión excepto para el último. Boltzmann [Boltzmann 1995, p. 352] ya calculó  $B_2=4$  y  $B_3=10$ , y Van Laar calculó la función de volumen libre correspondiente [Boltzmann 1898, Ecuación 11]

$$\frac{pV}{NkT} = 1 + 4\eta + 10\eta^2 + \dots \Leftrightarrow f(\eta) = 1 - 8\eta + 17\eta^2 + \dots \quad (18)$$

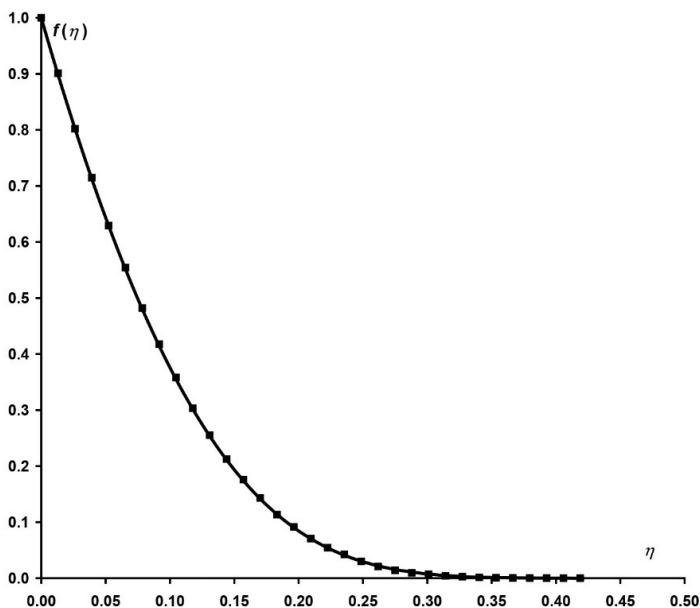
El acuerdo entre la función de volumen libre obtenida a partir de las simulaciones y a partir de los coeficientes del virial es excelente tal como muestra la Figura 6.

Van der Waals supuso que el volumen libre disponible para  $n$  moles de gas sigue la ley lineal  $V-nb$ , donde  $b$  es una constante llamada *covolumen*. Sin embargo, la función de volumen libre no es lineal excepto a bajas densidades. La ley potencial que mejor ajusta la función de volumen libre tiene exponente  $8/3$ , es decir,  $f(\eta) = (1 - 3\eta)^{8/3}$  y la ecuación de estado resultante es

$$\frac{pV}{NkT} = -\frac{5}{3} - \frac{8}{9\eta} \ln(1 - 3\eta) \quad (19)$$

Las esferas rígidas no tienen en cuenta ni las fuerzas intermoleculares atractivas ni la variación de la esfera de exclusión con la temperatura. Para considerarlas, se necesita un modelo de interacción intermolecular.

Figura 6. Función de volumen libre frente a la fracción de empaquetamiento. Cuadrados obtenidos promediando 100 simulaciones. Curva calculada con (17) a partir de los coeficientes del virial hasta  $B_{12}$ .



## 6. GAS DE ESFERAS BLANDAS

Las moléculas se comportan como esferas rígidas a bajas temperaturas y como pelotas elásticas a temperaturas más altas. En lugar de bolas de billar, un modelo más apropiado serían las pelotas de tenis. Para las moléculas esféricas, la energía de interacción depende únicamente de la distancia entre sus centros. Como modelo de la interacción intermolecular, hemos elegido el potencial de Lennard-Jones  $u(r) = 4\varepsilon[\sigma^{12}/r^{12} - \sigma^6/r^6]$ , donde  $\sigma$  es la distancia para la cual el potencial se anula, y  $\varepsilon$  es la profundidad del pozo de potencial. El segundo coeficiente virial para cualquier potencial intermolecular radial es [Hill 1986, Ecuación 15-24 en la p. 267]

$$B_{2,p} = -\frac{1}{2} \int_0^{+\infty} \left( \exp\left(-\frac{u(r)}{kT}\right) - 1 \right) 4\pi r^2 dr \quad (20)$$

Vargas y otros [Vargas 2001] calcularon una expresión exacta del segundo coeficiente virial en función de las funciones de Bessel modificadas. Sin embargo, nuestra aproximación, explicada a continuación, es más fácil de implementar. En primer lugar, dividimos el intervalo de integración en dos intervalos. Para  $r < \sigma$  el potencial  $u(r)$  es repulsivo y divergente, mientras que para  $r > \sigma$  el potencial es atractivo y está acotado según  $-\varepsilon/kT \leq u(r) \leq 0$ , de manera que los dos intervalos requieren diferentes aproximaciones analíticas. En el intervalo repulsivo, la integración por partes da

$$B_{2,p}^r = -\frac{1}{2} \int_0^{\sigma} \left( \exp\left(-\frac{u(r)}{kT}\right) - 1 \right) 4\pi r^2 dr = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} \frac{4\pi [r(u)]^3}{3} \exp\left(-\frac{u}{kT}\right) \frac{du}{kT} \quad (21)$$

donde  $r(u)$  es la función inversa de  $u(r)$  que, para el potencial de Lennard-Jones, es

$$r(u) = \frac{\sigma}{\sqrt[6]{\frac{1 + \sqrt{1 + u/\varepsilon}}{2}}} \quad (22)$$

Si interpretamos  $\exp(-u/kT)/kT$  como una densidad de probabilidad [Vasilyev 1994, p. 128], entonces la parte repulsiva del segundo coeficiente virial es igual a la mitad del volumen de la esfera de exclusión promediada para todas las energías positivas

$$B_{2,p}^r = \frac{1}{2} \left\langle \frac{4\pi r^3}{3} \right\rangle = \frac{2\pi\sigma^3}{3g(\tau)} \quad \text{con} \quad g(\tau) \cong \sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 + 0,5\ln(1 + \tau) + 0,5\tau}}{2}} \quad (23)$$

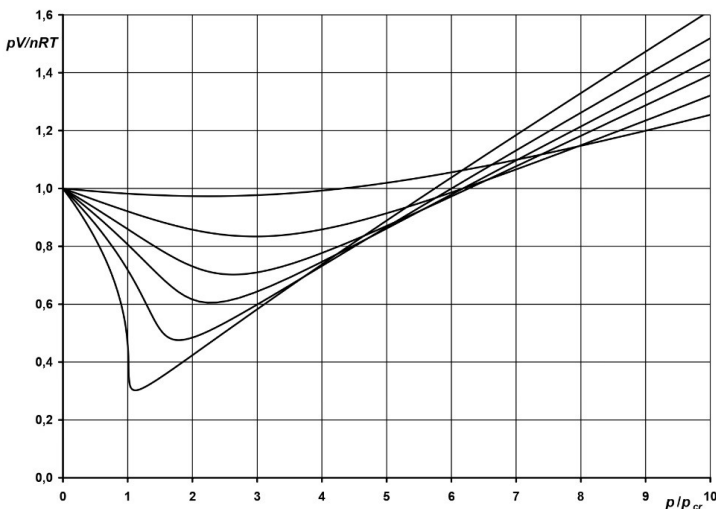
Mediante integración numérica, hemos encontrado una aproximación a  $g(\tau)$  que es mejor que la dada en [González 2025-II], donde  $\tau = kT / \varepsilon$  es la temperatura reducida. Cuanto mayor sea la energía relativa de dos partículas, menor será la distancia mínima que pueden alcanzar sus centros, al igual que dos pelotas de tenis. En este sentido, el potencial de Lennard-Jones modela la elasticidad de las moléculas. Para la parte atractiva del segundo coeficiente virial, el desarrollo de la exponencial da la aproximación [González 2025-II].

$$B_{2,\rho}^a = -\frac{1}{2} \int_{\sigma}^{+\infty} \left( \exp\left(-\frac{u(r)}{kT}\right) - 1 \right) 4\pi r^2 dr \cong -\frac{16\pi\sigma^3}{9\tau} - \frac{128\pi\sigma^3}{315\tau^2} - \frac{1024\pi\sigma^3}{10395\tau^3} \quad (24)$$

El coeficiente adimensional es  $B_2^a = 6B_{2,\rho}^a / (\pi\sigma^3)$ . Añadiendo esta aproximación de  $B_2^a$  e introduciendo  $\eta = \pi \langle r^3 \rangle > \rho / 6 = \eta_0 / g(\tau)$  en (19), hemos encontrado una ecuación de estado para los gases reales [González Calvet 2026] que satisface el principio de los estados correspondientes y reproduce cualitativamente las curvas del factor de compresibilidad (Figura 7)

$$\frac{pV}{NkT} = -\frac{5}{3} - \frac{8g(\tau)}{9\eta_0} \ln\left(1 - \frac{3\eta_0}{g(\tau)}\right) - \left(\frac{32}{3\tau} + \frac{256}{105\tau^2} + \frac{2048}{3465\tau^3}\right)\eta_0 \quad (25)$$

Figura 7. Factor de compresibilidad frente a la presión reducida calculada a partir de (25) para las temperaturas reducidas  $T/T_{cr}$  iguales a 1, 1.1, 1.2, 1.3, 1.5 y 2.



Sin embargo, los mínimos calculados son más altos y el cruce de las diferentes curvas ocurre a presiones más bajas que en los datos experimentales [Kondepudi

2008, Fig. 1.6 en p. 26], [Kontogeorgis y Folas 2020, Fig. 3.1 en p. 45]. Nuestro factor de compresibilidad calculado en el punto crítico es 0,3710 menor que 0,375 para la ecuación de van der Waals, mientras que los valores experimentales son ligeramente inferiores a 0,3 para muchos gases. Este resultado era de esperar ya que solo se toma en cuenta el segundo coeficiente virial para describir la atracción entre moléculas, lo cual es insuficiente. En conclusión, una ecuación de estado de un gas de esferas duras mejorada con la variación del radio de exclusión con la temperatura (esferas blandas) y con la parte atractiva del segundo coeficiente virial ya da una buena descripción cualitativa de los gases reales, aunque la concordancia todavía no es cuantitativa.

## REFERENCIAS

BOLTZMANN, L. On the characteristic equation of van der Waals. **Koninklijke Nederlandsche Akademie van Wetenschappen Proceedings** **1**, 398-404, 1898.

BOLTZMANN, L. **Lectures on Gas Theory**. Mineola: Dover, 1995.

DAMASKIN, B. B.; PETRII, O. A. y BATRAKOV V. V. **Adsorption of Organic Compounds on Electrodes**. New York: Plenum Press, 1971.

DUTKIEWICZ, E. y PARSONS, R. The adsorption of iodide ion from aqueous KI+ KF of constant ionic strength. **J. Electroanal. Chem.**, 11 (2), 100-110, 1966.

FRUMKIN, A. N. Die Kapillarkurve der höheren Fettsäuren und die Zustandsgleichung der Oberflächenschicht. **Z. Phys. Chem.**, 116 (1), 466-484, 1925.

GONZÁLEZ, R. Adsorption isotherm deduced from the billiard model. **Electrochim. Acta** 524: 145917, 2025.

GONZÁLEZ, R. Ecuaciones de estado de un gas bidimensional y tridimensional de esferas rígidas. En **Perspectivas e inovação na pesquisa em Química**, Atena Editora (pp. 53-76), <https://atenaeditora.com.br/catalogo/ebook/perspectivas-e-inovacao-na-pesquisa-em-quimica>, 2025.

GONZÁLEZ CALVET, R. El billar como modelo para la adsorción de moléculas esféricas y su generalización a los gases reales, **Contribuciones a las Ciencias Sociales**, 19 (1), 1-22, 2026.

GRAHAME, D. C. Die elektrische Doppelschicht. **Z. Elektrochem.**, 59 (7-8) 773-778, 1955.

HILL, T. **An Introduction to Statistical Thermodynamics**. New York: Dover, 1986.

JANSE VAN RENSBURG, E. J. Virial coefficients for hard disks and hard spheres. **J. Phys. A**, 26 (19), 4805-4818, 1993.

KONDEPUDI, D. **Introduction to Modern Thermodynamics**. Chichester: Wiley, 2008.

KONTOGEORGIS, G. M. y FOLAS, G. F., **Thermodynamic Models for Industrial Applications**. Chichester: Wiley, 2020.

LANGMUIR, I. The Adsorption of Gases on Plane Surfaces of Glass, Mica and Platinum. **J. Am. Chem. Soc.**, 40 (9) 1361-1403, 1918.

PAYNE, R. Specific adsorption of chloride ions at the mercury/aqueous solution interface. **Trans. Far. Soc.** **64**, 1638-1655, 1968.

SANZ, F. y GONZÁLEZ, R. Theoretical Considerations of the Adsorption Isotherm for Ionic Systems at Electrode Interphases. **Electrochim. Acta**, **34** (12), 1883-1887, 1989.

SEARS, A. R. y Lyons, PH. A. The adsorption of potassium bromide from constant ionic strength solutions of potassium bromide and potassium fluoride. **J. Electroanal. Chem.**, **42** (1), 69-76, 1973.

SPEEDY, R. J. Accurate Theory of the Hard Sphere Fluid. **J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2: Molecular and Chemical Physics**, **73** (5) 714-721, 1977.

TIAN, J.; JIANGH, H. y MULERO, M. Equations of the state of hard sphere fluids based on recent accurate virial coefficients  $B_5$ - $B_{12}$ . **Phys. Chem. Chem. Phys.**, **21** (24), 13070-13077, 2019.

VARGAS, P.; MUÑOZ, E. y RODRÍGUEZ, L. Second virial coefficient for the Lennard-Jones potential, **Physica A**, **290** (1-2), 92-100, 2001.

VASILYEV, A. M. **An Introduction to Statistical Physics**. Moscow: URSS, 1994.

## ACERCA DEL ORGANIZADOR



**Ramon González Calvet** (1964) es licenciado (1986) y doctor en Química Fundamental por la Universitat de Barcelona (1993). También obtuvo el máster en Matemáticas para profesores por la Universitat Autònoma de Barcelona (1995). Ganó las oposiciones a profesor de matemáticas de secundaria (1987) y fue catedrático de secundaria (2008). Actualmente está jubilado. Ha enseñado álgebra geométrica (de Clifford) a profesores en diversas escuelas de verano, de donde surgió el *Treatise of Plane Geometry through Geometric Algebra* (2007). Durante muchos años hasta el confinamiento, también formó a graduados y

profesores interinos que querían ganar las oposiciones a profesor de matemáticas de secundaria. Sus investigaciones se centran principalmente en interfaces electrificadas, álgebra geométrica, el problema de los  $n$  cuerpos, la geometría diferencial, la mecánica celeste y los relojes de sol. Su aterrizaje en el problema de los  $n$  cuerpos fue accidental. En su etapa de estudiante en la facultad de química, se dio cuenta de que el hamiltoniano electrónico del átomo de helio no podía ser deducido de ninguna manera lógica, puesto que el problema de los tres cuerpos no tenía solución general conocida. En consecuencia, se planteó y resolvió cómo expresar la energía cinética en términos de las velocidades relativas, lo que le permitió obtener las ecuaciones del movimiento clásico de los tres y  $n$  cuerpos en términos de coordenadas y aceleraciones relativas. Después, también dedujo los hamiltonianos de los correspondientes problemas cuánticos, que era su objetivo inicial. Aplicó su hamiltoniano de los tres cuerpos al estudio de los niveles de energía vibracional del dióxido de carbono, y de la energía electrónica del átomo de helio, corrigiendo los hamiltonianos dados previamente por otros autores. Después de describir analíticamente el movimiento del sistema Sol-Tierra-Luna en una serie de tres artículos, y de estudiar la dinámica y evolución del sistema solar en una serie de cinco artículos resumidos en el primer capítulo del libro *Planets, Moons, and Beyond: Unveiling the Mysteries of the Solar System* (2026), sus últimos artículos tratan sobre el billar como modelo de la adsorción de moléculas sobre una superficie, y sobre la forma de los glóbulos rojos. Su tesis doctoral sobre termodinámica de interfases electrificadas todavía permanece inédita, aunque su contenido fue parcialmente explicado en algunos artículos.

## ÍNDICE ALFABÉTICO

### A

Análisis Comparativo 100, 111, 157

Aprendizaje 84, 85, 86, 97, 99, 100, 101, 102, 103, 105, 109, 110, 112, 113, 114, 117, 118, 126, 127, 129, 130, 131, 132, 133, 134, 135, 136, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 149, 153, 156, 158, 159, 160, 161, 163, 164, 165, 166, 167, 168, 172, 173, 177, 178, 180, 183, 184, 185, 186, 187, 190, 191, 192, 193, 194, 195, 198, 202, 203, 205, 206, 208, 209, 212, 215, 216, 217, 219

Aprendizaje Basado en Proyectos 178, 183, 184, 185, 186, 187, 188, 190, 192, 193

Aprendizaje profundo 99, 100, 101, 102, 103

### C

Calidad educativa 159, 206, 207, 208, 209, 213, 214, 215, 216, 217, 218, 219

Ciencias de la salud 206, 207

Coefficientes del virial 17, 23, 24, 27

Competencias 116, 118, 119, 121, 124, 128, 134, 136, 166, 176, 177, 178, 181, 183, 184, 185, 186, 187, 190, 191, 192, 206, 209, 210, 211, 212, 218

Competencias digitales 116

Competencia transversal 175, 177, 182

Contraction semigroups 1

Correlación estadística 116, 119, 121

### D

Desempeño docente percibido 138, 144, 146, 149, 155, 157, 158, 160, 161

Didáctica de la matemática 129, 134

Dinámica molecular 32, 48

Dissipative operators 1

Diversidad 129, 130, 131, 132, 134, 135, 136, 143, 162

Docencia universitaria 174, 207

DUA 129, 134

### E

Educación ambiental 184, 185, 186

Educación matemática inclusiva 129, 131, 132, 134, 135, 136

Educación superior 116, 117, 165, 175, 176, 183, 184, 185, 186, 191, 192, 206, 207, 210, 211, 213, 214, 215, 217, 218, 219

Electro-estimulador 67, 69, 70, 71, 72, 74, 76, 80  
Electroterapia 67, 69, 72, 76, 77, 78, 79, 82, 83  
Equidade educativa 129, 131  
Estatística 17, 116, 119, 121, 151, 154, 165, 166, 167, 168, 169, 170, 172, 171, 173, 174  
Estudantes 116, 117, 119, 121, 122, 123, 125, 126, 127, 128, 130, 131, 132, 133, 134, 135, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 146, 148, 149, 150, 151, 152, 154, 155, 156, 157, 158, 159, 160, 161, 164, 166, 167, 168, 171, 173, 174, 175, 181, 183, 185, 186, 187, 188, 189, 190, 191, 192, 194, 196, 197, 198, 199, 200, 201, 202, 203, 204, 205, 206, 208, 209, 210, 211, 212, 215, 216, 217, 218  
Estudantes de medicina 194, 196, 197, 198, 199, 200, 201, 202, 203, 204, 205  
Estudios de ingeniería 175, 181  
Ética 127, 142, 175, 176, 177, 178, 179, 180, 181, 182

## F

Formação profissional 186, 207  
Fossil collecting 220  
Foundation Models 99, 100, 101  
Fourier analysis 1, 16

## G

Gas de esferas blandas 17, 28  
Gas de esferas duras 17, 23, 25, 26, 30  
Gráficos Vectoriais 84, 86, 87, 88, 89, 90, 95  
Green River Formation 220, 221, 222

## H

Habilidades investigativas 116, 119, 121, 122, 123, 124, 127  
Hille-Yosida theorem 1

## I

Inteligencia artificial 99, 100, 101, 102, 116, 117, 118, 119, 122, 124, 125, 127  
Inteligência Artificial Generativa 99, 100  
Interacción Humano Máquina 84  
Isoterma del billar 17

## J

Justicia social 129, 131, 133, 134, 135, 136

## L

Liderazgo 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 146, 147, 149, 150, 151, 154, 155, 156, 157, 158, 159, 160, 161, 162, 163, 164, 177, 183, 185, 186, 188, 189, 190, 191, 192

## M

Matemáticas 16, 44, 74, 90, 91, 129, 131, 132, 133, 134, 135, 136, 137, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 149, 151, 152, 154, 156, 157, 158, 159, 160, 161, 162, 163, 164, 165, 167, 168, 169, 173, 174

Metodologías activas 184, 185, 186, 187, 189, 192

Modelos Multimodales 100

Morrison Formation 220, 228

## N

Nanoquímica 32, 48

## O

Odd-order differential operators 1, 16

Odontología 206, 207, 208

## P

Percepción 67, 138, 140, 143, 144, 147, 148, 149, 150, 151, 152, 153, 154, 155, 156, 157, 158, 160, 161, 162, 176, 188, 189

Periodic Sobolev spaces 1, 16

Potencial de Lennard-Jones 17, 18, 28, 29

Private collections 220

Procesamiento de Lenguaje Natural 84, 88, 107, 112

Psicología 127, 165, 166, 167, 169, 173, 174

Python 84, 85, 87, 88, 89, 91, 97

## Q

Química Ambiental 183, 184, 185, 187, 188, 189, 192

Química de materiales 32, 48

## R

Reconocimiento de voz 84, 85, 86, 87, 88, 89, 94, 95, 96, 97, 98, 101, 102, 103, 108, 110

Redes Neuronales Convolucionales 99, 100, 101, 102, 104, 106, 113

Redes Neuronales Recurrentes 99, 100, 101, 102, 103, 106, 113

Región Ica 116, 119, 122

Responsabilidad profesional 175

Revisión sistemática 163, 194, 196, 197, 218

## S

Sauriermuseum Aathal 220, 221, 225, 229, 230

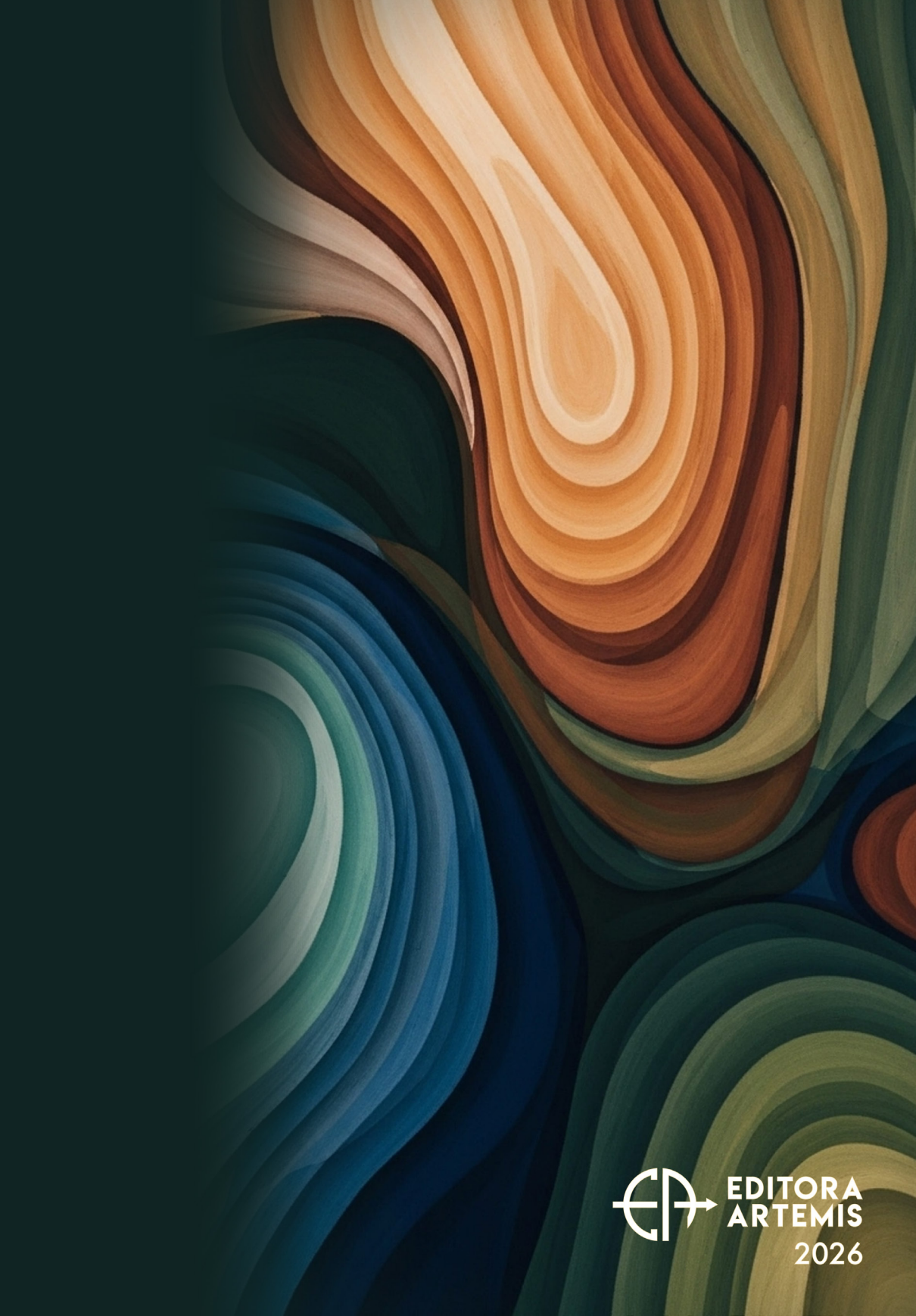
Science–policy collaboration 220

Sueño 194, 195, 196, 198, 199, 200, 201, 202, 203, 204, 205

## T

TENS 66, 67, 69, 83

Transformadores 99, 100, 101, 109, 111



**EDITORA  
ARTEMIS**

**2026**