



# BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA "LUIS RIVERA TERRAZAS"

## "DINÁMICA DE UN SISTEMA GRANULAR VIBRADO COMPUESTO DE PARTÍCULAS CÚBICAS"

### TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE  
MAESTRO EN CIENCIAS  
(FÍSICA)

PRESENTA  
LIC. ABRAHAM CARRILLO RIOS

DIRECTOR DE TESIS  
DR. FELIPE PACHECO VÁZQUEZ

No. de CVU: 930181

ENERO 2023



**BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE  
PUEBLA  
INSTITUTO DE FÍSICA "LUIS RIVERA TERRAZAS"**



**DINÁMICA DE UN SISTEMA GRANULAR  
VIBRADO COMPUESTO DE PARTÍCULAS  
CÚBICAS**

**TESIS**

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
MAESTRÍA EN CIENCIAS (FÍSICA)**

**PRESENTA**

**LIC. ABRAHAM CARRILLO RIOS**

**ASESOR**

**DR. FELIPE PACHECO VÁZQUEZ**

**PUEBLA, MÉXICO**

**ENERO 2023**



*A mis padres,  
por su incansable apoyo.*



# Agradecimientos

El haber llegado a este punto en mi vida académica solo sería muy poco creíble. Lo cierto es que han estado conmigo mi familia, siempre he contado con buenos amigos y el inagotable apoyo de mis asesores: el Dr. Felipe Pacheco Vázquez, quien me brindó la oportunidad de trabajar bajo su tutela; el Dr. Luis Fernando “El Gory” Elizondo Aguilera, aun cuando no es mi asesor formal, quien me proporcionó toda su “*expertise*” y esclareció mi camino en muchas ocasiones.

Injusto sería omitir al grupo de “Estudio en Familia” el cuál dedico su tiempo, esmero y esfuerzo a mi proyecto. Destaco la enseñanza que me dejó Mon, que me será útil por un largo tiempo. También quiero resaltar a Obed y Rodrigo, quienes con su ayuda y ánimos me motivaron a seguir adelante. Hago énfasis en mi buen amigo Isaías López, quien regresó por mi en uno de los momentos más difíciles de mi vida. Sería difícil nombrar a cada una de las personas que estuvieron conmigo en todo este proceso; sin embargo, quiero que sepan que agradezco infinitamente su amistad.

Por último, pero no menos importante, agradezco la paciencia y el amor que he recibido (a veces sin merecerlo), Flor Xinemi.



# Resumen

El presente trabajo consiste en un estudio experimental del comportamiento estructural y dinámico de un sistema granular cuasi-bidimensional vibrado, constituido por  $N$  cubos duros de tamaño milimétrico, confinados en una caja cúbica y sometidos a vibraciones mecánicas. Para ello, se analiza específicamente la función de distribución radial,  $g(r)$ , y el desplazamiento cuadrático medio  $\langle[\Delta\mathbf{r}(t)]^2\rangle$  (MSD, por sus siglas en inglés), con energía de vibración constante y en función de  $N$ . Haciendo uso de la función de distribución radial, se identifica el surgimiento de tres *fases* diferentes en el sistema, como lo indica la evolución gradual de  $g(r)$  con el aumento de  $N$ . Los estados identificados son de tipo gaseoso ( $N \leq 150$ ), de tipo líquido ( $200 \leq N \leq 300$ ) y de tipo sólido amorfo a cristalino ( $N > 300$ ).

Por otro lado, el análisis del MSD revela diferentes regímenes para la dinámica del sistema. Para un  $N$  pequeño ( $N \leq 150$ ), encontramos un comportamiento difusivo ( $\langle[\Delta\mathbf{r}(t)]^2\rangle \sim t$ ) en la relajación temprana del sistema ( $t \approx 1\text{s}$ ), seguido de una saturación asociado a las restricciones geométricas del contenedor. En cambio, para  $N$  intermedios a grandes ( $N > 150$ ), el comportamiento del sistema cae

en el régimen subdifusivo ( $\langle [\Delta \mathbf{r}(t)]^2 \rangle \sim t^\alpha, \alpha < 1$ ) que a tiempos cortos precede a un régimen lineal. Se estudia el régimen lineal posterior al régimen difusivo con un tiempo de vida  $\tau_B(N)$ , el cual muestra una dependencia de  $N$ . En el régimen de  $N$  grande, cuando el empaquetamiento del sistema se aproxima a la unidad, casi todos los cubos pueden acomodarse en una monocapa con estructura cuadrada sin intersticios, la cual es capaz de mantener su configuración cristalina durante una escala de tiempo  $\tau_c(\Gamma)$ , que depende de la fuerza de agitación  $\Gamma$ , exhibiendo el fenómeno conocido como supercalentamiento granular, previamente descrito para el caso de partículas esféricas.

# Abstract

We report an experimental study on the structural and dynamical behavior of a granular system constituted by  $N$  millimeter-sized hard-cubes, confined in a cubic box and subjected to mechanical vibrations. For this, we specifically analyzed the two-body radial distribution function,  $g(r)$ , and the mean square displacement (MSD),  $\langle[\Delta\mathbf{r}(t)]^2\rangle$ , at a fixed energy and as function of  $N$ . We identified the emergence of three different *phases*, as indicated by the gradual evolution of  $g(r)$  when  $N$  was increased. These phases are: gas-like (for  $N \leq 150$ ), liquid-like ( $200 \leq N \leq 300$ ) and crystalline-like ( $N > 360$ ) states.

On the other hand, the analysis of the MSD revealed different regimes for the dynamics of the system. For small values of  $N$ , we found a diffusive behavior ( $\langle[\Delta\mathbf{r}(t)]^2\rangle \sim t$ ) in the early relaxation of the system ( $t \approx 1$  s), followed by the development of a saturation plateau associated to the geometric constraints of the container. For intermediate to large values of  $N$ , instead, a subdiffusive regime ( $\langle[\Delta\mathbf{r}(t)]^2\rangle \sim t^\alpha, \alpha < 1$ ) at short-times precedes a linear regime, with a life time  $\tau_B(N)$  that shows dependence on  $N$ . For the largest values of  $N$ , we identified the existence of crystalline-like closed packed

structures, where a square-lattice monolayer was able to keep its configuration during a time-scale  $\tau_c(\Gamma)$  that depends on the shaking strength  $\Gamma$ , revealing the superheating granular state, previously described for the case of spherical particles.

# Índice general

|                                                                              |           |
|------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>Introducción</b>                                                          | <b>1</b>  |
| <b>1. Antecedentes y marco teórico</b>                                       | <b>5</b>  |
| 1.1. Materia granular vibrada . . . . .                                      | 5         |
| 1.2. Propiedades Estructurales . . . . .                                     | 12        |
| 1.2.1. Función de Distribución Radial . . . . .                              | 12        |
| 1.3. Propiedades Dinámicas . . . . .                                         | 15        |
| 1.3.1. Desplazamiento Cuadrático Medio . . . . .                             | 15        |
| <b>2. Arreglo experimental y Metodología</b>                                 | <b>18</b> |
| 2.1. Arreglo experimental . . . . .                                          | 18        |
| 2.2. Parámetros de control . . . . .                                         | 20        |
| 2.2.1. Inyección de energía: aceleración adimensional ( $\Gamma$ ) . . . . . | 20        |
| 2.2.2. Densidad de partículas ( $N$ ) . . . . .                              | 21        |
| 2.3. Metodología . . . . .                                                   | 22        |
| 2.3.1. Procesamiento de imágenes: . . . . .                                  | 24        |
| 2.3.2. Cálculo de $g(r)$ y el MSD. . . . .                                   | 25        |
| <b>3. Resultados</b>                                                         | <b>27</b> |
| 3.1. Análisis estructural . . . . .                                          | 28        |
| 3.2. Análisis dinámico . . . . .                                             | 33        |

|                                                              |           |
|--------------------------------------------------------------|-----------|
| 3.3. Supercalentamiento granular en un sistema de partículas |           |
| cúbicas: una perspectiva de investigación.                   | 43        |
| <b>Conclusiones</b>                                          | <b>49</b> |
| <b>A. Dificultades técnicas</b>                              | <b>52</b> |
| A.1. Experimento 1                                           | 53        |
| A.2. Experimento 2                                           | 56        |
| A.3. Experimento 3                                           | 59        |
| <b>B. Código MSD</b>                                         | <b>61</b> |



# Introducción

La materia granular forma parte de nuestra vida cotidiana. Interactuamos con ella desde el desayuno (los granos de café, los cereales y frutos que comemos, el azúcar que utilizamos); en el camino a la escuela o trabajo (las piedras y tierra que pisamos, el polvo); y es abundante en la naturaleza (semillas, granos, arena, piedras, grava, sales, minerales, etc). Además, es ampliamente usada en procesos industriales (fertilizantes, detergentes, píldoras farmacéuticas, cementos, etc); es decir, todos los días interactuamos con materia granular, haciendo que el estudio de ésta sea relevante para el ser humano. Dicho de otro modo, la materia granular es ampliamente manipulada por la humanidad (la segunda forma de materia después del agua)[\[1\]](#). Dependiendo de las condiciones a las que se somete, la materia granular puede comportarse como un sólido y formar montículos (como las dunas del desierto, e incluso caminar sobre ella como en la playa); también puede fluir, como en un reloj de arena o en la descarga de granos desde silos, o formar un gas de partículas como en las tormentas de arena o en las erupciones de ceniza y piedras expelidas por un volcán. Para su estudio, resulta importante partir de una definición precisa de materia granular.



**Figura 1. Ejemplos de materia granular: sales y minerales<sup>1</sup>, arena del desierto<sup>2</sup>, piedras de río<sup>3</sup> y granos y semillas<sup>4</sup>.**

Los materiales granulares son aquellos conjuntos de partículas macroscópicas visibles y discernibles a simple vista, mayores a una micra, y gracias a su tamaño los efectos de las fluctuaciones térmicas del medio en su dinámica son despreciables, por lo que no describen movimiento Browniano<sup>5</sup>. Las partículas que los conforman interactúan básicamente a través de colisiones entre ellas y fricción entre sus superficies, haciendo que estos sistemas sean altamente disipativos; es decir, son sistemas fuera del equilibrio <sup>[1]</sup>. Las

---

<sup>1</sup><https://www.hsnstore.com/blog/nutricion/minerales/alimentos-ricos-en-sales/>

<sup>2</sup><https://nuestroclima.com/el-poderoso-efecto-del-polvo-de-sahara-sobre-el-comportamiento-del-planeta/>

<sup>3</sup><https://www.freepik.es/fotos-premium/rio-piedra-guijarros-colores-pequenas-piedras-limpias-suelo.4624137.htm>

<sup>4</sup><https://www.freepik.es/fotos-premium/conjunto-diferentes-granos-enteros-frijoles-semillas-legumbres.6669327.htm>

<sup>5</sup>Todos los enlaces fueron consultados el 17 de noviembre del 2022.

interacciones, en principio simples, generan comportamientos complejos [2, 3, 4, 5], lo que ha resultado de gran interés para la comunidad científica durante las últimas décadas.

Entre los estudios desarrollados más sistemáticamente se encuentra el de los sistemas granulares vibrados: partículas típicamente esféricas confinadas en un contenedor y sometidas a oscilaciones mecánicas. Las vibraciones suministran energía a las partículas, y dependiendo de la densidad del medio granular (número de granos por unidad de volumen) se despliegan dinámicas que asemejan a gases, fluidos o sólidos. Estos sistemas, aunque fuera del equilibrio por su naturaleza disipativa, son estudiados típicamente en estados estacionarios, i.e. cuando la energía disipada se equilibra con la energía suministrada por vibración.

Hasta ahora, la mayoría de las investigaciones reportadas sobre materiales granulares vibrados se han enfocado al estudio de sistemas de partículas esféricas. El trabajo reportado en esta tesis, en cambio, tiene por objetivo el estudio de la dinámica y estructura de un sistema de partículas cúbicas, cuyo movimiento no se encuentra restringido a un plano, sino que también ocurre en dirección perpendicular al plano. Así mismo, la condición de confinamiento es modificada (con respecto a estudios previos), considerando aquí un contenedor con geometría cuadrada. Mostraremos que, como resultado de lo anterior, se obtiene un comportamiento estructural robusto. Por otro lado, se muestra que la dinámica de las partículas es mucho más susceptible a la rotación y traslación de los cubos en comparación con el caso de esferas. Finalmente, para una monocapa cristalina altamente empaquetada, fue posible estudiar el fenómeno de supercalentamiento para un

sistema granular de partículas cúbicas. En resumen, el objetivo de este trabajo es el estudio del comportamiento estructural y dinámico de un sistema granular vibrado cuasi-2D de partículas cúbicas

Esta tesis está ordenada de la siguiente forma: en el capítulo 1 se discuten los antecedentes sobre materia granular vibrada de esferas duras, así como los pocos trabajos en la literatura enfocados al estudio de sistemas vibrados de partículas no esféricas, en particular, aquellos con partículas cuadradas y restringidas a un plano. También se definen las propiedades estructurales y dinámicas que serán usadas para describir nuestro sistema de partículas cúbicas, como la función de distribución radial y el desplazamiento cuadrático medio. En el capítulo 2 se describe el sistema experimental y la metodología de investigación. En el capítulo 3 se discuten los resultados obtenidos. Finalmente, se dan las conclusiones del trabajo y las perspectivas de estudio.

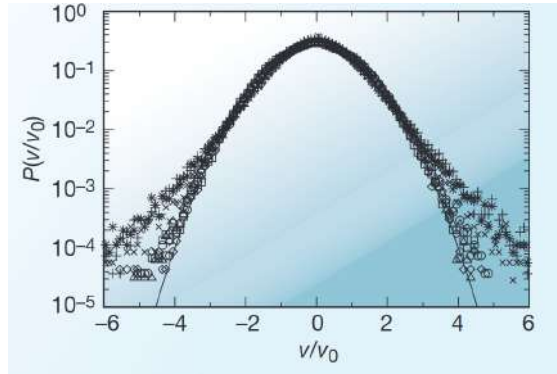
# Capítulo 1

## Antecedentes y marco teórico

### 1.1. Materia granular vibrada

Los estudios de la materia granular han permitido mejorar la comprensión y entendimiento de procesos fundamentales fuera de equilibrio, como lo es la auto-organización [6, 7, 8] o la transición vítrea [9, 10, 11]. Para estudiar este tipo de procesos, se han realizado experimentos con materia granular vibrada [12, 13, 14]. En este contexto, se han estudiado los gases granulares [3], logrando obtener diagramas de fase para dichos sistemas que dependen de parámetros tales como del coeficiente de restitución  $\epsilon$ , de la densidad de partículas o factor de empaquetamiento  $\phi$ , del tamaño de la partícula, del tamaño del sistema y del tiempo de observación [15]. Por otro lado, se han diseñado experimentos con monocapas de materia granular compuesta por partículas esféricas, dando como resultado un gas de esferas duras, en donde se ha estudiado la aglomeración de partículas y

se ha hallado que la distribución de velocidades no es gaussiana [16], como la que predice la teoría de Maxwell-Boltzmann para un gas ideal [17, 18]. Esto podría comprenderse considerando la naturaleza disipativa del sistema; sin embargo, al modificar la configuración del experimento, pasando de una capa a un sistema de dos capas (una colocada sobre la otra), y colocando en la capa inferior esferas pesadas y en la capa superior esferas ligeras, se encuentra que la distribución de velocidades para la capa de esferas ligeras sí es gaussiana [19] como se muestra en la FIG. 1.1. Esto habla de la complejidad en la dinámica en este tipo de sistemas.

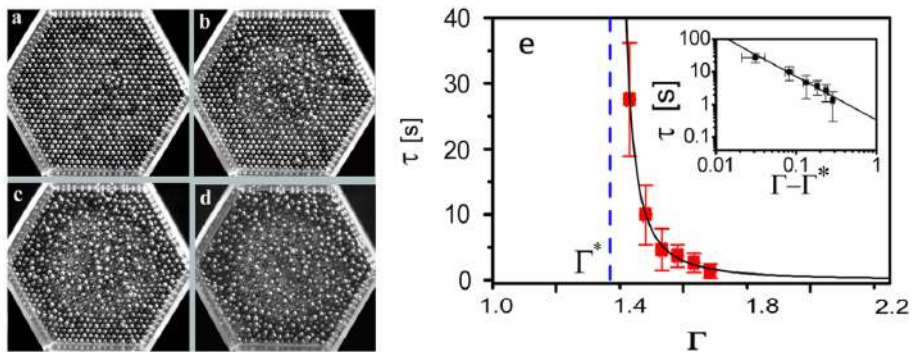


**Figura 1.1.** Distribución de velocidades para un sistema granular vibrado de dos capas. Los símbolos: cruz ( $\times$ ), signo más (+) y asterisco (\*), que pertenecen a la capa inferior, no corresponden a una distribución gaussiana (línea sólida). Los símbolos: diamante ( $\diamond$ ), cuadrado ( $\square$ ), círculo ( $\circ$ ) y triángulo ( $\triangle$ ), que pertenecen a la capa superior, se asemejan a una distribución gaussiana (línea sólida). Imagen tomada de [19]

Como se mencionó, los sistemas granulares vibrados se encuentran fuera del equilibrio y disipan rápidamente su energía, lo que significa que para realizar un análisis dinámico se necesita suministrar energía continuamente. En principio, la mecánica estadística no es aplicable a estos sistemas, puesto que toda esta herramienta se encuentra desarrollada para sistemas en equilibrio. Asimismo, el desarrollar herramientas para comprender sistemas fuera de equilibrio es un desafío actual para toda la comunidad científica [20]. Sin embargo, una característica de la materia granular, y en particular de los sistemas vibrados, es que gracias a los mecanismos de inyección y disipación de energía es posible alcanzar estados estacionarios [21, 22], en donde se logra un balance entre la energía suministrada y la energía disipada por los choques o la fricción entre partículas, o bien entre partículas y paredes. Debido a esto, se puede establecer una analogía entre los estados estacionarios y estados en equilibrio termodinámico.

Gracias a la analogía entre la mecánica estadística y los estados estacionarios, se pueden realizar estudios en donde la materia granular vibrada presenta, haciendo uso de la función de distribución radial (o función de correlación a pares), un comportamiento de fase robusto que incluye estados análogos a sólidos, líquidos y gases, así como las posibles transiciones entre ellos [21, 22, 23, 24, 25, 26]. Haciendo uso de sistemas granulares vibrados, se puede también realizar el estudio de estados metaestables análogos al supercalentamiento, como el que se observa para esferas duras, ver Fig. 1.2a [27]. Siendo un poco más específico, este fenómeno de supercalentamiento, se refiere a una monocapa de partículas esféricas duras que se encuentran compactadas en un contenedor con geometría hexagonal. Dicho contenedor, al agitarse con una aceleración adimensional  $\Gamma > 1$  pero por debajo de un

umbral de energía crítica,  $\Gamma^*$ , hace que el sistema sea capaz de mantener su configuración ordenada por un tiempo indefinido, como se representa en la FIG. 1.2b para  $\Gamma < 1.4$ . Por otro lado, si la energía suministrada al sistema rebasa el umbral de energía crítica, el sistema se sublima y el tiempo de estabilidad  $\tau$ , que tiene el sistema decrece obedeciendo a una ley de potencias, en donde el incremento de  $\Gamma$  disminuye el tiempo de estabilidad del sistema.



**Figura 1.2. Supercalentamiento de una monocapa hexagonal de esferas duras. (a-d) Imágenes tomadas desde la parte superior del contenedor. Se observa la metaestabilidad con  $\Gamma = 1.7$  y a  $60Hz$  y cómo evoluciona a distintos tiempos; a) 0 ms, b) 113 ms, c) 221 ms y d) 479 ms. Note la transición de sólido a fluido en menos de medio segundo. e) Tiempo de vida media del estado metaestable en función del valor de  $\Gamma$ .**

Imagen tomada de [27]

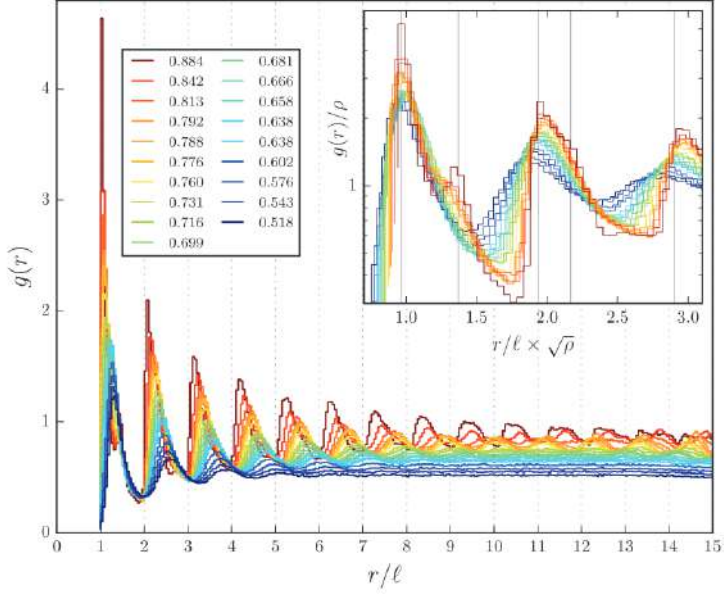
Cabe resaltar que todos los estudios mencionados con anterioridad hacen referencia a sistemas granulares compuestos de esferas duras. Esto se debe a que dicha geometría permite simplificar el estudio, ya que se evitan complejidades como introducir parámetros de rotación

para obtener los grados de libertad orientacionales y evitar que el sistema sea anisotrópico, o el modelar potenciales de interacción distintos al de interacciones repulsivas de corto alcance. Por ejemplo, la inclusión de fuerzas dependientes de la orientación produce una interacción que resulta compleja en el movimiento de rotación y orientación, lo que conduce a estados estructurales y dinámicos que no se observan en el caso de partículas esféricas [28, 29].

Por otro lado, se sabe que para sistemas dominados por interacciones repulsivas de núcleo duro, la geometría juega un papel crucial en la determinación de las posibles estructuras que se pueden generar [29, 30]. Para investigar los efectos de la anisotropía en sistemas bidimensionales vibrados, se ha hecho uso de partículas cuadradas duras. Por ejemplo, las simulaciones de dinámica molecular para cuadrados duros [30] predicen la formación de cristales de alta densidad con simetría cuadrada, los cuales evolucionan a una fase tetraédica. Por el contrario, un trabajo experimental a nivel de partículas coloidales usando losetas poliméricas cuadradas brownianas [29] sugiere un comportamiento de fase que incluye dos posibles estructuras cristalinas: una fase cristalina de rotor hexagonal y una fase cristalina rómbica. Con estos precedentes, trabajos posteriores basados en simulación de Monte Carlo [31, 32, 33], sugieren que la redondez de la partícula juega un papel importante en la organización de las mismas.

Los estudios de materia granular bidimensional vibrada y compuesta por partículas anisotrópicas son escasos, al compararlos con la vasta literatura que se tiene sobre sistemas granulares esféricos. Por tal motivo, los sistemas anisotrópicos son menos comprendidos; sin embargo, existen resultados experimentales para un sistema de

partículas cuadradas y sometidos a vibración, en donde la dinámica se encuentra restringida a un movimiento bidimensional en un contenedor circular [34]. En dicho experimento, se estudia las propiedades estructurales y la dinámica orientativa del sistema al cambiar la densidad de partículas en el arreglo. En su estudio estructural, hacen uso de la función de distribución radial  $g(r)$ , encontrando un diagrama de fases en función de la densidad en el sistema. Como se aprecia en la FIG. 1.3, el diagrama indica que conforme aumenta la densidad de partículas, los picos que proporciona  $g(r)$  se vuelven más pronunciados y delgados, sin embargo, a altas densidades se muestra la existencia de un realce en la curva, aproximadamente, en el valor de  $r/l = \sqrt{2}$ , el cual corresponde a la distancia en la que se encuentra el segundo vecino más cercano a la partícula de referencia en un cristal con simetría cuadrada. No obstante, dada a la geometría circular del contenedor, no todas las partículas se reorientan en la estructura cuadrada y por tanto el pico es poco visible (ver pico en el inset en  $r/l = \sqrt{2}$ ).



**Figura 1.3.** Función de distribución radial  $g(r)$  a distintas densidades. En el recuadro, Las líneas verticales indican las posiciones de los picos que se encuentran en:  $1, \sqrt{2}, 2, \sqrt{5}$  y  $3$ , los realces en las curvas se encuentran en las posiciones de  $\sqrt{2}$  y  $\sqrt{5}$  y a densidades mayores a  $\rho > 0.78$ . Imagen tomada de [34].

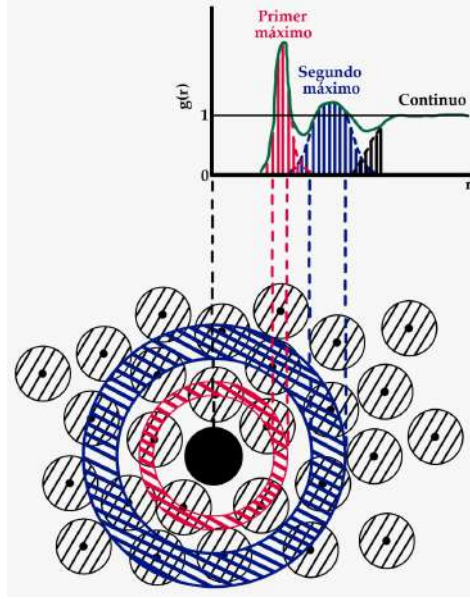
En el estudio de nuestro sistema granular de partículas cúbicas, analizaremos propiedades estructurales y dinámicas, las cuales se describen en las siguientes secciones.

## 1.2. Propiedades Estructurales

En la literatura se presentan diversas herramientas para caracterizar la estructura interna de un sistema de partículas (átomos, moléculas, coloides, etc.), en particular, centraremos nuestra atención en la función de distribución radial,  $g(r)$ .

### 1.2.1. Función de Distribución Radial

La función de distribución radial, describe la variación de la densidad de partículas como función de la distancia medida desde una partícula de referencia [35, 17]. Dicho de otro modo, si tenemos dos partículas,  $i$  y  $j$ , a una distancia  $r_{ij}$ , entonces la función de distribución radial,  $g(r_{ij})$ , es la probabilidad de encontrar a otra partícula, además de  $j$ , a la distancia  $r_{ij}$ , tomando como referencia a la partícula  $i$ . En términos más simples, la función de distribución radial mide la probabilidad de encontrar a una partícula a una distancia  $r$  desde una partícula de referencia dada, como se representa en la FIG. 1.4.

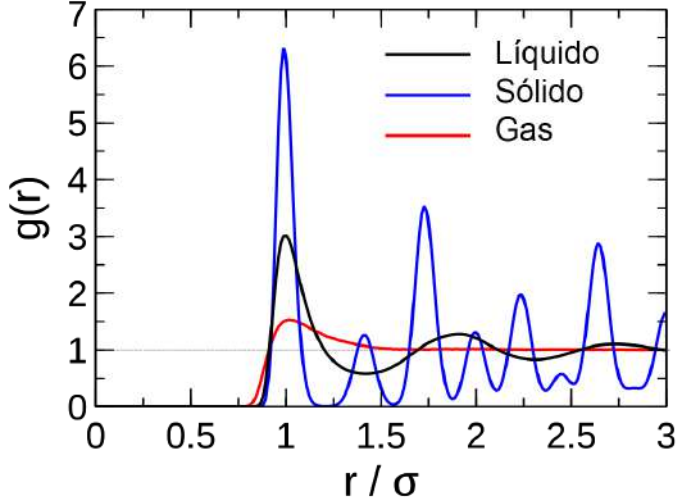


**Figura 1.4.** Representación esquemática de la función de distribución radial. Al centro la partícula de referencia  $i$ .  $g(r)$  para una muestra de discos duros. Imagen tomada de la referencia [36].

Como la función de distribución radial mide la correlación entre partículas, ya sea para un volumen o para un área, podemos determinar  $g(r)$  en un plano, es decir para discos, como [24]:

$$\rho g(r) = \frac{\langle n(r) \rangle}{2\pi r \Delta r} \quad (1.1)$$

donde  $\langle n(r) \rangle$  es el número promedio de partículas en un anillo de anchura  $\Delta r$  a una distancia  $r$  desde una partícula de referencia dada,  $2\pi r \Delta r$  es el área del anillo y  $\rho$  es la densidad de partículas en la superficie.



**Figura 1.5. Función de distribución radial para Argón: gas ( $T=300\text{K}$ ), líquido ( $T=80\text{K}$ ) y sólido ( $T = 50\text{K}$ ). Imagen tomada de la referencia [37].**

Como se sabe, la función de distribución radial,  $g(r)$ , también permite conocer el tipo de estructura interna del sistema estudiado. Dicho de otro modo, puede caracterizar el estado físico del material que se encuentra bajo estudio, es decir, se puede encontrar en estado gaseoso, líquido o sólido, ya que cada estado de la materia exhibe comportamientos diferentes en  $g(r)$  (ver FIG 1.5). Note que para un gas las partículas son completamente independientes y se encuentran lo suficientemente alejadas, por lo que  $g(r)$  tiene un primer máximo y posteriormente tiene un comportamiento constante e igual a uno. Por el contrario, en un líquido, la distancia entre partículas es menor en comparación al gas; en consecuencia,  $g(r)$  tiene algunos máximos que identifican a las partículas cercanas. Análogamente, para un sólido amorfo, como un vidrio, las moléculas presentan un mayor

ordenamiento que produce que los máximos se encuentren mejor definidos en comparación al líquido. Finalmente, en un cristal existe un ordenamiento periódico, por lo que  $g(r)$  tiene sus máximos bien definidos.

## 1.3. Propiedades Dinámicas

Con el objetivo de observar como influye la geometría de las partículas en la dinámica, se desea medir que tanto se mueven las partículas en un lapso de tiempo, para realizar dicha medición se calcula el desplazamiento cuadrático medio (DCM),  $\langle [\Delta \mathbf{r}(\tau)]^2 \rangle$ .

### 1.3.1. Desplazamiento Cuadrático Medio

En mecánica estadística, el desplazamiento cuadrático medio es una medida de la evolución de la posición de una partícula con respecto a una posición de referencia de ella misma. Es una observable física, comúnmente usada en partículas con movimiento aleatorio y se puede pensar que es la medida que indica cuánto se ha desplazado la partícula dentro del sistema.

El desplazamiento cuadrático medio para una partícula se define como [17, 18]:

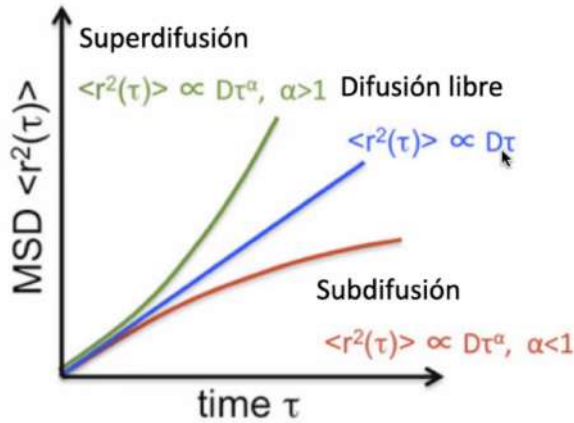
$$\langle [\Delta \mathbf{r}(\tau)]^2 \rangle = \langle [\mathbf{r}(\tau_i + \Delta\tau) - \mathbf{r}(\tau_i)]^2 \rangle \quad (1.2)$$

en donde  $\mathbf{r}(\tau_i)$  es la posición inicial de una partícula y  $\Delta\tau$  es un tiempo de correlación. El incremento se define a conveniencia, un ejemplo podría ser:  $\Delta\tau = n\tau_i$ , con  $n$  un número entero.

En 1905, el físico alemán A. Einstein, resuelve el problema del movimiento Browniano [38], en donde demuestra que el desplazamiento cuadrático medio de una partícula browniana, a tiempos largos, tiene la forma

$$\langle [\Delta \mathbf{r}(\tau)]^2 \rangle = 2D\tau \quad (1.3)$$

donde  $D$  es el coeficiente de difusión. Por otro lado, en el año de 1908, P. Langevin obtiene el mismo resultado [39] que Einstein. La ecuación 1.3 es un resultado de mucha importancia, ya que proporciona información sobre las propiedades difusivas del sistema.



**Figura 1.6.** Comportamiento del DCM para el caso superdifusivo ( $\alpha > 1$ ), difusivo ( $\alpha \sim 1$ ) y subdifusivo ( $\alpha < 1$ ).

Imagen tomada de la referencia [40]

En términos generales,  $\langle [\Delta \mathbf{r}(\tau)]^2 \rangle \sim \tau^\alpha$ , donde  $0 < \alpha$ . En el caso

cuando  $\alpha > 1$  se dice que el MSD tiene un comportamiento superdifusivo, en particular, a tiempos cortos  $\langle [\Delta \mathbf{r}(\tau)]^2 \rangle \sim \tau^2$ , es decir, la partícula tiene un movimiento balístico y no siente el efecto de las partículas que tiene a su alrededor, esto es, la partícula aún no tiene interacción con sus vecinas más cercanas y el MSD tiene un comportamiento parabólico. Por otro lado, cuando  $\alpha \sim 1$  se dice que es el régimen difusivo, el cual es característico del movimiento browniano y el MSD tiene un comportamiento lineal. Cuando  $\alpha < 1$ , se dice que el sistema tiene un comportamiento subdifusivo. En el régimen subdifusivo, las partículas interactúan con otras partículas a su alrededor, y en este caso, el MSD alcanza un valor asintótico, ver FIG. [1.6](#).

Por otro lado, cuando la curva del MSD sufre arresto dinámico, es decir un comportamiento descrito por un *plateau* (meseta), se define un parámetro llamado longitud de localización como [\[41, 42\]](#)

$$l = \lim_{\tau \rightarrow \infty} (\sqrt{\langle [\Delta \mathbf{r}(\tau)]^2 \rangle}) \quad (1.4)$$

el cual describe el desplazamiento de la partícula. La longitud de localización mide cuánto se desplazó la partícula hasta su saturación. Este valor es indicativo y nos ayudará a entender la saturación en el sistema, la cual indica que nuestro sistema es finito.

Una vez que se han definido las propiedades estructurales y dinámicas a analizar en este trabajo de tesis, en el siguiente capítulo se describirá el procedimiento experimental usado para el estudio de partículas cúbicas, y posteriormente se discutirán los resultados encontrados.

## Capítulo 2

# Arreglo experimental y Metodología

La materia granular ha sido estudiada de diversas maneras, como se ha hablado en secciones anteriores; sin embargo, la mayoría de los métodos de estudio de materia granular son enfocados a partículas esféricas. Aquí se realiza un estudio de materia granular cúbica, tomando como base un arreglo experimental cuasi-2D vibrado.

A continuación se realiza una descripción de los materiales utilizados y del arreglo experimental. De manera similar, se hace una descripción de cómo se obtuvieron y analizaron los datos.

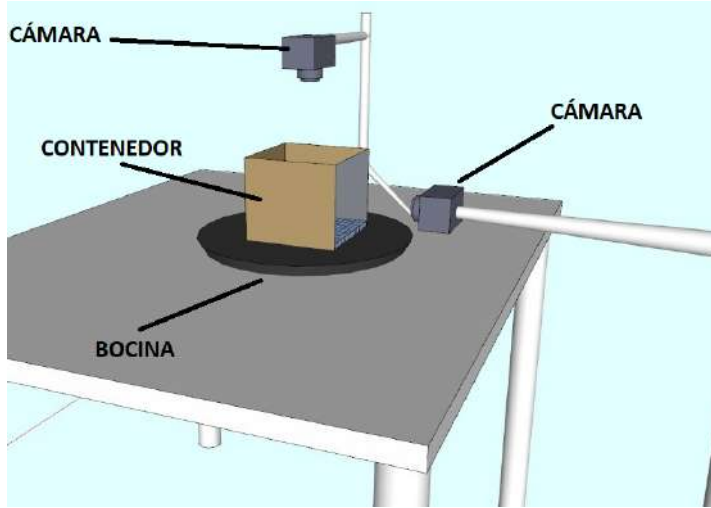
### 2.1. Arreglo experimental

La materia granular bajo estudio está conformada por dados de acrílico de 5 mm de lado y una masa de 0.123 gr. El contenedor es una caja de plástico cuadrada, la cual tiene 10 cm por lado y fue fabricada

en impresora 3D con políácido láctico (PLA). El contenedor se fija a una mica de acrílico de 6mm de grosor, cuya forma coincide con la de un altavoz de bajas frecuencias (subwoofer) de la marca XPLOD, modelo XS-L1290P5 que la hará vibrar. La oscilación mecánica será generada por el subwoofer conectado a un amplificador de audio de la marca XPLOD, modelo XM-SD61X, el cual amplifica una señal sinusoidal producida por un generador de frecuencias de la marca BK PRECISION, modelo 4053. El movimiento de las partículas es capturado con una cámara de alta velocidad de la marca PHOTRON modelo Fastcam Mini UX100 desde una vista superior. La obtención y análisis de los datos se realiza mediante los programas ImageJ y Matlab.

Con los materiales ya mencionados se monta el arreglo experimental de la siguiente forma: el contenedor de partículas que se encuentra sobre la mica de acrílico es colocada sobre el subwoofer. La mica no solo tiene la función de sostener al contenedor, también sirve como membrana para transmitir la oscilación mecánica del subwoofer al contenedor. La membrana es pegada con silicona sobre el perímetro de la bocina para evitar movimientos que afecten el comportamiento dinámico durante la vibración. El generador de frecuencias envía una señal eléctrica con una amplitud de 30 mV, y una frecuencia de 60 Hz, dicha señal pasa por el amplificador y finalmente llega al subwoofer, que la convierte en una onda mecánica. La cámara de alta velocidad fue colocada enfocando en una cara lateral del contenedor, para realizar grabaciones en el plano Y,Z. Posteriormente, la cámara se coloca en la parte superior, sobre el eje del contenedor de partículas, para realizar grabaciones sobre el plano X,Y. Las grabaciones se realizan a alta velocidad a 125 cuadros por segundos (o fps por sus

siglas en inglés). Un esquema ilustrativo del arreglo experimental previamente descrito se muestra en la FIG.2.1.



**Figura 2.1. Representación esquemática del arreglo experimental.**

## **2.2. Parámetros de control**

A continuación se introducen dos parámetros que podemos regular o mantener constantes en el sistema vibratorio, los cuales llamaremos parámetros de control.

### **2.2.1. Inyección de energía: aceleración adimensional ( $\Gamma$ )**

Nuestro sistema granular vibrado se somete a una vibración sinusoidal de la forma  $y(t) = A \sin(\omega t)$ . Bajo estas condiciones, uno de los parámetros de control es la aceleración adimensional [43, 27, 12],  $\Gamma$ , la

cual se define como:

$$\Gamma = \frac{A(2\pi f)^2}{g} \quad (2.1)$$

donde  $A$  es la amplitud de la oscilación mecánica,  $f = \omega/2\pi$  es la frecuencia de la oscilación, y  $g$  es la aceleración de la gravedad. Al variar el parámetro  $\Gamma$  lo que se hace es aumentar o disminuir la energía inyectada al sistema; básicamente, la aceleración adimensional (ecuación 2.1) es proporcional a la energía que se suministra al sistema. En el caso de nuestro sistema granular,  $\Gamma \approx 3$  se mantendrá constante. Note que cuando  $\Gamma = 1$ , significa que la aceleración de vibración  $A\omega^2$  es igual al valor de  $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ , por lo que las partículas comienzan a separarse de la superficie vibrada durante el ciclo de oscilación. Para valores menores, las partículas permanecen en contacto con la base. El valor de  $\Gamma = 3$  asegura que las partículas reciban suficiente energía como para formar un gas a bajas densidades, y de este modo, la transición hacia fluido y sólido se deba al incremento en el número de dados, esto se discute en la siguiente sección. Para el caso de supercalentamiento, este parámetro será variable.

### 2.2.2. Densidad de partículas (N)

Como ya se mencionó en el capítulo anterior,  $g(r)$  y el MSD, son dos observables características para el estudio de la estructura y dinámica en líquidos. La primera da una estimación de la distribución promedio de las partículas, mientras que la segunda provee información sobre la movilidad de las mismas. Para líquidos en donde predominan exclusivamente interacciones repulsivas de corto alcance, por ejemplo el fluido de esfera dura [35], el parámetro de control típico es la

fracción de empaquetamiento, definida como:

$$\phi = \frac{\pi N \sigma^3}{6V}, \quad (2.2)$$

donde  $N$  es el número de partículas,  $V$  es el volumen y  $\sigma$  es el diámetro de una esfera. Sin embargo, en nuestro caso, determinar  $\phi$  podría resultar ambiguo y muy complicado debido a que el sistema es cuasi-tridimensional y no cuenta con una frontera superior definida<sup>1</sup>, por lo que para facilitar el análisis solo utilizaremos  $N$  como parámetro de control.

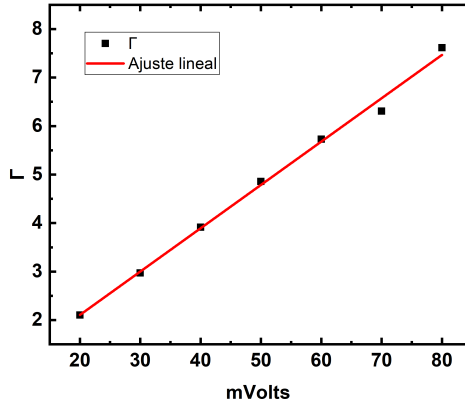
## 2.3. Metodología

Una vez montado el arreglo experimental y definidos los parámetros de control, se pone en funcionamiento el mecanismo de vibración, se deja pasar un lapso de tiempo ( $t_{espera} \approx 5$  s) para lograr que el sistema alcance un estado estacionario. Mayores tiempos de espera no producen efecto importante en la dinámica observada. Posteriormente, se realizan las grabaciones de alta velocidad que permiten determinar la dinámica de las partículas que conforman el sistema y cómo cambia su comportamiento de acuerdo con la variación del número de dados.

Como se menciona arriba, la medición de la energía suministrada al sistema mediante la vibración se realiza con el parámetro  $\Gamma$ . Para obtener dicho parámetro se realiza una grabación desde una vista lateral del contenedor y variando la amplitud de voltaje de la señal

---

<sup>1</sup>El movimiento del sistema de estudio es 3D, sin embargo, es grabado por una cámara, por lo que el movimiento se restringe a un movimiento 2D. Por otro lado, el conocer el volumen  $V$  es muy complejo ya que las partículas se desplazan verticalmente.



**Figura 2.2.** Diferentes valores de gama con respecto al cambio de la amplitud de la señal eléctrica.

sinusoidal enviada por el generador de frecuencias. El objetivo es medir la amplitud física,  $A$ , de la oscilación mecánica. Con esta amplitud y utilizando la ecuación 2.1, se calcula  $\Gamma$ .

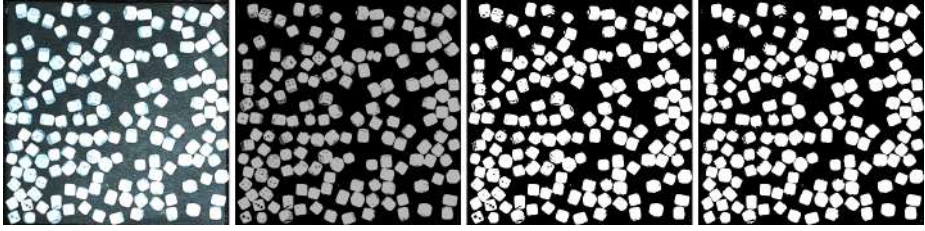
Como se aprecia en la FIG. 2.2,  $\Gamma$  muestra un comportamiento lineal con el voltaje suministrado. Los valores de  $\Gamma$  que se utilizaron son grandes en comparación con los reportados en experimentos similares realizados con esferas duras [24, 25, 26]; los valores que se tienen para esferas duras rondan entre  $1 < \Gamma < 2$ . Para nuestro arreglo experimental usamos una  $\Gamma$  de aproximadamente 3. Como se mencionó, este valor fue requerido para lograr gasificar al sistema, lo que puede deberse a la geometría de las partículas que componen al mismo, puesto que la superficie de contacto de un cubo es mayor al de una esfera, este hecho genera que la disipación de energía sea mucho mayor en los cubos que en las esferas. Por ende, se requiere que la energía suministrada para

agitar a las partículas en el sistema sea mayor. Además, el coeficiente de restitución de los dados es mucho menor al de esferas de vidrio o acero típicamente usadas para estudios gases granulares.

### 2.3.1. Procesamiento de imágenes:

Se grabaron vídeos para  $N=1, 10, 25, 50, 100, 150, 200, 250, 300$  y  $350$  partículas. Cada captura de vídeo se realizó a 125 fps por aproximadamente 155 segundos. Los datos se obtienen mediante el software ImageJ, con esta herramienta se procesan los vídeos; primero se convierte la imagen a 8 bits para ajustar el brillo y el contraste, posteriormente, se binariza la imagen ajustando el umbral de escala de grises. Las herramientas *Fill Holes* y *Wathershed*, dentro del software ImageJ, son de bastante utilidad para procesar los vídeos una vez binarizada la imagen. La herramienta *Fill Holes* ayudará a que las pequeñas imperfecciones del mismo material que no se binarizaron adecuadamente, sean rellenadas. Por otro lado, la herramienta *Wathershed* separa los dados haciendo uso de la interpretación del software y permite que dos partículas que colisionan puedan distinguirse por separado. Todo este proceso se ejemplifica en la FIG.

**3.3.** El procesamiento de las imágenes es de vital importancia y debe de hacerse con sumo cuidado, ya que el mal procesamiento de las mismas puede generar múltiples errores, como pueden ser la incorrecta medición de posiciones en el de seguimiento de partículas. Lo concerniente a los errores producidos por un inadecuado procesamiento de las imágenes se desarrolla de mejor manera en el Apéndice A.



**Figura 2.3.** Imagen con 150 partículas. Ejemplo de como se procesan los frames de cada vídeo, izquierda imagen original, derecha imagen ya procesada.

Finalmente, se realiza el seguimiento de partículas, el cual se lleva a cabo para cada cuadro del vídeo en cuestión, obteniendo así las posiciones de las partículas en cada instante durante el tiempo que dura la grabación. Con las posiciones de las partículas, se realiza el análisis estructural con la función de distribución radial,  $g(r)$ , y se calcula el desplazamiento cuadrático medio,  $\langle[\Delta\mathbf{r}(t)]^2\rangle$ .

### 2.3.2. Cálculo de $g(r)$ y el MSD.

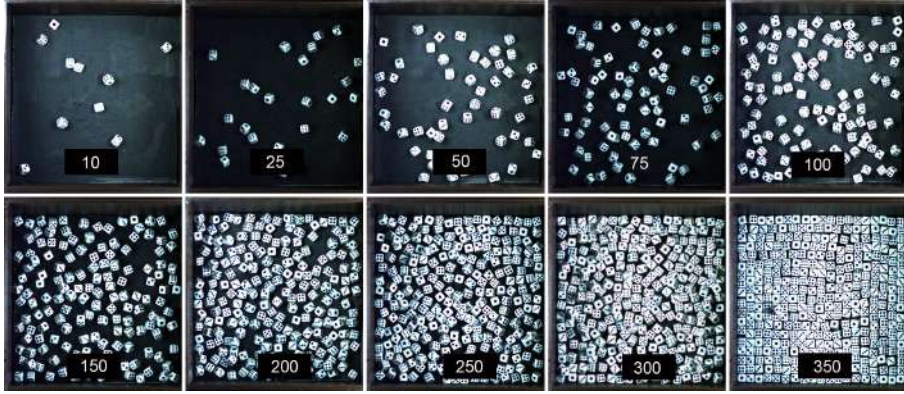
El cálculo de la función de distribución radial se realiza mediante la implementación de un código de programación en lenguaje Matlab llamado **CORDERLY** [44]. Este código calcula  $g(r)$  para cada cuadro del vídeo, en consecuencia, se obtienen el mismo número de gráficas de  $g(r)$  que cuadros por vídeo. Posteriormente se realiza el promedio de  $g(r)$  para todos los cuadros, de esta manera se puede hablar de un comportamiento estructural promedio para cada sistema con distinto número de partículas. Para el cálculo del desplazamiento cuadrático medio, se desarrolló un código de programación en lenguaje Matlab, que se presenta en el apéndice B. El código toma las posiciones de las

partículas obtenidas, con un incremento en  $\tau$  de 0.04 segundos (cada 5 cuadros). Esto es, los intervalos considerados fueron 0.04 s, 0.08 s...y así sucesivamente hasta abarcar el tiempo total del video (155 s aprox), de modo que se consideren al menos cinco órdenes de magnitud para el análisis del MSD. A diferencia del cálculo de  $g(r)$ , en este caso solo se obtiene una gráfica del  $\langle[\Delta\mathbf{r}(t)]^2\rangle$  por vídeo.

## Capítulo 3

# Resultados

La figura [3.1](#) muestra imágenes de la vista superior del sistema para distintos números de dados,  $N = 10, 25, 50, 100, 150, 200, 250, 300$  y  $350$ . Para  $N=10$  y hasta 25 dados, se puede notar prácticamente a todas las partículas se encuentran separadas, lo que sugiere que su interacción es muy limitada. Cuando  $N=50$ , comienza a observarse la aparición de estructura al formarse pequeños cúmulos. Estos agregados son mucho más notorios conforme se sigue incrementando  $N$ . En  $N=200$ , se observa ya algo parecido a un fluido denso y las partículas al no estar confinadas en el eje  $z$  se superponen considerablemente, y conforme se incrementa más el número de partículas, el sistema se va ordenando hasta parecer un cristal con estructura cuadrada. Solo en este momento se podría definir una fracción de empaquetamiento  $\phi \approx 1$ , ya que casi todas las partículas están en una sola monocapa, y por ello en el plano  $xy$ . Lo anterior da indicio de un cambio de fase en el arreglo, por lo que se implementa la función de distribución radial para realizar un estudio estructural de manera cuantitativa que depende de la densidad de partículas en el sistema.



**Figura 3.1.** Vista superior del sistema con diferentes números de partículas.

### 3.1. Análisis estructural

Del análisis estructural se obtiene la FIG. 3.2, que nos indica el valor de la función de distribución radial  $g(r)$  como función de  $r/d$  para distintos números de partículas. La distancia radial  $r$  está normalizada con el lado del cubo  $d$ . Como se puede observar, para  $N = 100$  y  $150$ , el sistema tiene un comportamiento parecido al de un gas, ya que se observa un primer máximo relativamente pequeño en  $r \approx 1.32$ , seguido de una relajación rápida a  $g(r) \approx 1$  conforme aumenta la distancia radial, indicando la falta de estructura en el sistema. Para valores de  $r/d < 1$  el valor de  $g(r)$  es cero porque las partículas son duras. No obstante, pequeñas variaciones pueden esperarse considerando que puede haber movimiento fuera del plano. No obstante, esto último es notorio solo para mayores densidades.

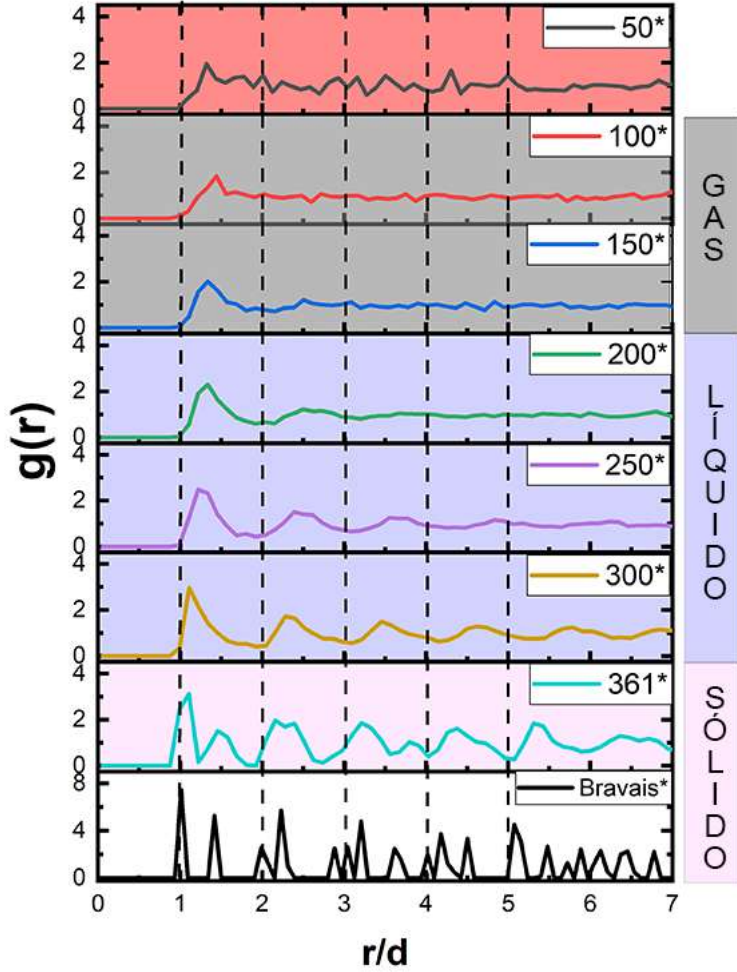
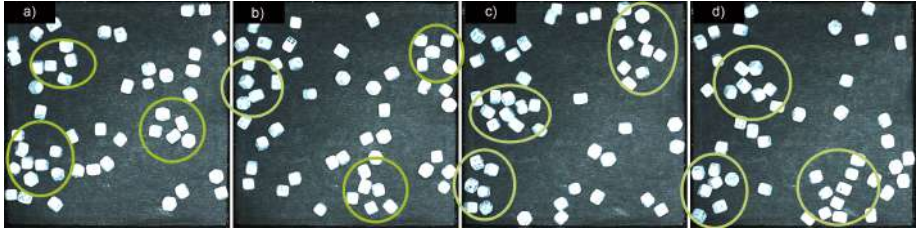


Figura 3.2. Funciones de distribución radial para diferente número de partículas a un  $\Gamma = 2.97297$ . Bajo estas condiciones, se identifican tres regiones: tipo gas, tipo líquido y tipo sólido.

Cuando se aumenta el número de partículas, es decir, para  $N = 200$ , 250 y 300, el comportamiento es similar al de un líquido, pasando de un líquido diluido, hasta un líquido denso. Para  $N = 350$  a 361, el comportamiento del sistema se asemeja al de un sólido. En la parte inferior de la FIG. 3.2, se coloca un sistema de referencia, el cual muestra  $g(r)$  para una red de Bravais de estructura cuadrada, que representa un caso ideal para nuestro sistema. Como se deseaba, la localización de los picos de la red cristalina de Bravais corresponde o se aproxima a las posiciones de los picos del sistema vibrado para el caso del sólido, lo cual refleja una buena aproximación del método de análisis. Lo anterior sugiere que esta figura puede ser utilizada para construir un diagrama de fases en función del número de partículas y las condiciones de vibración.

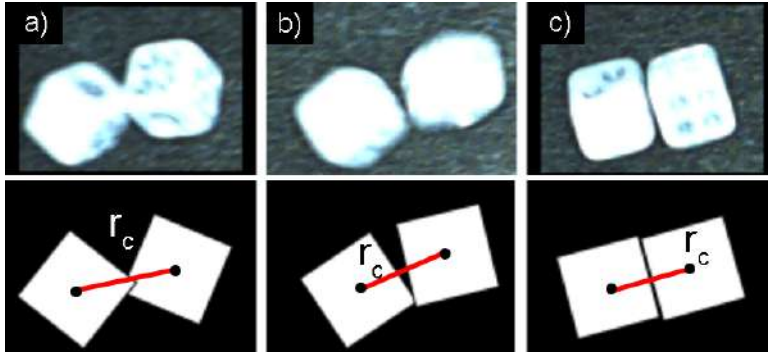
Nótese que en la parte superior de la FIG. 3.2, es decir, para  $N = 50$ , se observa un pico principal, centrado en  $r = 1.32$ , seguido de un tren de picos más pequeños, entre  $1.32 < r < 5$ . Para este caso se esperaba un comportamiento similar al del caso de  $N = 100$  y  $N = 150$  característico de un gas, lo cual invita a pensar que se trata de un error de medición o de procesamiento de imagen, o incluso una falta de estadística. Sin embargo, esto no es así. Debido a las anomalías antes mencionadas, el vídeo correspondiente al sistema de 50 partículas fue minuciosamente revisado. Como resultado de dicho análisis, se observó una tendencia a la aglomeración en distintas regiones del contenedor. En la FIG. 3.3 se observa la acumulación de partículas, marcadas con un círculo amarillo. Este comportamiento explicaría los picos esporádicos y a distancias más allá del primer valor de contacto en  $g(r)$ .



**Figura 3.3.** Capturas tomadas del vídeo de 50 partículas a distintos tiempos: *a)* 11.48 s , *b)* 45.4s, *c)* 80.92 s y *d)* 141.72 s, con una aceleración adimensional  $\Gamma \approx 3$  ilustrando la formación de cúmulos (círculos sólidos) .

La gráfica de  $g(r)$  para 50 partículas presenta un comportamiento análogo al de líquidos coloidales, el cual es típicamente indicativo de auto organización y formación de aglomeraciones [45], originados por interacciones de carácter atractivo. En este sentido, se resalta que las interacciones entre partículas son puramente repulsivas en nuestro sistema (cubos duros). Una posible explicación de la formación de aglomerados a bajas densidades es el efecto de la geometría cúbica de las partículas. A diferencia de esferas, los dados poseen vértices y las colisiones pueden ocurrir con distintas inclinaciones o configuraciones. Si una colisión sucede entre el vértice de una partícula y la cara plana de otra, por ejemplo, el punto de contacto funciona como un punto de apoyo o eje de giro para rotar al dado y alinear su cara con la del otro, incrementando considerablemente el área y tiempo de contacto, por lo que una mayor cantidad de energía es disipada debido a fricción durante la colisión, induciendo la acumulación de las partículas en ciertos instantes.

Otra característica importante que se muestra en la FIG. 3.2 es que el primer máximo se encuentra recorrido a la derecha en casi todos los casos, es decir, no comienza en el valor  $r/d = 1$ , como se esperaría para el caso de esferas duras. La causa más probable es de nuevo la geometría de la partícula, puesto que a bajas densidades, la partícula tiene mayor libertad de movimiento, y puede fácilmente rotar para tener distintas distancias de contacto, ( $r_c$ ), siendo la diagonal la máxima distancia de contacto entre partículas y la de un lado del cubo  $d$  la menor distancia de contacto, es decir  $1 < r_c/d < \sqrt{2}$ , donde  $\sqrt{2}d$  es la diagonal, esto se ejemplifica en la FIG. 3.4. A bajo número de partículas, la probabilidad de contacto está gobernada por el comportamiento observado en la FIG. 3.4 a), mientras que a alto número de partículas, es gobernado por el comportamiento exhibido en la FIG. 3.4 c).

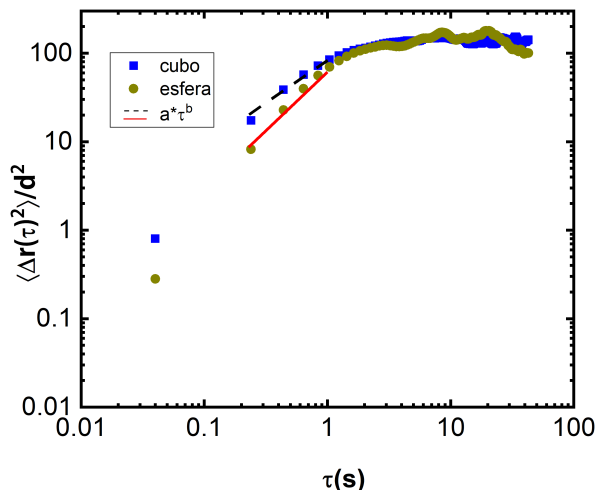


**Figura 3.4.** Instantáneas que ilustran las posibles distancias de contacto durante colisiones entre dos partículas cúbicas:

(a) Colisión en diagonal vértice-vértice, b) Colisión vértice-lado, c) colisión lado-lado (mínima separación entre partículas medida de centro a centro)

## 3.2. Análisis dinámico

La dinámica del sistema está descrita por el desplazamiento cuadrático medio MSD, que permite cuantificar la movilidad media de una partícula arbitraria en nuestro sistema.

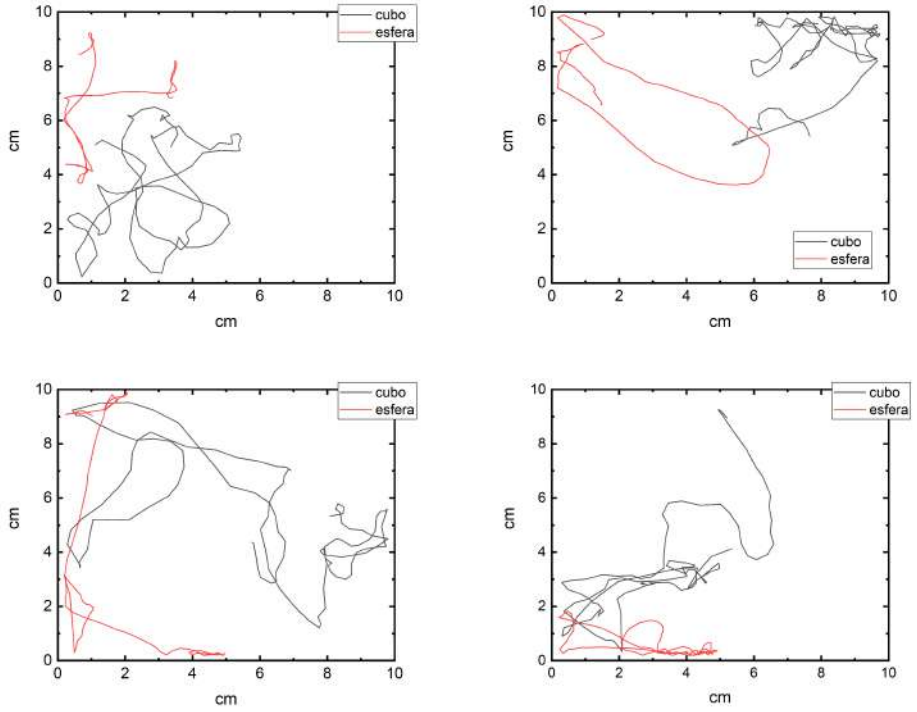


**Figura 3.5.** Desplazamiento cuadrático medio por unidad de área. Curvas obtenidas para una partícula esférica y una partícula cúbica. Para la esfera  $b = 1.30357$  y para el cubo  $b = 0.96150.0736$ .

En la FIG. 3.5 se observa el  $\langle [\Delta \mathbf{r}(\tau)]^2 \rangle / d^2$  para una partícula cúbica y una partícula esférica. En ambos casos se observa que el MSD tiene un comportamiento análogo, el cual muestra un rápido crecimiento seguido de un plateau, en tiempos de correlación similares. De esto se sigue que ambas partículas, independientemente de su forma geométrica, tienen un mismo desplazamiento efectivo en tiempos casi idénticos. No obstante, nótese que a tiempos cortos existen algunas diferencias en este régimen, el MSD de la partícula cúbica es

ligeramente mayor que el de la partícula esférica. Por otro lado, al realizar un ajuste de ley de potencias ( $y = a\tau^b$ ) se observa que para el cubo se tiene un ajuste lineal  $b \sim 1$  (línea azul), mientras que para la esfera se tiene un ajuste mayor a la unidad, con  $b \sim 1.3$  (línea roja). Como ambas partículas se encuentran inmersas en el mismo sistema, es decir, se encuentran sometidas a las mismas condiciones de confinamiento y vibración, la diferencia se debe a la constitución y geometría entre partículas.

En beneficio de entender mejor las diferencias entre las dinámica de la esfera y de cubo, resulta instructivo ver las trayectorias de ambas partículas. La FIG. 3.6 muestra las trayectorias arbitrarias en una ventana temporal de 5 s, que es la ventana de tiempo en que el MSD satura en un plateau. La esfera describe trayectorias suaves, cubriendo distancias largas y mostrando pocas desviaciones de dirección en su movimiento. Esto resulta de que después de una colisión la esfera sufre un movimiento parabólico hasta chocar nuevamente con la base. Por otro lado, el cubo tiene un movimiento más errático debido a la aleatoriedad con la que choca con la base del contenedor (choques de vértices, aristas, caras), por lo que las trayectorias que sigue el cubo se asemejan más a la trayectoria que describe una partícula browniana, aun siendo una sola partícula y estando en un régimen no-browniano. En este sentido las trayectorias de ambas partículas reflejan la distinta naturaleza del movimiento para cada una debido a su geometría, más balístico para la esfera y más difusivo para el cubo. Evidentemente, tratar de describir la dinámica del cubo es un trabajo mucho más desafiante, pues debe tomarse en cuenta un parámetro orientacional que nos indique cómo es que el dado colisiona con una superficie en un momento dado.



**Figura 3.6. Secuencia de cuatro trayectorias desarrolladas, por una partícula cúbica (línea negra) y una partícula esférica (línea roja), en intervalos aleatorios de duración de 5s por por imagen.**

Por otro lado, en la FIG. [3.7](#) se muestra el comportamiento del MSD para distinto número de partículas cúbicas, comenzado en 1 y terminando en 350. Existe una región de tiempo, delimitada entre las líneas punteadas verticales, que se encuentra entre 0.24 y 1.04 segundos, donde se realiza un ajuste de ley de potencias, como en el caso de la esfera y el cubo, donde  $a$  y  $b$  son constantes. El ajuste se lleva a cabo para determinar el comportamiento inicial del sistema, el

cual puede ser: difusivo o subdifusivo, como ya se habló en el capítulo dos. La línea sólida en negro representa un comportamiento difusivo (pendiente  $\sim 1$ ), mientras que en este gráfico la línea sólida en rojo representa un comportamiento subdifusivo (pendiente  $< 1$ ). Los coeficientes de  $b$  encontrados para cada numero de partículas se presentan en la tabla [3.1](#)

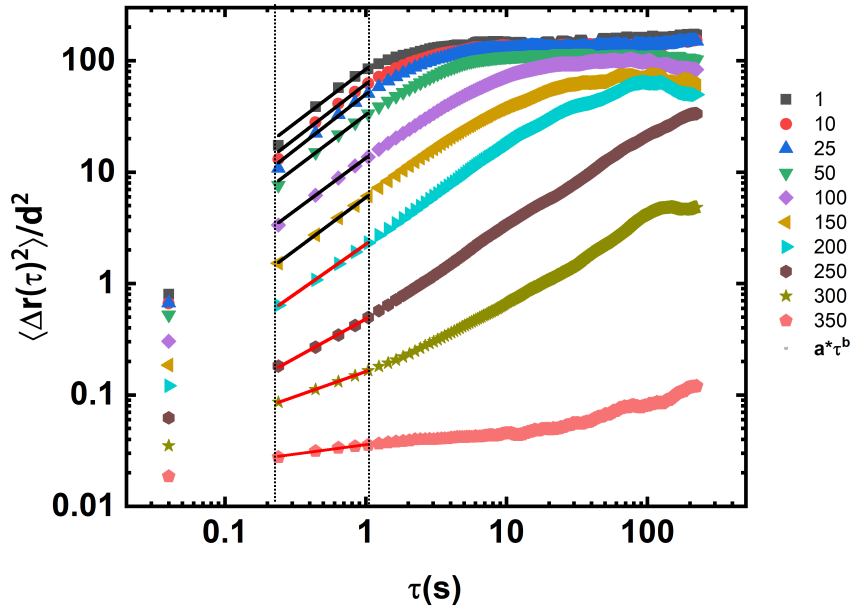


Figura 3.7. Desplazamiento cuadrático medio por unidad de área en función del salto de tiempo  $\tau$ . Curvas obtenidas para distintos números de partículas indicadas en la leyenda.

Entre  $\tau = 0.24$  y  $\tau = 1.04$  se realiza un ajuste de ley de potencias al MSD  $\propto \tau^b$  (ver valores de  $b$  en la tabla [3.1](#)).

| Número de partículas | $b$     | error en $b$ |
|----------------------|---------|--------------|
| 1                    | 0.9615  | 0.07367      |
| 10                   | 0.97759 | 0.05529      |
| 25                   | 0.9893  | 0.04212      |
| 50                   | 0.95407 | 0.03277      |
| 100                  | 0.93583 | 0.01699      |
| 150                  | 0.94079 | 0.00454      |
| 200                  | 0.88666 | 0.0035       |
| 250                  | 0.6921  | 0.01811      |
| 300                  | 0.44662 | 0.00851      |
| 350                  | 0.16878 | 0.0128       |

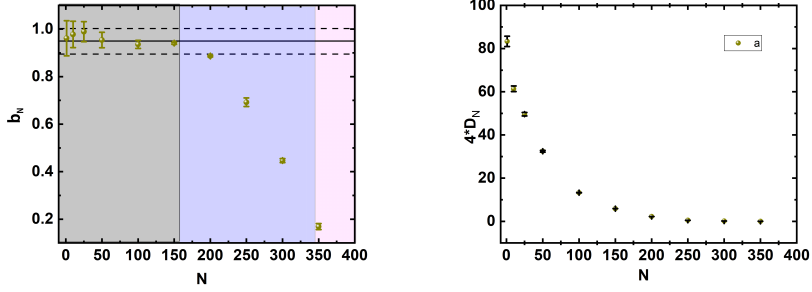
**Tabla 3.1. Valores obtenidos para la potencia  $b$  en el ajuste de ley de potencias a distinto número de partículas.**

A bajo número de partículas con  $N = 1, 10$  y  $25$ , el MSD tiene un comportamiento difusivo similar en los tres casos ( $b \sim 1$ ), alcanzando el plateau en saltos de tiempo de 1 s. Al aumentar el número de partículas a  $N = 50$ , se muestra un crecimiento ligeramente más lento hasta alcanzar el valor de saturación a  $\tau \sim 10$  s, aunque a tiempos cortos también se tiene un ajuste de ley de potencias difusivo. Por tanto, para  $N < 50$  dados podemos decir que tienen comportamientos predominantemente difusivos, y en vez de tomar todos los valores de  $N$ , solo podríamos basarnos en el valor de  $N = 50$  para futuras referencias. Al continuar aumentando el número de datos a  $N = 100, 150$  y  $200$ , se observa una ralentización gradual en el crecimiento del MSD, así como distintos tiempos de saturación en dichas curvas; esto se debe a que las partículas ya no tienen la misma libertad de movimiento y las colisiones entre partículas se comienzan a manifestar

en el MSD. No obstante, para estos valores de  $N$ , el MSD a tiempos cortos también tiene un comportamiento cuasi-difusivo.

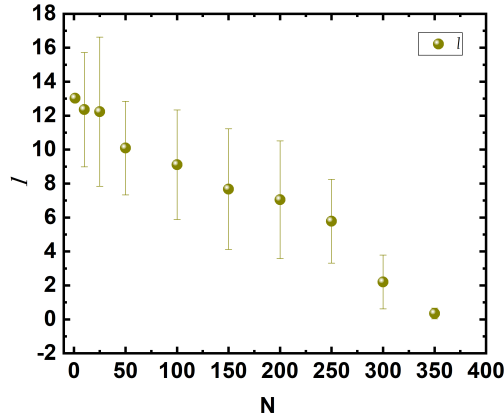
Conforme se sigue incrementando el número de partículas en el contenedor,  $N = 250$  y  $300$ , se observan los efectos del volumen excluido y las colisiones se manifiestan con más fuerza en la dinámica descrita por el MSD. Para estos valores de  $N$ , se encuentra un comportamiento subdifusivo a tiempos cortos. También se observa que el crecimiento del MSD no llega a un valor de saturación. Hasta cierto punto, estas características son comparables a los llamados efectos de enjaulamiento que son característicos de la dinámica de las suspensiones coloidales de esferas duras [46, 47]. Para pocas partículas, el plateau significa que el efecto del confinamiento lateral de las paredes del contenedor se hace presente, pero conforme la densidad del sistema aumenta, se hace más complicado que una partícula logre viajar grandes distancias dentro de la caja, pues sus vecinas la encajonan y obstruyen su desplazamiento. Para  $N = 350$  se obtiene un MSD prácticamente plano, lo cual indica que las partículas se encuentran ya encajonadas por sus vecinos alcanzando casi una estructura cristalina.

De lo anterior se sigue que para tiempos muy cortos y  $N$  menores a 200 partículas, el MSD tiene un comportamiento difusivo, dicho de otra manera, el sistema se comporta como un sistema Browniano en una ventana temporal de aproximadamente un segundo, por lo que se le puede asociar un coeficiente de difusión. Cabe resaltar que este sistema no es Browniano por su naturaleza disipativa (fuera de equilibrio) y, que estrictamente hablando, no se le puede asociar un coeficiente de difusión ya que no se encuentra en un solvente, sin embargo, matemáticamente se puede hacer dicha asociación.



**Figura 3.8. Comportamiento del exponente y el coeficiente de difusión, en el ajuste de ley de potencias, para diferentes concentraciones de partículas en el sistema. IZQUIERDA: Ajuste de la potencia. DERECHA: Ajuste del coeficiente de difusión.**

Como se observa en la FIG. 3.8 a) la región en que el sistema tiene un comportamiento difusivo tipo Browniano, es entre 1 y 150 partículas, es decir, en la región en donde el sistema tiene un comportamiento gaseoso. Aún con 200 partículas, se puede decir que sigue comportándose de forma difusiva, sin embargo para configuraciones de más de 200 partículas, el sistema tiene un comportamiento subdifusivo. Por otro lado, en la FIG. 3.8(b), se observa el comportamiento para la constante de difusión  $a = 4D_N$ , siendo  $D_N$  el equivalente al coeficiente de difusión en este sistema. Note que para configuraciones con más de 200 partículas, la constante  $a$  es despreciable, es decir, aproximadamente cero, indicando que la difusión de las partículas a través de la celda es nula y está arrestada. Es de notar que  $a$  es inversamente proporcional al número de partículas  $N$ .

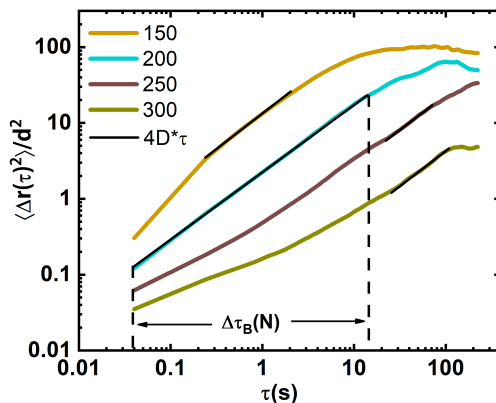


**Figura 3.9.** Longitud característica para distinto número de partículas normalizada con el tamaño de la partícula.

Por otro lado, el MSD para bajo número de partículas satura más rápido que para valores grandes de  $N$ , por lo cual resulta necesario definir un parámetro que mida la distancia recorrida por los cubos, dicho parámetro es la longitud de localización. En la FIG. 3.9 se observa como para  $N = 1, 10, 25$  y  $50$ , una partícula recorre en promedio entre 10 y 13 veces su tamaño. Esto se traduce en que la distancia recorrida es equivalente al tamaño del contenedor, tanto la distancia mínima (de lado a lado) como su distancia máxima (su diagonal). Que la partícula recorra la distancia del contenedor, se refleja en la saturación que se observa en el MSD, a este comportamiento lo denominaremos como límite geométrico. Como ya se dijo, para  $N = 1, 10, 25$  y  $50$  partículas, se tiene un comportamiento muy parecido, por lo que solo se tomará como referencia el MSD a partir de 50 cubos. Es de esperar que a mayor concentración de partículas, la distancia que recorren vaya

disminuyendo, como se aprecia en la FIG. 3.9. En particular, para el número de 350, los cubos, prácticamente, ya no se mueven por lo que podemos decir que se encuentra arrestado el sistema con  $l \sim 0$ .

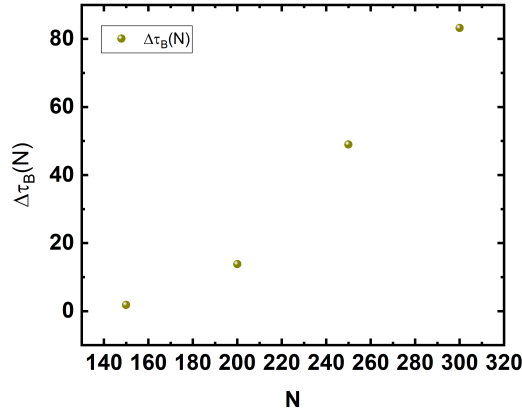
Retomando el comportamiento del MSD, como ya se mencionó, a tiempos cortos se tiene un comportamiento difusivo, sin embargo, ¿solo ocurre a tiempos cortos? Para resolver esta incógnita se realizaron ajustes a distintos tiempos. En la FIG. 3.10 se muestran líneas punteadas en negro que representa un ajuste del tipo  $MSD \propto \tau$  para  $N = 200, 250$  y  $300$  partículas. Para  $N = 150$ , se tomó el ajuste que ya se ha presentado en la FIG. 3.7.



**Figura 3.10.** Búsqueda del régimen difusivo para valores grandes de  $N$ . Las líneas negras son el ajuste lineal, MSD proporcional a  $\tau$ , en distintas ventanas temporales.

Se define el parámetro  $\Delta\tau_B(N)$  como el tiempo de observación requerido para distinguir un comportamiento difusivo en función del número de partículas. Este parámetro aumenta conforme crece el

número de dados en el contenedor pasando de aproximadamente un segundo para  $N = 150$ , hasta aproximadamente 85 segundos para  $N = 300$ , como se observa en la FIG. 3.11. Esto significa que conforme se aumenta el número de partículas, podemos encontrar regiones difusivas de larga duración. Esto es importante, ya que a pesar de no ser un sistema en equilibrio, el tiempo de duración del comportamiento difusivo aumenta en comparación con la fase inicial; dicho de otro modo, se obtienen comportamientos difusivos si el sistema se observa durante una ventana cada vez mayor de tiempo conforme aumenta  $N$ . Esto es, si deseamos observar el comportamiento difusivo de una partícula, necesitaríamos esperar cada vez tiempos más grandes para poder lograrlo, de modo que una partícula salga del encajonamiento creado por sus vecinas y vaya lentamente difundiéndose a través del sistema. Dado que para 350 partículas el arresto del sistema es total, nunca se lograría observar dicho proceso difusivo y  $\Delta\tau_B(N)$  diverge.



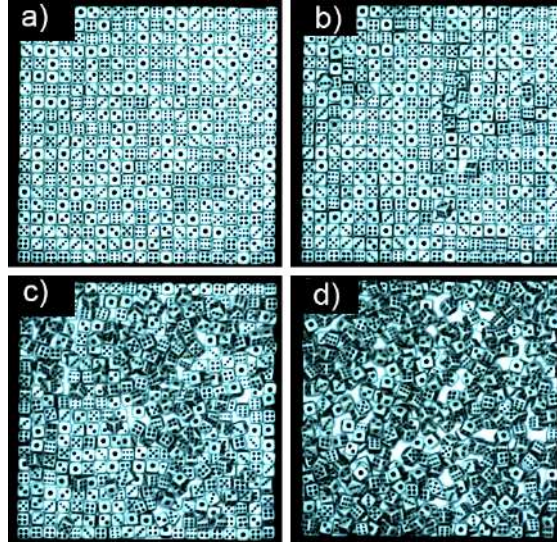
**Figura 3.11.** Tiempo de duración del comportamiento difusivo para  $N = 150, 200, 250$  y  $300$  partículas.

### 3.3. Supercalentamiento granular en un sistema de partículas cúbicas: una perspectiva de investigación.

En esta tesis se ha discutido el comportamiento estructural y dinámico del sistema de partículas cúbicas sometido a vibraciones mecánicas con una fuerza de agitación constante  $\Gamma \approx 3$ . Como mostramos en las secciones anteriores, dicho comportamiento se asemeja, en varios sentidos, al de un sistema constituido por partículas esféricas. Tomando esto en consideración, es natural preguntarse si existen similitudes o analogías adicionales entre el comportamiento colectivo de un sistema constituido por cubos y uno formado por esferas.

Un fenómeno fascinante reportado en un sistema de partículas esféricas es el *supercalentamiento granular* [27]. Específicamente, nos referimos al comportamiento de una monocapa horizontal vibrada en un recipiente de geometría hexagonal; es decir, en un arreglo cristalino para un sistema de esferas en 2 dimensiones sometidas a distintas intensidades de vibración. En dicha configuración, se encuentra que para agitaciones con aceleración adimensional  $\Gamma < 1.4$ , el arreglo hexagonal de esferas mantiene su configuración cristalina por un tiempo indefinido; mientras que para  $\Gamma > 1.4$ , el sistema permanece en su estado cristalino solo por un tiempo dado,  $\tau_{HS}$ , después del cual se evapora abruptamente, ver Fig. 1.2a-d. Por otro lado,  $\tau_{HS}$  se va reduciendo en función del incremento de  $\Gamma$ . Los resultados experimentales ajustan a una ley de potencias de la forma  $\tau_{HS} = a(\Gamma - \Gamma_c^{HS})^{-p}$ , ver Fig. 1.2e. El hecho de que el sistema permanezca en estado sólido (monocapa cristalina) a valores de  $\Gamma > 1$  cuando ya debería asemejarse a un fluido denso, es a lo que se

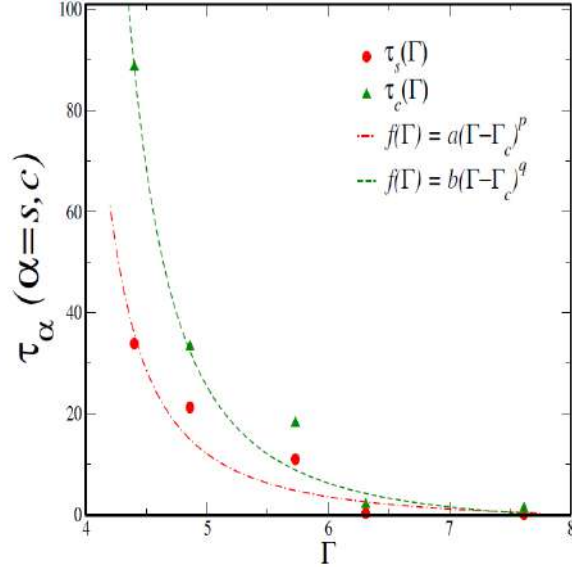
denomina supercalentamiento. En este sentido, vale la pena preguntarse si un proceso de supercalentamiento similar puede presentarse en nuestro sistema con partículas cúbicas y, de ser el caso ¿cómo es la fenomenología? Responder lo anterior implicaría una investigación exhaustiva y una redefinición de los parámetros envueltos en el sistema, como el coeficiente de restitución cuya definición solo existe para el caso de partículas esféricas. No obstante, en lo que sigue, presentamos una primera aproximación al problema como perspectiva de investigación.



**Figura 3.12.** Supercalentamiento de una monocapa cuadrada de cubos duros. (a-d) imágenes tomadas desde la parte superior del contenedor. Se observa la metaestabilidad con  $\Gamma = 7.5$  y  $60Hz$  y su evolución a distintos tiempos; a) 0 ms, b) 268 ms ,c) 766 ms y d) 1326 ms. Note la transición de sólido a fluido.

Se consideró un arreglo de 400 partículas cúbicas que forman una monocapa cuadrada perfecta dentro del contenedor como se observa en la FIG. 3.12 (a). La monocapa fue sometida a distintas amplitudes de vibración a frecuencia constante  $f = 60$  Hz, de modo que  $\Gamma$  se varió en el rango  $1 < \Gamma < 8$ . Con vídeos de alta velocidad se filmaron los cambios de estructura para medir los tiempos de evaporación (transcurso de la monocapa cristalina cuadrada a un gas granular de cubos). La FIG. 3.12 muestra imágenes típicas de la monocapa cuadrada (Fig. 3.12a) hasta su evaporación (Fig. 3.12d). Al variar la fuerzas de agitación se identifica que para valores inferiores a un valor crítico  $\Gamma_c \approx 4$ , se encuentra que la monocapa cristalina mantiene su configuración por un tiempo indefinido. Para valores mayores a  $\Gamma_c$  se aprecian diversos tiempos de vida del estado cristalino antes de su evaporación. Los resultados obtenidos se presentan en la FIG. 3.13 mediante puntos, a los cuales se les ajustó una ley de potencias (líneas). Note que en este sistema de cubos se tiene la necesidad de definir dos tiempos característicos,  $\tau_c = a(\Gamma - \Gamma_c)^p$  que representa el tiempo que tarda una primera partícula en salir del arreglo cristalino [ver FIG. 3.12b) ] y  $\tau_s = b(\Gamma - \Gamma_c)^q$  que es el tiempo que tarda el sistema en desordenarse por completo [ver FIG. 3.12d)]. Los valores obtenidos para los respectivos ajustes de los tiempos característicos observados experimentalmente son:  $a = 57$ ,  $p = -2.1$ ,  $b = 25$  y  $q = -1.8$ . Los tiempos  $\tau_c$  y  $\tau_s$  se definen para no tener una ambigüedad en el tiempo que tarda la configuración en pasar de una red cristalina a un estado completamente desordenado. En este mismo sentido, la diferencia  $\Delta\tau_{s,c} = \tau_c - \tau_s$  indica un tiempo de transición entre la fase cristalina y la fase gaseosa, como se representa en la FIG. 3.12(c), en donde en la parte inferior izquierda presenta un comportamiento ordenado local, mientras que en la parte central se

observa una región en donde las partículas ya se encuentran completamente desordenadas. Dicho comportamiento no se observa en el caso de esferas duras, puesto que la sublimación del cristal hexagonal de esferas ocurre prácticamente al instante ( $\Delta\tau_{s,c} \ll 1$  s).



**Figura 3.13.** Tiempo de vida de la fase cristalina antes de su derretimiento  $\tau_s$ , en función del parámetro  $\Gamma$  a  $60Hz$ . El tiempo en el que la primera partícula abandona su posición en el cristal  $\tau_c$  también se indica. Líneas punteadas: ajustes tipo ley de potencia para cada caso.

Al comparar los resultados obtenidos de nuestro sistema con los reportados en la literatura [27], notamos que en el arreglo de cubos la sublimación no ocurre de forma casi instantánea como en el caso de esferas [ver FIG. 3.12 c)]. En este caso, la transición desde que sale

una primera partícula hasta llegar a un estado completamente desordenado varía en función de  $\Gamma$ , con un tiempo de duración  $\Delta\tau_{s,c} = \tau_c - \tau_s$ . Esto nos indica el tiempo de coexistencia de fases cristalina y fluida. Como se observa en la FIG. 3.13 para valores apenas mayores a  $\Gamma_c$ , los tiempos de transición entre un comportamiento ordenado a uno desordenado son considerablemente largos al compararlos con  $\Gamma$  mayor a 6, en donde la transición se vuelve casi instantánea. Por ejemplo, cuando  $\Gamma \approx 4.5$ , la duración del proceso es del orden de 50 segundos, mientras que para  $\Gamma \approx 5$ , la duración de la transición es de solo aproximadamente 15 segundos. Para  $\Gamma \approx 5.7$  son solo 9 segundos, y para  $\Gamma > 5.7$  la transición se vuelve casi instantánea. Solo para estos valores grandes de  $\Gamma$  se observa un comportamiento similar al de esferas.

Por otro lado, los valores del ajuste  $[\tau_c^{HS} = C(\Gamma - \Gamma_c^{HS})^p]$  que se obtienen para el caso de esferas son:  $C = 0.2$ ,  $p = -1.7$  y  $\Gamma_c^{HS} = 1.37$  [27]. Es de entender que el coeficiente de proporcionalidad  $C$  y el valor crítico de la fuerza de agitación  $\Gamma_c^{HS}$  sean distintos al de nuestro sistema. En particular, el valor de  $\Gamma_c^{HS}$  es aproximadamente un tercio del valor estimado para nuestro sistema ( $\Gamma_c \sim 4$ ). Esto nos indica una capacidad disipativa considerablemente mayor para los cubos que para las esferas, pues el sistema de cubos puede sobrevivir como un cristal a  $\Gamma$  muy elevada porque la energía inyectada es disipada por fricción entre las caras de los cubos, mientras que en esferas las colisiones y los diminutos puntos de contacto entre partículas son menos eficientes en disipar la energía, por lo que se evaporan más fácilmente. No obstante, se encuentra que el ajuste en la potencia es muy parecido; para el caso de esferas es de  $n = -1.7$  y para el caso de cubos se obtiene  $p = -2.1$  y  $q = -1.8$ , en particular el valor de  $q \sim n$ . Esto sugiere una posible

universalidad de la ley de potencias que describe el supercalentamiento granular. Evidentemente, la búsqueda de dicha descripción universal requiere de una investigación exhaustiva del fenómeno tanto experimental como de forma numérica, que incluya el efecto de la geometría de las partículas. Esto se deja como un posible tema de investigación que se deriva de este trabajo de tesis y que sin duda será de interés para la comunidad científica.

# Conclusiones

En esta tesis se llevó a cabo un estudio experimental de un sistema granular vibrado compuesto de partículas cúbicas, del cual se deriva la información estructural y dinámica del sistema en función del número de partículas dentro del contenedor.

- A nivel estructural, la función de distribución radial,  $g(r)$ , revela la existencia de tres “fases”: gas, líquido y la posibilidad de ensamblar una estructura cristalina. Los picos en dicha función reflejan el efecto de la geometría de las partículas en comparación con las mismas funciones de distribución reportadas en la literatura para el caso de partículas esféricas.
- Como resultado de la disipación energética de las partículas y de su geometría, para un número de cubos  $N = 50$ , se observa la aparición de cúmulos. A dicho estado se le denominó “fluido de clusters”.
- Del análisis dinámico del sistema, se obtiene el desplazamiento cuadrático medio MSD para distinto número de partículas. Para  $N = 1, 10$  y  $25$ , se observa un comportamiento similar a bajas densidades en los que las partículas prácticamente no interactúan entre sí. Para estas bajas densidades se muestra una rápida

saturación, indicando el límite geométrico impuesto por el contenedor al desplazamiento máximo de las partículas.

- La dinámica también muestra que a tiempos cortos el sistema tiene dos tipos de comportamiento que dependen del número de partículas: difusivo y subdifusivo.
- Finalmente, al ensamblar un estado cristalino y variando el factor  $\Gamma$  se analizó un estado metaestable, denominado en la literatura “supercalentamiento granular”. Los datos obtenidos en nuestro experimento siguen un escalamiento tipo ley de potencias similar al obtenido para el caso de partículas esféricas, reflejando la universalidad del mecanismo. Para el caso de supercalentamiento de cubos, se obtienen dos tiempos,  $\tau_s$ ,  $\tau_c$ , y la diferencia entre ambos,  $\Delta\tau_{s,c}$  indica el tiempo de vida de la transición de fase, lo cual no ocurre para el caso de esferas.

El trabajo presentado en esta tesis muestra cómo variando la geometría de las partículas se da origen a una gran variedad de dinámicas en sistemas granulares vibrados. Hay mucho trabajo por hacer, como por ejemplo: 1) aumentar el tamaño del contenedor, para que de este modo se evite el límite geométrico, 2) también se podría pensar en el estudio de una combinación de partículas, ya sean esferas-cubos o una mezcla de diversos tamaños en los cubos. 3) Hay algunas preguntas abiertas, como ¿cuál es la causa de la formación de aglomeraciones de cubos para  $N = 50$  puesto que sus interacciones son puramente repulsivas? 4) Otra cuestión es el tiempo de transición de fase para el estado de supercalentamiento, que no es observado para el caso de esferas. Estos resultados requieren un análisis más detallado y exhaustivo que se dejan como perspectivas de trabajo a futuro.

Con este trabajo se desarrolló una técnica de análisis que se podrían aplicar a otros sistemas granulares vibrados cuasi-2D. También se desarrolló un código de programación en lenguaje MATLAB con el cual se calcula el MSD. Como reflexión personal, deseo comentar que estudiar este sistema granular vibrado me ha permitido abordar un área de la física que, si bien es ampliamente estudiada en el caso de esferas, ha sido muy poco explorada para otras geometrías. Esto nos ha llevado a encontrar resultados que son de interés en el intento de describir a la materia fuera de equilibrio, y que podrían estudiarse a otras escalas (a nivel coloidal, por ejemplo), siendo solo una muestra de la gran cantidad de fenómenos por descubrir y describir en la física de la materia granular.

## Apéndice A

### Dificultades técnicas

Durante la realización del experimento se han presentado diversos aspectos a tener en cuenta, tanto en el montaje del experimento, como en la captura y análisis de los datos.

En el montaje experimental, se considera que la bocina se encuentre nivelada, de este modo el contenedor de partículas no se encontrará desnivelado dando alguna preferencia en el movimiento de las partículas. Del mismo modo, se busca colocar la cámara de vídeo nivelada, es decir, que el plano óptico sea paralelo al plano del contenedor de partículas, por otro lado, el eje óptico de la cámara debe coincidir, o estar lo más cercano posible al centro del contenedor.

En la captura de datos, se debió tener cuidado con la iluminación del contenedor, ya que una mala iluminación dificultaba el procesamiento y análisis de los datos.

Se realizaron diversos ensayos para el experimento, en donde se

modificaron ciertas características físicas para lograr una mejor obtención de vídeos y facilitar el análisis de los mismos.

## A.1. Experimento 1

El primer ensayo se realizó con los datos sin modificar, de este modo se obtuvieron vídeos de 2 segundos, grabados a 250 fps, de 1 hasta 350 partículas, posteriormente se realizó el análisis estructural y dinámico de las partículas.

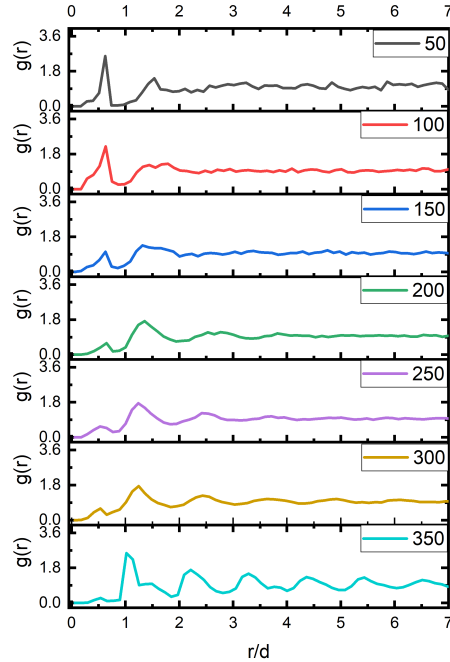
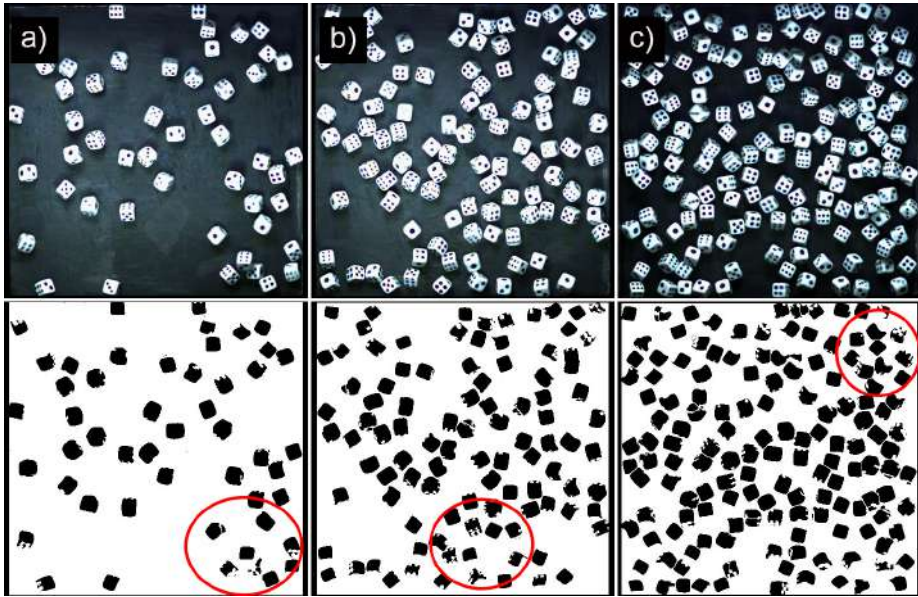


Figura A.1. Distintas curvas de  $g(r)$  para distinto número de partículas.

Al realizar el análisis estructural mediante el uso de la función de distribución radial, se obtienen las curvas que se muestran en la FIG. **A.1**. Se observan comportamientos anormales en la función de distribución radial. Para todos los casos, existe un pico antes del que debería ser el pico principal, siendo más prominente en el caso de 50, 100 y 150 partículas. Este pico inusual, se debe al ruido que se genera por la geometría y color del dado al ser procesada digitalmente, como se ejemplifica en la FIG. **A.2**

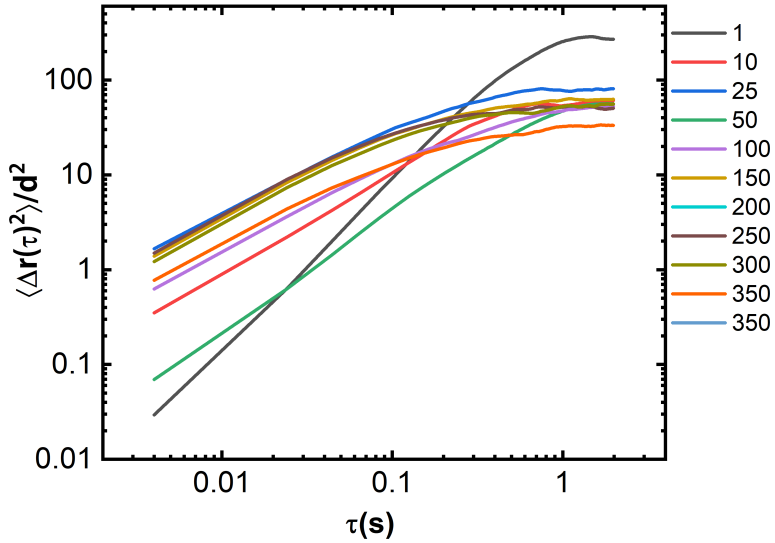


**Figura A.2.** Procesamiento de imágenes realizado con el software ImageJ. a) 50 partículas, b) 100 partículas, c) 150 partículas. Las elipses rojas ejemplifican el ruido generado por el procesamiento de imágenes.

A lo que se le llama ruido, es la fragmentación de la figura de un dado en otras partículas de menor tamaño y que se encuentran dentro del

área que debería de ocupar un dado (círculos rojos). De esta forma, al tener una partícula dentro del área de un dado, se genera el primer pico en la función de distribución radial (FIG. [A.1](#)).

Por otro lado, al realizar el análisis dinámico del sistema, mediante el uso del desplazamiento cuadrático medio, se obtienen las siguientes curvas

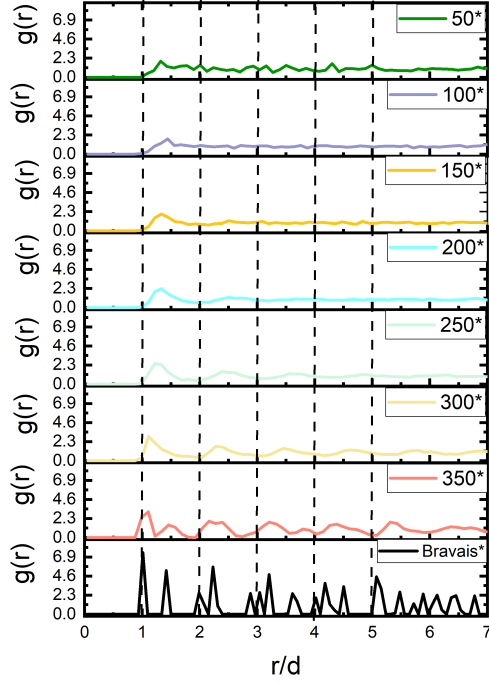


**Figura A.3.** Desplazamiento cuadrático medio por unidad de área. Curvas obtenidas para distintos números de partículas.

## A.2. Experimento 2

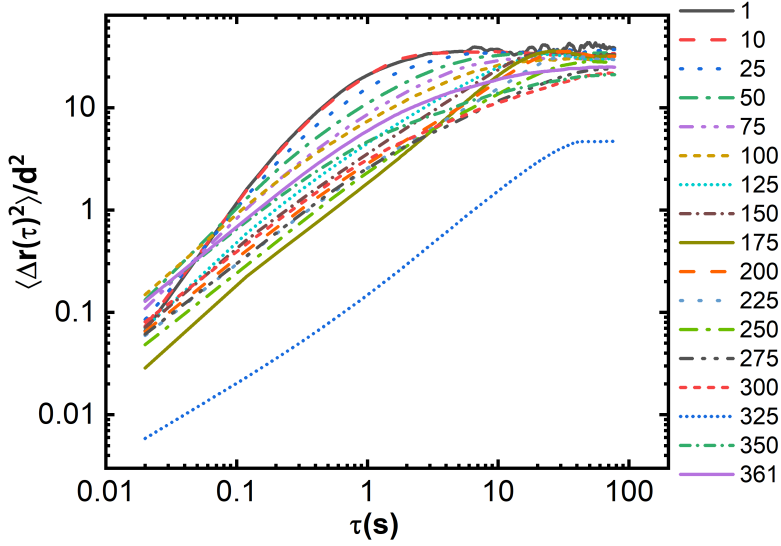
Debido a los problemas encontrados con el primer arreglo experimental, se propone otro en el que se cambia el color del dado, pintándolo completamente de blanco, esto ultimo con el fin de evitar o, en su defecto, disminuir la fragmentación del dado. También se propone ampliar la duración de los vídeos, pasando de 2 segundos a 120 segundos, sin embargo realizar esto significa bajar los fps, es decir: de 250 fps bajarlos a 125 fps. Con los cambios mencionados se realizan vídeos desde 1, hasta 350 partículas y posteriormente se realiza el análisis estructural y dinámico del sistema.

Al realizar el análisis estructural mediante el uso de la función de distribución radial, se obtienen las siguientes curvas:



**Figura A.4. Distintas curvas de  $g(r)$  para distinto número de partículas.**

En la FIG. [A.6](#), se observa el comportamiento de la función de distribución radial. Como se puede notar, el pico que se presentaba en la FIG. [A.1](#) ya no está presente y tienen un mejor comportamiento. Por lo que se puede estar seguro que el cambio en el color del dado, fue de ayuda en el procesamiento de la imagen. También se comparan los resultados obtenidos con una red de Bravais, y como se observa, los picos principales coinciden con los obtenidos en el experimento.



**Figura A.5.** Desplazamiento cuadrático medio por unidad de área. Curvas obtenidas para distintos números de partículas.

Del análisis dinámico se obtienen las curvas de la FIG. [A.5](#). Comparando con la FIG. [A.3](#), existen cambios, sin embargo, aún siguen presentando cruces extraños y, en particular, para el DCM de 325 partículas, se encuentra muy por debajo de las otras curvas.

Con el método de pintar los datos de blanco, se obtiene un mejor procesado de las imágenes para la caracterización estructural del sistema, sin embargo, para el análisis dinámico no parece ser suficiente ya que aún se tiene mucho ruido.

### A.3. Experimento 3

Se diseña un tercer experimento, con el propósito de mejorar las mediciones para el DCM. Este experimento consiste en mantener todas las partículas cúbicas pintadas de blanco, a excepción de una, la cual se pinta de negro, a este método lo denominamos como el **método de trazadora**. El propósito de tener un solo cubo de negro es para que al realizar el análisis, el software sea capaz de reconocer solo ese cubo. De este modo, el software seguirá toda la trayectoria de la partícula sin ningún tipo de error.

En contraste, una desventaja de este método, es que solo sigue una partícula por realización, es decir, solo se consigue seguir una partícula por cada vídeo analizado. En consecuencia, se requiere realizar múltiples grabaciones para poder obtener una buena estadística.

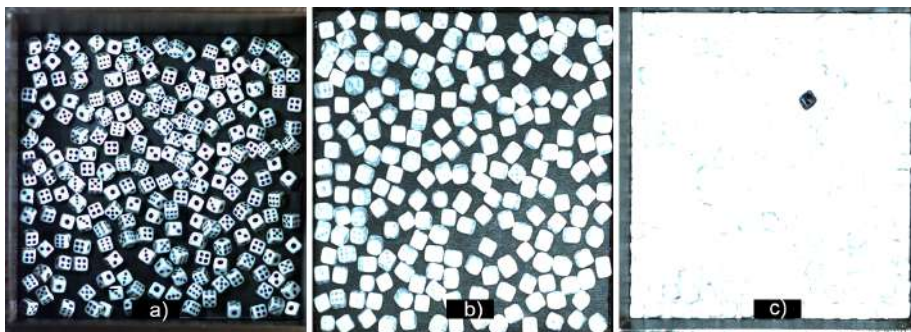


Figura A.6. Distinto arreglo experimental para 200 partículas. a) Representa el primer arreglo experimental usado para calcular el DCM, b) representa el segundo y c) el método de trazadora.

Los resultados obtenidos por el método de trazadora son los presentados en el capítulo [3](#).

## Apéndice B

### Código MSD

A continuación se proporciona el código que se desarrolló para el cómputo del desplazamiento cuadrático medio. Dicho código se desarrolla en el lenguaje de programación del entorno de Matlab.

```
1  clear();
2  format long
3  [nombre, direccion] = uigetfile({'*.txt','*.csv'}); %
    busca el archivo desde su ubicacion
4  A = readtable([direccion, nombre]); % lee los datos
    en formato tabla
5  a = height(A); %numero de filas i
6  b = width(A); %numero de columnas j
7  B = []; %zeros(C,E); %matris ixj llena de ceros
8  n=4;
9  MDS=[];
10 MeanMDS = [];
11 F = [];
12 T = [];
13 Tt = [];
```

```

14  seg = [];
15  for i=1 : b
16      C = table2array(A(:,i));
17      if i < n
18          B = [B,C]; %agrupa los valores de la tabla pero
                ahora como array y quita los caracteres raros.
19      else
20          n = n+3;
21      end
22
23  end
24  t=1;
25
26  bb=width(B);
27
28  while t < a % "numero de taus posible"
29      seg = t.*0.04;
30      T = [T;seg];
31
32
33
34  for k=2:bb
35      for i =1 : a
36          if i+t <a
37              M(i,k) = B(i+t, k) - B(i,k);
38          end
39
40      end
41  end
42  N = M.^2;
43  k=1;
44  H=[];
45  n=3;

```

```

46 l=1;
47 k = 2;
48
49 while n<bb+1
50     if k<n
51         H(:,l) = N(:,k) + N(:,n);
52         k = k+1;
53     else
54         n = n+2;
55         k = k+1;
56         l = l+1;
57     end
58 end
59 mds = mean(H);
60 MDS=[MDS;mds];
61 meanMds = mean(mds);
62 MeanMDS = [MeanMDS;meanMds];
63 t= t+5;
64 end
65 hold;
66 plot(T,MDS)
67 SAVE1 = [T,MDS];
68 SAVE2 = [T,MeanMDS];
69 csvwrite('esfera-cubo.csv',SAVE1);

```

# Bibliografía

- [1] P. G. de Gennes, “Granular matter: a tentative view,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 71, pp. S374–S382, 03 1999.
- [2] H. M. Jaeger and S. R. Nagel, “Physics of the granular state,” *Science*, vol. 255, no. 5051, pp. 1523–1531, 1992.
- [3] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, and R. P. Behringer, “Granular solids, liquids, and gases,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 68, pp. 1259–1273, Oct 1996.
- [4] R. M. Nedderman, *Statics and Kinematics of Granular Materials*. Cambridge University Press, 1992.
- [5] J. Duran and R. Behringer, “Sands, powders, and grains: An introduction to the physics of granular materials,” *Physics Today - PHYS TODAY*, vol. 54, pp. 63–64, 04 2001.
- [6] F. Dalton, “Self-organized criticality in a sheared granular stick-slip system,” *Physical review.*, vol. 63, no. 6, 2001.
- [7] P. Bak, C. Tang, and K. Wiesenfeld, “Self-organized criticality,” *Phys. Rev. A*, vol. 38, pp. 364–374, Jul 1988.

- [8] P. Bak, *How Nature Works: The Science of Self-Organized Criticality*. Copernicus, 1996.
- [9] A. Barrat, J. Kurchan, V. Loreto, and M. Sellitto, “Edwards’ measures: A thermodynamic construction for dense granular media and glasses,” *Phys. Rev. E*, vol. 63, p. 051301, Apr 2001.
- [10] C. S. O’Hern, L. E. Silbert, A. J. Liu, and S. R. Nagel, “Jamming at zero temperature and zero applied stress: The epitome of disorder,” *Phys. Rev. E*, vol. 68, p. 011306, Jul 2003.
- [11] C. S. O’Hern, S. A. Langer, A. J. Liu, and S. R. Nagel, “Force distributions near jamming and glass transitions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 86, pp. 111–114, Jan 2001.
- [12] P. B. Umbanhowar, F. Melo, and H. L. Swinney, “Localized excitations in a vertically vibrated granular layer,” *Nature*, vol. 382, no. 6594, pp. 793–796, 1995.
- [13] D. I. Goldman, M. Shattuck, H. L. Swinney, and G. H. Gunaratne, “Emergence of order in an oscillated granular layer,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 306, pp. 180–188, 2002. Invited Papers from the 21th IUPAP International Conference on Statistical Physics.
- [14] J. R. de Bruyn, C. Bizon, M. D. Shattuck, D. Goldman, J. B. Swift, and H. L. Swinney, “Continuum-type stability balloon in oscillated granular layers,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 81, pp. 1421–1424, Aug 1998.
- [15] S. E. Esipov and T. Pöschel, “The granular phase diagram,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 86, pp. 1385–1395, mar 1997.

- [16] J. S. Olafsen and J. S. Urbach, “Clustering, order, and collapse in a driven granular monolayer,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 81, pp. 4369–4372, Nov 1998.
- [17] D. A. McQuarrie, *Statistical mechanics*. Harper’s chemistry series, New York: Harper Row, 1975 - 1976.
- [18] K. Huang, *Statistical mechanics*. New York: Wiley, 2nd ed. ed., 1987.
- [19] J. S. Olafsen and J. S. Urbach, “Velocity distributions and density fluctuations in a granular gas,” *Physical Review E*, vol. 60, pp. R2468–R2471, sep 1999.
- [20] D. A. Egolf, “Equilibrium regained: From nonequilibrium chaos to statistical mechanics,” *Science*, vol. 287, no. 5450, pp. 101–104, 2000.
- [21] J. S. Olafsen and J. S. Urbach, “Two-dimensional melting far from equilibrium in a granular monolayer,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, p. 098002, Aug 2005.
- [22] P. M. Reis, R. A. Ingale, and M. D. Shattuck, “Crystallization of a quasi-two-dimensional granular fluid,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, p. 258001, Jun 2006.
- [23] E. Opsomer, F. Ludewig, and N. Vandewalle, “Phase transitions in vibrated granular systems in microgravity,” *Phys. Rev. E*, vol. 84, p. 051306, Nov 2011.
- [24] Y. Komatsu and H. Tanaka, “Roles of energy dissipation in a liquid-solid transition of out-of-equilibrium systems,” *Physical Review X*, vol. 5, Aug 2015.

- [25] A. L. Thorneywork, J. L. Abbott, D. G. A. L. Aarts, and R. P. A. Dullens, “Two-dimensional melting of colloidal hard spheres,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 118, p. 158001, Apr 2017.
- [26] J. Downs, N. Smith, K. Mandadapu, J. Garrahan, and M. Smith, “Topographic control of order in quasi-2d granular phase transitions,” *Physical Review Letters*, vol. 127, Dec 2021.
- [27] F. Pacheco-Vázquez, G. Caballero-Robledo, and J. Ruiz-Suárez, “Superheating in granular matter,” *Physical review letters*, vol. 102, p. 170601, 06 2009.
- [28] Z. Zheng, F. Wang, and Y. Han, “Glass transitions in quasi-two-dimensional suspensions of colloidal ellipsoids,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 107, p. 065702, Aug 2011.
- [29] L. Elizondo-Aguilera, P. Rico, H. Ruiz, and O. Alarcón-Waess, “Self-consistent generalized langevin-equation theory for liquids of nonspherically interacting particles,” *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, vol. 90, p. 052301, 11 2014.
- [30] K. Wojciechowski and D. Frenkel, “Tetratic phase in the planar hard square system,” *Computational Methods in Science and Technology*, vol. 10, pp. 235–255, 01 2004.
- [31] C. Avendano and F. Escobedo, “Phase behavior of rounded hard-squares,” *Soft Matter*, vol. 8, pp. 4675–4681, 04 2012.
- [32] V. Thapar, T. Hanrath, and F. Escobedo, “Entropic self-assembly of freely rotating polyhedral particles confined to a flat interface,” *Soft matter*, vol. 11, 11 2014.

- [33] J. A. Anderson, J. Antonaglia, J. A. Millan, M. Engel, and S. C. Glotzer, “Shape and symmetry determine two-dimensional melting transitions of hard regular polygons,” *Physical Review X*, vol. 7, apr 2017.
- [34] L. Walsh and N. Menon, “Ordering and dynamics of vibrated hard squares,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2016, p. 083302, aug 2016.
- [35] J.-P. Hansen and I. R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*. London: Elsevier Science Technology, 2006.
- [36] V. C. Fadanelli, “Estudio computacional de los mecanismos estructurales involucrados en las transformaciones de fases en fluidos,” *Universidad Veracruzana, Tesis*, Septiembre 2012.
- [37] “<https://commons.wikimedia.org/wiki/file:simulated-radial-distribution-functions-for-solid,-liquid,-and-gaseous-argon.svg>,”
- [38] A. Einstein., “Investigations on the theory of the brownian movement,” *Ann. Physik* 17, 549, 1905.
- [39] D. S. Lemons and A. Gythiel, “Paul langevin’s 1908 paper “on the theory of brownian motion” [“sur la théorie du mouvement brownien,” c. r. acad. sci. (paris) 146, 530–533 (1908)],” *American Journal of Physics*, vol. 65, no. 11, pp. 1079–1081, 1997.
- [40] A. N. Kapanidis, S. Uphoff, and M. Stracy, “Understanding protein mobility in bacteria by tracking single molecules,” *Journal of Molecular Biology*, vol. 430, no. 22, pp. 4443–4455, 2018. Plasticity of Multi-Protein Complexes.

- [41] J. Hendricks, R. Capellmann, A. B. Schofield, S. U. Egelhaaf, and M. Laurati, “Different mechanisms for dynamical arrest in largely asymmetric binary mixtures,” *Phys. Rev. E*, vol. 91, p. 032308, Mar 2015.
- [42] L. F. Elizondo-Aguilera, E. C. Cortés-Morales, P. F. Zubieta Rico, M. Medina-Noyola, R. Castañeda-Priego, T. Voigtmann, and G. Pérez-Ángel, “Arrested dynamics of the dipolar hard sphere model,” *Soft matter*, vol. 16, p. 170—190, January 2020.
- [43] P. Reis and M. Shattuck, “Forcing independent velocity distributions in an experimental granular fluid,” *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, vol. 75, p. 051311, 06 2007.
- [44] N. Mac Fhionnlaoich, R. Qi, and S. Guldin, “Application of the spatial distribution function to colloidal ordering,” *Langmuir*, vol. 35, no. 50, pp. 16605–16611, 2019. PMID: 31702166.
- [45] M. Elismaili, L. Bécu, H. Xu, and D. Gonzalez-Rodriguez, “Rotation dynamics and internal structure of self-assembled binary paramagnetic colloidal clusters,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 155, no. 15, p. 154902, 2021.
- [46] E. R. Weeks and D. A. Weitz, “Properties of cage rearrangements observed near the colloidal glass transition,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 89, p. 095704, Aug 2002.
- [47] B. U. Felderhof, “Cage effect in the viscoelasticity of a suspension of hard spheres without hydrodynamic interaction,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 114, no. 14, pp. 6426–6436, 2001.

