

Modelo de materia granular magnética para el estudio de la cristalización Magnetic granular matter model for the study of crystallization

M.A. Escobar-López 

Área Académica de Matemáticas y Física, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42184, Pachuca, Hidalgo, México

Resumen

Se estudió el proceso de cristalización por medio de un sistema 2D de materia granular magnética, compuesta de esferas de acero bajo la acción de un campo magnético alternante que les provee de energía cinética. La temperatura efectiva del sistema es proporcional a la intensidad del campo magnético. Al disminuir la intensidad del mismo, el sistema experimenta un proceso de enfriamiento. Si la temperatura disminuye lentamente, de forma lineal, se obtienen arreglos de tipo hexagonal compacto. Se observó que la formación de núcleos ocurrió en dos pasos. Primero, se formaron agregados amorfos estables, luego en una segunda etapa, estos se reordenaron terminando de consolidar el núcleo. Ese proceso también se observó en la etapa de crecimiento. Las partículas se adherían a la superficie en sitios aleatorios, de forma individual o en pequeños grupos; después, y debido a las colisiones con las esferas libres, las partículas tomaron sus posiciones de mínima energía. Se realizaron análisis estructurales y dinámicos para caracterizar todo el proceso de cristalización.

Palabras Clave: Materia granular magnética, cristalización, enfriamiento lineal.

Abstract

The crystallization process was studied through a 2D system of magnetic granular matter, composed of steel spheres under the action of an alternating magnetic field that provides them with kinetic energy. The effective temperature of the system is proportional to the intensity of the magnetic field. As the intensity decreases, the system experiences a cooling process. If the temperature decreases slowly, linearly, compact hexagonal arrangements are obtained. It was observed that the formation of nuclei occurred in two steps. First, stable amorphous aggregates were formed, and then in a second stage, these were rearranged, finishing consolidating the nucleus. This process was also observed in the growth stage. The particles adhered to the surface in random places, individually or in small groups; later, due to the collisions with the free spheres, the particles took their positions of minimum energy. Structural and dynamic analyses were performed to characterize the entire crystallization process.

Keywords: Magnetic granular matter, crystallization, linear cooling.

1. Introducción

Los cristales han formado parte de la civilización humana desde tiempos remotos debido a sus peculiares formas y a su belleza. En consecuencia, el proceso de cristalización ha sido objeto de estudio en diferentes áreas de la ciencia y la tecnología, ya que se trata de un proceso ampliamente utilizado tanto en la vida diaria como en la industria. La cristalización es un proceso de solidificación donde átomos, moléculas o iones forman un arreglo periódico y ordenado (Mullin, 2001).

Una de las primeras aproximaciones al estudio del crecimiento cristalino la propuso Kepler en 1611, cuando

correlacionó la morfología cristalina y su estructura. Posteriormente, Nicolous Steno catalogó la variedad de formas externas. En el siglo XIX, con los primeros descubrimientos de cristalografía y con ayuda de la difracción de rayos X, Bravais determinó catorce celdas unitarias en las que pueden ubicarse los átomos de un cristal (Cullity & Stock, 2001). Con el avance de la tecnología, actualmente, la atención de la cristalografía está enfocada sobre el proceso de cristalización y la obtención de cristales de mayor calidad.

El proceso de cristalización para su estudio se ha dividido en dos etapas principales: nucleación y crecimiento. La nucleación implica la formación de agregados ordenados (ya sea de átomos o moléculas) dentro de una fase fluida. Estos nuevos cúmulos de partículas surgen debido a fluctuaciones

*Autor para la correspondencia: maria_escobar@uaeh.edu.mx
Correo electrónico: maria_escobar@uaeh.edu.mx (M.A. Escobar-López).

en la concentración provocadas por las variaciones térmicas, y presentan la estructura característica del nuevo material. La forma, el tamaño y la estructura de los núcleos afecta en gran medida la producción final del cristal. La nucleación puede ser homogénea si la formación de núcleos sucede de manera espontánea en el interior del sistema o heterogénea si la nucleación es inducida por impurezas o defectos presentes. Posteriormente, las demás partículas se adhieren al núcleo, ya sea una a una o en grupos de partículas, ocupando posiciones de mínima energía en una configuración ordenada.

La cristalización puede ocurrir por diferentes vías y en distintas condiciones produciendo monocristales, policristales o materiales donde coexisten fases cristalinas y fases amorfas (Ediger, Angell, & Nagel, 1996) (Debenedetti & Stillinger, 2001). En todos los casos los materiales resultantes presentan características que los definen y las cuales determinan sus posibles aplicaciones. Algunas de las técnicas utilizadas para la obtención de cristales son la evaporación, la coprecipitación y el enfriamiento controlado (Kramer & Rosmalen, 2000). En todos los casos se busca cambiar la sobresaturación del sistema originando la formación de núcleos que posteriormente crecen para convertirse en cristales. De igual manera es posible crear materiales cristalinos por medio de la recristalización o recocido que implica el uso de un tratamiento térmico a un sólido no cristalino sin llegar a la temperatura de fusión. Esto permitirá que las moléculas tengan la energía necesaria para desplazarse a sus sitios de mayor orden (Carvente & Ruiz-Suárez, 2005).

Cabe destacar que, debido a las escalas de tiempo y espacio involucradas en la caracterización de cristales, la mayoría de los estudios son necesariamente realizados por técnicas indirectas; por ejemplo, a través de la dispersión de ondas electromagnéticas. Como consecuencia, aún no se tiene una descripción detallada a nivel de partículas del proceso de cristalización y preguntas importantes siguen sin ser resueltas (Grases Freixedas, Costa Bauzá, & Söhnle, 2000); por ejemplo, ¿Cuáles son las condiciones óptimas que llevan a un sistema a cristalizar? Por ello se han usado sistemas macroscópicos que poseen un comportamiento análogo al de sistemas formadores de cristales y en donde es posible seguir de manera individual las partículas. Por ejemplo, en la referencia (Carvente & Ruiz-Suárez, 2005) se estudió el proceso de recocido mediante un modelo 3D de esferas confinadas en un contenedor bajo vibración, partiendo de una estructura en desorden que se convirtió en un monocristal. De igual manera se ha combinado vibración con deformaciones mecánicas para obtener estructuras cristalinas en un sistema 2D compuesto por cubos milimétricos (López-González, Pacheco-Vázquez, & Donado, 2023).

En este sentido se propone el uso de un sistema granular en 2D para estudiar el proceso de cristalización. El sistema se encuentra bajo la acción de un campo magnético alternante que provee a las partículas de energía cinética. A diferencia de otros sistemas granulares, este sistema no necesita de vibraciones mecánicas para fluidizarse. Las partículas son esferas de acero de 1 mm diámetro depositadas en una superficie plana horizontal en medio de un par de bobinas con un tipo de arreglo de Helmholtz. El sistema tiene una configuración relativamente sencilla que permite un análisis detallado a nivel de partículas, de la dinámica y de la estructura de este.

En la referencia (Escobar, Tapia-Ignacio, Donado, Arauz-Lara, & Moctezuma, 2020), donde se usaron 131 partículas de 1 mm de diámetro sobre una lente cóncava de -250 mm de distancia focal se describió cómo una tasa de enfriamiento lento produjo disposiciones ordenadas de partículas. Esto en oposición a enfriamientos repentinos que condujeron a estados desordenados o amorfos. Por lo tanto, utilizando diferentes rapidezces de enfriamiento, se formaron distintas estructuras de vidrio, cristal o mixtas. En la referencia (Escobar, Donado, Moctezuma, & Weeks, 2021) se mostraron los resultados de un estudio más profundo sobre el proceso de cristalización, con condiciones experimentales similares a la referencia anterior. Se demostró que el proceso de nucleación ocurrió en más de un paso, es decir en una primera etapa se da la formación de un agregado amorfo de partículas que en un segundo paso se reordena para dar origen al núcleo. A diferencia de lo indicado por la teoría clásica de nucleación que describe la formación espontánea de un aglomerado de partículas (átomos o moléculas) separados de la fase líquida. Este aglomerado forma una semilla o núcleo, que actúa como foco central del proceso de crecimiento (Cölfen & Antonietti, 2008) (Hollomon & Turnbull, 1953). En el presente trabajo se busca analizar el proceso de cristalización en una superficie plana y con un mayor número de partículas. Con la finalidad de determinar si empleando un enfriamiento lineal es posible la formación de cristales en un plano y si el proceso de nucleación y crecimiento ocurren según los principios clásicos o no clásicos.

2. Metodología experimental

2.1. Configuración experimental

En el sistema granular no vibrado, la intensidad del campo magnético controla su temperatura efectiva. Los detalles se encuentran en la referencia (Donado, Moctezuma, López-Flores, Medina-Noyola, & Arauz-Lara, 2017). De forma breve, el mecanismo para la entrada de energía y la aleatorización del movimiento de las partículas puede entenderse con base en la Figura 1. En este esquema se muestra una partícula con un momento magnético $\mathbf{m}$ en un campo magnético alternante. Cuando se enciende el campo magnético sinusoidal vertical, la partícula tiende a alinearse con el campo para alcanzar una energía magnética potencial mínima, que sucede cuando $\alpha=0$. A partir de esta condición, cuando la partícula está alineada en la dirección del campo magnético, el campo cambia de orientación, así que la esfera apunta en la dirección opuesta. En esta nueva condición, la energía magnética de la partícula en el campo es máxima, y $\alpha = \pi \text{ rad}$. Por lo tanto, la partícula rota para alinearse nuevamente con el campo magnético. Dado que la partícula está en contacto con la superficie, por el efecto de la gravedad, al girar, se desplaza describiendo una trayectoria recta. Mientras rueda la partícula adquiere energía del campo magnético y la transforma en energía cinética de forma continua. Esto explica por qué la partícula se mueve a pesar de los efectos disipativos de la fricción. Una vez que la partícula está en movimiento, cuando cambia nuevamente la dirección del campo magnético, la partícula puede estar o no alineada en ese momento. Dependiendo de factores como la frecuencia e intensidad del campo aplicado, la masa de la

partícula, la fricción con la superficie y la fricción con el aire, el efecto sobre la partícula puede ser una disminución de la rapidez de rotación o un cambio en la dirección de esta. Las trayectorias, a bajas concentraciones son independientes unas de otras. A mayores concentraciones, las partículas experimentan constantes colisiones, por lo que aumenta el número de veces que cambian de dirección haciéndose más aleatorias. En el sistema estudiado, no toda la energía disponible, $4mB_0f$, se transforma en la energía de la partícula debido a la fricción fr con el plano mientras rueda y a las colisiones con otras partículas; el sistema es claramente disipativo. Sin embargo, aunque la energía se pierde rápidamente, se compensa con la energía que se obtiene del campo magnético alternante. Por lo que el movimiento no está en equilibrio termodinámico, sin embargo, alcanza un estado estacionario.

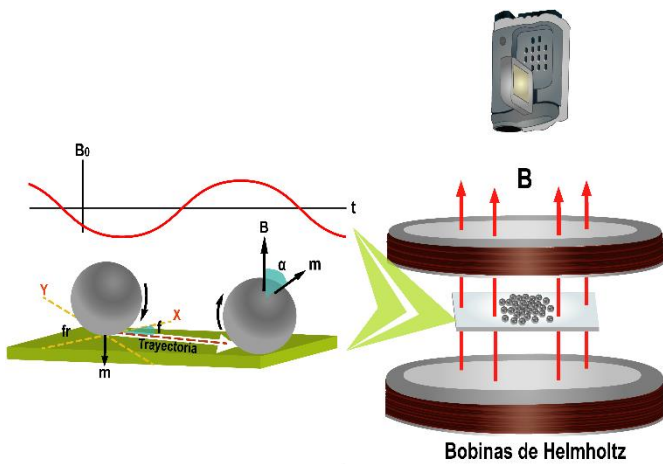


Figura 1. Configuración experimental. La señal es enviada a través de la computadora, pasa por una tarjeta de adquisición de datos y de ahí llega a un amplificador de potencia que alimenta a las bobinas de Helmholtz. A su vez, las bobinas producen el campo magnético que provee de energía cinética a las partículas, las cuales previamente fueron depositadas en medio del par de bobinas.

2.2. Detalles experimentales

En los experimentos que se describen en este trabajo, se emplearon 2500 partículas (de acero inoxidable AISI grado 1000) de 1 mm de diámetro sobre una placa de vidrio. Se colocó una barrera de PVC circular de 10 cm de diámetro y 1.3 cm de alto. Previamente a la realización de los experimentos, las partículas se sometieron a un proceso de magnetización, aplicando un campo constante alto (66 G) durante 90 min., por lo que adquirieron una magnetización remanente. Así que, las partículas obtuvieron un momento magnético constante con una magnetización de $\sim 62 \pm 4 \text{ emu/g}$. Este valor se estimó a partir de la magnetización de saturación máxima obtenida de la referencia (Oxley, Goodell, & Molt, 2009). El experimento inicio en 66 G y la intensidad del campo magnético disminuyó 0.02 Gauss por segundo. Lo que significa que el sistema se sometió a un proceso de descenso gradual de temperatura, análogo a un perfil de enfriamiento lineal. Una vez que las partículas dejan de moverse el experimento ha finalizado. Los experimentos se graban utilizando una cámara CCD con una resolución estándar de 720 x 540 píxeles a 30 cuadros por segundo (fps) en formato AVI entrelazado. Para mejorar la definición visual de los centros de las partículas y aumentar la resolución

temporal, se utiliza un filtro de desentrelazado obteniendo una resolución de 60 fps. El conjunto de imágenes descomprimidas es analizado a través de ImageJ (Schneider, Rasband, & Eliceiri, 2012), que es un software de edición de imágenes.

Para determinar las características estructurales y dinámicas del sistema, se pueden utilizar las mismas herramientas usadas en estudios de simulaciones numéricas de dinámica molecular y de mecánica estadística. Esto con base en los resultados mostrados en la referencia (Donado, Moctezuma, López-Flores, Medina-Noyola, & Arauz-Lara, 2017), que se refieren a procesos estocásticos de Ornstein-Uhlenbeck en estado estacionario. Para caracterizar estructuralmente al sistema se usa el parámetro orientacional de orden 6 (ψ_6) que permite determinar en qué medida un arreglo cualquiera de partículas se aproxima a una configuración hexagonal compacta (Zangi & Rice, 1998). Si una partícula tiene a sus vecinas ordenadas hexagonalmente, el parámetro es $\psi_6 = 1$. Pero si las partículas no se encuentran en ese arreglo, entonces ψ_6 adquiere otros valores, siempre menores a 1. Para determinar el parámetro orientacional de sexto orden en el sistema, primero se determinan las vecinas más cercanas (N_N), así como el número de vecinas en contacto, también conocido como número de coordinación (N_B). Esto se logra mediante el empleo de ImageJ y su plugin Delaunay-Voronoi. El parámetro ψ_6 para una partícula i se define como:

$$\psi_6 = \frac{1}{N_i} |\sum_j \exp(6i\theta_j)| \quad (1)$$

donde la suma de j está sobre el número de vecinas N_i de la partícula i y θ_j es el ángulo entre el eje x y el vector que apunta de i a j . ψ_6 es un número complejo y se toma su magnitud para cuantificar el orden hexagonal. En cuanto a la caracterización dinámica se empleó el desplazamiento (**DCM**) cuadrático medio que es una cantidad ampliamente utilizada para medir experimentalmente la difusión de partículas con movimiento aleatorio en un determinado tiempo, está definido de la siguiente manera:

$$DCM(t) = \langle |r(t + t_0) - r(t_0)|^2 \rangle \quad (2)$$

donde t_0 es un tiempo inicial y t es un tiempo posterior. Si se trata de un medio fluido el valor del **DCM** (t) es grande. Sin embargo, si este fluido se enfría y se acerca al estado sólido, los valores de dicho parámetro disminuirán conforme se enfríe el sistema (Carrasco Fadanelli & Huerta Hernández, 2012).

3. Resultados

3.1. Análisis estructural

La Figura 2 en la columna izquierda (a, b, c, d, y e) muestra el arreglo de las partículas a diferentes temperaturas a lo largo del proceso de enfriamiento. Mientras que en la columna de la derecha (Figs. f, g, h, i, y j) se encuentran las partículas coloreadas según el número de vecinos en contacto. Entre más oscuro sea el color significa que las partículas tienen un

número de vecinos mayor, acercándose a 6, correspondiente a una configuracional hexagonal compacta. Se puede observar cómo al inicio del experimento (66 G), las partículas se distribuyen por todo el espacio disponible, con la formación de pequeños agregados de 3 a 5 partículas en desorden, debido a la alta concentración que impulsa a las esferas a agruparse. En 64 G, ya se observan agregados amorfos de un tamaño considerable en diferentes partes de la superficie [ver las Figuras 2 (b) y (g)].

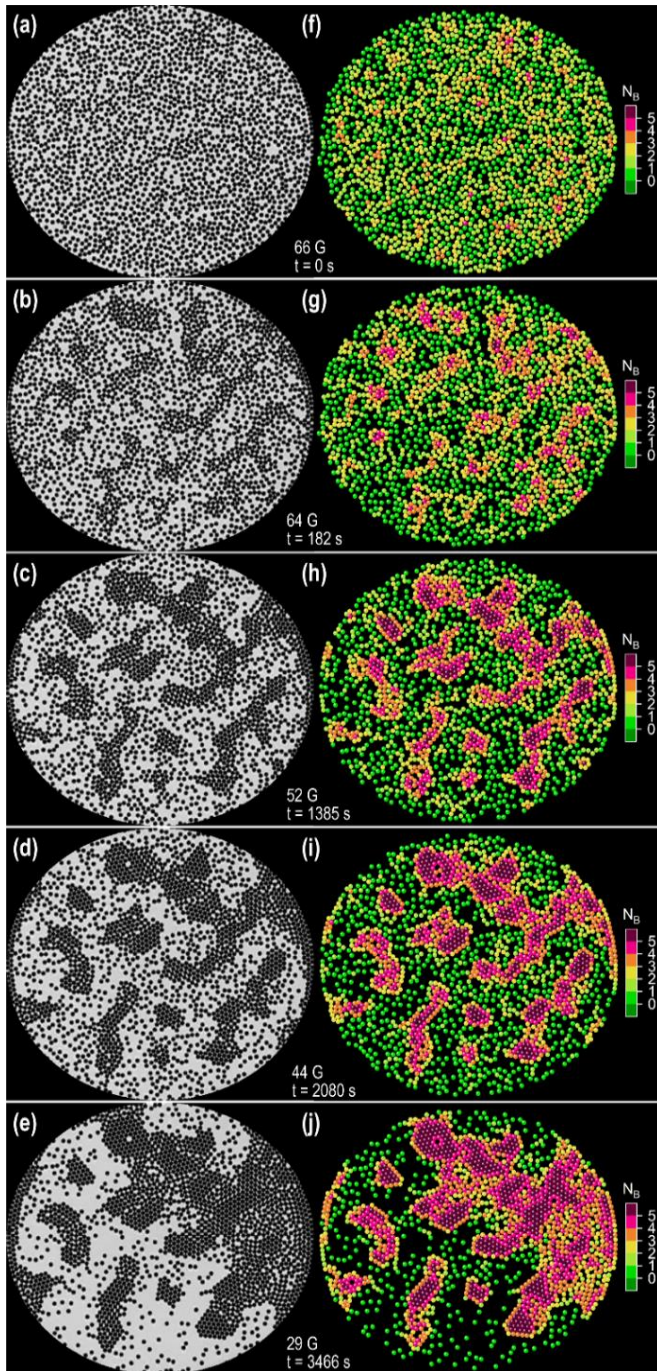


Figura 2. Columna izquierda (a, b, c, d y e), fotogramas que muestran la estructura formada por las partículas a lo largo del enfriamiento. Columna derecha (f, g, h, i y j), figuras coloreadas según la cantidad de N_B , la barra de color indica el número de vecinos en contacto por partícula.

A medida que descende la temperatura, los agregados ya formados comienzan a ordenarse en la parte central de los mismos, como se ve en la Figura 2 (h) e (i) en las tonalidades moradas más oscuras. Mientras que en los bordes las partículas se adhieren, pero no toman sus posiciones de mínima energía de inmediato [ver la Fig. 2 (h) e (i) con colores anaranjados], si no que se agregan en desorden y debido a los choques de las partículas externas y con el descenso de la temperatura llegan a una configuración hexagonal compacta, mostradas en la Fig. 2 (e) y (j). De igual manera se observa que, conforme van creciendo los agregados van aumentando su superficie y algunos de ellos se unen en los bordes formando estructuras más grandes.

Se realizó un análisis estructural considerando el total de las partículas y también filtrando solo los agregados. La Figura 3 (a) muestra un promedio del parámetro orientacional de orden 6 a medida que disminuye el campo magnético. Para ello se tomó 1 fotograma por cada 100 de ellos y se aplicó el procedimiento descrito en la sección 2.2 de detalles experimentales. Se puede observar en la gráfica un aumento lineal del promedio de Ψ_6 con valores que van de 0.42 a 0.61 al disminuir la temperatura. Esto significa que, al enfriarse el sistema lentamente las partículas se van agregando y tomando sus posiciones de mínima energía. Sin embargo, no se obtiene un ordenamiento total por lo que el promedio Ψ_6 no llega a la unidad. Si se compara el número de vecinos en contacto (N_B) contra el campo magnético [Fig. 3 (b)], se observa un comportamiento similar al registrado en el parámetro orientacional, existe un aumento casi lineal en el número de vecinos cercanos, pasando de 2 a 4 vecinos en promedio por partícula. Aunque al inicio del enfriamiento se puede ver una ligera curva que podría deberse a las pocas interacciones que hay entre las esferas, las cuales van incrementando al disminuir la temperatura. En la gráfica inferior [Fig. 3 (c)] se comparó el radio efectivo (R_E) del sistema con la disminución del campo magnético. R_E es la distancia media entre cada partícula en el sistema y el centro instantáneo del sistema de masa. Dicha cantidad fue normalizada con el diámetro de las partículas y se aprecia como a temperaturas altas de 66 G las partículas se mueven rápidamente por toda el área de observación, por tanto, el radio efectivo está por arriba de ~ 21.7 pero al disminuir la temperatura este valor desciende hasta llegar a un valor ~ 20.6 .

En un segundo análisis se consideraron solo las partículas que forman parte de los agregados estables, con la finalidad de tener una descripción más detallada de la formación inicial de los núcleos. Así que solo se tomaron en cuenta a los cúmulos con más de 7 partículas. Además de usar una configuración de Ψ_6 donde se utilizaron solo los vecinos en contacto, a este parámetro se le determinó como Ψ_6' . Dicho parámetro se graficó contra el campo magnético [Fig. 4(a)], se observa como Ψ_6' aumenta de ~ 0.4 a ~ 0.8 , llegando casi a la unidad. El número de coordinación (N_B) incrementó de ~ 2.2 a ~ 4.7 vecinos, ver la Figura 4(b). Aunque se esperaría un valor de $\Psi_6 = 1$ y $N_B = 6$, las regiones cristalinas presentan defectos de borde, vacancias y dislocaciones. Lo que hace que el promedio de dichas cantidades sea menor.

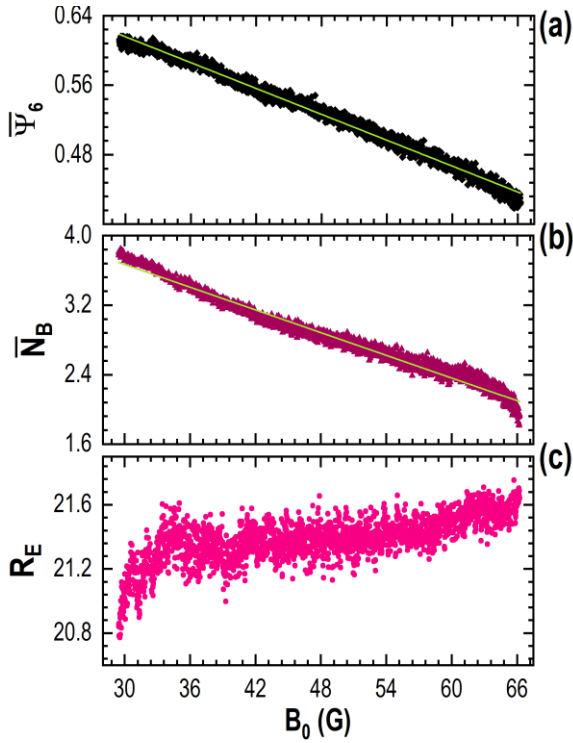


Figura 3. (a) Promedio del parámetro orientacional de sexto orden contra el campo magnético. (b) Promedio de $\overline{N}_B$ comparado con el campo magnético. (c) Radio efectivo del sistema a lo largo del enfriamiento.

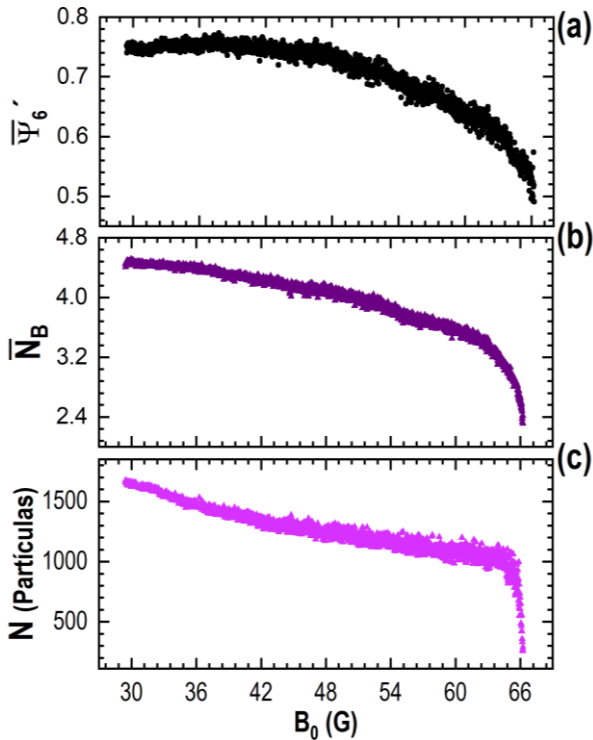


Figura 4. (a) Promedio de parámetro orientacional de sexto orden $\overline{\Psi}_6$ contra el campo magnético. (b) Promedio de número de coordinación $\overline{N}_B$ comparado con el campo magnético. (c) Número de partículas que conforman los agregados a lo largo del enfriamiento.

En la Figura 4 (c) se graficó el número de partículas que están contenidas en los agregados. Se observa un rápido crecimiento de los cúmulos a temperaturas tempranas por la alta concentración de partículas. Una vez que dichos grupos de partículas son estables, estos comienzan a ordenarse en el centro de los mismos y a crecer poco a poco.

Esta transición se observa en el gráfico, y se puede visualizar con mayor claridad en la Figura 2 (b), (g). Las partículas libres llegan a los bordes y se adhieren, algunas veces toman de inmediato sus posiciones de mínima energía, pero en su mayoría se unen en posiciones no ordenadas y conforme disminuye la temperatura se organizan en una configuración hexagonal compacta. Se observó que las esferas tienen sitios de adherencia preferenciales, es decir, eligen aquellos sitios donde existen regiones cóncavas por encima de configuraciones lineales.

3.3 Análisis dinámico

En cuanto al análisis dinámico se determinó el desplazamiento cuadrático medio, el cual se calculó a partir de las trayectorias de las partículas durante 4.16 s extraídas de 10 temperaturas a lo largo del enfriamiento. A continuación, se muestran algunas de las trayectorias seguidas por las partículas a 4 temperaturas del enfriamiento [Fig. 5 (a) inicial, (b), (c) intermedia y (d) final]. Se puede observar como las trayectorias son aleatorias, al inicio del experimento cuando la temperatura era de 66 G. A 59 G ya existían algunos agregados por lo que las trayectorias se distribuyen en diferentes regiones. A medida que disminuye la temperatura, las partículas de los cúmulos se van ordenando, así que las que están libres tienen más espacio para desplazarse y las trayectorias que describen son un tanto más largas y continuas. A 33 G ya hay poca energía y la mayoría de las partículas se han agregado y ordenado. Sin embargo, hay algunas que aún están libres y ahora tienen más espacio para desplazarse.

La Figura 6 (a) muestra el desplazamiento cuadrático medio durante 0.6 segundos a 10 distintas temperaturas. El **DCM** fue normalizado al diámetro de las partículas σ . A altas temperaturas (66-59 G) los valores promedio del desplazamiento cuadrático son altos. Una vez que comienzan a formarse los cúmulos el promedio disminuye. Esto se ve con mayor claridad al observar el coeficiente de difusión [Fig. 6 (b)], obtenido a partir de un cuarto de la pendiente del **DCM**, ya que, de acuerdo con la relación de Einstein en un sistema difusivo bidimensional, $\langle r(t)^2 \rangle = 4Dt$. Entre 59 y 51 G, los agregados estables van creciendo y ordenándose lentamente por lo que la difusividad de las partículas libres disminuye. Conforme los cúmulos de partículas se van ordenando (48-44 G) el espacio para moverse es mayor, así que las partículas se pueden desplazar con mayor facilidad y tanto los valores de **DCM** como de **D** incrementan. Después de 42 G, más partículas han tomado sus posiciones de mínima energía y la temperatura no es lo suficientemente alta como para que las esferas se muevan rápidamente. Por lo que el coeficiente de difusión disminuye rápidamente al igual que el desplazamiento cuadrático medio. De esta manera el coeficiente de difusión experimenta dos máximos correspondientes a un mayor movimiento promedio de las partículas externas, debido a los espacios liberados por la organización de los agregados ya estables.

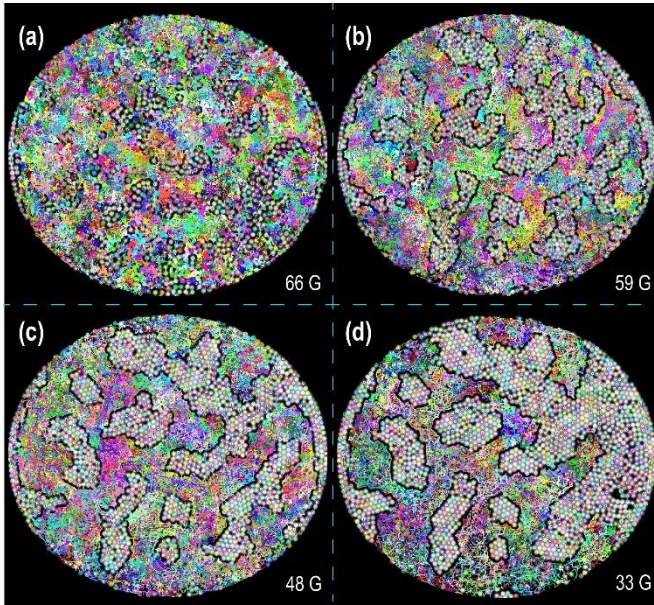


Figura 5. Trayectorias de las partículas durante 4.16 s a 66 G (a), 59 G (b), 48 G (c) y 33 G (d). Los diferentes colores corresponden a cada una de las trayectorias. Cuando las partículas no se mueven solo se observa una circunferencia de cierto color alrededor de la partícula.

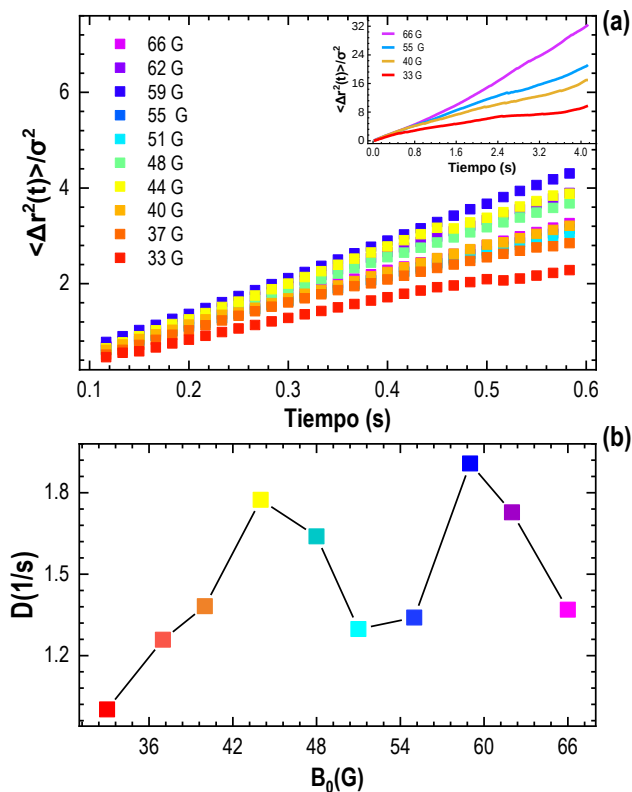


Figura 6. (a) Desplazamiento cuadrático medio para 10 distintas temperaturas, obtenido a partir de las trayectorias de las partículas. (b) Coeficiente de difusión del sistema calculado a partir del DCM.

4. Conclusiones

Se usó un modelo de materia granular magnética en 2D para el estudio del proceso de cristalización. Se estudió tanto la formación inicial de núcleos como el crecimiento de los mismos. Se observó que, en el sistema, las esferas poseen un comportamiento similar al de partículas Brownianas por la

acción del campo magnético. Cuando la temperatura efectiva es alta, las partículas se distribuyen rápida y aleatoriamente por toda el área de observación, como si se tratara de un gas. Al descender la temperatura, la distancia entre las partículas va disminuyendo, mostrando una transición primero hacia un estado líquido y luego hacia un estado sólido. Los resultados demostraron que los núcleos surgieron a partir de un agregado de partículas en desorden, que eran lo suficientemente estables como para no ser destruidos por las fluctuaciones de temperatura y las constantes colisiones de las partículas externas. Posteriormente, en una segunda etapa, el centro de los agregados comenzó a ordenarse en un arreglo hexagonal compacto. Lo que significa que, en estas condiciones, el proceso de nucleación ocurrió en dos pasos, contrario a lo descrito por la teoría clásica de nucleación.

Mientras los núcleos se ordenaban las demás partículas continuaban adhiriéndose a las periferias de manera individual o en pequeños grupos. Al igual que en la nucleación, las partículas no toman inmediatamente sus posiciones de mínima energía, si no que se unen a la periferia del agregado y posteriormente debido a los choques de las demás partículas vecinas, se ordenan y pasan a formar parte del cristal. Se observó que las partículas tienen mayor tendencia a adherirse a regiones cóncavas, que a lugares donde el arreglo era plano. En esos sitios las esferas pueden entrar en contacto con más vecinos que ayudan a estabilizar su presencia en el agregado, y las partículas con conexiones débiles con el agregado son más fáciles de “evaporar”.

Los resultados reportados dan una confirmación experimental sólida de que algunas de las herramientas mecánico estadísticas empleadas rutinariamente para caracterizar sistemas en equilibrio térmico, pueden ser utilizadas también para el estudio de sistemas fuera de equilibrio, siempre y cuando se satisfagan condiciones de estacionariedad. Así mismo, el sistema propuesto es relativamente sencillo de utilizar y no requiere de una amplia inversión, por lo tanto, podría ser empleado sistemáticamente en el futuro para establecer otras analogías importantes entre el comportamiento colectivo de la materia granular y el comportamiento de sistemas de escala atómica, molecular o mesoscópica fuera de equilibrio, por ejemplo, para investigar las transiciones de gelación y la vitrificación, ambas, con una trascendencia fundamental en el estudio de la materia blanda, la ciencia de materiales y otras disciplinas afines.

Agradecimientos

M.A. Escobar-López agradece la beca postdoctoral de CONAHCyT, México: Convocatoria 2023(1).

Referencias

- Carrasco Fadanelli, V., & Huerta Hernández, A. (2012). Tesis: Estudio computacional de los mecanismos estructurales involucrados en las transformaciones de fases en fluidos. Xalapa Veracruz, México.
- Carvente, O., & Ruiz-Suárez, J. (2005). Crystallization of Confined Non-Brownian Spheres by Vibrational Annealing. *Phys. Rev. Lett.*, 95, 018001.
- Cölfen, H., & Antonietti, M. (2008). *Mesocrystals and Nonclassical Crystallization*. England. doi:10.1002/9780470994603
- Cullity, B., & Stock, S. (2001). *Elements of X-Ray Diffraction* (Third Edition ed.). United States of America: Prentice-Hall.

- Debenedetti, P., & Stillinger, F. (2001). Supercooled liquids and the glass transition. *Nature (London)*, 410, 259. doi:10.1038/35065704
- Donado, F., Moctezuma, R., López-Flores, L., Medina-Noyola, M., & Arauz-Lara, J. (2017). Brownian motion in non-equilibrium systems and the Ornstein-Uhlenbeck stochastic process. *Sci. Rep.*, 7, 12614. doi:10.1038/s41598-017-12737-1
- Ediger, M., Angell, C., & Nagel, S. (1996). Supercooled Liquids and Glasses. *J. Phys. Chem.*, 100, 13200–13212. doi:10.1021/jp953538d
- Escobar, A., Donado, F., Moctezuma, R., & Weeks, E. (2021). Direct observation of crystal nucleation and growth in a quasi-two-dimensional nonvibrating granular system. *Physical Review E*, 104, 044904. doi:10.1103/PhysRevE.104.044904
- Escobar, A., Tapia-Ignacio, C., Donado, F., Arauz-Lara, J., & Moctezuma, R. (2020). Glass-and crystal-forming model based on a granular two-dimensional system. *Physical Review E*, 101, 052907. doi:10.1103/PhysRevE.101.052907
- Grases Freixedas, F., Costa Bauzá, A., & Söhnle, O. (2000). *Cristalización en disolución: conceptos básicos*. España: Reverté S.A.
- Hollomon, J., & Turnbull, D. (1953). Nucleation. *Progress in Metal Physics*, 4, 333-388. doi:10.1016/0502-8205(53)90020-3
- Kramer, H., & Rosmalen, G. (2000). Crystallization. *Encyclopedia of Separation Science*, 64-84.
- López-González, F., Pacheco-Vázquez, F., & Donado, F. (2023). Ordering of a granular layer of cubes under strain-induced shear and vibration. *Physica A*, 620, 128768.
- Mullin, J. (2001). *Crystallization* (4th Edition ed.). UK: Butterworth Heinemann: Oxford.
- Oxley, P., Goodell, J., & Molt, R. (2009). Magnetic properties of stainless steels at room and cryogenic temperatures. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 321, 2107-2114.
- Schneider, C. A., Rasband, W. S., & Eliceiri, K. W. (2012). NIH Image to ImageJ: 25 years of image analysis. *Nat Methods*, 9, 671–675. doi:10.1038/nmeth.2089
- Zangi, R., & Rice, S. (1998). Phase transitions in a quasi-two-dimensional system. *Phys. Rev. E*(58), 7529. doi:10.1103/PhysRevE.58.7529