Academia Journals

Humanidades, Ciencia, Tecnología e Innovación en Puebla

SCIENTIA ET STUDIUN

ISSN 2644-0903 online Vol. 3. No. 1. 2021 www.academiajournals.com

TRABAJO DE INVESTIGACIÓN AUSPICIADO POR EL CONVENIO CONCYTEP-ACADEMIA JOURNALS







Secretaría de Educación

YESICA YAZMÍN ESCOBAR ORTEGA

DINÁMICA DE TRES SISTEMAS GRANULARES MAGNÉTICOS

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

PRESIDENTE: DR. JOSÉ LUIS CARRILLO ESTRADA SECRETARIO: DR. MARTÍN R. PAI OMINO MERINO VOCAL: DR. JOSÉ ELADIO FLORES MENA VOCAL EXTERNO: DR. J. MARCOS SALAZAR VOCAL EXTERNO: DRA. ROSARIO E. MOCTEXZUMA MARTIÑÓN SUPLENTE: DR. YURI DUMARESQ SOBRAL ASESOR: DR. FELIPE PACHECO VÁZQUEZ CO-ASESOR: DR. J. NOÉ F. HERRERA PACHECO

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas

Dinámica de tres sistemas granulares magnéticos

Tesis presentada al

Posgrado en Física Aplicada

como requisito parcial para la obtención del grado de

Doctor en Ciencias en Física Aplicada

por

Yesica Yazmín Escobar Ortega

asesorada por

Dr. Felipe Pacheco Vázquez

Dr. J. Noé F. Herrera Pacheco

Puebla Pue. 12 DE AGOSTO 2020

Título: Dinámica de tres sistemas granulares magnéticos Estudiante: YESICA YAZMÍN ESCOBAR ORTEGA

COMITÉ

Dr. José Luis Carrillo Estrada Presidente

Dr. Martín R. Palomino Merino Secretario

Dr. José Eladio Flores Mena Vocal

> Dr. J. Marcos Salazar Vocal externo

Dra. Rosario E. Moctezuma Martiñón Vocal externo

> Dr. Yuri Dumaresq Sobral Suplente

Dr. Felipe Pacheco Vázquez Asesor

Dr. J. Noé F. Herrera Pacheco Coasesor

Resumen

"Dinámica de tres sistemas granulares magnéticos" Autor: Yesica Yazmín Escobar Ortega

En esta tesis exploramos la dinámica de conglomerados macroscópicos de partículas con interacciones magnéticas. Se estudian tres sistemas granulares que exhiben comportamiento tipo sólido, líquido o gaseoso. Para el caso sólido, estudiamos las propiedades mecánicas de arreglos cristalinos de esferas magnéticas ante la aplicación de esfuerzos de tensión, flexión y torsión, encontrando que la presencia de interacciones magnéticas da estabilidad a las estructuras y además, la dureza y elasticidad depende del tipo estructura así como del tipo de esfuerzo aplicado. Para el sistema fluido, analizamos el impacto y penetración de proyectiles en un sistema bidimensional de cilindros magnéticos con interacción repulsiva, infiriendo que su comportamiento se asemeja a un fluido viscoelástico. Finalmente, se presentan las perspectivas de investigación sobre la dinámica de un gas granular vibrado verticalmente. Para los primeros dos sistemas aquí reportados, la dinámica observada en los experimentos es analizada teóricamente y comparada con resultados de simulaciones numéricas, lo cual es un estudio completo de ambos.

Para Naila, mi niña, por ensenãrme tanto.

Para ti, mi pequeño infinito, con amor, como siempre y como nunca.

Agradecimientos

Esta investigación fue realizada gracias al apoyo del Consejo de Ciencia y Tecnología del Estado de Puebla.

Agradecimientos

A mis asesores, Dr. Felipe Pacheco y Dr. Noé Herrera Pacheco, gracias por su orientación, enseñanzas y apoyo para la realización y culminación de este proyecto. Les agradezco la oportunidad que me dieron para trabajar y aprender con ustedes.

A mi hija, mis papás y mis hermanos por su amor y apoyo incondicional.

A mis amigos por su entusiasmo y cariño.

A mis profesores.

A cada uno de los miembros del jurado que ayudaron a mejorar este trabajo de tesis.

A la Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas y al Instituto de Física Ing. Luis Rivera Terrazas, por haberme brindado el espacio y los recursos para llevar a cabo esta tesis doctoral.

A CONACyT y VIEP-BUAP por el apoyo y la beca otorgada para realizar mis estudios.

Índice general

Re	Resumen IX Introducción XI				
In					
1.	. Antecedentes				
	1.1.	Materia granular "convencional"	1		
	1.2.	Materia granular magnética	3		
		1.2.1. Modelo de carga	5		
		1.2.2. Líneas de campo	11		
2.	Sóli	do granular magnético	13		
	2.1.	Antecedentes	13		
	2.2.	Procedimiento experimental	16		
	2.3.	Simulaciones numéricas	18		
	2.4.	Resultados v discusión	21		
		2.4.1. Fuerza de tensión sobre una cadena simple	21		
		2.4.2. Fuerza de tensión en una cadena 2D (lámina)	22		
		2.4.3. Resistencia a la tensión en magnetocristales	24		
		2.4.4. Resistencia a la flexión en magnetocristales	25		
		2.4.5. Resistencia a la torsión en magnetocristales	28		
	2.5.	Conclusiones sobre el estudio de magnetocristales	30		
3.	Líq	uido granular magnético	33		
	3.1.	Antecedentes	33		
	3.2.	Diseño experimental	37		
	3.3.	Simulaciones: Dinámica molecular	39		
	3.4.	Resultados	40		
		3.4.1. Resultados experimentales	40		
		3.4.2. Resultados obtenidos mediante simulación	49		
		3.4.3. Modelo	54		
	3.5.	Discusión	58		
	3.6.	Conclusiones sobre el estudio de impacto en un medio granular repulsivo	59		
4.	Pers	spectivas: gas granular magnético bidimensional	61		
	4.1.	Antecedentes	61		
	4.2.	Montaje experimental	65		

	4.3. 4.4.	Resultados experimentales	66 70
А.	Inte	racciones dinámicas entre esferas uniformemente magnetizadas	75
в.	Alg	oritmo de Verlet	79
C.	Pub	licaciones y conferencias	81

Índice de figuras

1.1.	Fuerzas de contacto.	2
1.2.	Clasificación de los materiales magnéticos.	3
1.3.	Modelos de dipolo magnéticos.	5
1.4.	Diagrama de dos esferas uniformemente magnetizadas.	9
1.5.	Fuerza entre dos esferas uniformemente magnetizadas.	10
1.6.	Configuraciones de granos magnéticos I	12
1.7.	Configuraciones de granos magnéticos II.	12
2.1.	Bacteria magnetotáctica.	13
2.2.	Cristales de hematita.	14
2.3.	Modelación de partículas magnéticas.	14
2.4.	Configuraciones de cadenas magnéticas	15
2.5.	Magnetocristales experimentales.	17
2.6.	Montaje experimental.	18
2.7.	Configuraciones numéricas de magnetocristales.	20
2.8.	Fuerza de tensión aplicada a una cadena 1D.	21
2.9.	Fuerza de tensión aplicada a una cadena 2D	23
2.10	. Fuerza de tensión F_T como función de la deformación Δx en una cadena 2D	23
2.11	. Proceso de deformación en magnetocristales cP, Hx y cP-Hx	24
2.12	. Fuerza de tensión F_T como función de la deformación Δx en magnetocristales	24
2.13	. Fuerza máxima de tensión F_T^{max} en magnetocristales. $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	25
2.14	. Magnetocristales sometidos a esfuerzo de flexión.	26
2.15	. Fuerza de flexión F_B como función de la deformación perpendicular δx en magnetocristales.	26
2.16	. Fuerza máxima de flexión F_B^{max}	27
2.17	. Geometría en una estructura Hx	28
2.18	. Resistencia a la torsión τ como función de la deformación angular θ en magnetocristales.	29
2.19	. s_3 como función de las dimensiones del magnetocristal $N \times N$	29
3.1.	Modelos viscoelásticos	35
3.2.	Montaje experimental.	37
3.3.	<i>Time-lapse</i> en la dinámica de penetración.	40
3.4.	Región de interacción.	41
3.5.	Densidad local y PIV.	42
3.6.	Profundidad de penetración z del proyectil como función del tiempo $t,\rho=3.28~{\rm g/cm^3}.$	43
3.7.	Profundidad de penetración z del proyectil como función del tiempo t, $\rho_2 = 5.2 \text{ g/cm}^3$.	43
3.8.	Comparación z vs t de los tres tipos de proyectil, $\rho = 3.28 \text{ g/cm}^3$	44

3.9. Comparación z vs t de los tres tipos de proyectil, $\rho_2 = 5.2 \text{ g/cm}^3$
3.10. Comparación de las curvas z vs t de proyectiles repulsivos.
3.11. Comparación de las curvas z vs t de proyectiles atractivos
3.12. Comparación de las curvas z vs t de proyectiles neutros. $\ldots \ldots \ldots$
3.13. Esquema z_F , z_{max} y h_r
3.14. Tiempo de penetración τ como función de la altura de impacto h
$3.15. z$ como función de t: Resultados numéricos. $\ldots \ldots 4$
3.16. τ y z_F como función de h: Resultados numéricos
3.17. Efecto de la magnetización (MD)
3.18. z como función de t , M variable
3.19. Efectos de variar la magnetización (MD)
3.20. Simulaciones sin fricción
3.21. z y KE como función de t : Simulaciones numéricas sin fricción. $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 5^4$
3.22. Experimento-Modelo-Simulación
3.23. Parámetros λ y ω .
4.1. Sistema granular convencional en microgravedad (MD)
4.2. Materia granular vibrada verticalmente
4.3. Diagrama de fases en materia granular vibrada verticalmente
4.4. Montaje experimental: gas granular
4.5. Dinámica experimental en granos magnéticos vibrados verticalmente (I) 67
4.6. Dinámica experimental en granos magnéticos vibrados verticalmente (II)
4.7. Dinámica experimental en granos magnéticos vibrados verticalmente (III)
4.8. Diagrama de fases en un sistema granular repulsivo vibrado verticalmente 69
4.9. Función de distribución radial
A 1 Coordonadas polaros 7
Λ 2 Líneas de campo producidas por una esfera uniformemente magnetizada $7'$
11.2. Entors de campo producidas por una estera uniformemente magnetizada
C.1. Portada del artículo publicado en Journal of Magnetism and Magnetic Materials 81
C.2. Portada del artículo publicado en Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics 82
C.3. Conferencia durante el SWGM 2018

Introducción

"También yo soy un imán: las corrientes biológicas de mi cuerpo engendran en derredor un fantástico dibujo pulsativo de líneas de fuerza magnéticas". V.P. Kartsev

El interés y estudio en los imanes tiene más de tres mil años en la historia, pero fue hasta inicios de 1800 que se lograron construir imanes artificiales [1]. En las diferentes épocas se trataron de usar y descubrir sus misterios, de hecho hay modelos teóricos que pretenden explicar a nivel molecular qué es un imán y aún en este momento no se tiene un modelo definitivo y satisfactorio entre la comunidad científica. El salto importante en el estudio de los imanes surgió con las ecuaciones de Maxwell, las cuales podemos decir son uno de los máximos logros del intelecto humano en el estudio de los sistemas electromagnéticos, en especial de los imanes y sus interacciones. Además, se han realizado grandes avances en la tecnología usando imanes. A pesar de los avances indudables en la comprensión y aplicación de los sistemas con interacción magnética, a cada momento surgen nuevos problemas y, como veremos en esta tesis hay algunos sistemas que aunque pueden ser relativamente simples no se han estudiado a profundidad.

Como objetivo de esta tesis doctoral nos propusimos realizar el estudio de imanes macroscópicos modelados como un sistema granular. Como sabemos, los sistemas granulares han sido ampliamente estudiados en los últimos años [2]. Algunas de sus aplicaciones prácticas son el almacenamiento y transporte de granos, sin embargo, existen sistemas granulares con propiedades magnéticas que son de interés en diversos campos de aplicación como la ingeniería de fluidos o bioingeniería, donde por ejemplo, se trabaja en el desarrollo de sistemas magnéticos para administrar fármacos [3]. Dada su importancia práctica, estos sistemas se encuentran en permanente estudio. Debido a la presencia de campos magnéticos en este tipo de sistemas granulares, la dinámica que exhiben bajo diferentes condiciones es muy rica y diferente a la que se encuentra en la materia granular convencional, por lo tanto, presenta un reto en la investigación actual la modelación de estos sistemas. Un sistema granular magnético macroscópico permitiría entender y modelar estructuras nanométricas o bien construir marcadores en sistemas biológicos [4, 5]. Además es posible intuir que los sistemas magnéticos altamente repulsivos plantean un reto en su comprensión y caracterización [6].

El objetivo principal de esta tesis es investigar bajo ciertas condiciones experimentales sistemas granulares donde las interaccionas magnéticas son muy importantes. Primero, nos planteamos investigar su respuesta mecánica ante la aplicación de fuerzas externas. Después, pensamos en la posibilidad de generar un medio granular magnético donde se suprimieran las colisiones entre granos. Nos dimos a la tarea de diseñar los experimentos y buscar los medios materiales para realizarlos. Esta investigación se llevó a cabo en el laboratorio de materia granular y fluidos (GrainsLab) del Insituto de Fiísca Ing. Luis Rivera Terrazas de la BUAP.

En este documento de tesis, presentamos la dinámica de medios granulares magnéticos, los cuales, bajo determinadas condiciones experimentales, se pueden caracterizar como un sólido, líquido o gas. Por ejemplo, en la materia granular común, un apilamiento de arena en reposo se considera como un sólido, ya que los granos se mantienen en reposo a pesar de que las fuerzas gravitacionales generen cadenas de esfuerzo en su superficie. Pero, si el ángulo de apilamiento de granos excede cierto valor crítico, las capas superficiales del apilamiento fluyen como si fuera un líquido. Otro ejemplo de fluidización es la descarga de granos a través de silos. Además si estos granos son vibrados o agitados, pueden presentar dinámicas similares a un gas [7]. De manera análoga, podemos encontrar este tipo de comportamientos en la materia granular magnética investigada en este trabajo, donde las condiciones experimentales generan dinámicas similares a los estados previamente mencionados.

Nos enfocamos en el estudio de tres sistemas experimentales formados por partículas magnéticas (imanes permanentes) sometidos a diversas condiciones. Estos sistemas son una propuesta original y no han sido reportados previamente en la literatura. Los resultados de nuestra investigación son una aportación al estudio de la materia granular magnética, cuyo campo de aplicación es de interés en diversas área de la investigación.

La estructura de la tesis es la siguiente. En el Capítulo 1 hacemos una revisión de las propiedades de la materia granular convencional y la materia granular magnética, poniendo enfásis en las dinámicas reportadas en medios granulares magnéticos, y en particular en la modelación teórica de este tipo de sistemas, lo cual representa la base del entendimiento de nuestro objeto de estudio.

En el Capítulo 2, presentamos el estudio de las propiedades mecánicas de estructuras formadas por esferas magnéticas. Como sabemos, una forma de analizar un objeto es por medio de una prueba mecánica. Estas pruebas consisten en la medición de las fuerzas de tensión, flexión y torsión para determinar sus características mecánicas (elasticidad y rigidez). Encontramos una clara diferencia entre los tipos de ensamble evaluados y caracterizamos los resultados en función de la longitud de deformación de la estructura o bien del ángulo de torsión. Encontramos que las interacciones magnéticas dan estabilidad a las estructuras (cúbicas y hexagonales). Además, proponemos una estructura híbrida cuya respuesta a la deformación es una combinación de rigidez y elasticidad.

Por otra parte, se sabe que un método para caracterizar medios granulares cuantitativamente es midiendo la fuerza que resiste el sistema al impacto y penetración de un objeto (a veces llamado intruso o proyectil). Los datos obtenidos deben analizarse en términos de velocidad y profundidad de penetración y con ello obtener una ecuación para la fuerza de arrastre que nos permita caracterizarlo. La fuerza de arrastre puede dar ciertas propiedades no solo de la materia granular, sino también de fluidos simples, o bien, otros tipos de materia blanda, como son los materiales viscoelásticos. Este tópico corresponde con nuestro objeto de estudio en el Capítulo 3, donde caracterizamos un medio granular magnético con interacciones repulsivas (no hay contacto entre la superficie de las partículas) y su respuesta ante el impacto y penetración de un intruso. Cabe resaltar que por primera vez, una interacción de largo alcance entre el intruso y la cama granular se estudia y analiza sistemáticamente. Encontramos que la dinámica de penetración bajo ciertas condiciones es similar al impacto de un proyectil en un fluido miscelar viscoelástico [8, 9]. Las interacciones reportadas en nuestro estudio pueden ser ilustrativas para describir dinámicas complejas.

Tener un sistema experimental donde no hay contacto entre las partículas como ocurre en la materia granular común, nos permite explorar ciertas dinámicas por medio de la inyección continua de energía. En el Capítulo 4, presentamos las perspectivas de investigación y los resultados experimentales preliminares de un medio granular bidimensional repulsivo vibrado verticalmente, de tal modo que exhibe una variedad de dinámicas que son discutidas y comparadas con los estados dinámicos reportados en materia granular convencional vibrada verticalmente. Consideramos que este sistema da posibilidad a un tema de investigación más amplio, cuyas herramientas teóricas y diseño experimental presentan un reto de estudio.

Para concluir, se presenta un resumen de los resultados y aportaciones de esta tesis doctoral, así como las publicaciones logradas. Los apéndices muestran cálculos complementarios y de importancia en este trabajo.

Capítulo 1

Antecedentes

En este capítulo, presentamos una revisión de las propiedades de la materia granular "convencional" o común, que es aquella donde se presentan fuerzas de contacto entre las partículas que la conforman. Después, comparamos dichas propiedades con la materia granular magnética, donde puede o no haber contacto, pero su característica principal es además de los aspectos granulares la presencia de fuerzas de interacción magnética.

1.1. Materia granular "convencional"

La materia granular se define como una colección de partículas macroscópicas que interactuan disipativamente, en estos sistemas las fluctuaciones térmicas no son relevantes [10]. Los medios granulares se encuentran en la naturaleza y la vida cotidiana (por ejemplo: alimentos, medicamentos, arena, sistemas planetarios, etc.) y por ello, su estudio es de interés práctico en muchos campos de la investigación y aplicación. Sus características permiten que la materia granular exhiba cierto tipo de propiedades que discutiremos a continuación.

Para modelar un sistema granular es necesario tomar en cuenta diversos factores como: distribución del tamaño de los granos, forma, material del que están compuestos, efectos del fluido intersticial que los contiene, propiedades electromágneticas o presencia de campos externos. Esto hace que cada sistema granular presente dinámicas particulares. A pesar de que cada grano que compone la materia granular es un sólido, en conjunto, los granos pueden comportarse como un material en estado sólido o fluido, dependiendo de la energía de los granos. Usualmente, se distiguen tres estados dinámicos en la materia granular, caracterizados principalmente por la longitud de camino libre medio entre partículas: sólido, líquido y gas. Para el estudio de los medios sólidos se ha recurrido al uso de las teorías de mecánica y elasticidad, mientras que para el caso fluido, la hidrodinámica es una buena aproximación. Sin embargo, aún se trabaja en el desarrollo de una mecánica granular apropiada y un posible paso hacia este objetivo es la comparación de la fenomenología granular con los resultados de las teorías de la mecánica de medios viscosos, elástico o visco-plásticos [2, 11, 12].

Una de las propiedades que caracterizan a los medios granulares estáticos es el ángulo

de reposo, determinado por medio del criterio de falla de Coulomb. Esta falla ocurre cuando el esfuerzo cortante en un sistema granular formado por el apilamiento de granos, excede el esfuerzo normal que hay entre ellos [10]. Por ejemplo, cuando granos de arena se vierten lentamente sobre una superficie, ellos se acumulan hasta que el ángulo de apilamiento alcanza un ángulo crítico y, cuando este ángulo es excedido se produce una avalancha en la superficie que relaja el sistema hasta alcanzar el estado estático, es decir, cuando la suma de fuerzas sobre cada uno de los granos es igual a cero. La fricción granular en estado cuasiestático es más complicada de caracterizar que en estado fluido. Para sistemas granulares diluidos, las colisiones inelásticas son la fuente principal de disipación de energía.

Otra propiedad importante en la materia granular estática es el efecto Janssen. El cual describe la saturación de la presión en una columna granular soportada por una pared lateral [13, 14]. Como se ha mencionado, para que un grano se encuentre en equilibrio, su peso debe equilibrarse con la fuerza normal y la fricción con los granos vecinos, es decir, un grano debe ser sostenido por los granos que se encuentran debajo de él hasta alcanzar el fondo o las paredes del recipiente. Esta sucesión de fuerzas internas granulares se conocen como cadenas de esfuerzo. Experimentalmente, las fuerzas de contacto intergranular se han cuantificado mediante el uso de discos fotoelásticos [15]. En la figura 1.1 se presenta una imagen de la estructura en la tensión visualizada por estos discos. Ambas imágenes muestran discos fotoelásticos apilados dentro de una celda vertical que confina los granos entre paredes frontales y laterales, dicha celda se conoce como Hele Shaw. Mediante el análisis de imágenes, se pueden calcular las fuerzas de contacto normales y tangenciales [15]. Una comparación entre los resultados experimentales y los resultados de simulaciones por computadora se presenta en la figura 1.1. Notemos que debido a que las cadenas de fuerza son producidas por el propio peso de los granos, los discos de la región más profunda del contenedor se encuentran altamente estresados (más brillantes) debido al efecto hidrostático.



Figura 1.1: Caracterización con discos fotoelásticos de las fuerzas de contacto entre granos. a) Se muestra el resultado experimental y b) las simulaciones correspondientes. Figura tomada de [15].

Un tópico muy estudiado en materiales granulares debido a su importancia en procesos de producción de la industria y la agricultura, es la descarga de granos de un silo. En la literatura se ha reportado que la razón de flujo de masa Q está dado por las fuerzas de contacto entre los granos

$$Q = C\rho\sqrt{g} \, (D - kd)^{5/2} \tag{1.1}$$

esta ecuación se conoce como ley de Beverloo [16], donde D es el diámetro de apertura

del silo, d el diámetro del grano, C y k son parámetros de ajuste que se relacionan con la fricción y la forma del grano, ρ la densidad de bulto y g la aceleración de la gravedad. También se ha observado que durante la descarga, el flujo se interrumpe debido a la formación de un arco en la salida del silo que provoca una rápida disipación de toda la energía cinética dentro el sistema [17, 18].

Las propiedades mencionadas anteriormente son sólo algunas de las que se conocen en medios granulares, sin embargo, permiten darnos una idea de la cantidad de comportamientos peculiares que se presentan en la materia granular donde las fuerzas de contacto dominan la dinámica.

Los medios granulares investigados en esta tesis, presentan una característica adicional a las mencionadas en párrafos anteriores: *interacciones magnéticas*. Sabemos que en la naturaleza, diversos sistemas con propiedades magnéticas que presentan respuestas ante la aplicación de campos externos. Por ejemplo, las tortugas y algunas aves migratorias se desplazan orientándose por medio del campo magnético terrestre. Además, experimentalmente se han investigado fluidos ferromagnéticos y su respuesta ante la presencia de campos magnéticos [19]. Por ello, los materiales granulares magnéticos presentan una fuente de motivación para nuestro trabajo, lo cual nos ha llevado a caracterizarlos bajo condiciones experimentales que no habían sido reportadas.

1.2. Materia granular magnética

Los materiales magnéticos se pueden clasificar en las siguientes categorías: diamagnéticos, paramagnéticos, ferromagnéticos, antiferromagnéticos y ferrimagnéticos. Cada uno se caracteriza por el momento magnético neto que poseen [20], ver figura 1.2. Los materiales diamagnéticos no tienen momento magnético neto, cuando son sometidos a un campo externo, las corrientes atómicas generadas dan lugar a una magnetización que se opone al campo (el bismuto es un ejemplo de material diamagnético).





Los materiales paramagnéticos tienen momento magnético neto, pero el acoplamiento entre los momentos magnéticos de sus vecinos es débil. Estos momentos tienden a alinearse cuando se aplica un campo, pero el grado de alineación disminuye a altas temperaturas debido a los efectos aleatorios de la agitación térmica.

Los materiales ferromagnéticos tienen momento magnético neto y el acoplamiento entre los momentos magnéticos de sus vecinos es fuerte. Estos acoplamientos dan lugar a alineaciones espontáneas de los momentos en regiones macroscópicas llamadas *dominios*.

Finalmente, en los materiales antiferromagnéticos y ferrimagnéticos, los momentos magnéticos entre vecinos se orientan con direcciones antiparalelas. En los materiales antiferromagnéticos, las magnitudes de los momentos vecinos son iguales y por tanto, no hay un momento magnético neto. Mientras que en los materiales ferrimagnéticos, los momentos vecinos son desiguales y hay un momento magnético neto.

En esta tesis, nos enfocamos en el uso de materiales ferromagnéticos, los cuales tienen un momento magnético neto y presentan un fuerte acoplamiento entre los momentos dipolares vecinos [20]. Comunmente, este tipo de materiales, se conocen como materiales magnéticos duros o imanes permanentes. Los imanes permanentes se pueden encontrar en una gran variedad de equipos que van desde productos de consumo hasta maquinaria industrial y aparatos de investigación. Por ejemplo, los equipos de audio y/o video, computadoras personales, impresoras, fotocopiadoras, automóviles, electrodomésticos, herramientas eléctricas, motores y generadores electromagnéticos industriales y diversos aparatos biomédicos. Una ventaja fundamental de los imanes permantes es que pueden generar un campo magnético relativamente fuerte sobre una región espacial extendida durante un periodo de tiempo indefinido sin gasto de energía. Además, el campo que proporcionan es constante. Otra ventaja de los imanes permanentes es que se pueden fabricar con una amplia gama de propiedades estructurales, formas geométricas y patrones de magnetización. También son relativamente económicos por unidad, dependiendo del material utilizado. En los sistemas granulares reportados en esta tesis, usamos únicamente imanes permanentes esféricos y cilíndricos de neodimio-hierro-boro (NdFeB). Estos imanes permanentes fueron fabricados y puestos a la venta al público a principios de la década de 1980 como una opción rentable ante los imanes de samario-cobalto, que eran más costosos y menos abundantes.

En la literatura se ha reportado la dinámica experimental y por simulación de este tipo de materiales magnéticos bajo condiciones muy particulares. En [21, 22] se investigaron estructuras formadas por esferas magnéticas y los criterios de estabilidad para obtener estados de energía magnética mínima. Recientemente, diferentes configuraciones obtenidas con arreglos de esferas duras dipolares fueron reportadas en trabajos teóricos, tales resultados muestran que las transiciones sólido-sólido que ocurren a temperatura cero en sistemas dipolares pueden ser de importancia en sistemas relacionados de materia blanda o molecular [23]. Además en algunos trabajos se ha reportado la dinámica de configuraciones lineales de cadenas verticales coaxiales de esferas magnetizadas bajo la influencia de la gravedad utilizando análisis de estabilidad [24] o bien, mediante aproximaciones Lagrangianas en el estudio de cadenas lineales de imanes de neodimio cilíndricos [25]. En [26] se estudiaron esferas diamagéticas sobre un plano conductor diamagnético horizontal y la dinámica de rebote generada por las interacciones de los momentos dipolares. Un resultado para ampliar el conocimiento general sobre los materiales granulares es el estudio de la descarga en un silo bidimensional de granos magnéticos que se repelen entre sí [27, 6]. Como vimos en la sección anterior, la velocidad de flujo del material está determinada por las fuerzas de contacto entre los granos. Sin embargo, en un sistema granular repulsivo tenemos un sistema granular no convencional donde no hay contacto entre partículas. Se ha reportado que la dependencia de la velocidad de flujo sigue aproximadamente la ley de potencia reportada en granos donde hay colisiones cuerpo-cuerpo, ecuación (1.1), pero los perfiles de densidad y velocidad durante la descarga son totalmente diferentes. Así como la presencia de obstrucciones durante la descarga que favorece la formación de arcos. Desde el punto de vista computacional, también se han tenido avances importantes en la investigación y modelación de sistemas formados por partículas magnéticas con diversas formas geométricas inmersas en fluidos y su respuesta ante la aplicación de campos externos y flujos de corte [28].

1.2.1. Modelo de carga

El estudio teórico de los imanes permanentes se hace a partir de las ecuaciones de Maxwell, llamadas para este caso teoría magnetostática. Dichas ecuaciones en forma diferencial se expresan como

$$\nabla \times \vec{H} = 0 \tag{1.2}$$
$$\nabla \cdot \vec{B} = 0$$

con \vec{H} la intensidad de campo magnético (A/m), \vec{B} la densidad de flujo magnético (T) y \vec{J} la densidad de corriente libre (A/m²). O bien en su forma integral

$$\oint_C \vec{H} \cdot d\vec{l} = 0$$

$$\oint_C \vec{B} \cdot d\vec{s} = 0$$
(1.3)

En la teoría magnética el dipolo magnético es la unidad fundamental. Este se puede considerar como un par de polos magnéticos muy separados o equivalentemente como un circuito de corriente, ver figura 1.3.



Figura 1.3: Dipolos magnéticos: a) modelo de carga magnética y campo \vec{H} ; y b) modelo de circuito de corriente y campo \vec{B} .

La magnetización \vec{M} se mide como el momento magnético dipolar neto por unidad de volumen

$$\vec{M} = \lim_{\Delta V \to 0} \frac{\sum_{i} \vec{m}_{i}}{\Delta V} \tag{1.4}$$

donde $\sum_i \vec{m}_i$ es la suma vectorial de los momentos dipolares contenidos en el elemento de volumen ΔV . Si el dipolo magnético es sujeto a un campo externo \vec{B} , este adquiere una energía (en unidades del sistema SI):

$$U = -\vec{m} \cdot \vec{B} \tag{1.5}$$

y experimenta una torca

$$\vec{\tau} = \vec{m} \times \vec{B} \tag{1.6}$$

Además los campos \vec{B} y \vec{H} están relacionados por la ecuación constitutiva:

$$\vec{B} = \mu_0 \left(\vec{H} + \vec{M} \right) \tag{1.7}$$

donde $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ T m/A.

De identidades vectoriales, sabemos que si $\nabla\times\vec{A}=0$ entonces $\vec{A}=-\nabla\varphi,$ entonces podemos expresar \vec{H} como

$$\vec{H} = -\nabla\varphi_m \tag{1.8}$$

Usando la relación constitutiva (1.7), se tiene que

$$\nabla^2 \varphi_m = \nabla \cdot \vec{M} \tag{1.9}$$

En ausencia de superficies fronteras, la solución de (1.9) se representa en su forma integral por medio de la función de Green $G(\vec{x}, \vec{x}')$ para ∇^2

$$\varphi_m(\vec{x}) = \int G(\vec{x}, \vec{x}') \nabla' \cdot \vec{M}(\vec{x}') dv'$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\nabla' \cdot \vec{M}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dv'$$
(1.10)

donde \vec{x} es el punto de observación, \vec{x}' es el punto fuente, ∇' opera sobre las coordenadas primadas y la integración se hace sobre el volumen donde hay magnetización. Si \vec{M} se confina en un volumen V con permeabilidad μ_0 y cae abruptamente a 0 fuera de este volumen, entonces (1.10) se reescribe como

$$\varphi_m(\vec{x}) = \frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\nabla' \cdot \vec{M}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dv' + \frac{1}{4\pi} \oint_S \frac{\vec{M}(\vec{x}') \cdot \hat{n}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} ds'$$
(1.11)

donde S es la superficie que delimita V y \hat{n} el vector unitario normal a S. Esta ecuación sugiere definir las densidades volumétrica y superficial de carga como

$$\rho_m = -\nabla \cdot \vec{M}
\sigma_m = \vec{M} \cdot \hat{n}$$
(1.12)

con unidades (A/m^2) y (A/m) respectivamente.

Si el imán está en el espacio libre y se considera que el medio magnetizado es lineal, homogéneo e istrópico, tenemos $\mu = \mu_0$ y $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$, entonces de (1.8) y (1.11) se encuentra que

$$\vec{B}(\vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \frac{\rho_m(\vec{x}')(\vec{x} - \vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} dv' + \frac{\mu_0}{4\pi} \oint_S \frac{\sigma(\vec{x}')(\vec{x} - \vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} ds'$$
(1.13)

Con este análisis se obtiene bajo estas condiciones que el campo en un punto \vec{x} debido a una carga $Q_m(\vec{x}')$ en \vec{x}' es

$$\vec{B}(\vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{Q_m(\vec{x}')(\vec{x} - \vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3}$$
(1.14)

donde

$$Q_m(\vec{x}') = \rho_m(\vec{x}')\Delta V$$
 carga volumétrica (1.15)

0

$$Q_m(\vec{x}') = \sigma_m(\vec{x}')\Delta A$$
 carga superficial (1.16)

aquí ΔV y ΔA son los elementos de volumen y área que contienen $\rho_m(\vec{x}')$ y $\sigma_m(\vec{x}')$ respectivamente. La ecuación (1.14) nos da la intensidad de flujo magnético en términos de una carga magnética, éste es el resultado sobresaliente del llamado modelo de carga.

A continuación presentamos el análisis para el cálculo de la energía, fuerzas y torcas magnéticas entre dos objetos uniformemente magnetizados utilizando el modelo de carga [20]. En este modelo, las interacciones son idénticas a las que ocurren entre dos dipolos magnéticos puntuales a la misma distancia y con las mismas orientaciones magnéticas que los cuerpos magnéticos [29]. Estos resultados son de suma importancia para las aproximaciones numéricas de los capítulos 2 y 3.

Consideremos dos imanes permanentes de forma arbitaria. Si cada imán tiene un momento dipolar diferente de cero, los momentos dipolares de estos imanes dominarán sus interacciones a distancias mayores que sus dimensiones y cada imán puede ser tratado como un dipolo magnético puntual [30], ver Apéndice A. Por ejemplo, una esfera uniformemente magnetizada produce un campo magnético idéntico a su campo dipolar, no solo a grandes distancias, sino en todos los puntos fuera de la esfera. Por lo tanto, es natural preguntarse si las fuerzas y torcas entre dos esferas uniformemente magnetizadas son idénticas a aquellas entre dos dipolos puntuales, independientemente de su separación. Este resultado tiene aplicaciones prácticas, por ejemplo, los campos dipolares y fuerzas han sido utilizados para aproximar las interacciones entre ensambles de nanopartículas esféricas [31] y microesferas magnéticas [32].

En la literatura se ha reportado el estudio de la fuerza entre dos esferas uniformemente magnetizadas en el límite de tres geometrías: (i) para magnetizaciones que son perpendiculares a la línea que une los centros de la esferas [33], (ii) para magnetizaciones paralelas que hacen un ángulo arbitrario con esta línea [34] y (iii) para configuraciones con una magnetización paralela a esta línea y la otra en una dirección arbitraria [29]. Estos tres cálculos reproducen fuerzas que son idénticas a las fuerzas entre dos dipolos magnéticos puntuales. Los cálculos presentados aquí se basan en argumentos de simetría simples y son para esferas de tamaño, posiciones, magnetizaciones y orientaciones magnéticas arbitrarias.

El campo magnético en la posición \vec{r} producido por un dipolo puntual \vec{m} localizado en el origen está dado por (1.14) [35]

$$\vec{B}(\vec{m},\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{3\vec{m}\cdot\vec{r}}{r^5} - \frac{\vec{m}}{r^3} \right)$$
(1.17)

para $r = |\vec{r}|$. Este campo puede ser obtenido del potencial escalar

$$\varphi\left(\vec{m},\vec{r}\right) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\vec{m} \cdot \vec{r}}{r^3} \tag{1.18}$$

ya que

$$\vec{B}(\vec{m},\vec{r}) = -\nabla\varphi(\vec{r}) \tag{1.19}$$

Debido a que $\nabla \cdot \vec{B} = 0$, el potencial escalar φ satisface la ecuación de Laplace

$$\nabla^2 \varphi = 0 \tag{1.20}$$

Consideremos dos dipolos, \vec{m}_1 y \vec{m}_2 , localizados en la posición \vec{r}_1 y \vec{r}_2 . De la ecuación (1.17), el campo producido por el dipolo \vec{m}_i es

$$\vec{B}_{i}(\vec{r}) = \vec{B}(\vec{m}_{i}, \vec{r} - \vec{r}_{i})$$
(1.21)

donde i = 1, 2 y $\vec{r} - \vec{r_i}$ es el vector de posición relativa del dipolo $\vec{m_i}$, ver figura 1.4 con i = 1 y j = 2. De acuerdo a esto, el campo de $\vec{m_i}$, evaluado en la posición de $\vec{m_j}$ es

$$\vec{B}_{i}\left(\vec{r}_{j}\right) = \frac{\mu_{0}}{4\pi} \left(\frac{3\vec{m}_{i} \cdot \vec{r}_{ij}}{r_{ij}^{5}} \vec{r}_{ij} - \frac{\vec{m}_{i}}{r_{ij}^{3}} \right)$$
(1.22)

donde $\vec{r}_{ij}=\vec{r}_j-\vec{r}_i$ es la posición relativa entre \vec{m}_j y $\vec{m}_i,$ y $r_{ij}=\mid\vec{r}_j-\vec{r}_i\mid$



Figura 1.4: Diagrama de dos esferas uniformemente magnetizadas con posiciones \vec{r}_1 y \vec{r}_2 , radios a_1 y a_2 , magnetizaciones \vec{M}_1 y \vec{M}_2 y fuerzas magnéticas no centrales \vec{F}_1 y \vec{F}_2 . Se muestra también un vector de posición arbitraria \vec{r} y vectores de posición relativa $\vec{r} - \vec{r}_1$, $\vec{r} - \vec{r}_2$ y $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$. Este diagrama también es válido para fuerzas entre dos dipolos puntuales si las esferas \vec{M}_1 y \vec{M}_2 son reemplazadas por dipolos \vec{m}_1 y \vec{m}_2 en las mismas posiciones.

La interacción de energía entre $\vec{m_j}$ y el campo magnético de $\vec{m_i}$ está dado por

$$U_{ij} = -\vec{m}_j \cdot \vec{B}_i \left(\vec{r}_j \right) \tag{1.23}$$

Sustituyendo la ecuación (1.22) en esta expresión obtenemos

$$U_{ij} = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{\left(\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij}\right) \left(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij}\right)}{r_{ij}^5} \right]$$
(1.24)

Además, la fuerza de \vec{m}_i sobre \vec{m}_j se sigue de

$$\vec{F}_{ij} = -\nabla_j U_{ij} \tag{1.25}$$

donde ∇_j es el gradiente respecto a $\vec{r_j}$. Haciendo uso de la ecuación (1.24), se obtiene

$$\vec{F}_{ij} = \frac{3\mu_0}{4\pi r_{ij}^5} \left[\left(\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij} \right) \vec{m}_j + \left(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij} \right) \vec{m}_i + \left(\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j \right) \vec{r}_{ij} - 5 \frac{\left(\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij} \right) \left(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij} \right)}{r_{ij}^2} \vec{r}_{ij} \right]$$
(1.26)

Los primeros dos términos en el paréntesis cuadrado son paralelos a $\vec{m}_i \ y \ \vec{m}_j$ respectivamente. Por consiguiente, \vec{F}_{ij} es no central, esto significa que en general no es paralelo al vector \vec{r}_{ij} entre los dipolos.

Debido a la simetría entre $i \neq j$, de las ecuaciones (1.24) y (1.26) se tiene

$$U_{ji} = U_{ij} \tag{1.27}$$

у

$$\vec{F}_{ji} = -\vec{F}_{ij} \tag{1.28}$$

implicando que la tercera ley de Newton se aplica a la fuerza magnética entre dipolos magnéticos puntuales, y asegurando que el momento lineal se conserva en un sistema aislado formado de dipolos.

A continuación damos una demostración involucrando la tercera ley de Newton, mostramos que la fuerza entre dos esferas con magnetizaciones uniformes $\vec{M_1} \ y \ \vec{M_2}$ es idéntica a la fuerza entre dos dipolos puntuales con sus momentos magnéticos correspondientes $\vec{m_1}$ y $\vec{m_2}$ localizados en las mismas posiciones y con las mismas orientaciones magnéticas que las esferas. En figura 1.5(a) $\vec{F_{12}}$ representa la fuerza del dipolo $\vec{m_1}$ sobre el dipolo $\vec{m_2}$. Esta fuerza es producida por el campo $\vec{B_1}$ del dipolo $\vec{m_1}$. En la figura 1.5(b), la esfera $\vec{M_1}$ produce el campo $\vec{B_1}$ y por tanto ejerce la misma fuerza $\vec{F_{12}}$ sobre el dipolo $\vec{m_2}$. Por tercera ley de Newton, figura 1.5(c), $\vec{F_{21}} = -\vec{F_{12}}$ del dipolo $\vec{m_2}$ sobre la esfera $\vec{M_1}$. Esta fuerza es producida por el campo $\vec{B_2}$ del dipolo $\vec{m_2}$. La esfera 2, como se muestra en la figura 1.5(d) produce el campo $\vec{B_2}$ y por tanto ejerce la misma fuerza $\vec{F_{21}}$ sobre la esfera $\vec{M_1}$. Finalmente, aplicando la tercera ley de Newton se muestra que la fuerza $\vec{F_{12}} = -\vec{F_{21}}$ de la esfera $\vec{M_1}$ sobre la esfera $\vec{M_2}$ es idéntica a la fuerza del dipolo $\vec{m_1}$ sobre el dipolo $\vec{m_2}$, figura 1.5(e).



Figura 1.5: Diagrama ilustrando los cinco pasos del argumento con tercera ley de Newton para mostrar que la fuerza entre dos esferas uniformemente magnetizadas es idéntica a la fuerza entre dos dipolos puntuales.

Analizaremos ahora la torca de \vec{m}_i sobre \vec{m}_j , la cual tiene dos contribuciones [36],

$$\vec{\tau}_{ij} = \vec{\tau}_{ij}^A + \vec{\tau}_{ij}^B \tag{1.29}$$

El primer término surge del hecho que \vec{m}_i reside en el campo de \vec{m}_i , el cual está dado por:

$$\vec{\tau}_{ij}^A = \vec{m}_j \times \vec{B}_i \left(\vec{r}_j \right) \tag{1.30}$$

La suma de pares de torcas (derivado de los dipolos que residen en los campos del otro)

$$\vec{\tau}_{12}^A + \vec{\tau}_{21}^A = \frac{3\mu_0}{4\pi r_{12}^5} \left[\left(\vec{m}_1 \cdot \vec{r}_{12} \right) \vec{m}_2 \times \vec{r}_{12} + \left(\vec{m}_2 \cdot \vec{r}_{12} \right) \vec{m}_1 \times \vec{r}_{12} \right]$$
(1.31)

en general, es diferente de cero. Por tanto a diferencia de los pares de fuerzas \vec{F}_{12} y \vec{F}_{21} , los pares de torcas $\vec{\tau}_{12}^A$ y $\vec{\tau}_{21}^A$ en general, no son iguales ni opuetos. La segunda contribución a la torca, surge de la fuerza de \vec{m}_i sobre \vec{m}_j

$$\vec{\tau}_{ij}^B = \vec{r}_j \times \vec{F}_{ij} \tag{1.32}$$

y debido a que \vec{F}_{ij} es no central, la suma

$$\vec{\tau}_{12}^B + \vec{\tau}_{21}^B = \vec{r}_{12} \times \vec{F}_{12} \tag{1.33}$$

en general, también es diferente de cero. Las ecuaciones (1.31) y (1.32) revelan que la torca neta sobre un par aislado de dipolos desparace idénticamente.

$$\vec{\tau}_{12}^A + \vec{\tau}_{21}^A + \vec{\tau}_{12}^B + \vec{\tau}_{21}^B = 0 \tag{1.34}$$

La torca suministrada por $\vec{\tau}_{12}^A$ y $\vec{\tau}_{21}^A$ cancela la torca generada por $\vec{\tau}_{12}^B$ y $\vec{\tau}_{21}^B$, y el momento angular es conservado. Por esto, un sistema aislado dipolo-dipolo no rota espontáneamente y no hay intercambio entre el momento mecánico y electromagnético. Así, la torca asociada con la fuerza sobre una esfera uniformemente magnetizada en el campo de un dipolo es la misma que la torca sobre el correspondiente dipolo puntual. Estos resultados aseguran que la torca neta sobre un sistema aislado de dos esferas es cero como se ha visto para los dipolos puntuales. Todos los cálculos anteriores también son válidos para el caso de cilindros magnéticos [20], por ello el modelo de carga será ampliamente ocupado en este trabajo. Lo anterior, es una aproximación razonable pero inexacta ya que no tenemos garantía de que nuestros imanes satisfagan las características completas del modelo de carga.

1.2.2. Líneas de campo

Finalmente, presentamos un modelo visual bidimensional para representar las líneas de campo magnéticas presentes en nuestros sistemas de estudio, figura 1.6, donde hemos simulado numéricamente por medio del uso de un programa en Fortran y usando el modelo de carga, la fuerza de interacción entre los imanes permanentes representados como cargas puntuales en diferentes configuraciones, las cuáles se presentarán en nuestros sistemas granulares estudiados.



Figura 1.6: Líneas de campo magnéticas y curvas equipotenciales generadas por la interacción de imanes permanentes usando el modelo de carga. (a) Configuración para una capa con cinco imanes colineales y (b) ocho imanes con tendencia a la formación de doble capa.



Figura 1.7: a) proyectil bidimensional y b) celda con paredes repulsivas.

Las configuraciones de las figuras 1.6 y 1.7 representan algunos de los modelos experimentales estudiados en este proyecto y los cuáles serán discutidos en los siguientes capítulos.

Capítulo 2

Sólido granular magnético

En esta sección se presentan los resultados experimentales y por simulación obtenidos en el estudio de las propiedades mecánicas de ensambles de esferas magnéticas, llamados aquí magnetocristales. Tales ensambles corresponden a estructuras cúbicas (cP), hexagonales (Hx) e híbridas (cP-Hx), sometidas a fuerzas externas de tensión, flexión y torsión. Los magnetocristales poseen geometría isotrópica pero debido a las interacciones dipolares se producen anisotropías en su estructura que modifican la estabilidad y la respuesta de su configuración ante la aplicación de un esfuerzo.

2.1. Antecedentes

El estudio de nanopartículas que se autoensamblan magnéticamente ha generado reciente interés en la investigación de las interacciones que ocurren en este tipo de estructuras magéticas. Por ejemplo, el estudio de ensambles tipo cadena, ha motivado la investigación de la dinámica de bacterias magnetotácticas [4], en donde comprender el origen de la anisotropía magnética en un conjunto de nanocristales magnéticos alineados representa un desafío importante en el campo de la nanotecnología. Dentro de estas bacterias biológicas, cristales de magnetita (Fe₃O₄) con forma de cubo o de octaedro se dispone en filas paralelas al eje longitudinal de la célula (magnetosomas) y se organizan como un solo imán capaz de orientar el organismo completo en presencia de campos geomagnéticos [5], figura 2.1 .



Figura 2.1: (a-b) Imágenes de bacterias magnetotácticas obtenidas por medio de microscopio por transmisión de electrones. (c) Orientaciones cristalográficas de los magnetosomas. Las flechas blancas indican las orientaciones cristalográficas que siguen la orientación del campo de deposición, mientras que las flechas negras se usan cuando las orientaciones no siguen esta dirección. Imagénes obtenidas de [4].

Las nanopartículas magnéticas pueden formar estructuras con propiedades mecánicas interesantes que son de interés para la fabricación de dispositivos electrónicos. Por ejemplo, la aplicación de discos magnéticos de tamaño milimétrico en interfaces líquido-aire para producir patrones hidrodinámicos [37], o bien, en el estudio de procesos de autoemsamblado en estructuras cristalinas de ribosomas, nanofibras y películas delgadas [38]. También, se han investigado los efectos de las interacciones dipolares en arreglos hexagonales 2D de esferas huecas de tamaño nanométrico mediante simulación micromagnética en diferentes tipos de materiales [39]. Además, recientemente ha tenido relevancia el estudio experimental [40, 41, 42] y por simulación [3] de coloides magnéticos, los cuales pueden ser sintetizados en una gran variedad de formas, por ejemplo, el uso de partículas cúbicas de hematita del tamaño de micras con recubrimientos de sílica, las cuales, bajo ciertas condiciones se auto-organizan en cristales con simetría cúbica que dan lugar a la nucleación y crecimiento del cristal, figura 2.2.



Figura 2.2: Autoensamblaje en cristales cúbicos de hematita. La presión osmótica ejercida por el polímero favorece el contacto entre los cristales cúbicos de hematita. Imágenes obtenidas de [41].



Figura 2.3: Modelación de partículas magnéticas: (a) partícula esférica con un momento dipolar magnético en el centro de la partícula, (b) partícula esfero-cilíndrica con cargas magnéticas norte y sur en ambas hemiesferas y (c) partícula tipo disco con momento dipolar magnético en el centro. Imágenes obtenidas de [3].

Mientras que por el lado computacional, se han modelado partículas magnéticas esféricas, esferocilíndricas y tipo disco, figura 2.3; y se ha analizado el comportamiento microscópico de estas partículas magnéticas en un campo magnético aplicado así como su respuesta ante flujos de corte generados por la aplicación de una fuerza transversal que da como resultado la variación de los esfuerzos normales del medio, usando dinámica browniana y el método llamado *lattice Boltzmann* [28]. Esto abre la posiblidad de controlar este tipo de materia suave por medio de campos magnéticos externos, lo cual los hace ideales para una amplia gama de aplicaciones, desde su uso como sondas micro-reológicas para inferir las propiedades viscoelásticas de fluidos complejos hasta su implementación como sistemas activos en dispositivos microfluídicos o bien en operaciones precisas de administración de fármacos de una sola partícula [43]. A escala macroscópica,

se han aplicado cadenas granulares magnéticas para modular las fuerzas de contacto que se observan normalmente en estructuras granulares no homogéneas y estudiar la velocidad de propagación de señales acústicas [44].

En todos los ejemplos anteriores, el comportamiento del sistema es determinado principalmente por la interacción magnética de sus componentes, la cual debido a su inherente anisotropía se vuelve un problema engorroso. Estudios recientes se han enfocado en investigar las interacciones de arreglos nanométricos tipo cadena, esta estructura ha resultado tener la configuración más estable debido a su longitud característica y resistencia a la flexión [45]. También se ha reportado el estudio teórico de arreglos de N esferas magnéticas que pueden formar dímeros, trímeros, cadenas y anillos [46]. Para cadenas con más de 14 esferas, éstas se apilan en forma de estructuras tubulares. Si estos anillos apilados son grandes, se generan defectos configuracionales similares a los defectos puntuales en estructuras cristalinas [47]. Estos estudios con esferas magnéticas se han enfocado en encontrar la geometría necesaria para alcanzar la energía magnética mínima, este problema ha sido resuelto para estructuras en una y dos dimensiones [21, 22], figura 2.4. Pero, para el caso tres dimensional se mantienen muchas preguntas abiertas que uno se puede plantear [48], por ejemplo, el análisis de estabilidad de estas estructuras cuando son sometidas a esfuerzos a externos no ha sido medido y reportado. Por ello, en este trabajo de investigación nos planteamos la tarea de diseñar experimentos que se pudieran realizar en nuestras condiciones de laboratorio, para medir la respuesta de diferentes arreglos de imanes ante la presencia de fuerzas externas. Encontramos que era posible aplicar y medir sistemáticamente fuerzas de tensión, flexión y torsión sobre cadenas lineales de imanes, además de ir aplicando dichas fuerzas a arreglos de cadenas ensambladas como láminas y luego con esas láminas formar cristales tridimensionales. Al mismo tiempo, se invitó al experto de nuestro laboratorio en métodos de simulación por computadora a realizar las simulaciones pertinentes, durante este trabajo se fue discutiendo con el colaborador los resultados. Para las simulaciones, el colaborador hizo uso del modelo de carga, además se adecuaron los algoritmos numéricos para los ensambles de sistemas magnéticos formados por partículas que interaccionan como esferas duras con cáscara dura y una capa estérica de un diámetro dado y con cargas magnéticas de signos opuestos, formando un dipolo magnético puntual.



Figura 2.4: Configuraciones de mínima energía en cadenas magnéticas para $2 \le N \le 15$. Las configuraciones con flechas negras muestran resultados numéricos del cálculo de energía, mientras que su configuración experimental correspondiente se muestra a la derecha, imágenes obtenidas de [21].

En el caso de los cristales atómicos, los cuales tienen una configuración tridimensional, es importante conocer sus propiedades mecánicas de respuesta (elasticidad, plasticidad, dureza, fragilidad) ante la aplicación de una fuerza externa como tensión, compresión, flexión, corte, torsión o cargas combinadas, así como su respuesta como función de la estructura cristalina, lo cual es relevante desde el punto de vista de las aplicaciones. Por ejemplo, en ingeniería cristalina existen métodos de síntesis para diseñar sólidos mediante la manipulación de estas estructuras, estas técnicas han sido una herramienta eficaz para hacer adaptaciones y mejoras en las propiedades fisicoquímicas y mecánicas de los sólidos farmacéuticos (cocristales) [49]. Respecto a la respuesta de los materiales ante la aplicación de una fuerza externa, se han realizado varias investigaciones para evaluar si un cristal puede romperse de una manera frágil o si algún flujo plástico puede acompañar a la fractura, la cual está relacionada con el límite elástico de la estructura hasta llegar a la generación espontánea de dislocaciones [50, 51, 52]. Llamaremos fractura *dúctil* cuando la estructura se deforma sin que los granos una vez que se aplica el esfuerzo.

En esta tesis trabajamos con arreglos magnéticos de imanes esféricos milimétricos a fin de lograr tener estructuras cristalinas diferentes. Las propiedades mecánicas de estas estructuras magnéticas macroscópicas se analizaron por medio de experimentos de tensión, flexión y torsión y fueron comparados con resultados obtenidos numéricamente usando simulaciones de dinámica molecular o por minimización de energía. Estudiar este tipo de estructuras es conveniente y sumamente útil debido a las dificultades que se presentan al realizar pruebas mecánicas en sistemas nano o de tamaño microscópico. Específicamente hemos llevado a cabo el estudio sistemático de los siguientes casos: cadena unidimensional (1D), cadenas bidimensionales (2D) y arreglos tridimensionales (3D) con diferentes estructuras cristalinas (magnetocristales cúbicos simples (cP), hexagonales (Hx) e híbridos). Es pertinente comentar que nuestro protocolo experimental se puede aplicar también a otros arreglos. Sin embargo en esta tesis solo se presentaran y discutirán los casos mencionados.

2.2. Procedimiento experimental

Para los montajes experimentales se ocuparon esferas magnéticas de neodimio (NdFeB) con diámetro $d = 5.00 \pm 0.005$ mm y remanencia magnética de (1.17, 1.20) T. La estructura más simple que se contruye con estas esferas es una cadena lineal con los dipolos magnéticos de cada esfera alineados en la misma dirección, tal y como se muestra en la figura 2.5a. Las cadenas 2D se emsamblan mediante el siguiente procedimiento: una cadena larga se corta en dos segmentos lineales con igual número de cuentas y después se unen lateralmente con sus dipolos apuntando en direcciones opuestas, de esta manera los segmentos se atraen entre sí formando una lámina cuadrada (cP). Por otro lado, si los segmentos se acercan lateralmente con sus dipolos apuntando en la misma dirección, la estructura resultante es una lámina hexagonal (Hx), ambos tipos de ensambles se pueden observar en la figura 2.5b. Para construir las estructuras 3D, llamadas aquí magnetocristales, se ensamblaron láminas 2D (cuadrada o hexagonal) superponiendo capas de una estructura dada, una encima de la otra. Si las cadenas vecinas tienen dipolos opuestos, se forman estructuras cúbicas (Fig. 2.5c). Si los dipolos magnéticos

son paralelos en todas las esferas, la estructura resultante es hexagonal (Fig. 2.5d). Las capas también se pueden unir con sus dipolos antiparalelos en un plano y paralelos en el plano perpendicular para dar un cristal cúbico-hexagonal (Fig. 2.5e). Siguiendo este procedimiento, construimos arreglos con el mismo número N de cadenas en cada plano, utilizando un total de N^2 cadenas de longitud l > 30d, con $N\epsilon[2, 6]$. Cabe mencionar que el arreglo hexagonal corresponde a la estructura *bct* (tetragonal centrada en el cuerpo) de esferas duras dipolares (cuando no está deformada, es decir, en reposo). Aquí, usamos la notación -Hx- en lugar de -bct- para generalizar su uso en el caso de estructuras híbridas.



Figura 2.5: Ensambles de esferas magnéticas: a) cadena lineal, b) lámina cúbica y hexagonal, c) cristal cúbico, d) cristal hexagonal y e) cristal híbrido. Las flechas en color negro indican la dirección de los momentos dipolares.

Para medir la respuesta mecánica de las estructuras magnéticas, se aplicaron esfuerzos de tensión en las configuraciones 1D y 2D; además para las estructuras 3D se analizaron también las respuestas a esfuerzos externos de flexión y torsión utilizando los tres arreglos experimentales que se muestran en la Fig. 2.6. En los magnetocristales, la resistencia a la flexión se midió aplicando una carga perpendicular al cristal con los extremos fijos en un soporte (Fig. 2.6a). La respuesta a la tensión en el cristal se obtuvo sometiendo el ensamble magnético a un esfuerzo tensil con un extremo fijo y tensando desde el otro extremo del ensamble (ver figura 2.6b). En ambos casos, la fuerza de carga F se midió utilizando un sensor de fuerza Mark-10 con una resolución de ± 0.01 N y una frecuencia de lectura de 10 Hz. El sensor se desplazó con una velocidad v = 0.75 mm/s utilizando un motor paso a paso en la dirección indicada por la flecha roja en cada caso. Es importante comentar que se probaron diferentes velocidades del sensor encontrando que a velocidades superiores a la mencionada el sistema presenta un comportamiento que no se puede reproducir. Es decir la velocidad óptima de trabajo es de 0.75 mm/s, al menos para los sistemas trabajados en esta tesis. Esto nos permitió medir F como función del tiempo t, o equivalentemente, en función de la deformación $\Delta x = vt$. Para medir la resistencia a la torsión, se fijó un extremo del cristal a un medidor de torque Omega HHTQ88 con una resolución de 0.1

N-cm y una frecuencia de lectura de 8 Hz, este se giró alrededor de su eje más largo desde el extremo opuesto utilizando el motor de paso (Fig. 2.6c). Por medio de estos procedimientos, determinamos la fuerza de tensión F_t y la fuerza de flexión F_b como función de Δx , y el torque τ como función del ángulo de giro θ . Los datos de fuerza se registraron hasta que se presenta la falla en el cristal (ruptura). Los experimentos se repitieron cinco veces para cada magnetocristal de sección transversal $N \times N$. En el caso de arreglos 1D y 2D, solo aplicamos esfuerzo de tensión para medir la resistencia máxima en cada caso. Como se puede inferir las estructuras que se trabajaron son estables y permiten realizar experimentos de forma sistemática con condiciones reproducibles y controladas. Es posible tener otras estructuras estables, sin embargo los objetivos de esta tesis se limitaron a las estructuras mencionadas.



Figura 2.6: Arreglos experimentales usados para medir la respuesta mecánica de los cristales magnéticos ante la aplicación de: flexión, tensión y torsión. Las flechas en color rojo indican la dirección de la fuerza aplicada.

2.3. Simulaciones numéricas

Simular el movimiento dinámico en tres dimensiones de los materiales granulares representa un desafío computacional debido a sus propiedades físicas únicas. Sin embargo, es posible incorporar técnicas de sistemas físicos similares y modelar la materia granular como una gran colección de partículas cuyas fuerzas de contacto siguen ciertas leves y donde las partículas representan elementos discretos del material simulado. Por ello, en colaboración con miembros del laboratorio de materia granular (GrainsLab) del Instituto de Física (BUAP), se llevaron a cabo simulaciones numéricas en conjunto con las pruebas experimentales para comparar y extrapolar resultados. Para las cadenas 1D y 2D, se realizaron simulaciones de dinámica molecular (MD por sus siglas en inglés de Molecular Dynamics) para determinar la dinámica de las estructuras al aplicar un esfuerzo tensil, así como las reorientaciones de los dipolos para cada partícula que conforma la cadena. Esta aproximación numérica se puede ampliar para las estructuras 3D; dado que la cantidad de interacciones crece como una potencia de N y dadas las capacidades informáticas, se implementó un método de minimización de energía aleatoria (REM por sus siglas en inglés, random minimization energy) para el estudio de los magnetocristales 3D. Los detalles de las simulaciones son adecuaciones a los algoritmos usados y publicados por Satoh [3], pero no se incluyen en esta tesis por derechos de autor.

En las simulaciones de MD las ecuaciones de movimiento se integran aproximadamente. En este trabajo se utilizó el algoritmo de velocidad de Verlet, ver apéndice B. Consideramos la atracción magnética y la fuerza de contacto entre partículas, esta última se aproximó con la ley de contacto de Hertz utilizando el módulo de Young Y = 40 GPa para el imán de neodimio.

Los imanes permanentes esféricos que forman cada estructura tienen un dipolo magnético \vec{m} de magnitud constante igual al valor medido experimentalmente. La fuerza magnética entre dos esferas magnetizadas uniformemente se asume que satisface la misma ecuación que describe la fuerza entre dos dipolos magnéticos puntuales con los mismos momentos magnéticos ubicados en los centros de las esferas [29], es decir, se asume que la interacción imán-imán satisface el modelo de carga. La fuerza \vec{F}_{ab} actuando sobre un dipolo magnético \vec{m}_a debido al campo magnético de un dipolo m_b localizado en la posición \vec{r} se expresa como [53]

$$\vec{F}_{ab} = -\nabla U = \nabla (\vec{m}_a \cdot \vec{B}(\vec{m}_b)) \tag{2.1}$$

donde el campo magnético \vec{B} en la posición \vec{r} desde \vec{m}_b está dado por

$$\vec{B}(\vec{m}_b) = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} (3(\vec{m}_b \cdot \hat{r})\hat{r} - \vec{m}_b)$$
(2.2)

por esto, la fuerza está dada por

$$\vec{F}_{ab} = \frac{3\mu_0}{4\pi r^4} \left[(\hat{r} \times \vec{m}_a) \times \vec{m}_b + (\hat{r} \times \vec{m}_b) \times \vec{m}_a - 2\hat{r}(\vec{m}_a \cdot \vec{m}_b) + 5\hat{r}((\hat{r} \times \vec{m}_a) \cdot (\hat{r} \times \vec{m}_b)) \right]$$
(2.3)

donde μ_0 es la permeabilidad en el vacío y $\hat{r} = \vec{r}/|r|$. Por otro lado, la aceleración angular $\alpha(t)$ fue calculada dividiendo la torca actuando sobre cada imán por su momento de inercia. La torca sobre \vec{m}_a debido al campo magnético de \vec{m}_b es

$$\vec{\tau}_{ab} = \vec{m}_a \times \vec{B}(\vec{m}_b) \tag{2.4}$$

entonces

$$\vec{\tau}_{ab} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \vec{m}_a \times (\vec{m}_b - 3(\vec{m}_b \cdot \hat{r})\hat{r})$$
(2.5)

Las ecuaciones (2.3) y (2.5) fueron usadas para obtener las aceleraciones lineal y angular $\vec{a}(t)$ y $\vec{\alpha}(t)$ a fin de introducirlas en el algoritmo de velocidades de Verlet para obtener la dinámica. En las simulaciones numéricas, el sensor se modela como un resorte que tira de la estructura y también permitía la reorganización de la estructura. De la deformación de la cadena se obtuvo la resistencia a la tensión.

Para el caso 3D, construimos numéricamente estructuras cristalinas equivalentes a las utilizadas en los experimentos, colocando esferas en arreglos cúbicos y hexagonales utilizando el programa Mathematica para hacer la visualización. Para una estructura cúbica, las orientaciones de los dipolos magnéticos calculados a partir de la técnica de minimización de energía aleatoria (REM)[54, 55] tienen una configuración sin dirección preferencial pero tal que minimiza su energía, como lo indican las flechas negras en la figura 2.7a. Estas configuraciones dipolares para conjuntos cúbicos también se obtuvieron en la Ref. [56] en donde se han explorado arreglos de cuentas magnéticas a lo largo de cadenas y anillos;

mostrando que es posible crear defectos mecánicamente estables en los arreglos dipolares. No obstante, nuestras simulaciones muestran que si se aumenta el número de capas en uno de los ejes del crital, se obtiene una orientación dipolar preferencial como se muestra en la Fig. 2.7b.



Figura 2.7: a) Orientaciones dipolares en una estructura cúbica de imanes esféricos permanentes. b) Si se aumenta el número de capas en una dirección, los dipolos se reorientan en una dirección. c-d) Ejemplos de estructuras cP construidas numéricamente y sometidas a flexión y torsión. Para simular la flexión, cada capa de la estructura se traslada lateralmente manteniendo las extremidades del cristal fijas. La torsión se simula girando cada capa del cristal (colaboración GrainsLab).

Numéricamente, simulamos los diferentes tipos de deformación de los magnetocristales al desplazar los planos de las esferas magnéticas en una dirección deseada y la configuración más estable se obtuvo mediante REM. Este método se ha aplicado anteriormente para obtener configuraciones estables de cadenas lineales y anillos propuestos en la Ref. [21]. Esta aproximación consiste en realizar una búsqueda aleatoria de minimización de energía para calcular las orientaciones del dipolo magnético en cada paso de la deformación. Luego, la energía de interacción de cada dipolo magnético \vec{m}_a en un campo magnético externo \vec{B} producido por un segundo dipolo \vec{m}_b se calcula mediante [53]:

$$U = -\vec{m}_a \cdot \vec{B}(\vec{m}_b) \tag{2.6}$$

Usando el principio de adición agregamos las contribuciones de energía de todas las esferas magnéticas que interactúan y calculamos la energía magnética total de la estructura y su variación desde la posición inicial hasta la posición final. En una primera aproximación, este valor debe ser igual a la energía mecánica suministrada por la fuerza externa o torca. De la derivada de la energía magnética con respecto al desplazamiento o al ángulo de torsión podemos estimar la fuerza de flexión, tensión o torsión hasta el momento de la fractura de la estructura. En todos los casos, el proceso finaliza cuando dicha derivada alcanza un máximo. Los esfuerzos en la fractura fueron calculados por REM y se compararon con los valores experimentalmente obtenidos. A continuación se presentan los resultados experimentales y las estimaciones numéricas, así como su respectiva discusión.
2.4. Resultados y discusión

2.4.1. Fuerza de tensión sobre una cadena simple

El primer sistema fue una cadena lineal sometida a un esfuerzo de tensión. La figura 2.8a muestra los resultados obtenidos de medir la fuerza de tensión F_T como función de Δx para tres experimentos con una cadena de 30 esferas (líneas de color). Notemos el crecimiento abrupto de F_T desde cero hasta un valor experimental $F_T^{max} \approx 3.45$ N en el cual la cadena se rompe. Después de la fractura, a medida que aumenta Δx , F_T decae rápidamente a cero. Sin embargo, incluso cuando se ha alcanzado la ruptura mecánica, la fuerza de atracción magnética es diferente de cero y disminuye con Δx . En la figura 2.8b, F_T^{max} se presenta como función del número de esferas magnéticas que conforman la cadena (puntos negros), con su respectiva barra de error. Se encontró que cuando solo se separan dos esferas magnetizadas $F_T^{max} \approx 3.0$ N. Pero, este valor aumenta y se satura en $F_T^{max} \approx 3.45$ N para cadenas que tienen más de 10 esferas. Esto implica que la contribución a la fuerza de atracción entre dos vecinos debido a la presencia de las otras esferas es aproximadamente el 12% de su valor de la interacción dipolo-dipolo, es decir, esta interacción es dominante incluso cuando la cadena es considerablemente larga.



Figura 2.8: Fuerza de tensión requerida para fracturar una cadena: a) F_T vs Δx . Las líneas en color representan los datos experimentales y la línea negra a trazos representa $F \propto \Delta x^{-4}$. b) F_T^{max} como función del número de esferas magnéticas que conforman la cadena obtenida, experimentos (puntos negros) y simulaciones con dinámica molecular (línea roja).

El valor de F_T^{max} entre dos esferas magnetizadas es útil para calcular el momento magnético de las esferas. De la ecuación (2.3), si $\vec{m}_a = \vec{m}_b = \vec{m}$ y ambos dipolos puntuales se encuentran en la misma dirección paralela/antiparalela al vector de posición \vec{r} , la fuerza \vec{F} sobre \vec{m} es atractiva y/o repulsiva y tiene magnitud

$$F_{ab} = \frac{3\mu_0 m^2}{2\pi r^4} \tag{2.7}$$

Dado que experimentalmente obtuvimos $F_T^{max} = 3,0$ N para dos esferas separadas (centro a centro) por una distancia d = 5.0 mm, sustituyendo en (2.7), encontramos que la magnitud del momento magnético de la esfera es m = 0.056 Am². Este valor se usó en las simulaciones de dinámica molecular (MD) para calcular F_T^{max} para cadenas de diferente longitud, este resultado se muestra con una línea roja que satura en ~ 3.6 N en la figura 2.8b. Note que el resultado numérico sobreestima el valor de saturación

encontrado experimentalmente, esto se debe seguramente a que el cálculo numérico se realizó usando el modelo de carga, el cual sabemos es una aproximación de un sistema ideal, sin embargo, consideramos que es una buena aproximación y predice correctamente que si nuestros imanes fueran ideales tendríamos un fuerza resultante mayor.

Por otra parte, calculamos la fuerza que actúa sobre una esfera magnética de la cadena como función de la separación Δx después de la ruptura. Esta fuerza se expresa como la suma de las fuerzas individuales ejercidas sobre la esfera debido a la presencia de las otras esferas. Después de la fractura, si r es la distancia de una esfera a otra esfera en el punto de la fractura, se tiene:

$$F_T = \frac{3\mu_0 m^2}{2\pi} \left(\frac{1}{r^4} + \frac{1}{(r+d)^4} + \frac{1}{(r+2d)^4} + \dots + \frac{1}{(r+nd)^4} \right)$$

= $\frac{3\mu_0 m^2}{2\pi r^4} \left(1 + \sum_{k=1}^{k=n} \frac{1}{(1+\frac{kd}{r})^4} \right)$ (2.8)

renombrando el último término como β , se obtiene:

$$F_{tot} = \frac{3\mu_0 m^2}{2\pi r^4} \left(1 + \beta\right)$$
(2.9)

Dado que el primer término de la ecuación (2.8) corresponde con la ecuación (2.9) para el caso de dos esferas magnetizadas, entonces el segundo término incluye la contrubución debido al resto de las esferas de la cadena. Usando la ecuación (2.8) para ajustar los datos experimentales de la figura 2.8a), se muestra con línea roja y usando el valor de m = 0.056Am², se obtiene que $\beta = 0.12$, lo cual significa una contribución de ~ 12 %, en acuerdo con los datos experimentales.

2.4.2. Fuerza de tensión en una cadena 2D (lámina)

Los resultados anteriores muestran que la resistencia a la tensión para cadenas de más de 10 esferas es prácticamente constante. De acuerdo con este resultado experimental, elegimos trabajar con un mínimo de 30 esferas de largo. Analizamos también la resistencia a la tensión de cadenas que unidas forman una lámina dos dimensional (2D), es decir, cadenas 2×1 . Las imágenes a la izquierda de la figura 2.9a muestran que, cuando se aplica un esfuerzo de tensión sobre el ensamble, la cinta se rompe sin deformación en el ensamble cúbico, similar a una fractura frágil. En contraste, la cinta hexagonal sufre una deformación parecida a una deformación dúctil en un movimiento en zig-zag, ver figura 2.9b. Note que los resultados obtenidos numéricamente son equivalentes, como lo muestran las imágenes a la derecha en la figura 2.9. En las simulaciones de MD, la línea radial en cada partícula indica la orientación del dipolo magnético. Esto permite observar cómo giran los dipolos durante la deformación. En el caso cuadrado, los dipolos se orientan para tener una configuración de mínima energía después de la ruptura, este resultado está en consistencia con el estudio teórico que se muestra en el Apéndice A, donde se muestra como interaccionan dos esferas magnéticas según la orientación de sus dipolos, es evidente que en una lámina es más complicado puesto que hay contribución de los vecinos a la energía



de interacción. En el caso hexagonal, los dipolos permanecen prácticamente alineados, y esto permite la deformación dúctil.

Figura 2.9: Cadenas 2D sometidas a esfuerzos de tensión: a) estructura cuadrada (cP) y b) estructura hexagonal (Hx). Los *snapshots* de la izquierda muestran el proceso de ruptura experimental.

Las gráficas de la figura 2.10 muestran la fuerza como función de la deformación Δx . Note que la cadena cuadrada, figura 2.10a, admite una resistencia máxima a la tensión $F_T^{max} \approx 5.6$ N, y posteriormente disminuye hasta cero, este decaimiento es proporcional a $1/r^4$ de acuerdo con el modelo de carga, note que el comportamiento es similar al caso de una cadena simple. Para la estructura hexagonal, figura 2.10b, $F_T^{max} \approx 4$ N, seguido de una variación periódica de F_T que alcanza máximos locales de ~ 2 N después de cada paso de deformación igual a la mitad del diámetro de partícula d/2, es decir, cuando los dipolos se alinean de nuevo. Los valores promedio obtenidos de cinco repeticiones fueron $F_T^{max} = (5.8\pm0.2)$ N y $F_T^{max} = (4.1\pm0.1)$ N para arreglos cuadrados y hexagonales, respectivamente. Para los máximos periódicos en zig zag $F_T = (2.1\pm0.2)$ N. Cabe señalar que la resistencia a la tensión esperada de la contribución de dos cadenas largas individuales es de 6.9 N (experimentalmente obtuvimos que la fuerza necesaria para romper una cadena es 3.45 N). Por lo tanto, la estructura hexagonal genera un mayor *apantallamiento* a las cargas magnéticas asumidas en la interacción atractiva que en la matriz cuadrada.



Figura 2.10: Fuerza de tensión F_T como función de la deformación Δx para una cadena 2D. Las líneas sólidas representan los experimentos y las líneas a trazos los resultados numéricos.

2.4.3. Resistencia a la tensión en magnetocristales

A continuación se presenta la respuesta mecánica de las estructuras magnéticas tridimensionales cuando un esfuerzo de tensión es aplicado. La dinámica de deformación de los arreglos cP, Hx y cP-Hx con dimensiones 3×3 se muestra en las imágenes de la figura 2.11. De igual forma que en el caso 2D, el magnetocristal cP se rompe en dos partes, manifestando una ruptura frágil, pero se observa una deformación extensa en los otros dos cristales (cP y cP-Hx), que se asemeja a una ruptura dúctil.



Figura 2.11: Proceso de deformación en magnetocristales sometidos a esfuerzos de tensión: a) cP, b) Hx y c) estructuras cP-Hx.



Figura 2.12: Resultados experimentales. Resistencia a la tensión como función de la deformación Δx en magnetocristales con dimensiones 3×3 . Las estructuras pueden deformarse de forma periódica (líneas azules) o desordenadas (líneas rojas) dependiendo de la velocidad de deformación.

En los gráficos de la figura 2.12, el primer pico de F_T como función de Δx muestra una mayor resistencia a la tensión para la estructura cP ($F_T \sim 25$ N) que para la matriz Hx ($F_T \sim 20$ N), esta dinámica es similar a la observada en sistemas 2D. Para las matrices Hx, las esferas pueden desarrollar una reorganización continua que disminuye el tamaño de la estructura (ver figura 2.11b) y produce una variación periódica en F_T con máximos cada $\Delta x \approx 2.5$ mm = d/2. Esta dinámica surge del hecho de que las cadenas rotas se desplazan a lo largo de los planos de deslizamiento orientados a 60° con el vecino libre más cercano, donde el campo magnético es más fuerte y donde el producto $\vec{m}_j \cdot \vec{B}$ tiene un máximo [57]. Sólo cuando se llega a una cadena lineal de esferas, se logra el fallo de la estructura. Este reordenamiento continuo recuerda la deformación progresiva en las estructuras cristalinas [58]. Para los cristales cP-Hx, la dinámica de ruptura es una combinación de los comportamientos de los cristales cP y Hx: las interacciones dominantes se producen en los planos cúbicos y determinan la resistencia máxima ($F_T \approx 25$ N), no obstante la deformación después de la ruptura es periódica, como en el caso de los arreglos hexagonales, figura 2.11c.

La fuerza máxima de ruptura F_T^{max} medida para las estructuras cP y Hx de diferentes dimensiones $N \times N$ se muestra en la figura 2.13. La dependencia esperada debido a la contribución de N^2 cadenas individuales sería $F_T = (3.45N^2)$ N y se indica en el gráfico con una línea azul. Sin embargo, si realizamos un ajuste cuadrático a los datos experimentales, se encuentra una contribución por cadena de 2.39 N y 1.72 N para estructuras cP (línea negra) y Hx (línea roja) respectivamente. Estos valores se desvían del valor esperado en un 30 % y 50 % aproximadamente. Si se usaran N^2 cables de acero de la misma rigidez en lugar de esferas magnéticas, la resistencia total sería N^2 veces la contribución de un cable individual, pero aquí la interacción magnética entre cadenas genera un *apantallamiento* entre las cargas debido a la orientación de los dipolos que como hemos visto en la estructura Hx se mantienen practicamente alineados. Las simulaciones de minimización de energía (REM) reproducen la resistencia a la tensión de la estructura cP (curva negra a trazos). No obstante, se obtuvo una desviación considerable del valor experimental para la estructura Hx (curva roja a trazos).



Figura 2.13: Fuerza máxima de ruptura F_T^{max} de magnetocristales sometidos a fuerza de tensión como función de las dimensiones del cristal $N \times N$ (puntos sólidos). Las curvas continuas corresponden a $F_T^{max} \propto N^2$ y las curvas a trazos con las simulaciones de minimización de energía.

2.4.4. Resistencia a la flexión en magnetocristales

A diferencia de las estructuras magnéticas 1D y 2D, los magnetocristales adquieren rigidez en todas las direcciones y pueden soportar una considerable flexión y torsión. La resistencia a la flexión es el esfuerzo para fracturar el ensamble mientras se dobla. La figura 2.14 muestra magnetocristales a) Hx y b) cP 3×3 sometidos a flexión por una fuerza perpendicular F_B . En el caso de estructuras hexagonales, la fractura es tipo frágil y se rompe ante una deformación por flexión casi despreciable δx que es la magnitud del desplazamiento transversal del ensamble. Esta respuesta contrasta con la estructura cúbica que resiste mayor flexión a una estructura cP, la ruptura es frágil, mientras que para

la estructura Hx es dúctil. Por lo tanto, un magnetocristal puede ser dúctil o frágil según la dirección cristalográfica en la que se aplique el esfuerzo.



Figura 2.14: Montaje experimental: a) Magnetocristal Hx y b)cP, sometidos a esfuerzo de flexión. Note que la estructura Hx se rompe (forma de V) mientras que la matriz cP se dobla, en ambos se mide la deformación perpendicular δx .



Figura 2.15: Fuerza de flexión experimental F_B requerida para producir una deformación perpendicular δx en los ensambles Hx, cP y cP-Hx de diferente tamaño (líneas sólidas). El gráfico Hx-cP, indica que la fuerza en la estructura híbrida se aplica sobre el plano con configuración Hx, mientras que el cP-Hx indica que la fuerza se aplica sobre el plano cP de la estructira. Las líneas a trazos corresponden con las simulaciones REM. Las curvas con $\delta x < 0$ representan valores de fuerza medidos antes de aplicar el esfuerzo sobre la estructura.

La figura 2.15 muestra la fuerza de flexión F_B como función de la deformación para todos los tamaños N×N y tipos (Hx,cP y cP-Hx) de estructuras evaluadas experimentalmente (curvas continuas) y por simulación por minimización de energía (curvas a trazos), estas curvas obtenidas numéricamente son válidas hasta que la estructura alcanza la máxima resistencia, después de este punto el decaimiento en las curvas no representa los datos experimentales. En todos los casos analizados, se encuentra que las estructuras hexagonales resisten más a la flexión que las estructuras cúbicas pero son menos elásticas (los momentos dipolares con dirección paralela favorecen la dureza de la estructura Hx), dado que la fuerza máxima de flexión F_B^{max} se encuentra cuando $\delta x_{Hx} \ll \delta x_{cP}$. Para el caso de las estructuras híbridas, en donde recordemos que se combinan planos cúbicos y hexagonales, si el esfuerzo de flexión es aplicado en el plano hexagonal (Hx-cP) el arreglo presenta mayor dureza, incluso es más resistente que un arreglo puro Hx, pero si la flexión se aplica en el plano cP (cP-Hx) el magnetocristal es elástico. Este resultado es relevante ya que indica que podemos combinar características de dureza y elasticidad en una sola estructura, lo cual puede ser de interés para diversas aplicaciones, por ejemplo, para el desarrollo de nuevos metamateriales [59].



Figura 2.16: Fuerza máxima de flexión F_B^{max} para magnetocristales cP y Hx como función del tamaño del cristal $N \times N$, experimentos (puntos sólidos) y simulaciones (puntos abiertos). A la derecha se muestra que $F_B^{max} \propto N^3$ para la estructura hexagonal y $F_B^{max} \propto N(N-1)$ para la estructura cP.

La figura 2.16a muestra F_B^{max} como función de la dimensión $N \times N$ del magnetocristal y 2.16b presenta ajustes tipo $F_B^{max} \propto N^3$ para una estructura hexagonal, mientras que para un cristal cúbico $F_B^{max} \propto N(N-1)$. En la literatura se ha reportado que para una barra de sección transversal rectangular continua a la cual se aplica una carga en una configuración de flexión de tres puntos, como la que se utiliza en nuestros experimentos, el esfuerzo de flexión es aproximadamente igual que el esfuerzo para alcanzar la ruptura por medio de tensión y viene dada por [60]:

$$\sigma = \left(\frac{3}{2}\right) \frac{F_B^{max}L}{ab^2} \tag{2.10}$$

donde *a* y *b* son el ancho y el grosor de la barra y *L* es la longitud de la barra. En nuestros experimentos y simulaciones, para todos los casos analizados $F_B^{max} \ll F_T^{max}$. Además, sólo los magnetocristales hexagonales siguen la dependencia esperada en σ . Dada la pendiente 0.162±0.007 de la curva negra de la figura 2.16b y usando la ecuación (2.10) para la estructura hexagonal con L = 23d = 11.5 cm y $a = b = \frac{\sqrt{3}}{2}Nd$ (figura 2.17), se encuentra

que la resistencia a la flexión es $\sigma_{Hx} = (344\pm40)$ kPa. Notemos que este resultado es válido para nuestro sistema experimental a pesar de que lo hemos considerado como una barra continua. Es conveniente resaltar que es un problema interesante deducir una expresión analítica que contenga la información magnética de la estructura, pero no es nuestro objetivo. Para la estructura cúbica, la ecuación (2.10) no se puede aplicar considerando que F_B^{max} no sigue la dependencia cúbica de N. Por ello, calculamos la tensión resultante bajo una fuerza axial dada por

$$\sigma_{cP} = \frac{F_B^{max}}{ab} = \frac{F_B^{max}}{N(N-1)d^2}$$
(2.11)

y de la pendiente 0.58 ± 0.01 del ajuste de la curva roja de la figura 2.16b, se encuentra: $\sigma_{cP} = 23.2$ kPa. Aunque ésta es una aproximación, claramente $\sigma_{Hx} \gg \sigma_{cP}$, como se muestra en los datos experimentales. Para estructuras híbridas, la resistencia a la flexión, está determinada principalmente por la estructura cristalina del plano sobre el cual se aplica la fuerza de deformación. Sin embargo, F_B^{max} para el ensamble Hx-cP y más bajo para el cP-Hx; por lo tanto, la elasticidad dada por los planos cP mejora la rigidez en los planos Hx, pero la rigidez de los planos Hx disminuye la rigidez de los planos cP. Notemos que en todos los casos, las simulaciones predicen bien los valores experimentales.



Figura 2.17: Geometría de la estructura hexagonal dos dimensional.

A continuación presentamos los resultados para el análisis de torsión aplicado a magnetocristales.

2.4.5. Resistencia a la torsión en magnetocristales

La última prueba mecánica aplicada a las estructuras magnéticas fue la resistencia a la torsión. Las figuras 2.18a-c muestran la torca τ medida como función del ángulo de torsión θ para las diferentes estructuras. Claramente, la resistencia a la torsión es considerablemente mayor para las estructuras Hx que para las cP. Sin embargo, los ángulos de fractura θ_f son más pequeños para Hx que para los arreglos cP. De manera similar a las pruebas mecánicas anteriores, la respuesta mecánica a la torsión de las matrices híbridas está en acuerdo con su respuesta ante flexión y la tensión: una combinación de rigidez y plasticidad.

En el caso de una varilla continua de longitud L sometida a torsión, la relación entre la torca τ y el ángulo de giro θ está dada por:

$$\tau = G J_T L^{-1} \theta \tag{2.12}$$

donde el producto del módulo de *shear*, *G*, y el segundo momento del área, J_T , da la rigidez torsional, y θ/L es la razón de torsión o giro. Para una barra de sección transversal rectangular con lados $a \ge b$, $J_T = K_1\left(\frac{a}{b}\right) ab^3$, donde los valores de $K_1\left(\frac{a}{b}\right)$ se dan en [61]. En nuestros cristales, la dependencia lineal $\tau(\theta)$ dada por la ecuación (2.12) es claramente observada únicamente cuando $\theta \ll \theta_f$. Por tanto, aplicamos un ajuste de la forma $\tau = s_3\theta$ a la parte lineal de cada curva (el rango lineal de θ varía dependiendo del tipo y tamaño de estructura) en las figuras 2.18a-c para obtener las pendientes $s_3 = GK_1\left(\frac{a}{b}\right) ab^3/L$, las cuales se grafican como función de la dimensión del cristal en la figura 2.19a. El gráfico log-log, figura 2.19b, presenta la dependencia s_3AN^4 , donde *A* en unidades [N/m³] es una constante que se obtiene ajustando los datos y depende de la estructura cristalina. Por tanto se obtiene que el valor medio del módulo de *shear* y está dado por $G = AL/K_1d^4$, el cálculo para cada estructura es $G_{cP} \approx 29$ kP, $G_{Hx} \approx 54$ kP y $G_{cP-Hx} \approx 32$ kP $(G_{cP} < G_{cP-Hx} < G_{Hx})$.



Figura 2.18: (a-c) Resistencia a la torsión τ opuesta por los tres tipos de estructuras a la deformación angular θ . Los puntos representan valores obtenidos experimentalmente para cada estructura, las líneas continúas muestran los resultados obtenidos de simulaciones numéricas.



Figura 2.19: a) s_3 como función de las dimensiones del cristal $N \times N$ para Hx (cuadros rojos), cP (puntos negros) y cristales híbridos (rombos verdes). b) Gráfico log s_3 vs log N el cual indica una dependencia con N^4 , las líneas continuas indican las curvas ajustadas.

Aunque el análisis anterior nos permitió cuantificar el módulo de shear, solo es válido

suponiendo la dependencia lineal impuesta por la ecuación (2.12). Sin embargo, tanto los experimentos como las simulaciones con REM (curvas continuas en las figuras 2.18a-c) muestran que los magnetocristales siguen una dependencia no lineal con θ . Se requiere un modelo que considere los efectos combinados de la elasticidad, incluido el elongamiento y la compresión radial, para determinar la forma funcional de $G(\theta)$, como el utilizado para estudiar la conservación del orden en haces torcidos de estructuras elásticas [62].

2.5. Conclusiones sobre el estudio de magnetocristales

La mecánica de medios continuos establece que las propiedades elásticas de materiales pueden explicarse por medio de su estructura cristalina y su respuesta colectiva a las fuerzas externas aplicadas [47]. Varios estudios se han enfocado en la formación de estructuras estables a partir de esferas magnéticas y han mostrado la formación estable de cadenas y anillos [45, 46]. Sin embargo, un estudio sistemático sobre las propiedades elásticas de este tipo de estructuras estaba hace poco ausente en la literatura. En este trabajo, después de caracterizar las estructuras magnéticas 1D y 2D, hemos ampliado la investigación mediante el estudio de la respuesta mecánica de magnetocristales tridimensionales a esfuerzos de tensión, flexión y torsión.

Nuestros resultados mostraron que las estructuras cúbicas bajo esfuerzo de tensión exhiben una fractura tipo frágil, mientras que las estructuras hexagonales muestran un proceso de deformación similar a una deformación progresiva [58]. La dependencia de la resistencia a la tensión como función de la sección transversal está bien aproximada por una dependencia cuadrada ($F_T^{max} \propto N^2$). Este resultado es consistente con la energía cohesiva reportada en la referencia [46]. En el caso de la resistencia a la flexión, las estructuras cúbicas exhiben un comportamiento dúctil y las estructuras hexagonales exhiben un comportamiento frágil. Es de resaltar que la combinación de planos cúbicos y hexagonales en el cristal adquieren la resistencia a la ruptura de la estructura Hx y la plasticidad de la estructura cP.

Teóricamente, se espera que la fuerza de flexión (F_B^{max}) como función del número de planos que forman la sección transversal $(N \times N)$ siga una ley de potencias con N^3 , sin embargo, esto solo se cumple para estructuras hexagonales, mientras que las estructuras cúbicas siguen una ley N(N-1). Este último punto indica que las estructuras hexagonales sometidas a flexión, presentan mayor resistencia a la ruptura y admiten poca deformación (frágiles) y, las estructuras cúbicas admiten mayor deformación antes de fracturarse (dúctiles). Nuestro análisis sobre la resistencia a la torsión nos permitió determinar el módulo de *shear* y mostrar que éste es considerablemente más alto para los magnetocristales hexagonales que para los cristales cúbicos. De hecho, la cohesión es mucho más alta en una estructura hexagonal ferromagnética que en una estructura cúbica. Nuestros resultados sugieren que los magnetocristales pueden ser dúctiles o frágiles dependiendo de la dirección cristalográfica en la que se aplica el esfuerzo. Además, nuestra investigación revela nuevos comportamientos asociados con la dinámica de reorganización de partículas, los cuales pueden ser llevados al estudio de respuestas mecánicas en estructuras cristalinas. Con esta investigación, hemos logrado un estudio original y sistemático de las propiedades mecánicas de estructuras de esferas magnéticas, las cuales no habían sido reportadas en la literatura. Por ello, este trabajo representa una aportación al estudio de los sistemas granulares magnéticos. Hemos descubierto que las interacciones magnéticas dan estabilidad a estructuras cúbicas y hexagonales, y que además, es posible construir ensambles híbridos cuya respuesta a la deformación sea una combinación de ambos tipos de estructuras. Muy recientemente, nuestros resultados han contribuido al estudio de actuadores magneto-elásticos [63], así como el estudio de patrones de agregación en sistemas compuestos por partículas magnéticas [64].

En la siguiente sección presentamos el estudio de un sistema magnético sometido a condiciones experimentales que le permiten presentar características análogas a las que se encuentran en medios fluidos.

Capítulo 3

Líquido granular magnético

En este capítulo analizaremos el estado fluidizado de un medio granular magnético cuasi bidimensional. El cual es un medio granular no convencional, ya que las partículas que lo conforman interactúan por medio de fuerzas repulsivas. Para esto, se diseña una celda especial que obliga a los imanes a mantener sus dipolos magnéticos en una misma dirección de tal manera que las interacciones entre los granos son repulsivas. Investigamos la dinámica de penetración de un proyectil o intruso en este medio. El proyectil puede experimentar interacciones de tipo repulsiva, atractiva o neutra con las partículas (granos). generando diferentes dinámicas: i) para el caso repulsivo, el proyectil comprime la cama de granos y presenta rebotes antes de detenerse, ii) el proyectil es acelerado cuando se aproxima a la cama de granos, al llegar a ella es rodeado por granos de la cama que se adhieren a él, incrementando su diámetro efectivo y consecuentemente, la fuerza de arrastre que actúa y iii) en el caso neutro, el proyectil se mueve como si penetrara en una cama de granos con fricción convencional, esto debido a que no hay interacción magnética con los granos del sistema. Además, en colaboración con miembros del laboratorio GrainsLab del Instituto de Física (BUAP) se desarrollaron simulaciones de dinámica molecular (MD. por sus siglas en inglés) capaces de reproducir los resultados experimentales. Además, de determinar el efecto de la magnetización y el papel de la fricción entre las partículas y las paredes del contenedor. Los resultados muestran que nuestro sistema granular magnético repulsivo presenta un comportamiento similar al de una esfera impactando en un fluido miscelar viscoelástico y que la dinámica del proyectil puede ser modelada como un sistema resorte-amortiguador (spring-dashpot). Por otro lado, el sistema magnético también puede ser usado como un un sistema disipativo, ya que se encontró que cuando un proyectil magnético atractivo y un proyectil neutro impactan sobre dicha cama granular, se detienen presentando un comportamiento de respuesta análoga a la de un oscilador sobre amortiguado. Estas características podrían ser de interés para algunas posibles aplicaciones.

3.1. Antecedentes

La dinámica de impactos tiene características que la distinguen de otras áreas de la mecánica clásica de cuerpos rígidos. Una de ellas corresponde con los efectos de inercia que deben ser considerados en las ecuaciones de movimiento. Para dar solución a los fenómenos de impacto existen tres rutas posibles [65]: i) aproximaciones empíricas, donde

por medio de datos experimentales se obtienen correlaciones, este procedimiento sólo es útil para un problema específico y por tanto es complicado extrapolar información a otros materiales o geometrías fuera del rango de velocidad que se investiga experimentalmente, ii) simulaciones considerando la cama granular como un medio continuo, por medio de este método se aplican modelos computacionales que se basan en aplicación y combinación de las leyes fundamentales de conservación; y iii) modelos físicos, donde las leyes físicas son aplicadas a cada elemento del sistema. Cada uno de los tres métodos tiene sus ventajas y desventajas, por ello en nuestro sistema granular hacemos uso de los tres métodos a fin de obtener una mejor aproximación.

El impacto y penetración de un objeto sólido en un líquido y en un medio granular convencional ha sido extensamente estudiado debido a su relevancia en ingeniería espacial y aeroespacial [77, 67], por ejemplo, en la investigación del impacto de meteoritos en la superficie arenosa de la Luna y de otros cuerpos celestes y la formación de cráteres [68, 69, 70, 71], lo cual ha motivado que durante las últimas décadas se realizaran numerosos experimentos a escala de laboratorio para estudiar sistemáticamente la dinámica de impacto en medios granulares de este tipo y explicar así la dependencia del fenómeno en términos de parámetros como la fuerza de arrastre F_d , la profundidad de penetración z del proyectil, velocidad \dot{z} , factor de empaquetamiento del medio granular, fricción de deslizamiento entre el provectil y el medio granular, masa y forma del proyectil, propiedades del medio, entre otros, de tal modo que se han planteado distintas dependencias relacionando dichos parámetros en forma de leves de potencia. También, se han reportado similitudes entre el impacto de un proyectil en líquidos y en superficies granulares [72], donde se ha mostrado que el impacto de una esfera sólida en un medio granular genera una fenomenología similar a la que se observa en líquidos, por ejemplo, la formación de cavidades y colapso [8]. Sin embargo, la diferencia más importante entre impacto en fluidos y granos, es que el objeto que impacta y penetra se hunde en un fluido mientras que en la materia granular el objeto alcanza una profundidad final. Esta diferencia se debe principalmente a las fuerzas de arrastre y fricción en cada caso. A continuación vamos a comentar cuáles son los modelos más simples usados para describir el movimiento de un proyectil cuando penetra un medio.

Para el caso en que el medio sea un *fluido newtoniano*, la fuerza de arrastre sobre una esfera de radio r_b escala linealmente con la velocidad del proyectil \dot{z} cuando las fuerzas viscosas dominan (número de Reynolds $Re \ll 1$), y está dada por la ley de Stokes

$$F_d = 6\pi\eta r_b \dot{z} \tag{3.1}$$

donde η es la viscosidad del fluido. Para el caso en que las fuerzas inerciales dominan (número de Reynolds $Re \gg 1$), F_d escala con el cuadrado de la velocidad del proyectil como

$$F_d = C_d \pi \rho r_b^2 \dot{z}^2 \tag{3.2}$$

donde C_d es el coeficiente de arrastre hidrodinámico del objeto y ρ es la densidad (constante). En este tipo de fluidos, un objeto cayendo alcanza una velocidad terminal

cuando su peso es balanceado por la fuerza de arrastre.

Por otro lado, cuando un proyectil penetra en un *fluido viscoelástico*, es decir, un fluido no newtoniano que combina características de un sólido elástico y un fluido viscoso, la velocidad del proyectil puede presentar oscilaciones mientras se aproxima a su estado final [8, 9]. Muchos materiales naturales no pueden ser descritos únicamente por leyes lineales ya que frecuentemente exhiben comportamientos reológicos complejos no lineales y para caracterizarlos, la viscosidad y la elasticidad se acoplan [10]. El comportamiento viscoso se modela por medio de un elemento amortiguador y la elasticidad, el modelo de Maxwell y el modelo de Kelvin-Voigt. Las ilustraciones esquemáticas de estos modelos se muestran en la figura 3.1. El modelo de Maxwell se define por una conexión en serie de un amortiguador (*dashpot*) y un resorte (Fig. 3.1a), y el modelo de Kelvin-Voigt corresponde a una conexión en paralelo (Fig. 3.1b).



Figura 3.1: Ilustración esquemática de los modelos viscoelásticos clásicos. (a) El modelo de Maxwell consiste en una conexión en serie de un amortiguador y un resorte. (b) El modelo de Kelvin-Voigt consiste en una conexión en paralelo de estos elementos.

En el modelo de Maxwell, el esfuerzo aplicado al elemento amortiguador y el aplicado al elemento resorte son idénticos. Así, el esfuerzo interno se almacena primero en un elemento de resorte lineal con constante elástica κ , y luego, se disipa gradualmente por un elemento amortiguado lineal con coeficiente viscoso de amortiguamiento β . En este modelo, se asume que el resorte y el amortiguador se comportan de acuerdo a la ley de Hooke y Stokes respectivamente. Por tanto, la fuerza de arrastre está dada por

$$F_d = \kappa z + \beta \dot{z} \tag{3.3}$$

Dependiendo de los valores de κ y β , la solución de la ecuación de movimiento puede ser subamortiguado, reproduciendo oscilaciones en la velocidad observadas durante la penetración de un proyectil en fluidos miscelares [8], o sobreamortiguado, como ocurre en el caso de impactos en soluciones de alcohol de polivinilo donde la velocidad del objeto decae exponencialmente [73]. En el modelo de Kelvin-Voigt, donde el resorte y el amortiguador están conectados en paralelo, el esfuerzo se distribuye y la tensión es común entre ambos componentes. En la referencia [74] se estudió el impacto de objetos en espumas usando una adaptación del modelo de Kelvin-Voigt. Sin embargo, las respuestas elásticas y viscosas en el modelo no presentan influencia sobre la velocidad de decaimiento en impactos a bajas velocidades.

Si el fluido viscoelástico es *shear thickening*, su viscosidad incrementa cuando es sometido a un esfuerzo cortante. En la referencia [75], se propone un modelo de masa agregada para describir la respuesta al *shear thickening* de una solución de maizena disuelta en agua donde un objeto impacta en el límite de bajas velocidades. El impacto genera un frente de solidificación que transforma una matriz de partículas inicialmente compresibles en una región de atascamiento creciente, incrementando así la masa que el objeto tiene y conduciendo a una extraordinaria cantidad de absorción de momento. En la referencia [73], se muestra que para impactos de alta velocidad la habilidad de líquidos no newtonianos para detener objetos es dado por su propiedad viscoelástica más que por el *shear thickening* o *shear thinning*.

Regresando a los materiales granulares convencionales, un modelo aceptado para describir la dinámica de un objeto impactando considera la fuerza de arrastre como la suma de un término de fricción dependiente de la profundidad más un término inercial viscoso [76]:

$$F_d = F(z) + \gamma \dot{z}^2 \tag{3.4}$$

donde γ es el coeficiente de arrastre viscoso, y F(z) es el término de fricción. Esta ecuación es similar a la ley de fuerza de Poncelet [77], $F_0 + cv^2$ utilizado en balística de alta velocidad, la cual establece que el término de fricción de Coulomb es una función de la profundidad en el medio granular. Tsimring y Volfson [76] argumentan que la forma de F(z) debería tener una dependencia desde cuadrática a constante debido a las formas del proyectil y del cráter formado por su movimiento. Ellos también muestran que la profundidad de penetración sigue una ley de potencias como $d = (d_0^2 H)^{1/3}$. En la ecuación (3.4) el término de fricción frecuentemente se toma con una dependencia lineal creciente con z [78]. Por tanto, la velocidad del proyectil decrece desde su valor al momento del impacto y la fricción detiene el objeto hasta una profundidad final donde el proyectil se mantiene en estado estacionario. Sin embargo, para sistemas con baja fracción de empaquetamiento o materiales ultra ligeros, F(z) tiene una saturación exponencial debido al efecto Janssen [13, 14]. Bajo tales condiciones un objeto denso puede hundirse a través de los granos alcanzando una velocidad terminal, manifestando un comportamiento tipo líquido como en el caso de fluidos newtonianos [79].

En un medio granular convencional, el contacto entre partículas produce disipación de energía debido a la fricción y las colisiones, esto da rigídez a la estructura granular a través de las cadenas de fuerza de contacto [80]. En el sistema granular magnético que estudiamos en esta tesis, las partículas no presentan contacto entre ellas, sino que las interacciones se dan a través del campo magnético de cada una, este tipo de características no han sido exploradas hasta donde sabemos en la literatura. Por lo anterior, una de las contribuciones de esta tesis es el estudio experimental, por simulación y en base del modelo teórico análogo al modelo de Maxwell que se hace un estudio sistemático de tres proyectiles diferentes impactando en una cama de granos magnéticos que se repelen entre sí. Debido al impacto del proyectil, la cama granular se comprime parcialmente, por tanto la densidad local cambia antes y después del impacto, disminuyendo la separación entre los imanes y por tanto incrementando la energía potencial magnética, esto da como resultado una respuesta viscoelástica en el medio. A pesar de que las fuerzas de contacto no existen en nuestro medio granular repulsivo, la interacción magnética de los granos induce rigidez en el sistema confinado y el proyectil se detiene a cierta profundidad. Por ello, nuestro sistema presenta un comportamiento análogo al que se observa en fluidos viscoelásticos, pero mantiene características de un medio granular.

Para investigar la dinámica de impacto y penetración en este tipo de sistema granular, consideramos tres escenarios diferentes: interacciones repulsivas, atractivas y neutras entre el proyectil y los granos. En la literatura se ha reportado el estudio de sistemas magnéticos donde una gota magnética impacta la superficie de un fluido magnético [81], y se ha observado que la respuesta es diferente al de gotas que impactan un líquido viscoso [82]. Similarmente encontramos que la dinámica de los granos magnéticos perturbados por un proyectil magnético es diferente al caso de un proyectil neutro (no magnético), esto debido a las interacciones magnéticas de largo alcance. A continuación describimos el montaje experimental y discutimos la dinámica de los tres proyectiles para diferentes velocidades de impacto, así como el efecto de la magnetización de la cama granular y el rol de la fricción con las paredes. Finalmente se propone un modelo análogo al de un resorte amortiguado para estudiar teóricamente la dinámica del sistema.

3.2. Diseño experimental



Figura 3.2: Esquema del montaje experimental. a) Celda Hele-Shaw parcialmente llena con discos magnéticos que se repelen entre sí. Un proyectil es lanzado desde la parte superior dentro de la celda, su penetración es filmada con cámara de alta velocidad. El proyectil puede experimentar interacción b) repulsiva, c)neutra o d) atractiva.

Se diseñó un montaje experimental específico para estudiar un provectil que impacta sobre una cama de imanes permanentes distribuidos de manera que sus momentos dipolares quedan alineados de forma que en el sistema los granos magnéticos no se tocan, ya que al interactuar por fuerzas repulsivas de largo alcance quedan separadas entre ellas. En el link https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S037702572030063X se encuentra material suplementario con fotos y videos del sistema en funcionamiento. El experimento se diseñó de tal forma de hacerlo lo más funcional en las condiciones de nuestro espacio y recursos materiales. Así que tanto el número como las dimensiones de la celda y su altura se eligieron de tal forma que optimizara nuestros recursos. Este montaje experimental para estudiar la dinámica de impacto y penetración en un medio granular repulsivo se muestra en la figura 3.2. El diseño consiste en una celda Hele-Shaw con dimensiones 40 cm \times 150 cm de longitud por altura, separadas por una placa de acrílico de 3.1 mm de espesor. La celda contiene un conjunto de N = 550 imanes cilíndricos de neodimio con diámetro $d_m = (5.00 \pm 0.02)$ mm, grosor $t_m = (3.00 \pm 0.02)$ mm y masa m = 0.4 g. Todos los imanes son introducidos en la celda con su momento dipolar magnético en dirección perpendicular a las paredes a fin de obtener interacciones repulsivas grano-grano. Los imanes quedan confinados por paredes laterales, frontales y traseras bajo la acción de la gravedad, de tal manera que no pueden rotar, formando así un medio granular magnético repulsivo cuasi dos dimensional. La celda se montó sobre dos pivotes horizontales que permiten invertir verticalmente la celda para acumular los granos en el extremo opuesto. Antes de rotar la celda a su posición original se coloca una barra magnética en el exterior de la pared frontal de la celda a 80 cm del fondo de la celda. Esta barra tiene la función de puerta que evita el flujo de granos cuando la celda es rotada a la posición vertical inicial. Cuando la barra es retirada, los granos magnéticos caen por efecto de gravedad y se acumulan en el fondo de la celda formando una cama granular. Este procedimiento nos permite obtener condiciones iniciales reproducibles, con los granos distribuidos en un área de 40 cm \times 32 cm = 1280 cm² (es decir una densidad promedio de 0.43 imanes/cm² y fracción de empaquetamiento promedio =0.08).

Una vez que la cama granular está preparada, un proyectil es introducido a través de una puerta en la parte superior de la celda y se sujeta por medio de una barra magnética en el exterior de la celda a cierta altura h medida desde la superficie de la cama determinada por la posición promedio de la primera línea de imanes en la cama granular. El provectil se deja caer desde 5, 10, 20, 40, 60, 80, 100, 120 y 170 cm ± 0.5 cm. En todos los experimentos, consideramos únicamente caídas verticales. Para h = 170 cm fue necesario añadir una canaleta en la parte superior de la celda. Trabajamos con tres tipos de proyectiles para obtener las interacciones repulsivas, atractivas o neutras con los granos. Para los primeros dos casos (repulsivo y atractivo), el proyectil consiste en un disco de acrílico con diámetro $D = (3.26 \pm 0.01)$ cm con 13 imanes los cuales son insertados en perforaciones alrededor de la circunferencia del disco. Con esto, el proyectil puede experimentar interacciones repulsivas o atractivas con la cama granular dependiendo si los imanes del proyectil tienen sus dipolos paralelos o antiparalelos a los dipolos magnéticos de los imanes de la cama. Para el caso neutro, usamos un disco de acrílico con plomo en su centro para obtener la misma masa. Para los tres proyectiles, la masa total es $M = (8.2 \pm 0.1)$ g y densidad media $\rho = 3.28$ g/cm³. Cada impacto se repitió 5 veces por altura y fue filmado con una cámara de alta velocidad Photron SA3 a 1000 cuadros por segundo (fps, por sus siglas en inglés). Las posiciones z(t) de los proyectiles, definidas como la distancia entre el centro de masas del proyectil y la superficie inicial de la cama granular y medidas en dirección opuesta a g, se obtuvieron por medio de un algoritmo de seguimiento de partícula (*particle tracking*) usando el software ImageJ. Los resultados que se presentan en este capítulo son para un solo proyectil, pero no fue el único sistema que trabajamos ya que extendimos nuestro estudio repitiendo los experimentos con otros proyectiles (repulsivo, atractivo y neutro) con la misma geometría cilíndrica y tamaño que el primer proyectil pero con masa $M_2 = 12.98 \pm 0.001$ y densidad media $\rho_2 = 5.2$ g/cm³). Debido a que la dimámica de ambos proyectiles sigue el mismo comportamiento, únicamente presentamos el análisis completo para los proyectiles con densidad ρ y sólo mostraremos en esta memoria algunos gráficos correspondientes a los proyectiles con ρ_2 .

3.3. Simulaciones: Dinámica molecular

En colaboración con los expertos en simulación de GrainsLab, se desarrollaron simulaciones por medio de dinámica molecular (MD) implementando el método de velocidades de Verlet en Matlab, ver apéndice B. Consideramos el peso $\vec{W} = m\vec{g}$, la fuerza magnética repulsiva \vec{F}_m y la fricción \vec{F}_r debido a la interacción de los imanes con la pared frontal y trasera. Aquí la fuerza magnética se calculó sumando todas las contribuciones de los dipolos magnéticos que interactúan [57] y considerando el modelo de carga [20]. Bajo estas condiciones, la fuerza magnética de un dipolo con momento magnético $\vec{\mu}_m$ actuando sobre un segundo dipolo magnético idéntico está dado por

$$\vec{F}_m = \frac{3\mu_0\mu_m^2}{4\pi r^4}\hat{r}$$
(3.5)

donde r es la distancia radial entre partículas. Por otro lado, de la referencia [6], $\vec{F_r}$ la fuerza de fricción se puede estimar de la torca que actúa sobre cada partícula $\vec{\tau} = \vec{\mu}_m \times \vec{B}$ tratando de girar los imanes. Dado que las paredes de la celda evitan la rotación del imán y $\vec{\mu}_m \perp \vec{B}$, la fuerza de fricción se puede estimar de la torca actuando sobre cada partícula, $\tau = \mu_m B = F_n d$ donde F_n es la fuerza normal y d el diámetro de la partícula. Considerando un coeficiente de fricción μ_k , la fuerza de fricción dinámica sobre un imán es $F_r = \mu_k F_n = \mu_k \mu_m B/d$. De modo que la aceleración de la partícula se expresa como:

$$\vec{a}(t) = \vec{g} + \left(\sum_{j}^{N-1} \vec{F}_{m_j}(t) - \frac{\mu_k \mu_m \vec{B}_j(t)}{d}\right) / m$$
(3.6)

Usando las ecuaciones anteriores en cada paso del tiempo para calcular las posiciones y velocidades de todas las partículas, se ejecuta la simulación, tomando siempre en consideración los parámetros libres del proyectil, ya que es aproximadamente 10 veces más pesado que las partículas que forman la cama granular y su campo magnético considera por separado los tres casos respecto al proyectil: repulsivo, atractivo y neutro. Las simulaciones se hacen en dos partes, primero dejamos caer el conjunto de partículas tal como lo hicimos experimentalmente, y luego soltamos el proyectil en la cama granular repulsiva que está en equilibrio, es decir, cuando los granos se mantienen en una posición fija. De las simulaciones obtenemos la profundidad de penetración y la energía cinética de las partículas en cada paso de tiempo hasta alcanzar la relajación del sistema. Estos resultados numéricos se compararon con los resultados obtenidos experimentalmente y, además, por medio de las simulaciones extendimos el rango de velocidad de impacto, es decir la altura de impacto y, modificamos la magnetización de las partículas de la cama granular. Los algoritmos de simulación generales están dados en [3].

3.4. Resultados

3.4.1. Resultados experimentales



Figura 3.3: Instantáneas obtenidas de los videos de experimentos para impactos con interacciones: a) repulsiva, b)atractiva y c)neutra. El proceso de impacto y penetración se puede dividir en diferentes etapas dependiendo de la interacción cama-proyectil.

Nuestras mediciones experimentales exhiben tres comportamientos diferentes para cada proyectil. En la figura 3.3a-c se muestran instantáneas del impacto y penetración para interacciones repulsiva, atractiva y neutra respectivamente. Para el caso repulsivo, figura 3.3a, el proyectil comprime la región de interacción en la cama granular acumulando energía potencial magnética, como ocurre, aunque por otra causa, con un resorte. Cuando el proyectil alcanza su máxima profundidad z_{max} , la fuerza restauradora de la cama produce rebotes en el proyectil hasta detenerse a una profundidad final $z_F < z_{max}$. El rebote es un efecto de la elasticidad efectiva del medio, así como de su densidad efectiva. Para el caso atractivo, figura 3.3b, el proyectil primero es acelerado cuando se acerca a la cama debido a la atracción magnética con los granos y la aceleración de la gravedad, después, una capa de imanes es rápidamente atraída al perímetro del intruso y éste se vuelve repulsivo. Debido al incremento de la masa del intruso, 14 imanes adheridos con masa ≈ 5.6 g, la conservación de momento en una colisión inelástica implica una rápida desaceleración desde la velocidad de impacto v_0 hasta $v = M v_0 / (M + 14m) \approx 0.6 v_0$. Además, la desaceleración es amplificada por el incremento en el tamaño efectivo del proyectil, sin embargo, el proyectil penetra más profundo que en el caso repulsivo debido a su incremento en el peso de ~ 1.73 veces. La interacción repulsiva de los granos atraídos es parcialmente compensada por la interacción atractiva con los granos dentro del disco, por tanto el proyectil interactúa con un menor número de granos y puede penetrar más profundo en la cama granular. Para el proyectil neutro, figura 3.3c, la ausencia total de interacción magnética con los granos genera una menor compresión de la cama magnética. lo cual permite la penetración más profunda de los tres casos analizados, notemos que la fricción entre los granos y el proyectil es similar a como sucedería en un medio granular convencional. Notemos que en los tres casos la densidad de los granos debajo del proyectil incrementa considerablemente debido a la compresión de los granos. En los tres escenarios, el proyectil se detiene cuando su peso es balanceado por las interacciones magnéticas y las fuerzas que se manifiestan debido a la fricción debido al confinamiento.

La figura 3.4 muestra la zona de interacción de cada proyectil (atractivo, repulsivo y neutro) dentro de la cama granular, así como las trayectorias que siguen los granos (líneas negras). Notemos que la zona de mayor compresión se observa en el caso repulsivo, el cual presenta una región de perturbación de aproximadamente 5 veces el diámetro del proyectil ($\sim 5D$), mientras que en el caso atractivo y neutro es de $\sim 3D$.



Figura 3.4: Región de perturbación después del impacto de cada proyectil. Se muestran las trayectorias de los granos de la cama granular desplazados debido al impacto.

En la figura 3.5 se muestra que para el caso repulsivo los granos de la cama se mueven alejándose del proyectil que penetra, mientras que para el caso atractivo y neutro los granos fluyen hacia arriba del proyectil. Este flujo de granos conduce a diferencias en la densidad local σ de la cama granular por encima y debajo del proyectil cuando alcanza su máxima profundidad, como se muestra en la figura 3.5, donde cada recuadro rojo muestra la densidad local. Debido al gradiente de densidad en la cama granular generado por la penetración del proyectil, se produce una fuerza restauradora que permite que el proyectil repulsivo rebote hasta que alcanza su profundidad final. En los casos atractivo y neutro, la diferencia entre densidades locales superior e inferior es menor, por ello no hay presencia de rebote o es despreciable. Por medio de técnicas de velocimetría de imagen de partículas (PIV) realizamos el seguimiento de las partículas desplazadas durante la penetración del proyectil, como se aprecia en el tercer esquema de la figura 3.5, la barra de colores muestra la velocidad en escala adimensional de los vectores de velocidad de las partículas que se desplazan debido al impacto, las partículas vecinas más proximas al proyectil son aquellas que se desplazan con una velocidad mayor.



Figura 3.5: Cambio en la densidad local σ (medida en imanes/cm²) de la cama granular en la región superior e inferior del proyectil cuando la máxima profundidad de penetración es alcanzada en los tres casos. Las regiones rectangulares fueron seleccionadas siguiendo un análisis análogo al que se propone en [83].

La figura 3.6 muestra la profundidad de penetración del intruso z y su velocidad v como función del tiempo t, para los tres tipos de proyectil cayendo a partir de una altura h e impactando con velocidad v_0 . Cada curva representa el valor promedio de 5 trayectorias obtenidas experimentalmente, la varianza correspondiente es $s^2 = 0.94$. Las curvas de velocidad se obtuvieron de la primera derivada de z. Notemos que la cinemática descrita anteriormente se reproduce para las diferentes velocidades de impacto: i) máxima profundidad de penetración seguida de oscilaciones en el proyectil repulsivo debido a la compactación de la cama y la respuesta elástica, ii) mayor desaceleración para el proyectil atractivo, el cual se detiene a tiempos más cortos (0.06-0.08 s), y iii) mayor profundidad de penetración para el proyectil neutro. En todos los casos, z(t = 0) = 0 corresponde a la superficie de la cama y $v_0 = v(t = 0)$ a la velocidad de impacto. Los valores positivos para v(t) se observan únicamente para el proyectil repulsivo, éstos corresponden al rebote del proyectil cuando se mueve en dirección contraria a g. Este tipo de dinámica oscilatoria se ha observado en la penetración de un objeto en un fluido miscelar viscoelástico [8]. Los valores más grandes de v(t = 0) para el caso atractivo reflejan la atracción magnética de la

cama que incrementa ligeramente la velocidad de impacto del proyectil. En la figura 3.7 se muestra la dinámica de penetración para los experimentos realizados con proyectiles con masa M_2 , notemos que en este sistema se reproduce el comportamiento discutido para los tres casos anteriormente.



Figura 3.6: Dinámica de penetración experimental para interacciones a) repulsiva, b) atracttiva y c) neutra con proyectiles ($\rho = 3.28 \text{ g/cm}^3$) penetrando desde diferentes alturas h, z = 0 corresponde a la superficie de la cama granular. La máxima profundidad se alcanza aproximadamente a 0.1 s para los tres casos. El caso repulsivo se caracteriza por oscilaciones en la dinámica de penetración, con velocidades positivas correspondientes al rebote del proyectil. Note que el proyectil neutro penetra más profundo en los tres casos.



Figura 3.7: Dinámica de penetración para interacciones a)repulsiva, b)atractiva y c)neutra para experimentos con proyectiles ($\rho_2 = 5.2 \text{ g/cm}^3$) penetrando desde diferentes alturas h.

En las figuras 3.8 y 3.9 se presenta la comparación entre los tres tipos de interacción para diferentes energías de impacto con los proyectiles con densidad ρ y ρ_2 . Además en las figuras 3.10, 3.11 y 3.12 se presenta la comparación entre proyectiles con diferente densidad y su dinámica para cada tipo de interacción y energía de impacto. Note que en el caso repulsivo, el comportamiento del proyectil durante la penetración es similar al caso con el proyectil con menor densidad pero los rebotes disminuyen. Para el caso atractivo y neutro, la aceleración y profundidad final son mayores.



Figura 3.8: Comparación de z vs t de los tres tipos de proyectil impactando desde distintas alturas, el color de la curva representa el tipo de proyectil, la densidad de los proyectiles es $\rho = 3.28 \text{ g/cm}^3$. La convención de colores es: negro-repulsivo, verde-neutro y rojo-atractivo.

Líquido granular magnético 3.4 Resultados



Figura 3.9: Comparación de z vs t de los tres tipos de proyectil impactando desde distintas alturas, el color de la curva representa el tipo de proyectil, la densidad de los proyectiles es $\rho_2 = 5.2$ g/cm³. La convención de colores es: negro-repulsivo, verde-neutro y rojo-atractivo.

Líquido granular magnético 3.4 Resultados



Figura 3.10: Comparación de las curvas z vs t de proyectiles repulsivos con densidades $\rho_1 = 3.28 \text{ g/cm}^3$ (línea azul) y $\rho_2 = 5.2 \text{ g/cm}^3$ (línea roja). Notemos que los rebotes del proyectil disminuyen para ρ_2 con alturas de impacto h > 20 cm.



Figura 3.11: Comparación de las curvas z vs t de proyectiles atractivos con densidades $\rho_1 = 3.28 \text{ g/cm}^3$ (línea azul) y $\rho_2 = 5.2 \text{ g/cm}^3$ (línea roja).

Líquido granular magnético 3.4 Resultados



Figura 3.12: Comparación de las curvas z vs t de proyectiles neutros con densidades $\rho_1 = 3.28 \text{ g/cm}^3$ (línea azul) y $\rho_2 = 5.2 \text{ g/cm}^3$ (línea roja).

De los gráficos anteriores para los proyectiles con densidad ρ , nos enfocamos en tres parámetros y su dependencia con la velocidad de impacto: el tiempo total de penetración t_p , la profundidad final z_F para los tres casos, así como la máxima profundidad z_{max} alcanzada por el proyectil repulsivo y la altura del primer rebote h_r en el caso repulsivo. En la figura 3.13 se muestra un esquema del criterio de evaluación de dichos parámetros.



Figura 3.13: Curva representativa z vs t de un proyectil repulsivo. Se muestran los parámetros de medición z_F (profundidad final de pentración), z_{max} (máxima profundidad de penetración) y h_r (altura de rebote).

La figura 3.14a muestra que $t_p \approx 0.1$ s para los casos neutro y atractivo sin importar el valor de v_0 . El tiempo de penetración es practicamente constante e independiente de la velocidad de impacto, este resultado también ha sido reportado para impactos en materia granular con fricción convencional [78]. El proyectil repulsivo alcanza z_{max} en un tiempo similar, pero se mantiene rebotando hasta alcanzar su profundidad final z_F . Este periodo de rebote prolongado para bajas velocidades de impacto y mayor desaceleración para altas velocidades de impacto es similar a la respuesta a la deformación de un líquido shear-thickening [75]. Por otro lado, la figura 3.14b muestra que z_F incrementa con la altura de impacto para los tres casos. Así como z_{max} para el caso repulsivo. El gráfico log-log correspondiente en la figura 3.14c sugiere que $z_F = Av_0^p$ con $p \approx 2/3$ en el rango 100 cm/s< $v_0 < 600$ cm/s. Además la altura de rebote h_r muestra saturación y alcanza un valor constante, ver figura 3.14d. Estos últimos resultados han sido encontrados en el caso de esferas sólidas impactando fluidos miscelares viscoelásticos [8]. Sin embargo, estas observaciones sólo son válidas en un rango de velocidades de impacto muy corto ya que por limitaciones experimentales no podemos ampliar este rango de velocidad de impacto. Por esta razón, desarrollamos las simulaciones numéricas necesarias para explorar la dinámica de penetración en los tres escenarios en un rango más amplio como veremos en la siguiente sección.



Figura 3.14: Resultados experimentales. a) Tiempo de penetración τ vs altura de impacto h para los tres tipos de proyectil. El tiempo máximo de penetración para el caso repulsivo se muestra con el símbolo o. El tiempo total de penetración para el caso repulsivo (puntos rojos) es mayor debido a los rebotes que presenta. Para los casos atractivo y neutro τ es aproximadamente constante. b)Profundidad final de penetración como función de h para los tres proyectiles. c) Gráfico log-log para z_{max} vs v_0 para el caso repulsivo comparado con z_F para lo tres proyectiles. La pendiente de las curvas es 1/3. d) La altura promedio de rebote del proyectil negativo tiene un valor ~2.3 cm. La leyenda a colores de a) es válida en b) y c).

3.4.2. Resultados obtenidos mediante simulación

En la figura 3.15 se muestran los resultados obtenidos por medio de las simulaciones de dinámica molecular (MD) para proyectiles que caen desde h = 0 a 800 cm por encima de la cama granular magnética. El coeficiente de fricción μ_k en (3.6) se estimó numéricamente para cada tipo de intruso con el fin de obtener el mejor ajuste con las curvas experimentales. Para el proyectil repulsivo $\mu_k = 0.42$, para el atractivo $\mu_k = 0.36$ y para el caso neutro $\mu_k = 0.28$. Además se consideró el momento magnético $\mu_m = 0.56 \text{ mA/m}^2$ obtenido experimentalmente. Un resultado importante es que las trayectorias mostradas en la figura 3.15 reproducen las observaciones experientales para cada tipo de interacción. Notemos que las aproximaciones numéricas nos permiten investigar alturas de impacto mayores a 170 cm, que fue el rango experimental máximo.



Figura 3.15: Se muestran los resultados para z vs t obtenidos de las simulaciones de dinámica molecular (MD) para los tres tipos de interacción: repulsiva, atractiva y neutra, para diferentes alturas de impacto.

En la figura 3.16a mostramos una comparación entre los resultados obtenidos experimentalmente y por simulación, notemos que las simulaciones reproducen los valores encontrados experimentalmente para el tiempo total de penetración τ , mostrando un comportamiento independiente de la velocidad. La única diferencia es que las simulaciones no reproducen el pico experimental para $h \sim 20$ cm observado experimentalmente en el caso del proyectil repulsivo, es posible que en las simulaciones el coeficiente de fricción no se ha reproducido de manera óptima, además numéricamente se consideraron granos perfectos, ya que para realizar la simulación se asume el modelo de carga, el cual como hemos visto es un modelo ideal. La profundidad de penetración z_F como función de h presenta un buen acuerdo con los experimentos en el rango h=0-170 cm, ver figura 3.16b. Sin embargo, en lugar de una ley de escala de potencias como se mostró en los resultados experimentales de la figura 3.14c, z_F se describe mejor en un rango más amplio de h por medio de una dependencia logarítmica de la forma

$$z_F = z_0 + b\log(h) \tag{3.7}$$

donde b y z_0 son parámetros de ajuste. El ajuste propuesto para los experimentos (curva verde a trazos en la figura 3.16b) falla para valores grandes de h. Las simulaciones también confirman que la altura de rebote h_r alcanza un valor constante, figura 3.16c, pero en este caso $h_r \approx (3.3\pm0.2)$ cm, que es mayor al valor hallado experimentalmente. Notemos que las simulaciones nos han permitido evaluar nuestros resultados experimentales, además permiten la extrapolación de los datos con el fin de predecir el comportamiento físico de nuestro sistema en un rango de impacto mayor al evaluado exprimentalmente.



Figura 3.16: Resultados numéricos: a) Tiempo de penetración τ vs h para los tres tipos de intruso obtenidos por MD y comparados con los datos experimentales. b) Profundidad final de penetración z_F como función de h. Las líneas sólidas corresponden con un ajuste logarítmico de la forma $z_F = z_0 + b \log(h)$. La línea a trazos corresponde con $z_F \propto h^{2/3} (\propto v_0^{1/3})$ que únicamente presenta un buen ajuste con los datos en el rango experimental de alturas de impacto. $c)h_r$ vs h obtenidos por MD comparado con datos experimentales. Las simulaciones confirman que la altura de rebote h_r alcanza un valor constante.

Las simulaciones numéricas también permitieron explorar el efecto que se produciría en la dinámica del proyectil si cambiamos la magnitud de la magnetización de las partículas. Esta herramienta computacional presenta una ventaja considerando que cambiar sistemáticamente el momento dipolar magnético de los imanes es complejo desde el punto de vista experimental. En la figura 3.17 se muestran ejemplos de camas granulares repulsivas construidas numéricamente para diferentes valores de la magnitud de magnetización M. El valor de M fue normalizado con M_{max} , el cual corresponde con el valor experimental de $\mu_m = 55 \text{ mA/m}^2$. Esto significa que $M/M_{max} = 1$ corresponde con una cama granular equivalente a la cama experimental, primer cuadro de la figura 3.17. Cuando el valor de M se reduce en las simulaciones, las partículas magnéticas se encuentran más cerca unas con otras y por tanto la densidad de la cama aumenta considerablemente. Para el caso $M/M_{max} = 0.01$, la mayoría de los granos están en contacto debido a que la repulsión magnética entre ellas se vuelve despreciable, como si se tratara de un medio granular convencional. Experimentalmente es complejo modificar sistemáticamente la magnitud de la magnetización de la cama granular, por ello con las simulaciones se puede predecir el comportamiento asociado para diferentes valores de M.



Figura 3.17: Usando dinámica molecular (MD) se construyen camas granulares con diferentes magnitudes de magnetización M/M_{max} . El caso $M/M_{max} = 1$ corresponde con el valor de la magnetización experimental.

La figura 3.18 muestra z vs t para los tres tipos de interacción de un intruso que se deja caer desde una altura h = 100 cm. Notemos que cuando la magnetización se reduce al mínimo valor ($M/M_{max} = 0.01$), los tres tipos de proyectil alcanzan la misma profundidad de penetración, es decir, $z \approx 5$ cm. Esto se puede entender si consideramos que al reducir la magnetización aumenta la densidad de la cama granular (también hay contacto entre los granos) y por tanto el proyectil debe desplazar una mayor cantidad de granos durante la penetración del medio. Esto indica que cuando la magnetización es despreciable, los tres tipos de interacción presentan una dinámica tipo neutra y la profundidad final de penetración es aproximadamente igual para los tres tipos de proyectil.



Figura 3.18: Dinámica de penetración obtenida por medio de simulaciones numéricas (MD) para interacciones repulsiva, atractiva y neutra en camas granulares con granos con magnetización M variable.

Es importante mencionar que la densidad de la cama granular no es homogénea y

presenta un efecto de saturación tipo Janssen, es decir, incrementa con z, como se mostró en [6]. La figura 3.19 muestra la fracción de volumen como función de z obtenida por medio de análisis de imágenes de las cuatro camas granulares presentadas en la figura 3.17. Notemos que la fracción de volumen experimental (línea negra) tiene una buena aproximación con el valor obtenido por medio de simulaciones (línea roja), donde ϕ incrementa desde 0 hasta ~ 0.2 en el fondo de la cama granular. La máxima fracción de empaquetamiento se obtiene cuando M/M_{max} <0.1, con $\phi \sim 0.82$, lo cual refleja el hecho de que los imanes cilíndricos que forman la cama granular presentan un arreglo tipo hexagonal en el fondo de la cama. El factor de empaquetamiento cerrado hexagonal (hexagonal close packing) para un arreglo de discos dos dimensional es $\phi_{hcp} = \pi/\sqrt{12}$ de acuerdo con [84], sin embargo debido a los efectos de confinamiento generados por las paredes frontales y laterales de nuestro sistema y el campo magnético de las partículas no es posible alcanzar el estado de cristalización perfecto en nuestro sistema, para alcanzar tal estado se requiere un proceso de cristalización granular inducida por cohesión magnética [85]. La figura 3.19b muestra que z_F disminuye cuando la magnetización se reduce en los tres tipos de proyectil, esto se debe a que al incrementar la fracción de empaquetamiento de la cama granular, el número de contactos entre granos también incrementa y por lo tanto, el proyectil debe desplazar un volumen mayor de granos mientras penetra el medio, lo cual reduce su profundidad de penetración. Además en la figura 3.19c se muestra que la magnitud del primer rebote h_r en el caso repulsivo alcanza un valor máximo cuando $M/M_{max} \sim 0.2$ y después disminuye para valores de magnetización mayor. Estos resultados muestran que es posible alcanzar un sistema óptimo cuando $M/M_{max} \sim 0.2$, ya que conforme aumenta la magnetización del sistema también cambia el número de granos magnéticos que interactúan, como se observa en la figura 3.17). Por ello el proyectil debe desplazar más granos magnéticos mientras penetra el medio granular. Las fuerzas de peso, empuje y fricción que compiten determinan la respuesta del sistema.



Figura 3.19: Efectos de la magnetización: a) Fracción de volumen ϕ como función de z en camas granulares magnéticas generadas por medio de simulaciones numéricas (MD) para diferentes valores de M. También se muestra el caso experimental $M/M_{max} = 1$. b) z_F vs M para los tres tipos de interacción. c) Magnitud de la altura del primer rebote h_r para el caso repulsivo como función de M/M_{max} .

Finalmente, para tomar en cuenta el efecto de la fricción debido al confinamiento, el término de fricción se tomó como $\mu_k = 0.01$ para las paredes frontal y trasera. La figura 3.20 muestra instantáneas tomadas de las simulaciones para los tres proyectiles y sus correspondientes trayectorias para h = 20 cm. Confirmamos que para los tres casos, el

proyectil se hunde en la cama granular fluidizada hasta alcanzar el fondo del contenedor, mientras que los granos sin fricción se mantienen en movimiento debido a que la disipación de energía cinética generada por el impacto es despreciable.



Figura 3.20: Instantáneas mostrando la dinámica de penetración de los tres proyectiles (repulsivo, atractivo y neutro) considerando partículas sin fricción. Los resultados se muestran para h = 20 cm. En los tres casos el proyectil alcanza el fondo de la cama granular.

Es posible distinguir una oscilación en la trayectoria del proyectil repulsivo en la figura 3.21a, similar a las oscilaciones observadas durante el movimiento transitorio de una esfera penetrando una solución acuosa altamente elástica [9]. El rebote cuando h = 33 cm se debe al impacto del provectil con el fondo del contenedor de la cama granular. En este punto, es importante recalcar que los resultados numéricos presentan buen acuerdo con los experimentos, donde la fricción con las paredes laterales no puede inhibirse debido a la torca que se produce por el campo magnético actuando sobre los dipolos magnéticos de los granos. Esta fricción genera una rápida disipación en la energía cinética del provectil. La figura 3.21b muestra la evolución temporal de la energía cinética (KE) del proyectil y la cama granular normalizada con la energía cinética del proyectil en t = 0, estos datos se obtuvieron por medio de técnicas de seguimiento de partículas de los videos experimentales con los tres tipos de proyectil cayendo desde una altura h = 20 cm. En el momento del impacto $KE/KE_0 = 1$ para el proyectil y 0 para los granos de la cama granular. Después del impacto, el proyectil transfiere energía a los granos. Sin embargo, la energía acumulada en la cama granular nunca alcanza el valor KE_0 ya que una fracción de la energía es disipada debido a la fricción de los granos con las paredes de la celda. Por ejemplo, en el caso del proyectil repulsivo (con línea a trazos negra en la figura 3.21b), se muestra una transferencia de $\approx 60\%$, lo cual indica que el 40% restante se disipa en el sistema debido a la fricción con las paredes y las interacciones electromagnéticas entre los granos. Notemos además que a cualquier tiempo t, la suma de energía de los granos siempre es menor que el 20% de la energía de impacto, esto indica una rápida disipación de energía con las paredes. Durante la penetración del medio, toda la energía cinética será disipada y el provectil y las partículas alcanzarán el reposo. Estos resultados muestran que aunque en nuestro sistema no hay colisiones cuerpo-cuerpo entre partículas, el sistema es altamente disipativo debido al confinamiento lateral.



Figura 3.21: Resultados numéricos: a)Gráficos z vs t mostrando la dinámica de los tres proyectiles con partículas sin fricción considerando los casos repulsivo (curva negra), atractivo (curva roja) y neutro (curva verde). b) Se muestra la evolución temporal de la energía cinética (KE) para el proyectil (curvas sólidas: negro-repulsivo, rojo-atractivo, verde-neutro) y los granos de la cama granular (curvas a trazos: azulrepulsivo, anaranjado-atractivo, verde-neutro), la energía KE está normalizada con la energía de impacto del proyectil en t = 0 (KE_0). La energía acumulada KE representa la suma de la energía cinética máxima de los granos que han interactuando con el proyectil desde t = 0 hasta un tiempo t, para los tres casos: repulsivo (línea a trazos negra), atractivo (línea a trazos verde) y neutro (línea a trazos anaranjada). La energía cinética de los granos es la suma de las energías de todos los granos a un tiempo t. En esta figura h = 20 cm. La energía acumulada representa la trasferencia de energía relativa en el sistema. Por ejemplo, el proyectil repulsivo transfiere al sistema aproximadamente el 60 % de su energía, esto indica que el 40 % restante se disipa debido a la fricción con las paredes de la celda.

3.4.3. Modelo

Los resultados anteriores muestran similaridades entre la dinámica reportada aquí y la penetración de un proyectil en un fluido miscelar viscoelástico [8]. Además el hecho que la velocidad del proyectil repulsivo manifiesta oscilaciones nos indica que un buen candidato para representar la fuerza de arrastre es el modelo de Maxwell discutido anteriormente. Es necesario aclarar que se intentaron diferentes aproximaciones y propuestas a fin de encontrar un modelo teórico y se concluyó que el modelo de Maxwel era suficiente y que no era necesario construir por nuestra cuenta otro modelo, ya que como se comentó el modelo de Maxwell es suficiente para dar una buena descripción del sistema. Por tanto, la dinámica del proyectil considerando la respuesta de la cama magnética puede ser descrita con la ecuación de movimiento de un oscilador armónico amortiguado:

$$m\ddot{z} = mg_0 - kz - \beta \dot{z} \tag{3.8}$$

La ecuación puede ser reescrita en la forma:

$$\ddot{z} + 2\lambda \dot{z} + \omega^2 z = g_0 \tag{3.9}$$

 $\operatorname{con} \lambda = \beta/2m$ y $\omega^2 = k/m$ la frecuencia angular. Aquí, g_0 es una aceleración de la gravedad modificada que incluye el efecto repulsivo o atractivo de la cama granular sobre el proyectil cayendo. Esta ecuación es una ecuación diferencial de segundo orden no-homogénea, cuya solución general consta de la solución de la ecuación homógenea $z_h(t)$ más una solución particular $z_p(t)$:

$$z(t) = z_h(t) + z_p(t)$$
(3.10)

Caso homogéneo

Para el caso homogéneo se tiene la ecuación

$$\ddot{z} = +2\lambda\dot{z} + \omega^2 z = 0 \tag{3.11}$$

para hallar la ecuación característica proponemos $z = e^{mt}$ (con $\dot{z} = me^{mt}$, $\ddot{z} = m^2 e^{mt}$), sustituyendo en 3.11, se encuentra

$$m^2 + 2\lambda m + \omega^2 = 0 \tag{3.12}$$

cuya solución es:

$$m_1 = -\lambda + \sqrt{\lambda^2 - \omega^2}$$

$$m_2 = -\lambda - \sqrt{\lambda^2 - \omega^2}$$
(3.13)

Se pueden distinguir tres casos posibles dependiendo del signo algebraico de $\lambda^2 - \omega^2$.

• $\lambda^2 - \omega^2 > 0$. Se dice que el sistema está sobreamortiguado debido a que el coeficiente de amortiguamiento β es muy grande comparado con la constante del resorte k. La solución correspondiente de la ecuación (3.11) es $z(t) = c_1 e^{m_1 t} + c_2 e^{m_2 t}$ o

$$z(t) = e^{-\lambda t} \left(c_1 e^{\sqrt{\lambda^2 - \omega^2}t} + c_2 e^{\sqrt{\lambda^2 - \omega^2}t} \right)$$
(3.14)

esta ecuación representa un movimiento suave y no oscilatorio.

• $\lambda^2 - \omega^2 = 0$. El sistema está *críticamente amortiguado* porque cualquier ligera disminución en la fuerza de amortiguamiento daría como resultado un movimiento oscilatorio. La solución de (3.11) es $z(t) = c_1 e^{m_1 t} + c_2 t e^{m_1 t}$ o

$$z(t) = e^{-\lambda t} \left(c_1 + c_2 t \right) \tag{3.15}$$

• $\lambda^2 - \omega^2 < 0$. El sistema está subamortiguado, debido a que el coeficiente de amortiguamiento es pequeño comparado con la constante del resorte. Este es el caso que encontramos en nuestro sistema. Cuando esto ocurre, las raíces m_1 y m_2 son complejas:

$$m_1 = a + bi$$

$$m_2 = a - bi$$
(3.16)

la solución para cada raíz está dada por $z_{m_1}(t) = e^{at} \cos(bt)$ y $z_{m_2}(t) = e^{at} \sin(bt)$ respectivamente, por tanto la solución general es $z_h(t) = z_{m_1}(t) + z_{m_2}(t)$ o bien

$$z_h(t) = e^{at} \left(c_1 \cos(bt) + c_2 \sin(bt) \right)$$
(3.17)

identificando $a = -\lambda$ y $b = \sqrt{\omega^2 - \lambda^2}$ en ecuación (3.13) y sustituyendo en la expresión anterior, encontramos que la solución para la ecuación diferencial homogénea es

$$z_h(t) = e^{-\lambda t} \left(c_1 \cos\left(\sqrt{\omega^2 - \lambda^2} t\right) + c_2 \sin\left(\sqrt{\omega^2 - \lambda^2} t\right) \right)$$
(3.18)

Una forma alternativa para la ecuación (3.18) se expresa como:

$$z_h(t) = Ae^{-\lambda t} \operatorname{sen}\left(\sqrt{\lambda^2 - \omega^2}t + \phi\right)$$
(3.19)

donde $A = \sqrt{c_1^2 + c_2^2}$ y el ángulo fase es determinado de las ecuaciones

$$\sin \phi = \frac{c_1}{A}, \qquad \cos \phi = \frac{c_2}{A} \tag{3.20}$$

El coeficiente $Ae^{-\lambda t}$ a veces es llamado *amplitud de amortiguamiento* de vibraciones. Dado que la ecuación (3.19) no es una función periódica, el número $2\pi/\sqrt{\omega^2 - \lambda^2}$ es llamado *cuasi periodo* y $\sqrt{\omega^2 - \lambda^2}/2\pi$ es la *cuasi frecuencia*. El cuasi periodo es el intervalo de tiempo entre dos máximos sucesivos de z(t).

En este caso, el proyectil debería oscilar dentro del fluido con una amplitud decreciente en el tiempo. La solución se presenta a continuación.

Caso particular

La ecuación a resolver es de la forma:

$$\ddot{z} + 2\lambda \dot{z} + \omega^2 z = g_0 \tag{3.21}$$

Tal ecuación es de la forma

$$a_n z^{(n)} + a_{n-1} z^{(n-1)} + \dots + a_1 z^{(1)} + a_0 z = g(x)$$
(3.22)

Si g(x) = cte, se propone una solución particular de la forma

$$z_p(t) = A^* \tag{3.23}$$

Sustituyendo esta solución en la ecuación (3.21) se encuentra que $A^* = g_0/\omega^2$.

Solución

Finalmente la solución de 3.9 está se expresa como la suma de las ecuaciones (3.19) y (3.23):

$$z(t) = \frac{g_0}{\omega^2} + A \exp(-\lambda t) \sin\left(t\sqrt{\omega^2 - \lambda^2} + \phi\right)$$
(3.24)
Por otro lado, para la condición $\lambda^2 - \omega^2 > 0$, el proyectil se detiene sin oscilar siguiendo la ecuación:

$$z(t) = \frac{g_0}{\omega^2} + A \exp(-\lambda t) \sinh\left(t\sqrt{\omega^2 - \lambda^2} + \phi\right)$$
(3.25)

Las constantes $A \neq \phi$ se pueden hallar analíticamente usando las condiciones iniciales $z(t=0) = 0, \dot{z}(t=0) = v_0$, y la posición de equilibrio final $z(t=\infty) = z_F$. Las constantes elástica y viscosa equivalentes $\lambda \neq \omega$ son parámetros libres.

Los resultados experimentales fueron ajustados con el modelo anterior usando Mathematica y comparados con las simulaciones numéricas, los resultados se muestran en la figura 3.22. Por claridad, únicamente se muestran los resultados para dos alturas de impacto h = 20 cm y h = 120 cm. Para el caso repulsivo y atractivo usamos la ecuación (3.24) y para el caso neutro la ecuación (3.25). Notablemente, las principales características dinámicas de los datos experimentales (oscilaciones amortiguadas y trayactorias sobreamortiguadas) son bien reproducidas por el modelo y también por las simulaciones numéricas. Para el modelo ajustado, encontramos que las constantes elástica y viscosa equivalentes para el caso atractivo deben ser mayores que los valores correspondientes para los casos repulsivo y neutro, reflejando el hecho que el tamaño efectivo del proyectil atractivo incrementa cuando los imanes se adhieren a la superficie del proyectil, figura 3.23. Además estos parámetros indican que la rigidez del sistema está determinada por el balance entre ellos.



Figura 3.22: Dinámica de penetración de los tres proyectiles (repulsivo, atractivo y neutro) obtenida de los experimentos (puntos) y su comparación con el modelo (línea a trazos) y las simulaciones (línea sólida). Los resultados se muestran para h = 20 cm y h = 120 cm.



Figura 3.23: Se muestran los parámetros libres $\lambda \neq \omega$ como función de *h* para los tres tipos de proyectil. Note que ambos parámetros son considerablemente mayores en el caso del proyectil con interacción atractiva, reflejando que el tamaño efectivo del proyectil aumenta cuando penetra el medio granular.

3.5. Discusión

Una vez presentados los resultados obtenidos en la investigación de este sistema, presentamos una discusión sobre lo reportado. Típicamente, el impacto de un objeto sólido en fluidos newtonianos [86] o en materiales granulares [68] involucra el número de Froud, $Fr = v_0^2/gd$, donde g es la aceleración gravitacional, v_0 la velocidad del proyectil y d su diámetro. En la referencia [8], se mostró que para describir la dinámica de impacto de una esfera sólida cayendo en un fluido miscelar viscoelástico, se requiere tomar en cuenta los efectos de elasticidad. Introduciendo el número de Froude elástico como la razón entre la energía cinética y la energía elástica, $Fe = \Delta \rho v_0^2/G$, donde $\Delta \rho$ es la diferencia entre las densidades del proyectil y el medio granular y G es el módulo elástico del fluido, se encontró que la profundidad máxima antes del rebote, z_p , escala como $z_p \sim Fe^{1/3}$, es decir $z_p \propto v_0^{2/3}$. En este tipo de fluidos, los polímeros o tubos micelares son los responsables de la elasticidad en el medio, generando una afuerza restauradora que hace que el proyectil rebote [8, 9]. En nuestro caso, la respuesta elástica es debido a la naturaleza de la fuerza magnética que incrementa cuando la distancia radial r entre los imanes disminuye, con una dependencia proporcional a $1/r^4$. Por tanto, la ley de escalamiento encontrada en 3.14c esta asociada con la respuesta elástica equivalente de la cama granular magnética.

Por otro lado, para velocidades de impacto mayores, la saturación logarítmica de z_F vs h encontrada por medio de las simulaciones numéricas en la figura 3.16b indica que nuestro medio granular se vuelve más resistente a la penetración conforme la razón de deformación incrementa. Este comportamiento reológico es similar a la respuesta a la deformación tipo *shear thickening* de un fluido no newtoniano [75]. Cuando la compresión debido al impacto es lenta, la matriz de granos tiene suficiente energía para generar un reordenamiento en sus posiciones y los granos pueden alcanzar zonas de menor energía potencial. Este reordenamiento no es posible cuando la compresión es rápida, ya que la matriz de imanes queda arrestada localmente debido a la torca generada sobre cada iman y por tanto aumentando la fuerza de fricción sobre las paredes. Además, el incremento en la densidad a mayores profundidades de penetración

reportadas en la figura 3.19a también contribuye a la resistencia del medio a ser penetrado.

Respecto a la altura de rebote h_r , uno podría pensar que su magnitud debería aumentar con la velocidad de impacto v_0 debido a que más granos se comprimen mientras el proyectil se hunde. Sin embargo, los experimentos muestran que h_r alcanza un valor constante. Además, los granos magnéticos por encima del proyectil actúan como mecanismo de amortiguamiento del rebote del proyectil. En el caso de los fluidos miscelares viscoelásticos [8], el valor constante de h_r ha sido asociado a los efectos de confinamiento. Dado que el confinamiento es esencial en nuestros experimentos para evitar el colapso de la cama magnética, este valor también debería tener un efecto importante. En efecto, en un material granular típico, la energía cinética durante el impacto se disipa debido a la fricción entre los granos. Pero, en nuestro sistema no hay contacto directo entre granos y el proyectil, así que la energía disipada se asocia con la fricción entre los granos y las paredes de la celda. Sin fricción o confinamiento, el proyectil debería hundirse a través del medio granular sin presentar rebotes, tal y como se mostró en la figura 3.21a.

Las dinámicas de penetración repulsiva y atractiva observadas en nuestros experimentos son semejantes a dinámicas complejas observadas en otros escenarios. Por ejemplo, partículas de polvo cargadas en medios donde experimentan interacciones electrostáticas de largo alcance que producen efectos como levitación, aglomeración, repulsión y captura de partículas [87]. También, la atracción de imanes a la superficie de proyectiles atractivos es análogo a los procesos de atrapamiento de partículas inducidas por fuerzas cohesivas cuando burbujas de aire se mueven en un líquido con micro partículas suspendidas, o bien, nano partículas magnéticas encapsuladas y dirigidas por medio de campos magnéticos [3]. Similarmente, se encuentran los procesos de burbujas de aire generadas por chorros de granos que penetran agua, y son desacelaradas debido al pegado de los granos en la superficie de las burbujas [88]

3.6. Conclusiones sobre el estudio de impacto en un medio granular repulsivo

El impacto y penetración de un proyectil en una cama granular magética repulsiva se estudió experimentalmente y por medio de simulaciones numéricas usando dinámica molecular. Por primera vez, una interacción de largo alcance entre el intruso y la cama granular ha sido estudiado y analizado sistemáticamente. En un medio granular donde la fricción entre partículas y las colisiones son los principales mecanismos de disipación de energía, la máxima penetración z_F de un proyectil escala con una ley de potencias a la 1/3 de la energía de impacto del proyectil, es decir, $z_F \propto h^{1/3}$ [78]. En nuestro sistema donde no hay fricción ni colisiones cuerpo-cuerpo entre las partículas, el único mecanismo de disipación de energía es la fricción con las paredes que confinan los granos. Encontramos que la ley de potencias a la 1/3 escala adecuadamente en rango corto de alturas de impacto que corresponde con el rango experimental. Por otro lado, las simulaciones nos permitieron encontrar que el proyectil se puede hundir hasta el fondo de la cama granular cuando el término de fricción con las paredes de la celda es despreciado, y se comporta como si el sistema fuera un líquido. Cuando la magnetización de los granos de la cama granular se reduce, la fración de empaquetamiento de la cama aumenta y la dinámica de los tres tipos de interacción ya sea repulsiva, atractiva o neutra, es similar. Debido a la presencia de interacciones magnéticas, la fuerza depende de la distancia r entre las partículas magnéticas como r^{-4} , así la energía potencial repulsiva de los imanes incrementa cuando la cama granular se comprime debido al impacto del proyectil, generando una fuerza restauradora que hace que el proyectil rebote en la cama. Esta dinámica es similar a la dinámica con rebotes que se ha encontrado en proyectiles impactando fluidos miscelares viscoelásticos [8, 9] y que ha sido descrito por medio del modelo de Maxwell, el cual es capaz de reproducir la dinámica de penetración encontrada experimentalemente.

El estudio de sistemas granulares con partículas magnéticas se ha ocupado para representar la dinámica de varios tipos de sistemas, por ejemplo, la descarga de granos que se repelen entre sí a través del orificio de un sistema bidimensional [27, 6], lo cual es similar al flujo de autos a través de un embotellamiento. En otro contexto, las interacciones repulsivas o atractivas reportadas en nuestro estudio pueden ser ilustrativas para describir la sorprendente y compleja dinámica de pequeñas partículas de polvo cargadas en medios espaciales, donde la levitación, transporte rápido, repulsión de partículas, eyección y captura pueden ser observados [87]. Por otro lado, el caso atractivo puede ser útil para estudiar los procesos de aglomeración de partículas coloidales en suspensiones eléctricamente cargadas. O bien, la estructura densa de imanes milimétricos muestra una respuesta a la deformación similar a los sólidos en la física de materia condensada. cuya respuesta depende de la estructura cristalina del arreglo [89]. Con esto, creemos que nuestro estudio puede contribuir a futuras investigaciones en materia granular con interacciones de largo alcance. Además los granos magnéticos que se repelen pueden ser usados para desarrollar un nuevo tipo de amortiguador granular magnético [20] con el fin de evitar el desgaste de las partículas que se produce en amortiguadores granulares clásicos [90].

Capítulo 4

Perspectivas: gas granular magnético bidimensional

Como se ha visto en los capítulos anteriores, la materia granular puede exhibir comportamientos análogos a los que se observan en sólidos y fluidos, dependiendo de la energía de los granos. En el capítulo 2, se mostró que granos magnéticos en reposo se agrupan en continuo contacto entre ellos, de tal modo que el sistema es muy parecido a un sólido. Sin embargo, cuando los granos pueden moverse libremente, reduciendo los contactos cuerpo a cuerpo entre ellos, el sistema es semejante a un fluido, como vimos en el capítulo 3. En lo que refiere al estado gaseoso en materia granular convencional, las colisiones binarias dominan la dinámica del sistema, de tal modo que los granos se mueven aleatoriamente y se dice que se comportan como un gas granular. Pero, para alcanzar estos estados, es necesario inyectar energía continuamente al sistema. Sabiendo esto, nos preguntamos que ocurriría si tuviéramos un sistema granular magnético sometido a inyección externa de energía y donde no hubiera colisiones cuerpo-cuerpo entre los granos que lo conforman.

En esta sección, se presentan las perspectivas de estudio de un sistema granular magnético vibrado verticalemente. Se muestran los resultados experimentales preliminares relativos a un medio granular gaseoso con interacciones magnéticas repulsivas. Los granos magnéticos se encuentran confinados en una celda Hele-Shaw sometida a vibración vertical, generando así, una dinámica análoga a un medio gasesoso, pero con características no convencionales. Los granos son imanes cilíndricos que se repelen entre sí debido a la configuración experimental que hemos disenãdo.

4.1. Antecedentes

La materia granular es altamente disipativa y para que este tipo de sistemas alcance un estado estacionario con energía cinética diferente de cero, es necesario suministrarle energía continuamente. Esta inyección de energía se puede hacer a través de las fronteras del sistema. En el caso de la materia granular magnética, se ha reportado que un método experimental efectivo para suministrar energía en el sistema es por medio de la aplicación de campos electromagnéticos, lo cual da lugar a la formación de estados homogéneos e inhomogéneos [91]. También, entre los métodos experimentales más utilizado para invectar energía y fluidizar sitemas granulares convencionales confinados, es por medio de la inyección de flujos de aire o bien, por medio de la vibración (horizontal o vertical) de las paredes. Tal vibración induce energía al sistema y arrastra a las partículas debido a la fricción con las paredes, de tal manera que los granos ganan energía durante las colisiones con ellas y se genera una rica variedad de comportamientos granulares [7]. Por otro lado, entre los modelos teóricos para analizar este tipo de inyección de energía se encuentra el modelo de termostáto estocástico, en donde a las partículas de la cama granular se les aplica una fuerza estocástica como baño térmico con el fin de alcanzar estados estacionarios y homogéneos [92]. Aunque en fluidos y gases normales, estos fenómenos son bien comprendidos, no ocurre así con la materia granular. Uno de los mayores retos en la investigación en materia granular es encontrar una descripción hidrodinámica para este tipo de efectos y un paso indispensable para comprender esta teoría es determinar los parámetros de control adimensionales que gobiernan el fenómeno. En el caso de la materia granular vibrada, uno de los parámetros más adecuados para caracterizar cuantitativamente la fuerza de vibración es la aceleración adimensional definida como

$$\Gamma = \frac{(2\pi f)^2 A_0}{g}$$
(4.1)

donde A_0 es la amplitud de vibración, f es la frecuencia y g es la aceleración de la gravedad. Si asumimos una vibración sinusoidal, la aceleración es $a = (d/dt^2)A_0 \sin(2\pi ft)$.

La herramienta teórica para estudiar los gases granulares se encuentra en la teoría cinética y en particular en la ecuación de Boltzmann, la cual fue obtenida por Ludwing Boltzmann en 1896. Después, fue modificada por Enskog al tomar en cuenta efectos de volumen en gases. La ecuación de Boltzmann-Enskog es una ecuación integro diferencial que proporciona la evolución de la función de distribución de velocidades de las partículas, introduciendo los efectos de las colisiones entre partículas y asumiendo la hipótesis de caos molecular, la cual admite que las partículas no están correlacionadas antes de su colisión [93], por tanto restringe su uso al límite diluido. Además, existen algunos estudios donde la correlación entre partículas se ha tomado en cuenta a partir de modifiaciones en las ecuaciones de Liouville [94]. El modelo más simple para describir los gases granulares consiste en considerar un conjunto de esferas duras inelásticas idénticas, donde la disipación se caracteriza por un coeficiente de restitución que en general, se asume que es independiente de la velocidad de las partículas; se define como la razón entre el módulo de las velocidades relativas después y antes de la colisión y puede tomar valores entre 0 y 1, correspondiendo con los casos inelástico y elástico respectivamente. Una vez que se ha definido el modelo y se ha establecido la regla de colisión entre las partículas, la cual contiene la esencia física del sistema que se analiza, se puede obtener por medio de la ecuación de Boltzmann las ecuaciones para la evolución de la densidad, velocidad y energía del sistema. Notemos que la teoría para un gas granular magnético repulsivo requeriría además información adicional para completar la descripción del sistema.

Existen diversos reportes en la literatura sobre el estudio experimental y por simulación de materiales granulares vibro-fluidizados. De acuerdo con la presencia o ausencia de gravedad [96], se han reportado ciertas fenomenologías. En *microgravedad*, se ha reportado

experimentalmente la presencia de dos regímenes cinéticos: homogéneos y cúmulos [95]. Numéricamente (MD) se han investigado gases granulares en gravedad cero, los resultados muestran cuatro tipos de dinámicas: gaseoso, aglomerado parcial, aglomerado completo y aglomerado con rebote, como se muestra en la figura 4.1.



Figura 4.1: Se muestran los regímenes que exhibe un sistema granular convencional en microgravedad por medio de simulaciones con MD. I) estado gaseoso, II) aglomeración parcial, III) aglomeración completa y IV) aglomeración con rebote. Figura tomada de [95].



Figura 4.2: Se muestran los regímenes que exhibe un sistema granular convencional en presencia de gravedad. a) rebote, b) ondulaciones, c) efecto leidenfrost granular, d) rollos de convección y e) gas granular. Figura tomada de [7].

En presencia de gravedad, se ha reportado experimentalmente que un sistema conformado por granos de vidrio contenidos en una celda cuasi bidimensional vibrada a diferentes valores de Γ , exhibe una rica variedad de dinámicas, las cuales se dividen en cinco regiones: rebote, ondulaciones, efecto leidenfrost granular, rollos de convección y gas granular [7], como se muestra en la figura 4.2. Además, esta fenomenología así como sus transiciones se pueden caracterizar por medio del parámetro adimensional Γ y el número de capas F, los cuales se pueden llevar a una representación gráfica por medio de un diagrama de fases, figura 4.3. Este diagrama, presenta los puntos críticos para las transiciones de fase que ocurren en el sistema, mostrando un rango completo de fases que la materia granular puede presentar.



Figura 4.3: Diagrama de fases experimental de un sistema granular cuasi bidimensional vibrado a diferentes valores de Γ como función del número de capas F. Se muestran las regiones de rebote, ondulaciones, efecto leidenfrost granular, rollos de convección y gas granular. La región indicada en círculos rojos próximos al eje x muestra el regimen sólido. Figura tomada de [7].

En este capítulo, presentamos el enfoque de estudio de un sistema formado por imanes cilíndricos confinados en una celda Hele-Shaw, los granos magnéticos se repelen entre sí. El sistema es sometido a vibración vertical con el fin de inyectar energía generando un medio con características análogas a las de un gas granular. Sin embargo, los granos no sufren colisiones cuerpo a cuerpo, sino que la interacción se da a través de los momentos dipolares de los granos. Este tipo de sistema cuasi dos dimensional presenta un comportamiento efectivo para el cual la inyección de energía se produce en casi todo el volumen del sistema. Los sistemas vibrados verticalmente, como ya se mencionó, presentan fases desordenadas tipo gas y para ciertos valores en la densidad y bajas aceleraciones de vibrado, puede presentar agregados de partículas que pueden organizarse en distintos patrones dependiendo de los parámetros de inyección de energía. Así que resulta interesante investigar cómo será la dinámica del sistema experimental que se presenta a continuación.

Los parámetros en los que enfocamos el análisis de nuestro sistema son: a) la aceleración

adimensional Γ (4.1), que describe la razón de la energía cinética inyectada al sistema por medio de la vibración desde el fondo del contenedor y la energía potencial asociada con el desplazamiento de las partículas; y b) el número de capas N en el sistema.

4.2. Montaje experimental

Para el estudio de un gas magnético repulsivo se requiere una celda Hele Shaw diferente a la usada en el estudio de un proyectil penetrando la cama granular, ya que para este caso necesitamos inyectar energía de forma vertical mediante fuentes externas controladas. Realizamos los diseños necesarios y adaptados a las condiciones en nuestro laboratorio. Conseguimos construir una celda con capacidad de máximo 120 imanes y las fuentes de suministro de energía alcanzaron un valor máximo de $\Gamma = 16.2$. Por lo que como veremos a continuación nuestros resultados preliminares quedan limitados debido a dichas circunstancias.



Figura 4.4: Montaje experimental: Sistema granular repulsivo cuasi dos dimensional vibrado verticalmente.

En la celda Hele Shaw con dimensiones 34 cm×44 cm, se introdujo un conjunto de n = 120 cilindros magnéticos de neodimio de espesor $t = 2.0\pm0.02$ mm, diámetro $d = 3.0\pm0.02$ mm y masa m = 0.2 g. Las paredes frontales de la celda consisten en dos placas de vidrio cuya separación entre ellas es 2.10 ± 0.05 mm, las paredes laterales son barras de aluminio con imanes de neodimio incrustrados en su interior y colocados a una distancia de 1 cm entre cada uno, todos con sus dipolos orientados en dirección perpendicular con las paredes de vidrio. Los granos se introducen dentro de la celda por medio de un compartimento removible en la tapa superior de la celda, los imanes se

Perspectivas: gas granular magnético bidimensional 4.3 Resultados experimentales

introducen con sus dipolos magnéticos en la misma dirección (de la misma forma que se presentó la configuración en la sección anterior para el estudio de un proyectil penetrando una cama granular magnética repulsiva) con el fin de obtener interacciones repulsivas entre los granos. La celda es soportada por dos pivotes con longitud de 79 cm montados sobre bocinas instaladas en una estructura de madera que soporta todo el sistema, ver figura 4.4. Una vez que se han introducido los imanes, el compartimento superior se cierra de tal forma que los imanes quedan confinados. Para los experimentos, se varía el número de granos dentro de la celda desde n = 20 hasta n = 120. Una vez que los imanes están dentro de la celda, por medio de un generador de funciones conectado a las bocinas, se fija una frecuencia de 12 Hz y se varía la amplitud de vibración desde 100mV hasta 550mV. Una vez que se pone a vibrar la celda, el movimiento de los granos es grabado por medio de una cámara de alta velocidad *Photron Mini UX100* a 1000 cuadros por segundo (fps).

La celda se sometió a vibración vertical mediante las dos bocinas conectadas en fase y alimentadas con una señal sinusoidal de frecuencia f. La vibración se caracteriza por el parámetro adimensional Γ (4.1). El experimento se repitió para diferentes amplitudes de vibración y frecuencia constante. Experimentalmente hemos identificado cualitativamente algunas dinámicas que han sido reportadas para medios granulares convencionales [7, 97]. tal fenomenología se discute en la siguiente sección donde se describen los fenómenos observados, uno por uno y en el orden en que aparecen cuando la aceleración adimensional aumenta y por tanto la fluidización crece. Además, hicimos una revisión bibliográfica de la teoría cinética de gases granulares [93, 98]. Por ello, concluimos que se requiere determinar la función de distribución de velocidades adecuada para la dinámica de este sistema haciendo aproximaciones por medio de modelos continuos que toman como base el modelo de gas ideal. Sin embargo, dadas las características de nuestro sistema se requiere una investigación minuciosa para hallar un modelo que describa la fenomenología del gas granular repulsivo, este tópico continúa siendo un reto experimental y teórico. Nuestro objetivo por el momento es presentar los resultados experimentales iniciales que podrán ser mejorados en el futuro. Pero es necesario insistir que para los objetivos de este trabajo, lo aquí presentado es suficiente para presentar las bases de un trabajo posterior.

4.3. Resultados experimentales

De acuerdo con las condiciones experimentales de nuestro sistema, encontramos que para una aceleración adimensional $\Gamma \leq 2.3$ el sistema granular repulsivo cuasi bidimensional se comporta como un sólido, moviéndose con el fondo del contenedor y sin que las partículas presenten movimiento fuera de sus puntos de equilibrio, como se observa en las figuras 4.5, 4.6 y 4.7 para $\Gamma = 0.94$ en los 6 casos analizados (n = 20, 40,60, 80, 100 y 120 partículas). Para que las partículas puedan salir de estas posiciones se requiere que la aceleración de vibración de la celda supere la fuerza de gravedad y la fricción con las paredes. Los valores de Γ para los cuales la transición de sólido a rebote ocurre, se presentan al aumentar el valor de Γ (variando la amplitud de vibración a > 6.93 mm). Esta dinámica de rebote ha sido reportada en la literatura [7], donde un sistema granular convencional cuasi bidimensional formado por esferas de vidrio es vibrado verticalmente. De manera similar con nuestro experimento, la transición de sólido a rebote ocurre cuando se incrementa el valor de Γ , sin embargo se encuentra que el valor crítico para tal transición ocurre cuando $\Gamma > 1$ y este valor incrementa conforme crece el número de capas en el sistema. Incrementando el valor de Γ en nuestro sistema, se observa un fenómeno similar a las ondulaciones cuando $\Gamma > 5.7$ (ver figuras 4.5, 4.6 y 4.7) y es más marcado tal comportamiento cuando el número de capas es mayor a 2. Nuevamente, en [7] se ha reportado esta fenomenología (para $\Gamma > 12$ y N > 6) generada por el impacto de las partículas con las paredes laterales del contenedor (celda Hele-Shaw), las cuales transfieren energía para que las partículas se desplacen horizontalemente y generen ondas de propagación que se manifiestan como ondulaciones en el sistema.

Debido a que la fuerza de interacción decae rápidamente, se requieren amplitudes de vibración mayores para que las partículas magnéticas se comporten como un gas granular, este estado altamente fluidizado corresponde con $\Gamma > 10.4$ y número de capas entre 1 y 3, ya que cuando se aumenta el número de capas se presenta una combinación de estados segregados con ondulaciones y otro fluidizado, correspondiendo con el de un gas. En el estado gaseoso, las partículas se mueven aleatoriamente dentro del contenedor, ver figuras 4.5, 4.6 y 4.7. Este estado ha sido observado experimentalmente en otros estudios [7], con N = 2.7 y $\Gamma = 30$.



Figura 4.5: Se muestra la dinámica observada experimentalmente con una celda Hele Shaw vibrada verticalmente con granos magnéticos repulsivos en su interior, n representa el número de granos y Γ el parámetro de aceleración adimensional.



Perspectivas: gas granular magnético bidimensional 4.3 Resultados experimentales

Figura 4.6: Se muestra la dinámica observada experimentalmente con una celda Hele Shaw vibrada verticalmente con granos magnéticos repulsivos en su interior, n representa el número de granos y Γ el parámetro de aceleración adimensional.



Figura 4.7: Se muestra la dinámica observada experimentalmente con una celda Hele Shaw vibrada verticalmente con granos magnéticos repulsivos en su interior, n representa el número de granos y Γ el parámetro de aceleración adimensional.



Figura 4.8: Diagrama de fases representativo de un sistema granular bidimensional con interacciones repulsivas vibrado verticalmente. Los cuatro fenómenos explorados cualitativamente en este sistema se indican con diferentes colores. Los valores para hallar la dinámica de sólido, rebote, ondulaciones y gas granular son gobernados por los parámetros Γ y N.

Las dinámicas observadas experimentalemente en nuestro sistema y descritas anteriormente se reunieron en un diagrama de fases, figura 4.8. Este diagrama, presenta como una primera aproximación la fenomenología experimental como función del parámetro de vibración adimensional Γ y el número de capas N. En este diagrama de fases (figura 4.8), los parámetros Γ y N usados para modelar la dinámica de nuestro sistema indican las respectivas transiciones halladas experimentalmente. El parámetro Γ se muestra a lo largo del eje vertical y los correspodientes puntos de coexistencia se muestran con símbolos geométricos. Las fronteras entre regiones fueron marcadas como guía para el lector pero no fueron medidas exhaustivamente. Es importante remarcar que aún con las características magnéticas repulsivas de los granos, la fenomelogía observada es similar a la reportada en la literatura [7, 99], es decir, las fases de estado sólido, rebotes de los granos, ondulaciones y la formación de un gas granular son observadas. Sin embargo, no es posible observar la formación de rollos de convección o el efecto leidenfrost granular en nuestro rango experimental evaluado. Debido a que hemos suprimido los contactos entre granos y pared, los efectos de frontera en el sistema se modifican, además el número de partículas no es suficiente para obtener un análisis estadístico completo. Además, las características magnéticas de nuestro sistema sugieren una nueva definición del parámetro Γ , el cual contenga información de la magnetización del sistema. De este modo, cuando M = 0 uno esperaría hallar la dinámica que se encuentra en un sistema granular convencional. Notemos también que debido a los momentos dipolares de los granos magnéticos, es complicado definir con exactitud las fronteras de las regiones dinámicas halladas en nuestro sistema.

El análisis preliminar de la función de distribución radial [100], para un sistema forma-

do por n = 120 granos se muestra en la figura 4.9. Esta curva representa la distribución promedio de partículas alrededor de cualquier partícula dada dentro del sistema. Para su cálculo utilizamos procesamiento de imágenes por medio del software ImageJ. Debido al número de partículas y el rango de Γ explorado experimentalmente, por el momento no es posible concluir una estadística completa para calcular los desplazamientos cuadráticos medios de los granos de manera apropiada. Además es importante mencionar que nuestro sistema presenta un gradiente de densidad que varía con el número de capas, por ello, podemos observar en la figura 4.9, que la función de distribución radial presenta un comportamiento combinado de sólido y fluido, ya que los picos indican cierta estructura cristalina, mientras que los valores alrededor de 1 es el comportamiento típico de un fluido, lo cual sugiere una coexistencia de fases. Esto muestra nuevamente que requerimos mayor inyección de energía en el sistema con el fin de alcanzar una fluidización completa.



Figura 4.9: Función de distribución radial para un sistema con $\Gamma = 16.2$ y n = 120. La curva indica una coexistencia de fases líquida y gaseosa.

4.4. Conclusiones sobre el estudio de un gas granular repulsivo

Caracterizamos de forma preliminar la dinámica de nuestro sistema granular repulsivo vibrado verticalmente mediante un diagrama de fases. Este diagrama, muestra los diferentes regímenes (sólido, rebote, ondulaciones y gas) como función de Γ y n. Consideramos que este sistema puede dar lugar a un tema de estudio más amplio y completo, donde se analicen las herramientas teóricas para este tipo de sistema y cuyo reto principal es determinar la regla de colisión efectiva entre partículas, para después obtener por medio de la ecuación de Boltzmann las ecuaciones para la evolución de los campos de velocidad, densidad y energía del sistema. Esto también incluye el tensor de presiones, el flujo de calor y la velocidad de enfriamiento que contiene la información de los efectos de disipación sobre la evolución de energía, lo cual representa un desafío matemático. Realizar este tipo de cálculos para el análisis de nuestro gas granular repulsivo es una línea de investigación futura y cuyos alcances por el momento, se encuentran fuera de este trabajo. Además es necesario realizar mejoras en el montaje experimental por medio de una celda Hele Shaw

más grande y bocinas más potentes para alcanzar valores de Γ superiores a los aquí presentados. Las herramientas de software mencionadas seguramente serán las mismas, por lo que este trabajo ya da indicios a lo que que se puede hacer.

Conclusiones generales

Como hemos visto a lo largo de este trabajo, la caracterización de los estados de un sistema granular magnético se había hecho de forma empírica y era necesario plantear un conjunto de experimentos que permitan sistematizar el estudio de las propiedades dinámicas de estos sistemas en términos de experimentos apropiados, investigación de modelos teóricos de campo promedio y usando métodos de simulación por computadora. Como sabemos la variedad de formas, tamaños e intensidades de los sistemas, es muy grande. Por ello, en este trabajo se diseñaron experimentos y se eligieron un número limitado de fenómenos y sistemas a estudiar. A pesar de ello consideramos que el contenido de esta tesis contribuye de forma significativa al estudio y caracterización de de los sistemas granulares magnéticos, en especial lo que se refiere al fluido magnético repulsivo.

En esta tesis se ha presentado un estudio original y sistemático de tres sistemas granulares magnéticos experimentales que muestran una variedad de dinámicas que no habían sido reportadas hasta donde sabemos. Estos resultados representan una contribución al avance en la investigación de la materia granular magnética, que como hemos mencionado, es de interés para diversas áreas de la aplicación.

Caracterizamos por medio de experimentos y simulaciones la respuesta mecánica de ensambles 1D, 2D y magnetocristales tridimensionales ante la aplicación de esfuerzos de tensión, flexión y torsión. Encontramos que las estructuras cúbicas bajo esfuerzo de tensión exhiben una fractura tipo frágil, mientras que las estructuras hexagonales muestran un proceso de deformación similar a una deformación dúctil. En el caso de la resistencia a la flexión, las estructuras cúbicas exhiben un comportamiento dúctil y las estructuras hexagonales exhiben un comportamiento frágil. Además al combinar planos cúbicos y hexagonales (estructuras híbridas) en el cristal, estos adquieren la resistencia a la ruptura de la estructura Hx y la plasticidad de la estructura cP. Nuestros resultados sugieren que las interacciones magnéticas dan estabilidad a los magnetocristales. Pueden ser dúctiles o frágiles dependiendo de la dirección cristalográfica en la que se aplica el esfuerzo. Además, los resultados de nuestra investigación revelan nuevos comportamientos asociados con la dinámica de reorganización de partículas, los cuales pueden ser llevados al estudio de respuestas mecánicas en estructuras cristalinas, actuadores magneto-elásticos y el estudio de patrones de agregación en sistemas compuestos por partículas magnéticas.

El diseño y construcción de un sistema magnético repulsivo nos permitió ver el comportamiento fluido de un sistema magnético. Este sistema es artificial y por ende

Perspectivas: gas granular magnético bidimensional 4.4 Conclusiones sobre el estudio de un gas granular repulsivo

poco entendido y caracterizado. Para su estudio se realizaron experimentos de impacto y penetración de un proyectil en una cama granular magética repulsiva. Se estudió experimentalmente y por medio de simulaciones numéricas usando dinámica molecular. Por primera vez, una interacción de largo alcance entre el intruso y la cama granular fue estudiada y analizada sistemáticamente. Para explorar esta dinámica consideramos tres escenarios diferentes: interacciones repulsivas, atractivas y neutras entre el provectil y los granos. Debido a la presencia de interacciones magnéticas, la energía potencial repulsiva de los imanes incrementa cuando la cama granular se comprime debido al impacto del proyectil, generando una fuerza restauradora que hace que el proyectil rebote en la cama. Esta dinámica es similar a la dinámica que se ha encontrado en provectiles impactando fluidos miscelares viscoelásticos y se mostró que un modelo apropiado dentro de nuestro rango de velocidades estudiado es el llamado modelo de Maxwell. Este modelo es capaz de reproducir la dinámica de penetración encontrada experimentalmente en nuestro sistema. Nuestro estudio presenta un marco de referencia para el estudio de sistemas granulares magnéticos con interacciones de largo alcance. Además los granos magnéticos que se repelen pueden ser usados para desarrollar un nuevo tipo de amortiguador granular magnético el cual evitaría el desgaste que se produce en el sistema debido a las continuas colisiones de sus componentes.

Finalmente, diseñamos un arreglo experimental que nos permitió inyectar energía tal manera que sea fluidizara un sistema magnético repulsivo. Dadas las limitaciones de nuestro diseño experimental, consideramos que nuestros resultados podrán ser usados como base para trabajos posteriores. A pesar de tener un sistema pequeño y con energías de excitación bajas, hemos construido un diagrama de fases el cual se podrá consolidar cuando sea posible tener un sistema de más partículas y Γ mayores a las que aquí reportamos. Además, seguramente la simulación por computadora y el desarrollo de modelo teóricos apropiados son una área de oportunidades de investigación que se visualizan a futuro.

Apéndice A

Interacciones dinámicas entre esferas uniformemente magnetizadas

Consideremos las interacciones entre dos esferas magnéticas idénticas cuyas posiciones y orientaciones magnéticas están confinadas en el plano x - y. Consideremos las fuerzas y torcas sobre una esfera libre (esfera 2, de radio *a*, masa *m* y momento de inercia $I = 2ma^2/5$) en el plano xy que se generan debido al campo producido por otra esfera (esfera 1, con radio *a*) fija en el origen ($\vec{r_1} = 0$), con momento dipolar fijo $\vec{m_1} = m\hat{x}$. Usamos coordenadas polares (r, θ) , para describir la posición $\vec{r} = \vec{r_2} = \vec{r_{12}} = r\cos\theta \hat{x} + r\sin\theta \hat{y}$ desde el centro de la esfera libre y el ángulo ϕ para describir el ángulo de orientación de su momento dipolar $\vec{m_2} = m\cos\phi \hat{x} + m\sin\phi \hat{y}$, figura A.1.



Figura A.1: Sistema de coordenadas polares para estudiar dos esferas magnéticas con igual radio. Una esfera con un momento magnético \vec{m}_1 se mantiene fija en el origen con su momento magnético en la dirección +x. Una segunda esfera con momento magnético \vec{m}_2 orientada un ángulo ϕ se localiza en la posición \vec{r} con coordenadas polares (r, θ) .

La velocidad y aceleración de la esfera libre están dadas por $\vec{v} = \dot{\vec{r}}$ y $\vec{a} = \dot{\vec{v}}$, mientras que su velocidad y aceleración angular están dados por $\omega = \dot{\phi}\hat{z}$ y $\alpha = \dot{\omega}$, donde el punto indica la derivada con respecto al tiempo.

La dinámica de una esfera libre es caracterizada por las coordenadas r, θ, ϕ y los momentos correspondientes

$$p_r = \tilde{m}\dot{r}$$

$$p_\theta = \tilde{m}r^2\dot{\theta} \qquad (A.1)$$

$$p_\phi = I\dot{\phi}$$

que representan el momento radial, angular y de espin, respectivamente. La energía cinética está dada por

$$T = \frac{\tilde{m}}{2}\dot{r}^{2} + \frac{\tilde{m}}{2}r^{2}\dot{\theta}^{2} + \frac{I}{2}\dot{\phi}^{2}$$

$$= \frac{p_{r}^{2}}{2\tilde{m}} + \frac{p_{\theta}^{2}}{2\tilde{m}r^{2}} + \frac{p_{\phi}^{2}}{2I}$$
(A.2)

La figura A.2 ilustra el campo dipolar magnético \vec{B}_1 producido por la esfera fija, así como las fuerzas magéticas y torcas sobre la esfera libre, para varias posiciones y configuraciones de esta esfera. Las fuerzas se pueden dividir en 5 categorías, las cuales se caracterizan por el ángulo β formado entre \vec{m}_2 y \vec{B}_1 , estas configuraciones se pueden explorar por medio del programa en línea *Magphyx* [29], las cuales son:

- 1. Atractiva, central ($\beta = 0$). La fuerza entre dos esferas es atractiva y central cuando \vec{m}_1 y \vec{m}_2 son paralelos y colineales [figura A.2(a) A, E], conduciendo a un estado de equilibrio estable. La fuerza también es atractiva y central cuando ambos dipolos son antiparalelos entre sí y perpendiculares a la línea que une sus centros [figura A.2(e) C, G]. En ambos casos, \vec{m}_2 es paralelo a \vec{B}_1 ($\beta = 0$), cuando $\tau_{12} = 0$ y $\vec{m}_2 \cdot \vec{B}_1 = m_2 B_1$. Para maximizar este producto, \vec{m}_1 atrae a \vec{m}_2 a su vecindad cuando el campo es más fuerte.
- 2. Atractiva, oblicua $(0 < \beta < \pi/2)$. Para valores agudos de β , la fuerza es atractiva y no central: [figura A.2b) A, B, E, F], [figura A.2c) B, F] y [figura A.2d) B, C, F, G]. La fuerza actúa para incrementar $\vec{m}_2 \cdot \vec{B}_1 = mB_1 \cos\beta$, moviendo \vec{m}_2 a regiones donde el campo es más fuerte (B_1 más grande) y mejor alineado con \vec{m}_2 (β más pequeño, $\cos\beta$ más grande). La torca también actúa para incrementar $\vec{m}_2 \cdot \vec{B}_1$ rotando \vec{m}_2 en dirección de \vec{B}_1 .
- 3. Perpendicular ($\beta = \pi/2$). Cuando \vec{m}_2 es perpendincular a \vec{B}_1 , la fuerza de \vec{m}_1 sobre \vec{m}_2 es perpendicular a la línea que une estas esferas, no es atractiva ni repulsiva [figura A.2(c) A, C, E, G], esta fuerza actúa para incrementar $\vec{m}_2 \cdot \vec{B}_1$ moviendo \vec{m}_2 hacia una región donde esté alineado con el campo. La torca nuevamente actúa para rotar \vec{m}_2 alineado con \vec{B}_1 .
- 4. Repulsivo, oblicuo ($\pi/2 < \beta < \pi$). Para ángulos obtusos de β , la fuerza es repulsiva y no central: [figura A.2(b) C, D, G, H], [figura A.2(c) D,H], [figura A.2(d) A, D, E, H] y [figura A.2(e) B, D, F, H]. La fuerza actúa para incrementar el producto negativo $\vec{m}_2 \cdot \vec{B}_1 = -mB_1|\cos\beta|$, moviendo \vec{m}_2 a regiones donde el campo es más débil (B_1 más pequeño) y alineado con \vec{m}_2 (β se aproxima con $\pi/2$, se hace más pequeño) $|\cos\beta|$. La torca actúa para incrementar $\vec{m}_2 \cdot \vec{B}_1$, rotando \vec{m}_2 con el campo local.

Interacciones dinámicas entre esferas uniformemente magnetizadas

5. Repulsivo, central ($\beta = \pi$). La fuerza es repulsiva y central cuando \vec{m}_1 y \vec{m}_2 son paralelos y perpendiculares a la línea que une sus centros [figura A.2(a) C, G] y cuando \vec{m}_1 y \vec{m}_2 son antiparalelos y colineales [figura A.2(e) A, E]. En ambos casos, \vec{m}_2 es antiparalelo a \vec{B}_1 ($\beta = \pi$), dando $\tau_{12} = 0$ y $m_2B_1 = -mB$. Para incrementar su producto negativo, \vec{m}_1 repele a \vec{m}_2 a regiones donde el campo es más débil.



Figura A.2: Líneas de campo producidas por una esfera uniformemente magnetizada con un momento magnético total $\vec{m_1}$ en el centro de cada panel y las fuerzas magnéticas resultantes y torcas sobre una esfera uniformemente magnetizada de momento magnético total $\vec{m_2}$, en varias posiciones y orientaciones. Se muestran las figuras para $\vec{m_2}$ y $\vec{m_1}$ en diferentes configuraciones para β a)0, b) $\pi/4$, c) $\pi/2$, d) $3\pi/4$ y e) π . Para cada panel hay 8 posiciones de la esfera 2, representados por A-H, distribuidos uniformemente alrededor de un círculo centrado en la esfera 1. Los vectores de fuerza se presentan con longitud proporcional a la magnitud de la fuerza. Las torcas se muestran por medio de arcos con longitud proporcional a la magnitud de la torca y sin arco cuando la torca es cero. La dirección del momento magnético se indica con flechas negras. Imagen obtenida por medio del software *Magphyx* [29].

Interacciones dinámicas entre esferas uniformemente magnetizadas

En esta sección se ha demostrado que la energía, fuerzas y torcas entre dos esferas uniformemente magnetizadas son idénticas a las que se presentan en un sistema de dos dipolos magnéticos puntuales. Esta equivalencia se puede extender inmediatamente a esferas polarizadas uniformemente y a dipolos eléctricos puntuales porque los campos, fuerzas y torcas de dipolos eléctricos tienen las mismas formas matemáticas que sus contrapartes magnéticas, y el campo fuera de una esfera polarizada uniformemente es idéntico matemáticamente al campo de un dipolo eléctrico.

Apéndice B

Algoritmo de Verlet

El método de Verlet [101, 102, 103, 28] consiste en encontrar la posición \vec{r} y la velocidad \vec{v} de cada partícula en un tiempo t + h dados los valores \vec{r} y \vec{v} en un tiempo t.

Sabemos que el movimiento de una partícula se describe por

$$m_i \frac{d^2 \vec{r_i}}{dt^2} = \vec{f_i} \tag{B.1}$$

Por tanto, para N partículas se requerirían N ecuaciones. Hallar un conjunto de N ecuaciones resulta inadecuado, por ello se recurre a una expresión algebráica por medio de la expansión en serie de Taylor para la componente x

$$x(t+h) = x(t) + h\frac{dx(t)}{dt} + \frac{1}{2!}h^2\frac{d^2x(t)}{dt^2} + \frac{1}{3!}h^3\frac{d^3x(t)}{dt^3} + \cdots$$
(B.2)

Si x no cambia significativamente con el tiempo, los términos con diferenciales de orden mayor se pueden despreciar.

Para obtener una aproximación del segundo término de la ecuación diferencial (B.1), se requiere otra forma de la expansión en serie de Taylor para x

$$x(t-h) = x(t) - h\frac{dx(t)}{dt} + \frac{1}{2!}h^2\frac{d^2x(t)}{dt^2} - \frac{1}{3!}h^3\frac{d^3x(t)}{dt^3} + \cdots$$
(B.3)

Sumando (B.2) y (B.3), se obtiene

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} = \frac{x(t+h) - 2x(t) + x(t-h)}{h^2} + O(h^2)$$
(B.4)

Si $\vec{r_i} = (x_i, y_i, z_i)$ es la posición y $\vec{f_i} = (f_{xi}, f_{yi}, f_{zi})$ es la fuerza actuando sobre la partícula *i*, la ecuación de movimiento de Newton se reescribe como

$$x_i(t+h) = 2x_i(t) - x_i(t-h) + \frac{h^2}{m_i} f_{xi}(t)$$
(B.5)

Con (B.5), la posición al siguiente paso de tiempo se calcula conociendo la posición actual, anterior y la fuerza actuando, este método se conoce como *método de Verlet*.

Si se requiere hallar la velocidad, se resta (B.3) de (B.2),

$$\vec{v}_i(t) = \frac{\vec{r}_i(t+h) - \vec{r}_i(t-h)}{2h}$$
 (B.6)

La evaluación simultánea de (B.5) y (B.6) es deseable con el fin de tener una descripción completa. Despreciando los términos de orden mayor en (B.2), se tiene que

$$\vec{r}_i(t+h) = \vec{r}_i(t) + h\vec{v}_i(t) + \frac{h^2}{2m_i}\vec{f}_i(t)$$
(B.7)

Además, se requiere la siguiente ecuación para especificar la velocidad

$$\vec{v}_i(t+h) = \vec{v}_i(t) + \frac{h}{m_i}\vec{f}_i(t)$$
 (B.8)

En esta expresión, el término de la fuerza se modifica como

$$\vec{v}_i(t+h) = \vec{v}_i(t) + \frac{h}{2m_i}(\vec{f}_i(t) + \vec{f}_i(t+h))$$
(B.9)

El uso de (B.7) y (B.8) para determinar el movimiento de la partícula *i* es el *método de velocidad de Verlet*. Este método es superior en estabilidad y exactitud en las simulaciones.

Apéndice C

Publicaciones y conferencias

La investigación de este trabajo doctoral dio como resultado la publicación de los artículos:

- 1. S. Hidalgo-Caballero, Y.Y. Escobar-Ortega, R.I. Becerra-Deana, J.M. Salazar, F. Pacheco-Vázquez, Mechanical properties of macroscopic magnetocrystals, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 479 (2019) 149-155. https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0304885318338101
- Y.Y. Escobar-Ortega, S. Hidalgo-Caballero, J.O. Marston, F. Pacheco-Vázquez, The viscoelastic-like response of a repulsive granular medium during projectile impact and penetration, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics 280 (2020) 104295. https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/ pii/S037702572030063X



Journal of Magnetism and Magnetic Materials 479 (2019) 149-155

Figura C.1: Portada del artículo publicado en Journal of Magnetism and Magnetic Materials.

Publicaciones y conferencias



Figura C.2: Portada del artículo publicado en Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics.

Este trabajo fue presentado en una sesión oral en el congreso internacional Southern Workshop on Granular Materials 2018, en Puerto Varas, Chile.



Figura C.3: Conferencia durante el SWGM 2018.

Bibliografía

- [1] V.P. Kartsev, Tres milenios del imán, MIR, Moscú 1974.
- [2] H.M. Jaeger, S.R. Nagel, R.P. Behringer, Granular solids, liquids, and gases, Rev. Mod. Phys. 68 (1996) 1259.
- [3] A. Satoh, Modeling Magnetic Particles, Wiley Encyclopedia of Electrical and Electronics Engineering, John Wiley & Sons, 2015.
- [4] E. Alphandery, Y. Ding, A.T. Ngo, Z.L. Wang, L.F. Wu, M.P. Pileni, Assemblies of aligned magnetotactic bacteria and extracted magnetosomes: what is the main factor responsible for the magnetic anisotropy? ACS Nano 3 (2009) 1539-1547.
- [5] A. Komeili, Z. Li, D.K. Newman, G.J. Jensen, Magnetosomes are cell membrane invaginations organized by the actin-like protein MamK, Science 311 (2006) 242-245.
- [6] D. Hernández-Enríquez, G. Lumay, F. Pacheco-Vázquez, Discharge of Repulsive grains: Experiments and simulations, EPJ Web of Conferences 140 (2017) 03089.
- [7] P. Eshuis, K. van der Weele, D. van der Meer, R. Bos, D. Lohse, Phase diagram of vertically shaken granular matter, Phys. Fluids 19 (2007) 123301.
- [8] B. Akers, A. Belmonte, Impact dynamics of a solid sphere falling into a viscoelastic micellar fluid, J. Non-Newt. Fluid Mech. 135 (2006) 97-108.
- [9] M.T. Arigo, G.H. McKinley, The effects of viscoelasticity on the transient motion of a sphere in a shear-thinning fluid, J. Rheol. 41 (1997) 103-128.
- [10] H. Katsuragi, Physics of Soft Impact and Cratering, Springer, Japan 2016.
- [11] J.M. Ottino, D.V. Khakhar, Mixing and Segregation of Granular Materials, Annu. Rev. Fluid Mech. 32 (2000) 55.
- [12] I.S. Aranson, L.S. Tsimring, Patterns and collective behavior in granular media: Theoretical concepts, Rev. Mod. Phys. 78 (2006) 641.
- [13] H.A. Janssen, Z. Ver. Dtsh. Ing. 39 (1895) 1045.
- [14] M. Sperl, Experiments on corn pressure in silo cells-translation and comment of Janssen's paper from 1895, Granul. Matter 8 (2006) 59.

- [15] T.S. Majmudar, R.P. Behringer, Contact force measurements and stress-induced anisotropy in granular materials, Nature 435 (2005) 1079-1082.
- [16] W.A. Beverloo, H.A. Leniger, J. van de Velde, The flow of granular solids through orifices, Chem. Eng. Sci. 15 (1961) 260.
- [17] I. Zuriguel, A. Garcimartín, D. Maza, L.A. Pugnaloni, J.M. Pastor, Jamming during the discharge of granular matter from a silo, Phys. Rev. E 71 (2005) 051303.
- [18] I. Zuriguel, Invited review: clogging of granular materials in bottlenecks, Papers in Physics 6 (2014) 060014.
- [19] Y.D. Sobral, F.R. Cunha, Drift velocity and deformation of polarized drops in magnetic fields, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 289 (2005) 318-320.
- [20] E. Furlani, Permanent Magnet and Electromechanical Devices, Academic Press, 2001.
- [21] R. Messina, L.A. Khalil, I. Stankovic, Self-assembly of magnetic balls: from chains to tubes, Phys. Rev. E 89 (2014) 011202.
- [22] R. Messina, I. Stankovic, Assembly of magnetic spheres in strong homogeneous magnetic field, Phys. A 466 (2017) 10-20.
- [23] L. Spiteri, R. Messina, Dipolar crystals: the crucial role of the clinohexagonal prism phase, Phys. Rev. Lett. 119 (2017) 155501.
- [24] J. Schonke, E. Fried, Stability of vertical magnetic chains, Proc. R. Soc. A 473 (2017) 20160703.
- [25] J. Boisson, C. Rouby, J. Lee, O. Doaré, Dynamics of a chain of permanent magnets, EPL (Europhys. Lett.) 109 (2015) 34002.
- [26] A.J. Batista-Leyva, J.C. Ruiz-Suárez, Coefficient of restitution mediated by a diamagnetic interaction, Eur. Phys. J. E 39 (2016) 74.
- [27] G. Lumay, J. Schockmel, D. Hernández-Enríquez, S. Dorbolo, N. Vandewalle, F. Pacheco-Vázquez, Flow of magnetic repelling grains in a two-dimensional silo, Papers in Physics 7 (2015) 070013.
- [28] A. Satoh, Introduction to Practice of Molecular Simulation, Elsevier, London, 2011.
- [29] B.F. Edwards, D.M. Riffe, J.Y. Ji, W.A. Booth, Interactions between uniformly magnetized spheres, Am. J. Phys. 85 (2017) 130.
- [30] J.D. Jackson, Classical Electrodynamics, 2nd ed., Wiley, New York 1975.
- [31] M. Varon, M. Beleggia, T. Kasama, R.J. Harrison, R.E. Dunin-Borkowski, V.F. Puntes, C. Frandsen, Dipolar magnetism in ordered and disordered low-dimensional nanoparticle assemblies, Sci. Rep. 3 (2013) 1-5.

- [32] G. Helgesen, T.T. Skjeltorp, P.M. Mors, R. Botet, R. Jullien, Aggregation of magnetic microspheres: Experiments and simulations, Phys. Rev. Lett. 61(15) (1988) 1736-1739.
- [33] M. Beleggia, M. De Graef, General magnetostatic shape-shape interactions, J. Magn. Magn. Mater. 285 (2005) L1-L10.
- [34] D. Vokoun and M. Beleggia, Forces between arrays of permanent magnets of basic geometric shapes, J. Magn. Mater. 350 (2014) 174-178.
- [35] D.J. Griffiths, Dipoles at rest, Am. J. Phys. 60 (1992) 979-987.
- [36] D.J. Griffiths, V. Hnizdo, The torque on a dipole in uniform motion, Am. J. Phys. 82 (2014) 251-254.
- [37] B.A. Grzybowski, H.A. Stone, G.M. Whitesides, Dynamic self-assembly of magnetized, millimetre-sized objects rotating at a liquid-air interface, Nature 405 (2000) 1033-1036.
- [38] G. M. Whitesides, B.A. Grzybowski, Self-Assembly at all scales, Science 295 (2002) 2418-2421.
- [39] Y. Guerra, R. Peña-Garcia, E. Padrón-Hernández, Dipolar magnetic interaction effects in 2D hexagonal array of cobalt hollow-spheres, J. Magn. Magn. Mater. 451 (2018) 269-275.
- [40] M. Nakade, T. Ikeda, M. Ogawa, Synthesis and properties of ellipsoidal hematite/silicone core-shell particles, J. Mater. Sci. 42 (2007) 4815-4823.
- [41] L. Rossi, S. Sacanna, W.T.M. Irvine, P.M. Chaikin, D.J. Pine, A.P. Philipse, Cubic crystals from cubic colloids, Soft Matter. 7 (2011) 4139-4142.
- [42] E.S. Pyanzina, A.V. Gudkova, J.G. Donaldson, S.S. Kantorovich, Cluster analysis in systems of magnetic spheres and cubes, J. Magn. Magn. Mater. 431 (2017) 201-204.
- [43] P. Tierno, Recent advances in anisotropic magnetic colloids: realization, assembly and applications, Phys. Chem. Chem. Phys. 16 (2014) 23515-23528.
- [44] F.J. Sierra-Valdez, F. Pacheco-Vázquez, O. Carvente, F. Malloggi, J. Cruz-Damas, R. Rechtman, J.C. Ruiz-Suárez, Acoustic gaps in a chain of magnetic spheres, Phys. Rev. E 81 (2010) 011301.
- [45] B. Kiani, D. Faivre, S. Klumpp, Elastic properties of magnetosome chains, New J. Phys. 17 (2015) 043007.
- [46] L. Spiteri, R. Messina, Columnar aggregation of dipolar chains, EPL (Europhys. Lett.) 120 (2018) 36001.
- [47] F.R.N. Nabarro, Theory of Crystal Dislocations, Dover, New York, 1987.
- [48] T. Friedrich, I. Rehberg, R. Richter, Comment on Self-assembly of magnetic balls: from chains to tubes, Phys. Rev. E 91 (2015) 057201.

- [49] O. Almarsson, M.J. Zaworotko, Crystal engineering of the composition of pharmacentrical phases. Do pharmaceutical co-crystals represent a new path to improved medicines? Chem. Commun. 17 (2004) 1889-1896.
- [50] A. Kelly, W.R. Tyson, A.H. Cottrell, Ductile and brittle crystals, Phil. Mag. 15 (1967) 567-586.
- [51] J.M. Rice, R. Thomson, Ductile versus brittle behaviour of crystals, Phil. Mag. 29 (1974) 73-97.
- [52] V.M. Kornev, The fracture of brittle and ductile crystals. Force and deformation criteria, J. Appl. Math. Mech. 67 (2003) 901-910.
- [53] J.D. Jackson, Electrodynamics, second ed., Jhon Wiley and Sons, New York 1975.
- [54] J. Bergstra, Y. Bengio, Random search for hyper-parameter optimization, J. Mach. Learn. Res. 13 (2012) 281-305.
- [55] F.J. Solis, R.J.B. Wets, Minimization by random search techniques, Math. Oper. Res. 6 (1981) 19-30.
- [56] N. Vandewalle, S. Dorbolo, Magnetic ghosts and monopoles, New J. Phys. 16 (2014) 013050.
- [57] B.F. Edwards, J.M. Edwards, Dynamical interactions between two uniformly magnetized spheres, Eur. J. Phys. 38 (2016) 015205.
- [58] R.E. Reed-Hill, Physical Metallurgy Principle, Van Nostrand Ltd, New York 1964.
- [59] Fedotov V., Metamaterials. In: Kasap S., Capper P. (eds) Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials, Springer Handbooks, Springer, 2017.
- [60] W.D. Callister, Materials Science and Engineering, John Wiley Sons, 5th Ed., 2003.
- [61] J. Francu, P. Novackova, P. Janicek, Torsion of a non circular bar, Eng. Mech. 19 (2012) 45-60.
- [62] A. Panaitescu, G.M. Grason, A. Kudrolli, Persistence of perfect packing in twisted bundles of elastic filaments, Phys. Rev. Lett. 120 (2018) 248002.
- [63] J. Ciambella, G. Tomassetti, A form-finding strategy for magneto-elastic actuators, Int. Journal of Non-Linear Mech. 119 (2020) 103297.
- [64] J.A.C. Modesto, F.R. Cunha, Y.D. Sobral, Aggregation patterns in systems composed of few magnetic particles, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 512 (2020) 166664.
- [65] H.A. Zukas, High Velocity Impact Dynamics, Wiley-Interscience, Maryland 1990.
- [66] J.V. Poncelet, Cours De Mechanique Industrielle, First Edition, 1829.
- [67] G. Birkhoff, E.H. Zarantonello, Jets, Wakes, and Cavities, Academic Press, New York 1957.

- [68] A. M. Walsh, K.E. Holloway, P. Habdas, J. R. de Bruyn, Morphology and scaling of impact craters in granular media, Phys. Rev. Lett. 91 (2003) 104301.
- [69] P. Umbanhowar, D.I. Goldman, Granular impact and the critical packing state, Phys. Rev. E 82 (2010) 010301(R).
- [70] F. Pacheco-Vázquez, G.A. Caballero-Robledo, J.M. Solano Altamirano, E. Atshuler, A.J. Batista-Leyva, J.C. Ruiz-Suárez, Infinite penetration of a projectile into a granular medium, Phys. Rev. Lett. 106 (2011) 218001.
- [71] F. Pacheco-Vázquez, Ray systems and craters generated by the impact of nonspherical projectiles, Phys. Rev. Lett. 122 (2019) 164501.
- [72] J.O. Marston, E.Q. Li, S.T. Thoroddsen, Evolution of fluid-like granular jet ejecta generated by sphere impact, J. Fluid Mechanics 704 (2012) 5-36.
- [73] T.C. Goede, K.G. de Bruin, D. Bonn, High-velocity impact of solid objects on Non-Newtonian Fluids, Sci. Rep. 9(1) (2019) 1250.
- [74] A. Le Goff, D. Quéré, C. Clanet, Shooting in a foam, Soft matter 10 (2014) 6696-6704.
- [75] S.R. Waitukaitis, H.M. Jaeger, Impact-activated solidification of dense suspensions via dynamic jamming fronts, Nature 487 (2012) 205-209.
- [76] L.S. Tsimring, D. Volfson, In Powders and Grains, edited by R. Garcia-Rojo, H.J. Herrmann, S. McNamara, (A.A. Balkema, Rotterdam, 2005) 1215-1223.
- [77] J.V. Poncelet, Cours de mecanique industrielle (Clouet, 1829).
- [78] H. Katsuragi, D.J. Durian, Unified force law for granular impact cratering, Nature Physics 3 (2007) 420-423.
- [79] L.A. López-Rodríguez, F. Pacheco-Vázquez, Friction force regimes and the conditions for endless penetration of an intruder into a granular medium, Phys. Rev. E 96 (2017) 030901(R).
- [80] F. Nicot, H. Xiong, A. Wautier, J. Lerbet, F. Darve, Force chain collapse as grain column buckling in granular materials, Granular Matter 19 (2017)18.
- [81] V. Bashtovoi, P. Kuzhir, A. Reks, The impact between a magnetic fluid drop and a magnetic fluid surface, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 252 (2002) 280-282.
- [82] F. Marcotte, G.-J. Michon, T. Séon, C. Josserand, Ejecta, corolla, and splashes from drop impacts on viscous fluids, Phys. Rev. Lett. 122 (2019) 014501.
- [83] D. Kawabata, M. Yoshida, A. Shimosaka, Y. Shirakawa, Discrete element method simulation analysis of the generation mechanism of cooperative behavior of disks falling in a low-density particle bed, Adv. Powder Technol. 31 (4) (2020) 1381-1390.
- [84] D.W. T. Aste, The Pursuit of Perfect Packing, IOP Publishing Ltd, 2000.

- [85] O. Carvente, G.G. Peraza-Mues, J.M. Salazar, J.C. Ruiz-Suárez, Self-assembling of non-Brownian magnetized spheres, Granular Matter 14 (2012) 303-308.
- [86] E.G. Richardson, The impact of a solid on a liquid surface, Proc. Phys. Soc. 61 (1948) 352-367.
- [87] M. Horányi, Charged dust dynamics in the solar system, Annu. Rev. Astron. Astrophys. 34 (1) (1996) 383-418.
- [88] A. Cervantez-Álvarez, Y.Y. Escobar-Ortega, A. Sauret, F. Pacheco-Vázquez, Air entrainment and granular bubbles generated by a jet of grains entering water, J. Colloid Interface Sci. 574 (2020) 285-292.
- [89] S. Hidalgo-Caballero, Y. Escobar-Ortega, R. Becerra-Deana, J. Salazar, F. Pacheco-Vázquez, Mechanical properties of macroscopic magnetocrystals, J. Magn. Magn. Mater. 479 (1) (2019) 149-155.
- [90] F. Pacheco-Vázquez, S. Dorbolo, Rebound of a confined granular material: combination of a bouncing ball and a granular damper, Sci. Rep. 3 (1) (2013) 2158.
- [91] A. Snezhko, I.S. Aranson, W.-K. Kwok, Structure Formation in Electromagnetically Driven Granular Media, Phys. Rev. Lett. 94 (2005) 108002.
- [92] T.P.C. Van Noije, M.H. Ernst, Velocity distributions in homogeneous granular fluids: the free and the heated case, Granular Matter 1(2) (1998) 57-64.
- [93] T. Poschel, N. Brilliantov, Granular Gas Dynamics, Springer, Germany 2003.
- [94] J. M. Salazar, L. Brenig, Inelastic granular gas: Computer simulations and kinetic theory of the cooling state, Phys. Rev. E 59 (1999) 2093.
- [95] E. Opsomer, F. Ludewig, N. Vandewalle, Phase transitions in vibrated granular systems in microgravity, Phy. Rev. E 84(5) (2011).
- [96] G. H. Ristow, Pattern Formation in Granular Materials, Springer, New York 2004.
- [97] P. Eshuis, K. van der Weele, D. van der Meer, D. Lohse, Granular leidenfrost effect: Experiment and theory of floating particle clusters, Phy. Rev. Lett. 95 (2005).
- [98] Buzón Díaz V., Estudio de un modelo cinético de gas granular confinado casibidimensionalmente, Tesis Doctoral, Universidad de Granada, Sevilla 2017.
- [99] C.R. Wassgren, C.E. Brennen, M.L. Hunt, Vertical vibration of a deep bed of granular material in a container, J. Appl. Mech. 63 (1996) 712.
- [100] J.P. Hansen, I.R. McDonald, Theory of Simple Liquids (2005) Academic Press.
- [101] D. Frenkel, B. Smit, Understanding molecular simulation: from algorithms to applications, Academic Press, Great Britain 2001.
- [102] N. Bell, Y. Yull, P.J. Mucha, Particle-based simulation of granular materials, Eurographics/ACM SIGGRAPH Symposium on Computer Animation, 2005

[103] K. Anagnostopoulos, Computational Physics, National Technical University fo Athens, Athens 2014.