

Universidade de Brasília Instituto de Física

Estudo das propriedades físicas de estruturas heterogêneas de arames em cavidades bidimensionais

Cássia Cristina Donato

Orientador: Prof. Fernando A. Oliveira Universidade de Brasília Instituto de Física Centro Internacional de Física da Matéria Condensada Brasília/DF

Có-Orientador: Prof. Marcelo A. F. Gomes Universidade Federal de Pernambuco Departamento de Física Recife/PE

Maio de 2006

Agradecimentos

Muitas pessoas contribuiram de uma maneira ou de outra para minha tese de doutorado. Sem elas este trabalho teria sido impossível, de modo que eu gostaria nesse momento de manifestar explicitamente meus agradecimentos, se não a todas, mas pelo menos a algumas delas.

Em primeiro lugar eu gostaria de agradecer a minha família, começando com uma menção especial a Leonardo por trazer felicidade a todos os meus dias com sua presença e seu amor. Também gostaria de agradecer muito profundamente a minha mãe Ismarina e a meu pai José, bem como às minhas irmãs Márcia e Ângela (bem como seus filhos, filhas e esposos), por seu apoio ilimitado e por terem ao longo dos anos me ensinado que o amor, o respeito, a dignidade e a perseverança devem sempre estar presente em nossas vidas. Mais recentemente, mas não menos importante, pela recepção acolhedora não apenas em sua casa durante um período considerável no ano passado, mas também pela acolhida em seus corações, desejo agradecer meu sogro Bartolomeu e minha sogra Maria de Fátima, bem como sua filha Andréa. Suas atenções e cuidados me proporcionaram o sentimento de estar vivendo novamente em família. Gostaria, ainda, de acrescentar um agradecimento especial aos meus novos tios Astor, Amyrthes e Zélia, bem como aos demais membros das famílias Cavalcanti de Mélo e Pires do Carmo por todo o carinho com que sempre me recebem. Não há palavras para expressar o quanto amo a todos os aqui mencionados.

No lado científico, eu gostaria de manifestar meu particular agradecimento aos meus orientadores, Profs. Fernando Oliveira e Marcelo Gomes, por sua dedicação e por me proporcionarem as ferramentas para realizar este trabalho. Em particular, ao Fernando, por ter sido acima de um bom professor, um grande e inestimável amigo; ao Marcelo, por sua constante ajuda, o qual com seus ensinamentos e seu interesse estimulou minhas realizações durante este período como estudante de doutorado. Aos dois, minha profunda admiração e respeito.

Sou também muito grata aos colegas dos grupos de sistemas complexos, tanto aos da *Confraria dos Físicos Malditos* do CIFMC-IF/UnB, quanto aos da *Coisa Complexa* do LSA-DF/UFPE, por partilharem seus conhecimentos e questionamentos. Oportunamente, desejo ainda agradecer ao Prof. Valdemiro Brito e seu grupo pela valiosa colaboração.

Do mesmo modo sou bastante grata aos professores, administradores e funcionários do Instituto de Física da UnB, os quais foram uma constante fonte de suporte. Extendo os mesmos agradecimentos àqueles do Departamento de Física da UFPE, pelo apoio quando da minha estada nos últimos meses.

Eu gostaria ainda de agradecer muito especialmente ao Pedro Hugo, à Sandra Elisa, à dona Maria Cristina e ao seu João, por mesmo diante das indas e vindas, manterem sempre viva uma amizade muito querida e valiosa. Um agradecimento particular pelos amigos remanescentes no Recife, Laércio, Ailton, Mari e Ferraz. Por último, mas não menos importante, aos novos amigos da Capital Federal, em particular, Simone e Jorge, João Batista, André Naves, Priscila Favero, Meire, Ismael, Leonardo Gollo, Luciano, Mendeli, Rafael e Sandra Longhin. Ainda à minha amiga distante, Juciléia, pela consideração sempre presente. A todos os demais amigos e colegas não citados, recebam também meus sinceros agradecimentos.

Finalmente, às agências brasileiras de fomento à pesquisa, especialmente à CAPES e ao CNPq, pela bolsa de doutorado e demais aportes financeiros, os quais viabilizaram o desenvolvimento de todo o trabalho abordado nesta tese.

Resumo

Através de experimentos, de simulações computacionais e de teoria de escala, é estudado nesta tese diversos aspectos físicos de uma nova estrutura heterogênea bidimensional formada pela injeção contínua de fios metálicos de cobre e de liga de estanho e chumbo em cavidades planas circulares. Os experimentos levam à formação de padrões complexos sem simetrias evidentes, mas fortemente controlados por interações de auto-exclusão e descritos por leis de escala robustas.

À medida que o comprimento do fio injetado na cavidade cresce, a estrutura confinada de arame torna-se lentamente mais rígida, até que a densidade média das interações de auto-exclusão alcança um limiar, levando a uma instabilidade na injeção do fio, com a subseqüente limitação da fração máxima de ocupação da cavidade a um valor sensivelmente menor do que a unidade, o qual depende da razão entre os módulos de cisalhamento e de Young do fio.

Propriedades estatísticas e geométricas dos padrões de cobre são estudadas como uma função do comprimento *L* do fio injetado na cavidade, enquanto as propriedades mecânicas das estruturas dos fios de liga são estudadas em termos de deformações plásticas axiais. A dimensão fractal desses sistemas obedece a uma relação de escala do tipo $M \sim R^D$, onde M é a massa (ou área projetada) do fio dentro de um círculo de raio R, e $D = 1,9 \pm 0,1$, independentemente do material ter sofrido transformações plásticas ou não. O comprimento transversal *x* das configurações de fios da liga $S n_y P b_{1-y}$ deformadas axialmente é encontrado experimentalmente e depende da deformação δ da estrutura como $x \sim (1 - \delta)^{-\xi}$, com $\xi = 0, 50 \pm 0, 15$. Esses resultados são estudados teoricamente à luz de modelos de *blobs* tipo-de Gennes.

A influência da presença de obstáculos na injeção de fios de liga foi estudada quando *n* objetos da mesma espessura do fio injetado eram diluídos na cavidade. A taxa máxima de ocupação da cavidade nesse caso decai com a lei de potência $p \sim n^{-\beta}$, $\cos \beta = 0,60 \pm 0,05$ ao longo de efetivamente três ordens de grandeza em *n*. Um estudo dessa última relação de escala baseado em métodos heurísticos permite estimar teoricamente o expoente β como sendo $\beta = 0, 50$.

Observamos também que no limite de máxima ocupação para as configurações de fios de cobre, a distância quadrática média para caminhadas aleatórias de N passos executadas sobre essas estruturas mostra uma dependência em lei de potência do tipo $\langle r(N)^2 \rangle \sim N^{\alpha}$, onde $\alpha = 2/d_w = 0, 66 \pm 0, 01$. Portanto, o expoente controlando a difusão assume o valor anômalo $d_w = 3, 03 \pm 0, 05$.

Finalmente, utilizamos um método para medir a dimensão do conjunto onde a energia é dissipada ou armazenada no dobramanento de fios dentro da cavidade. Nossos resultados dessas medidas são comparados com uma estimativa baseada na teoria de Flory para polímeros. Ao longo de toda a tese, a estrutura heterogênea de fios é comparada com a de outros sistemas bidimensionais bem estudados e de grande interesse físico e aplicado, como caminhadas aleatórias, agregados de percolação, empacotamento de discos, entre vários outros.

Abstract

Through experiments, computational simulations, and scaling, it is studied in this thesis several physical aspects of a new two-dimensional heterogeneous structure formed by copper or tin-lead wires continuously injected into planar circular cavities. The experiments lead to formation of complex patterns without evident symmetries, but strongly controlled by self-avoiding interactions and described by robust scaling laws.

As the length of the wire injected in the cavity grows, the structure of wire becomes slowly more rigid, until the average density of self-avoiding interactions reaches a threshold leading to an instability in the injection of the wire with the subsequent limitation of the maximum packing fraction of the cavity to a value sensibly smaller than the unit, which depends on the ratio of shear and Young moduli. Statistical and geometric properties of the copper patterns are studied as a function of the length *L* of the wire injected in the cavity, while mechanical properties of the structures of alloy wires are studied in terms of axial plastic deformations. The fractal dimension of these systems obeys a scale relation $M \sim R^D$, where *M* is the mass (or projected area) of the system within a circle of radius *R*, and $D = 1.9 \pm 0.1$, independently of the material to have undergone a plastic transformation or not. The horizontal dilation *x* of the wire configurations of $S n_y P b_{1-y}$ alloy axially deformed is found experimentally to depend on the deformation (δ) of the structure as $x \sim (1 - \delta)^{-\xi}$, with $\xi = 0.50 \pm 0.15$. This result is theoretically studied in the light of blobs models.

The influence of the presence of obstacles on the injection of $S n_y P b_{1-y}$ wire was studied when *n* objects of the same thickness of the wire were diluted in the cavity. The packing fraction of the cavity in this case decays with the power law $p \sim n^{-\beta}$, with $\beta = 0.60 \pm 0.05$ along three orders of magnitude in *N*. A study of this last scaling relation based in heuristic methods allow us to estimate theoretically the exponent as $\beta = 0.50$.

We also observed the diffusion of a random walker on the copper wire patterns in the maximum occupation limit. In this case, the mean-square displacement of the random walker scales as the number of steps (N) as $\langle r(N)^2 \rangle \sim N^{\alpha}$, where $\alpha = 2/d_w =$ 0.66 ± 0.01 . Therefore, the exponent controlling the diffusion assumes the anomalous value $d_w = 3.03 \pm 0.05$.

Finally, we used a method to measure the fractal dimension of the set where the energy is dissipated or stored in the crumpling of wires inside the cavity. Our results of these measurements are compared to an estimate based on the Flory theory of polymers. Along all this thesis the heterogeneous structure of wire is compared with other two dimensional systems of great interest in physics and technology as e.g. random walks, percolations clusters, packing of discs, and several others.

Sumário

1 Introdução 3 2 FIOS DE COBRE AMASSADOS EM UMA CAVIDADE 2d10 2.1 10 Detalhes experimentais 2.2 Configurações de fios amassados 12 2.3 Relação massa-tamanho para fios amassados 19 2.4 29 2.5 32 2.5.1 Número de Alças 32 2.5.2 NÚMERO DE CONTATOS ENTRE ALÇAS 33 2.6 35 2.7 36 2.8 38 Fração de empacotamento para fios em duas dimensões 43 3 4 TRANSIÇÕES GEOMÉTRICAS EM ESTRUTURAS HETEROGÊNEAS DE FIOS AMASSADOS SOB 55 STRESS AXIAL 4.1 56 4.2 61 4.2.1 PROPRIEDADES PLÁSTICAS EM DEFORMAÇÕES AXIAIS 61 4.2.2 66

		4.2.3	Dimensão fractal	68
		4.2.4	Corrigindo o modelo de glóbulos	74
5	Propriedades conformacionais de estruturas heterogêneas de um fio amas-			
	SADO EM CAVIDADE BIDIMENSIONAL COM OBSTÁCULOS			77
	5.1	5.1 Padrões de fios em cavidades com obstáculos		. 78
	5.2	Fração de ocupação da cavidade em função do número de obstáculos .		84
		5.2.1	Box-counting para os padrões observados em função do nú-	
			MERO DE OBSTÁCULOS	88
		5.2.2	DIFUSÃO DE FIOS EM CAVIDADES BIDIMENSIONAIS	89
6	Difusão anômala em fios amassados em duas dimensões			99
	6.1	Introi	RODUÇÃO	
	6.2	Result	TADOS E DISCUSSÃO	101
7	Cor	Condensação de energia no confinamento de fios em duas dimensões		
	7.1	1 Introdução		108
	7.2	2. Medindo a dimensão D_E do suporte onde a energia é dissipada ou		
		ARMAZ	ENADA	110
	7.3	Argu	mento de campo médio para cálculo de D_E	116
	7.4	Come	NTÁRIOS FINAIS	119
8	Cor	Conclusões gerais e perspectivas		
G	Glossário dos principais símbolos			
Rı	CFERÊN	ICIAS BIE	BLIOGRÁFICAS	132

2

Capítulo 1

Introdução

O método dos físicos de refletir sobre o mundo tem, especialmente no último século, nos possibilitado avançar significativamente sobre questões diversas, ampliando nossa visão sobre o mundo como o tem poucas atividades na história. A relatividade tem mostrado que existe uma profunda ligação entre espaço e tempo, levando a descobertas surpreendentes da relação entre massa e energia. A mecânica quântica tem revelado fenômenos de beleza, precisão e utilidade que são inconcebíveis em termos das experiências atuais [1].

Embora as implicações da relatividade e da mecânica quântica tenham dominado a física no século XX e, por conseguinte, sejam seus campos mais popularmente conhecidos, estes são apenas exemplos particulares dos empreendimentos da física. Um outro campo da física cujas descobertas têm contribuído consideravelmente para tais avanços é a física da matéria condensada - este talvez o maior campo de pesquisa da física contemporânea.

A física da matéria condensada é o campo da física que trata das propriedades físicas macroscópicas da matéria. Em particular, é a que se ocupa com a fase "condensada" que aparece sempre que o número de constituintes em um sistema é extremamente grande e as interações entre os constituintes são fortes. Os exemplos mais familiares de fases condensadas são os sólidos e líquidos, que se originam da força elétrica entre os átomos. As fases condensadas mais exóticas incluem o superfluido e o condensado de Bose-Einstein descobertos em certos sistemas atômicos sob temperaturas muito baixas, a fase supercondutora caracterizada pela condução elétrica em certos materiais, e as fases ferromagnéticas e antiferromagnéticas do spin em um sistema cristalino.

Mais recentemente, a física da matéria macia tem surgido como um subcampo identificável dentro do grupo abarcado pela física da matéria condensada. Como o próprio nome diz, ela se concentra no estudo de matéria macia, ou seja, de materiais que respondem facilmente quando da aplicação de campos externos [2]. As mais bem conhecidas estruturas de matéria macia são polímeros - moléculas de hidrocarbonos em que muitas subunidades conectadas formam uma cadeia flexível. Outros exemplos são: colóides, emulsões, membranas e cristais líquidos [2, 3]. Estes materiais além de serem muito comuns na natureza, são de grande importância na indústria e tecnologias emergentes. São também a base de muitos sistemas biológicos [4, 5]. Eles possuem tipicamente estruturas que são muito maiores que as escalas atômicas ou moleculares; a estrutura e a dinâmica em escalas mesoscópicas determinam propriedades físicas macroscópicas. Comumente, o que se busca é estabelecer e compreender as relações entre essas escalas. O rápido crescimento na área deve-se a recentes avanços na preparação de amostras e técnicas de medidas, novas aplicações tecnológicas e novos problemas de biologia e física estatística [6].

O estudo de matéria macia nos trouxe novas noções qualitativas de como a matéria pode se comportar. Um tema central, é a auto-organização: a criação espontânea de estruturas regulares, tais como as representadas por simetria de dilatação e estruturas fractais (Figuras 1.1(a) e 1.1(b)) [7]. Outro tema recorrente é o estudo de estruturas desordenadas (Figura 1.1(c)). Estruturas amassadas, como as estudas no presente trabalho, são particulamermente interessantes nesse contexto, pois respondem facilmente à atuação de forças externas, são exemplos claro de estruturas desordenadas e, além disso, apresentam muitos comportamentos em leis de escala.

Leis de escala são interessantes pois oferecem uma descrição simples de como



Figura 1.1: (a) Fractal determinístico: criado por uma regra, de tal modo que as partes são cópias escaladas da original - Ex.: Sistema desordenado - modelo de Ising com campo aleatório com condições de contorno periódicas. Spins que apontam para Curva de Koch. (b) Fractal estatístico: as partes tem as mesmas propriedades estatísticas que a original - Ex.: Árvore . (c) baixo, no estado fundamental, são desenhados em branco; os spins para cima são desenhados em cinza ou preto (se pertencem ao aglomerado de percolação).

5

as características do sistema mudam, quando este é submetido a uma alteração em sua escala. O comportamento em lei de potência pode surgir devido à similaridade geométrica existente no sistema, ou como uma decorrência da análise dimensional deste. A possibilidade de se escrever leis de escala que relacionem a evolução das quantidades físicas relevantes ocasionou um avanço significativo em todas as áreas da Física como, por exemplo, na compreensão dos fenômenos críticos, na caracterização dos sistemas fractais, na descrição das instabilidades em sistemas com dinâmica não-linear e nos fenômenos de não-equilíbrio [8–10].

Amassamento é um problema interessante tanto intrinsecamente, quanto por ser observado em diferentes fenômenos físicos. A despeito da grande importância científica e tecnológica de fenômenos associados com estruturas microscópicas e macroscópicas de materiais amassados, nossa compreensão do comportamento geométrico e físico destes sistemas é ainda muito limitada. De fato, efeitos não-lineares extremos e irreversibilidade observados em amassamento de estruturas com topologias simples, como a do plano, introduzem grandes dificuldades na teoria da elasticidade e na geometria de superfícies [11–15]. Não obstante, nos últimos anos, aspectos teóricos e experimentais associados ao amassamento têm sido objeto de crescente interesse em muitas áreas de estudo.

De forma não-sistemática, lidamos cotidianamente com amassamento; por exemplo, é comum amassarmos ao acaso uma folha de papel antes de nos desfazermos dela (Figura 1.2, esquerda); ou a dobrarmos sucessivamente num formato regular (veja Figura 1.2, centro). Na primeira situação o processo é desordenado, a entropia é elevada, mas gasta-se pouca energia; enquanto na segunda o processo é organizado, tendo baixa entropia, mas necessitando de um alto emprego de energia. Mesmo quando amassamos de modo pouco acentuado uma folha, observamos que a mesma já apresenta a formação de uma rede de vincos e singularidades, como é ilustrado pela imagem central na Figura 1.2. Tais estruturas ou singularidades sugerem que a energia empregada no amassamento foi concentrada de forma muito irregular na folha [16–22].



Figura 1.2: Folhas de papel amassadas: à esquerda, amassamento regular; no centro, amassamento suave, na qual se pode observar redes de singularidades e vincos; e à direita, amassamento altamente compactado, resultando numa bola aproximadamente esférica.

Por maior que seja a força envolvida não é possível compactar mesmo uma folha de papel macio em uma bola esférica perfeita. Este último fato, verificável através de medidas da relação massa-tamanho expressa pela Eq. (1.1), aponta para uma dimensão fractal (média) $D = D_0 = 2,5$ [23,24] deste sistema, com a distribuição de frequência de D mostrada na Figura 1.3,



Figura 1.3: Distribuição de freqüência da dimensão fractal *D* para bolas de papel amassadas.

Portanto, nem todo o espaço físico tridimensional no qual a superfície amassada está mergulhada é ocupado. Isto deve-se às fortes interações de auto-exclusão exis-

tentes nas folhas amassadas, as quais contribuem consideravelmente para seu caráter não-linear. Um outro aspecto importante é a topologia do sistema, a qual, juntamente com interações de auto-exclusão, limita as configurações acessíveis nos processos de amassamento. Num certo sentido, todos os resultados encontrados a partir do estudo de estruturas amassadas com a topologia do plano são generalizações bidimensionais de resultados obtidos com cadeias poliméricas ou caminhadas aleatórias auto-excludentes. Propriedades estatísticas de caminhadas aleatórias e polímeros unidimensionais já eram bem conhecidas nos anos sessenta. Vale ressaltar, no entanto, que os problemas de amassamento nos quais estamos interessados, são processos irreversíveis de não-equilíbrio, enquanto a maior parte dos resultados na física de polímeros tem sido obtido no âmbito de processos de equilíbrio [25–32].

Estruturas com diferentes topologias, como exemplificado por uma bola de fio comprimido, têm sido igualmente estudadas na literatura física. Aspectos físicos, geométricos e estatísticos de fios amassados em 3D foram examinados nos últimos dez anos do ponto de vista experimental e, em particular, leis de escala robustas e dimensões fractais associadas com estes sistemas desordenados foram reportadas. Quando fios metálicos são amassados irreversivelmente, obtemos uma relação massa-tamanho como a indicada na Eq. 1.1 com *D* médio igual a $D_0 = 2,75$, ao longo de três décadas [33–35].

Um exame detalhado da literatura, nas duas últimas décadas, revela uma quantidade razoável de pesquisa enfocando aspectos de processos de amassamento em três dimensões. No entanto, existe uma ausência de estudos envolvendo problemas de amassamento bidimensional. Por sua vez, o estudo de sistemas bidimensionais tem apresentado uma fenomenologia fascinante na teoria de matéria condensada. Apenas muito recentemente [36], resultados de uma extensiva análise estatística de estruturas amassadas em 2*d*, obtidas por amassamento irreversível de pedaços macroscópicos de fios de cobre dentro de uma cavidade plana bidimensional começaram a ser reportados. Nosso propósito nesta tese é o de estudar aspectos físicos e estatísticos do amassamento de objetos com dimensão topológica efetiva unitária gerando estruturas hierárquicas ou bastante heterogêneas bidimensionais.

A linha de apresentação desta tese é a que segue: no Capítulo 2 fazemos uma revisão detalhada dos resultados apresentados em [36, 37], os quais reportam alguns aspectos importantes da física estatística e da geometria dessas estruturas amassadas. No Capítulo 3 apresentamos uma discusão física a qual nos permite entender porque o valor da fração de empacotamento máxima, p_{max} , de um fio numa cavidade bidimensional pode ser um número universal menor que a unidade. No Capítulo 4 discutimos as transições geométricas observadas quando estruturas de fios de solda são submetidas à deformações axiais pela ação de uma força externa. No Capítulo 5 examinanos a influência nas propriedades conformacionais das estruturas heterogêneas dos arames amassados, quando obstáculos são diluídos na cavidade. No Capítulo 6 estudamos o problema da difusão sobre arames amassados, comparando o resultado obtido com a difusão em aglomerados de percolação. No Capítulo 7 discutimos uma forma que nos possibilita estudar a energia dissipada ou armazenada nas configuração de fios amassados levando em conta as singularidades que aparecem nessas estruturas. Uma analogia dos resultados encontrados nesse capítulo com a dissipação de energia em atividades vulcânicas é apresentada. Finalmente, no Capítulo 8 apresentamos nossas conclusões gerais e perpectivas de trabalhos futuros sobre o tema.

Capítulo 2

FIOS DE COBRE AMASSADOS EM UMA CAVIDADE 2d

2.1 DETALHES EXPERIMENTAIS

O aparato experimental usado em nosso trabalho é mostrado na Figura 2.1. Consiste de uma célula plana transparente formada pela superposição de dois discos de acrílico, fixados um ao outro por parafusos, com altura total de 1, 8*cm* e diâmetro externo de 30*cm*, tendo uma cavidade circular com 20*cm* de diâmetro e 0, 11*cm* de altura. Esta cavidade permite acomodar configurações de uma *única* camada de fio amassado com 0, 1*cm* de diâmetro. Para reduzir a fricção, a cavidade da célula foi polida e utilizamos fio de cobre n° 19 com superfície esmaltada, e diâmetro $\zeta = 0, 1$ *cm*. Cinco canais radiais foram feitos no disco inferior para possibilitar três diferentes caminhos de injeção de fio dentro da célula em ângulos $\theta = 10^{\circ}, 90^{\circ}$ e 180°. Para cada um dos ângulos de injeção especificados anteriormente realizamos um conjunto de 42 inserções de fio na cavidade. Estas amostras foram divididas em famílias com 7 experimentos equivalentes correspondendo a L = 50, 100, 150, 250, 300 e um comprimento máximo médio, \bar{L}_{max} , referente ao maior comprimento de fio possível de ser injetado na cavidade. Este comprimento é a média aritmética na família e é distinto para cada um dos ângulos, a saber, $\bar{L}_{max} = 423$, 363 e 438*cm*, para $\theta = 10^{\circ}$, 90° e 180°, respectivamente. O regime obtido quando o comprimento máximo é atingido é bastante específico e será amplamente discutido nas seções seguintes. Na realização destes experimentos nenhum tipo de lubrificante foi utilizado e tanto a cavidade quanto o fio operam em regime seco. Adicionalmente, no entanto, realizamos um conjunto de 7 inserções, restrita ao ângulo de 180° e à situação limite do maior comprimento de fio possível de ser inserido na cavidade, neste caso $L = \bar{L}_{max} = 450cm$, num regime úmido, utilizando óleo mineral como lubrificante. De antemão, ressaltamos que o estudo das quantidades estatísticas e geométricas abordadas neste trabalho é centrado nas configurações obtidas pela inserção de fio nos canais a 180°, sendo algumas destas quantidades extendidas para os demais canais.



Figura 2.1: Desenho dos discos que compõem a célula de injeção usada nos experimentos de amassamento de fio de cobre discutidos neste trabalho.

Há um procedimento padrão para a realização do experimento, consistindo dos passos abaixo descritos:

- Mede-se o comprimento *L* de fio desejado;
- O ponto correspondente a metade do comprimento L é disposto no centro da

cavidade do disco inferior, o que implica em ter quantidades equivalentes de fio inseridas em cada um dos canais de injeção, sendo que para cada ângulo de injeção há uma diposição, conforme mostrado na Fig. 2.2, que especifica a configuração inicial do experimento;





Figura 2.2: Disposição inicial do fio na cavidade para os três caminhos de injeção.

- Superpõe-se o disco superior ao inferior e fixa-os com os parafusos;
- Introduz-se o fio para dentro da cavidade, manual e uniformemente, em ambos os lados dos canais da célula até que o comprimento L de fio em sua totalidade esteja inserido;
- Utilizando uma câmera digital, montada 37,7*cm* acima da base superior da célula, faz-se a fotografia da configuração formada. Estas fotografias são então transferidas para o computador, onde passam por um processo de filtragem que as transformam em imagens binárias, as quais servirão de base para o estudo proposto.

2.2 Configurações de fios amassados

Inicialmente, para o leitor desenvolver uma noção sobre a natureza do processo de amassamento que estamos considerando neste trabalho, mostramos na Figura 2.3 configurações típicas de fios amassados em 2*d* para o regime de injeção a 180°, para seis diferentes valores do comprimento *L* do fio (L = 50, 100, 150, 250, 300 e 470 cm). Para cada comprimento existem outras seis configurações não mostradas aqui para não sobrecarregar o texto.

Vamos, agora, discutir alguns aspectos básicos e qualitativos das estruturas exibidas na Figura 2.3. Como mencionamos na Seção 2.1, cada tipo de injeção leva a uma disposição inicial do fio dentro da cavidade, a partir da qual o fio é inserido de forma manual e uniforme. A velocidade de injeção em cada canal nestes experimentos foi da ordem de 1cm/s. Os resultados numéricos aqui apresentados referem-se, em geral, aos canais de injeção a 180° , extendendo-nos nos demais canais quando alguma das quantidades estatísticas em estudo são factíveis de comparação e apresentam esclarecimento complementar. Quando um fio fino de comprimento *L* é injetado dentro de uma cavidade através dos canais à 180° , o fio começa a se encurvar se seu comprimento é ligeiramente maior que o diâmetro da cavidade, $2R_0$. Há um comprimento crítico $L_c = h_1$, dado pela razão

$$\eta = \frac{h_1}{2\pi R_0} = 0,684 \pm 0,008,\tag{2.1}$$

quando o fio toca ele mesmo formando a primeira alça conforme mostrado na Figura 2.4. Essa estimativa numérica se baseia numa média em 20 experimentos cujo intento era determinar o comprimento total de fio, h_1 , necesário para formar o primeiro contato fio-fio e, como conseqüência, para formar a primeira alça dentro da cavidade. Como veremos, a razão adimensional η será importante no modelo hierárquico desenvolvido no Seção 2.8. A Figura 2.3(a) se refere a uma situação onde $\frac{L}{2\pi R_0} \cong 0,795$, isto é, não muito além da conformação crítica ilustrada na Figura 2.4. Quando *L* cresce, isto é, quando

$$p = \text{fração de ocupação da cavidade} = \frac{\zeta L}{\pi R_0^2},$$
 (2.2)

cresce, o fio começa a se amassar progressivamente em uma forma complexa não-



(a) L=50cm





(c) L=150cm

(d) L=250cm



(e) L=300cm

(f) L=470cm

Figura 2.3: Fotografias para configurações típicas de fios amassados nos canais de injeção a 180°.



Figura 2.4: Alça de comprimento crítico $L_c = h_1$, formada no momento do primeiro contato fio-fio.

uniforme, como ilustrado nas figuras para L > 100cm. Nestes casos, a estrutura amassada torna-se progressivamente mais rígida e a dificuldade de injeção aumenta um pouco, fazendo com que a velocidade de injeção fique mais lenta. Contudo, o fenômeno observado é independente da velocidade para todo o intervalo de velocidade compatível com um processo manual. Há um momento em que a velocidade de injeção vai a zero rapidamente e a estrutura do fio amassado se torna, por definição, rígida (Figura 2.3(f)). A configuração de empacotamento rígido ocorre quando a fração de ocupação é máxima:

$$p = p_{max} = \frac{\zeta L_{max}}{\pi R_0^2} = 0,140 \pm 0,006 \text{ se } \theta = 180^\circ.$$
 (2.3)

Como comentado no primeiro parágrafo da Seção 2.1, duas outras geometrias de injeção foram estudadas, $\theta = 10^{\circ}$ e 90°, cujas fotografias das configurações típicas são apresentadas nas Figuras 2.5 e 2.6, respectivamente. As frações máximas de empaco-tamento para estas geometrias valem:

$$p = p_{max} = \frac{\zeta L_{max}}{\pi R_0^2} = \begin{cases} 0, 135 \pm 0,010 & \text{se} \quad \theta = 10^{\circ} \\ 0, 11 \pm 0,02 & \text{se} \quad \theta = 90^{\circ}. \end{cases}$$
(2.4)

O comportamento mecânico das amostras parece bastante diferente próximo e acima de p_{max} . A estrutura amassada é rígida para $p = p_{max}$; ela está completamente travada



(a) L=50cm

(b) L=100cm



(c) L=150cm

(d) L=250cm



(e) L=300cm



Figura 2.5: Fotografias para configurações típicas de fios amassados nos canais de injeção a 10°.



(a) L=50cm

(b) L=100cm



(c) L=150cm

(d) L=250cm



(e) L=300cm

(f) L=470cm

Figura 2.6: Fotografias para configurações típicas de fios amassados nos canais de injeção a 90°.

dentro da cavidade e é impossível continuar a injecção de fio. Como se pode notar de (2.3) e (2.4) os maiores comprimentos de fio que podem ser injetados na cavidade dependem fracamente do ângulo escolhido. Além disso, os padrões geométricos de fios amassados para os ângulos de injeção a 10°, 90° e 180° diferem apenas para os comprimentos menores, notadamente para L=50 cm, e quando L cresce, as configurações convergem rapidamente para uma estrutura típica que não é fortemente dependente do ângulo de injeção.

Uma dúvida que se poderia levantar diz respeito à dependência das configurações de empacotamente rígido com forças de fricção, as quais dificultariam a injeção de maiores comprimentos de fio dentro da cavidade. Para esclarecer este ponto, realizamos experimentos onde a cavidade foi lubrificada com óleo mineral e injetamos fio pelos canais a 180° até atingir o limite de empacotamento com as fotografias obtidas nesta situação); isto é, o limite em que é impossível inserir qualquer quantidade adicional de fio dentro da cavidade. O resultado encontrado corrobora com o regime seco, com

$$p = p_{max} = \frac{\zeta L_{max}}{\pi R_0^2} = 0,14 \pm 0,02,$$
(2.5)

para o regime lubrificado.

Os padrões observados dentro da célula quando L > 100cm, para todos os canais de injeção e também nos dois regimes apresentados, seco e lubrificado, são basicamente devido a formação de uma cascata de alças de tamanho decrescente. Durante a injeção progressiva de fio dentro da cavidade, a cascata de alças evolui em um caminho tal que é comum observar rearranjos locais ou globais das alças previamente formadas. Um exame detalhado das configurações de fios amassados é feito nas próximas seções, através do uso de diversas propriedades estatísticas.

Como veremos ao longo desta tese, as configurações de fios de cobre amassados, no limite de empacotamento máximo, $p = p_{max}$, quando o ângulo de injeção é 180°, são citadas e estudas sob vários aspectos, de modo que para bem situar o leitor mostramos na Figura 2.7 as realizações experimentais que, juntamente com a Figura 2.3(f), formam o conjunto a ser abordado.

2.3 Relação massa-tamanho para fios amassados

Uma das propriedades físicas mais básicas quando lidamos com modelos de crescimento, configurações de polímeros e estruturas fractais que apresentam algum grau de isotropia estatística é a dependência M(R) da massa do sistema dentro de um círculo de raio R. Esta quantidade é mostrada nos gráficos log – log da Figura 2.8 em unidades arbitrárias, para as configurações de fios amassados associados a seis diferentes comprimentos L variando de 50cm a 438cm (veja a Figura 2.3 correspondente para as típicas conformações destas estruturas). O último valor numérico L = 438cm é uma média em sete valores de comprimento variando de 410 a 470cm.

Nos gráficos da Figura 2.8 podemos observar que a massa (ou área projetada) das estruturas amassadas apresenta uma tendência razoavelmente boa para escalar como uma lei de potência em *R* ao longo de aproximadamente duas décadas na variável raio, de R = 0, 1cm a $R = R_0 = 10cm$. Neste ponto alguma informação sobre o método usado para obter *M*(*R*) na Figura 2.8 é necessária. A medida de *M* como uma função de *R* foi feito em dois passos:

- Para 4*cm* ≤ *R* ≤ 10*cm*, *M*(*R*) foi medido dentro de um único círculo com origem no centro geométrico da célula;
- Para 0, 1*cm* ≤ *R* ≤ 4*cm*, *M*(*R*) foi tomado como a massa média dentro de 5-6 círculos distintos equivalentes, cujos centros eram localizados em diferentes pontos do fio, tomados aleatoriamente mas sujeitos adicionalmente à restrição de não interceptarem a borda da cavidade.

O procedimento acima é importante para contornar uma distorção comum, devido principalmente à diminuição da massa próximo ao centro da célula, quando um único cír-



(a)

(b)



(c)

(d)



Figura 2.7: Configurações de fio de cobre amassado em duas dimensões no regime de máxima densidade, $p \rightarrow p_{max} = 0, 14 \pm 0, 02$, para $\theta = 180^{\circ}$. 20



Figura 2.8: Dependência massa-tamanho para 5-7 configurações equivalentes de fios amassados em 2D, (injeção a 180°) de comprimento (a) 50*cm*; (b) 100*cm*; (c) 150*cm*;
(d) 250*cm*; (e) 300*cm* e (f) 438*cm*. As linhas pontilhadas verticais mostram em detalhe a região de escala considerada. Veja Seção 2.3 para detalhes.



Figura 2.9: A mesma relação massa-tamanho para fios amassados da Figura 2.8, mas usando um único círculo com origem no centro da célula: (a) 50*cm*; (b) 100*cm*; (c) 150*cm*; (d) 250*cm*; (e) 300*cm* e (f) 438*cm*. Veja Seção 2.3 para detalhes.

culo é usado. Este efeito devido a um único centro na amostra é ilustrado na Figura 2.9, a qual mostra o mesmo tipo de gráfico que na Figura 2.8, mas com M(R) medida apenas

em círculos de raio R coincidindo com o centro da célula.

Como podemos observar dos gráficos na Figura 2.8, M(R) apresenta uma tendência robusta em obedecer uma relação de escala massa-tamanho

$$M(R) \sim R^D, \tag{2.6}$$

onde *D* varia efetivamente com *L* no intervalo 1, $10 \pm 0,05$ a $1,9 \pm 0,1$. Para detalhar esses resultados, observamos na Figura 2.10 a dependência do expoente de massatamanho médio, *D*, com 1/L, incluindo as flutuações estatísticas em *D* dentro dos *ensembles* de experimentos equivalentes. Os dados na Figura 2.10 sugerem que há três tipos de estruturas ou regimes de fios amassados qualitativamente diferentes:

- i. regime de única alça, correspondente ao limite de estruturas de uma alça (isto é, com *L* não muito maior comparado com $2R_0$), com $D \cong 1$;
- ii. um regime intermediário de muitas alças e baixa densidade, apresentando uma cascata de muitas alças, com $D \approx 1, 4 \pm 0, 1$; e
- iii. um empacotamento rígido, novamente de muitas alças, mas agora com alta densidade, com $D = 1,9 \pm 0, 1$.

A relação massa-tamanho das configurações de fios amassados para as demais geometrias de injeção (10° e 90°) também foi estimada. A distríbuição M(R) apresenta comportamento semelhante ao observado para a geometria a 180°, especialmente para L > 100cm, tendo comportamento significativamente diferente apenas para comprimentos $\leq 100cm$ nos canais a 10°. Esta alteração é de certa forma esperada pois, como comentamos na Seção 2.2, os padrões geométricos diferem sensivelmente para os comprimentos L = 50cm e 100*cm*, quando comparados entre os distintos ângulos de injeção. Na Figura 2.11 apresentamos o gráfico dos valores de D contra 1/L obtidos para as configurações formadas pela injeção de fio nos canais a 10°(•) e 90°(•). Enquanto para $L \leq 100$ na injeção a 10° não se observa um intervalo de escala, à medida



Figura 2.10: Dimensão efetiva massa-tamanho D como uma função de 1/L, obtida dos gráficos na Figura 2.8. As linhas horizontais tracejadas apontam os expoentes para o esqueleto de um conjunto percolativo bidimensional, e para uma cadeia polimérica, segundo a teoria de campo médio de Flory.

que $L \rightarrow L_{max}$ o expoente *D* converge para um mesmo valor, independente do ângulo dos canais de injeção.

Gostaríamos, nesse momento, de comparar alguns aspectos da estrutura geométrica de fios amassados em 2*d* com outros sistemas físicos bem conhecidos de interesse. Embora o expoente massa-tamanho no regime de uma alça seja trivial, o mesmo não se pode dizer sobre *D* nos regimes de muitas alças com alta e baixa densidade, como descrito anteriormente. O regime de baixa densidade poderia ser qualitativamente explicado por um modelo de campo médio tipo-Flory para uma cadeia polimérica auto-excludente sem ramificação em um bom solvente, ou uma caminhada aleatória auto-excludente (*SARW*) em d = 2 [38].

Faremos a seguir uma aplicação das idéias de Flory para uma sistema amassado de dimenão topológica d_T , mergulhado num espaço *d*-dimensional. Neste argumento a energia da superfície amassada apresenta duas componentes:



Figura 2.11: Dimensão efetiva massa-tamanho *D* como uma função de 1/*L*, obtida para as configurações mostradas nas Figuras 2.5 (expoentes indicados pelo símbolo ●)
e 2.6 (símbolo ■).

$$E = E_{el} + E_{rep},\tag{2.7}$$

onde

$$E_{el}$$
 = componente elástica ou entrópica = κR^2 , (2.8a)

$$E_{rep}$$
 = componente de auto-exclusão = $C\bar{\rho}^2 R^d$, (2.8b)

onde $\kappa = g \frac{L^{d_T-1}}{L} = g L^{d_T-2}$ é a constante elástica, com d_T especificando a dimensão topológica da estrutura, C é uma constante relacionada ao parâmetro do volume excluído, $\bar{\rho} = \frac{M}{R^d} = \frac{\sigma L^{d_T}}{R^d}$ é a densidade média e d é uma dimensão arbitrária. Usando estas definições a Eq. 2.7 fica escrita na forma:

$$E = gL^{d_T - 2}R^2 + C\sigma^2 L^{2d_T} R^{-d}.$$
(2.9)

A Eq. 2.9 tem um mínimo para um raio *R* bem definido:

$$\frac{\partial E}{\partial R} = 0 \implies 2gL^{d_T - 2}R = dC\sigma^2 L^{2d_T} R^{-d - 1}$$
(2.10)

$$\therefore \quad R^{2+d} = \frac{d C \sigma}{2 g} (L^{d_T+2}). \tag{2.11}$$

Omitindo os coeficientes numéricos, temos:

$$R \sim L^{\frac{d_T+2}{2+d}}.\tag{2.12}$$

Assim, por exemplo, para $d_T = 1$ e d = 1, 2, 3, tem-se, $R \sim L, L^{3/4}, L^{3/5}$, respectivamente.

A estrutura de fios amassados lembra a dos polímeros no que diz respeito à dimensão topológia ($d_T = 1$) e à existência de interações auto-excludentes, assim podemos compreender, em parte, o fato do expoente de massa efetivo dos arames 2*d*, igualar ao expoente de Flory D = 4/3 numa ampla faixa de comprimento do fio, *L*.

Ademais, o valor experimental $D = 1, 4 \pm 0, 1$ para o regime de muitas alças e baixa densidade é também reminiscente de outro importante problema de empacotamento de discos em 2*d*, o empacotamento Apoloniano [39], como exemplificado pela Figura 2.12(a), que tem *D* no intervalo [1, 300; 1, 315]. Esta analogia aparentemente captura o fato de que estruturas amassadas de fio em 2*d* no regime de baixa densidade poderiam ser tomadas como um empacotamento de discos *deformados*. Especulando ainda esta analogia, realizamos uma simulação do empacotamento Apoloniano dentro dos limites do nosso experimento. A experiência consistiu em desenhar círculos cobrindo a cavidade da célula, na configuração mostrada na Figura 2.12(b).

Esta última configuração tem a particularidade de ter perímetro total L = 125cm, isto é, p = 0,0400, intermediário às configurações de fios amassados com $100cm \le L \le 150cm$. Além disto, o número de círculos utilizados, seis ao todo, pode ser relacionado ao número de alças, n_a , e ao número de contatos fio-fio, n_{ff} , (veja Seções 2.5.1 e 2.5.2 onde estas quantidades são discutidas), observados experimentalmente nas configurações de fio para L = 150cm, $3 \le n_a(L = 150) \le 7$ e $6 \le n_{ff}(L = 150) \le 13$. Um passo complementar para averiguar se comportamento semelhante se estenderia para outros domínios de p experimental, seria iterar o processo de empacotamento



Figura 2.12: (a) Configurações de círculos com um padrão de tangências, ilustrando um típico empacotamento Apoloniano. (b) Ilustração de um particular empacotamento Apoloniano de discos comparativa ao nosso experimento de amassamento de fios.

Apoloniano. Isto seria realizável adicionando novos círculos tangentes aos anteriores, observando as regras deste tipo de empacotamento.

O regime de alta densidade está associado com a fração de ocupação máxima, cuja estimativa experimental é apresentada na Eq. 2.3. A geometria do regime de alta densidade é aproximadamente similar ao bem conhecido tapete de *Sierpinski*, exemplificado pela Figura 2.13(a), se nos restringirmos apenas as dimensões topológica e fractal ($d_T = 1, D \cong 1, 89$ [39]). Devemos ainda observar que o valor $D = 1, 9 \pm 0, 1$ no regime de alta densidade é igual a $D_{FA-3d} - 1$, onde $D_{FA-3d} = 2,75 \pm 0,05$ é o expoente massa-tamanho obtido para bolas de fio amassado em 3*d* [33]. Uma configuração deste tipo de estrutura é apresentada na Figura 2.13(b). Assim, do ponto de vista estatístico, as configurações de fio amassado examinadas aqui poderiam ser vistas como uma secção 2*d* das bolas 3*d* de fio amassado previamente estudadas.

É importante notar que se o único ponto associado com o regime de alta densidade na Figura 2.10 é excluído, obtemos um ajuste bem razoável dos outros pontos



(a) Tapete Sierpinski



Figura 2.13: Dois outros sistemas físicos com os quais a analogia de fios amassados em 2*d* se apresenta: (a) fractal determinístico representado pelo Tapete de Sierpinski em 2*d*. (b) Configuração desordenada ilustrada por um fractal estatístico representado por fio amassado em 3*d*. Veja texto para detalhes.

experimentais na forma de uma linha reta $D = -24/L + D_{\infty}$, com $D_{\infty} = 1,55 \pm 0,10$, como pode ser visto naquela figura. Podemos interpretar $D_{\infty} = 1,55 \pm 0,10$ como a dimensão fractal de uma estrutura 2*d* de fios amassados de muitas alças e baixa densidade no limite termodinâmico. A última dimensão é igual, dentro das barras de erro, à dimensão do esqueleto do conjunto de percolação (*percolation cluster backbone*) em 2*d*, $D_e \cong 1,61 \pm 0,02$ [40]. O esqueleto é a estrutura residual obtida quando as extremidades pendentes do conjunto de percolação são eliminadas; é ele o responsável pelas propriedades de transporte associadas com o conjunto percolativo. Em particular, é o esqueleto que carrega tensão se as extemidades do conjunto são comprimidas ou esticadas. Toda a estrutura amassada no regime de muitas alças (baixa densidade) comporta-se em alguns aspectos importantes como o esqueleto de um conjunto percolativo:

i. ambos tem dimensão topológica $d_T = 1$ e não possuem extremidades soltas;

- ii. ambos são muito efetivos na transmissão de esforços mecânicos (no caso dos fios amassados, durante a injeção de fio na célula);
- iii. topologicamente falando, ambos tem um colar de alças de todos os tamanhos [40]. Como uma consequência, não é estranho que ambos expoentes D_{∞} e D_e sejam de fato similar.

2.4 Contagem por caixas para Fios Amassados em 2D

As propriedades geométricas das estruturas amassadas mostradas na Figura 2.3 foram estudadas com o método de contagem por caixas [41], contando-se o número de caixas $N(\varepsilon)$ de tamanho ε necessárias para cobrir as estruturas amassadas. Mostramos na Figura 2.14 que

$$N(\varepsilon) \sim \epsilon^{-D'},$$
 (2.13)

onde D' é a dimensão fractal dos fios amassados em 2D.

O expoente D' tem dentro das flutuações estatísticas o mesmo valor do expoente encontrado com a relação massa-tamanho, variando de 1, 1 ± 0 , 1 a 1, 7 ± 0 , 1. O mesmo padrão dos três regimes como discutido na Seção 2.3 é confirmado com o método box-counting:

- i. para *L* não muito maior comparado com $2R_0$; isto é, para o limite de uma alça, obtemos $D' = 1, 1 \pm 0, 1$;
- ii. no limite de estruturas de baixa densidade e muitas alças, obtemos $D' = 1, 3 \pm 0, 1;$ e
- iii. para o regime de alta densidade encontramos $D' = 1, 7 \pm 0, 1$.


Figura 2.14: Gráficos log – log do número médio $N(\epsilon)$ de caixas de tamanho ϵ necessárias para cobrir cada configuração de fio amassado na cavidade 2*d* (Figura 2.8) como uma função de ϵ : (a) 50*cm*; (b) 100*cm*; (c) 150*cm*; (d) 250*cm*; (e) 300*cm* e (f) 438*cm*. As barras de flutuação estatística são da ordem do tamanho dos símbolos.

Estes dados obtidos da análise pelo método da contagem por caixas são exibidos na Figura 2.15, a qual mostra D' e as respectivas flutuações estatísticas como uma função de 1/*L*. Indicamos também nesta figura o expoente para uma caminhada aleatória auto-excludente, em d = 2, bem como o expoente para o esqueleto de um conjunto percolativo, cujas discussões pertinentes podem ser encontradas na Seção 2.3. Como observado na Seção 2.3, para o expoente de massa-tamanho, se o único ponto associado ao regime de alta densidade é excluído, obtemos um bom ajuste dos dados na Figura 2.15. Nesta figura, a linha contínua representa o ajuste $D' = -17/L + D_{\infty}$, com $D_{\infty} = 1,45 \pm 0,10$ sendo a dimensão fractal de fios amassados em 2*d* no limite termodinâmico para estruturas de muitas alças e baixa densidade.



Figura 2.15: A dimensão fractal D' obtida dos gráficos de contagem por caixas da Figura 2.14. D' é dado como uma função de 1/L e é consistente com o expoente Dobtido das medidas massa-tamanho. Comparações com a dimensão do esqueleto de um conjunto percolativo e de um polímero são indicadas. Veja Seção 2.4 para detalhes.

2.5 Alças

Apresentamos na Figura 2.4 a configuração de primeiro contato fio-fio e designamos este formato geométrico como sendo uma *alça*. Posteriormente observamos que estas alças se manifestam como sendo as unidades constitutivas de configurações de fios amassados em 2*d*, como é bem exemplificado pelas Figuras 2.3, 2.5 e 2.6. Na presente seção nos deteremos em avaliar a quantidade de alças formadas nos padrões, o número de contatos fio-fio, que ocasiona a formação de alças bem como o número de contato entre alças em função da fração de ocupação da cavidade, *p*.

2.5.1 Número de Alças

Quando o comprimento de fio injetado na cavidade ou a fração de ocupação aumenta, o número total de alças n_a formadas em consequência dos contatos fio-fio também aumenta. A dependência experimental de n_a com p e as correspondentes flutuações são mostradas no gráfico maior da Figura 2.16. Neste gráfico log-log, $n_a(p)$ mostra dois comportamentos difererentes: i) um ombro para $p \leq 0,032$, e ii) uma dependência em lei de potência para $p \gtrsim 0,032$, na forma $n_a(p) \sim p^{1,55\pm0,10}$, cujo ajuste é indicado pela linha reta contínua. A taxa de formação de alças apresenta o maior valor no começo da primeira região, quando o fio amassado incipiente comporta-se como uma estrutura macia. Ainda neste gráfico exibimos também a dependência teórica de $n_a \operatorname{com} p$ (indicada pela linha tracejada) como derivado do modelo de amassamento hierárquico que será introduzido no Seção 2.8. O número total de alças, n_a , aumenta alternativamente como $n_a - 1 \sim (p - p_c)^{1,07 \pm 0,10}$, com $p_c = 0,0137 \pm 0,0003$ sendo a probabilidade crítica definida na Seção 2.2 associada a formação da primeira alça. Assim $n_a \rightarrow 1$ quando $p \rightarrow p_c^+$. A última região de escala é verificada em todo domínio estudado, isto é, para 0,0159 < $p \leq 0,1496,$ como mostrado no gráfico menor da Figura 2.16; ou seja, n_a escala aproximadamente com $L^{1,0}$ para L grande, dentro das barras de erro, e para ζ e R_0 fixos.



Figura 2.16: Gráfico log-log do número de alças pertencente a um fio amassado ocupando uma fração p da área da cavidade: (**n**) dados experimentais, com ajuste para a região com comportamento lei de potência indicado pela linha reta contínua. A linha tracejada representa os valores teóricos obtidos do modelo hierárquico discutido no Capítulo 2.8. O gráfico interno mostra $n_a - 1$ contra $p - p_c$, onde p_c é a fração crítica associada com a formação da primeira alça dentro da cavidade (Figura 2.4). Veja Seção 2.2 e Seção 2.8 para detalhes.

O perímetro médio das alças, $\lambda = \frac{L}{n_a}$, apresentado no gráfico principal da Figura 2.17, decai como $p^{-0,50\pm0,15}$ ao longo de uma década de variabilidade em p, enquanto o gráfico interno mostra esta mesma grandeza em aproximadamente duas décadas de variabilidade decaindo como $(p - p_c)^{-0,26\pm0,03}$.

2.5.2 Número de Contatos Entre Alças

O número total de contatos entre alças, n_{aa} , escala assintoticamente com $n_{aa} \sim p^{2,20\pm0,01}$, como mostrado no gráfico maior da Figura 2.18, para 0,0470 $\leq p \leq 0$,1496. No gráfico menor mostramos o comportamento de n_{aa} em relação a $p - p_c$. A linha reta



Figura 2.17: Perímetro médio das alças, λ , com decaimento indicado pela linha reta como $p^{-0,50\pm0,15}$ (gráfico maior) e como $(p - p_c)^{-0,26\pm0,03}$ (gráfico menor).

neste gráfico indica o melhor ajuste para os dados como $n_{aa} \sim (p - p_c)^{2,25\pm0,05}$, com $0,0181 \leq p - p_c \leq 0,1285$. O número total de contatos fio-fio, $n_{ff} = n_{aa} +$ número de contatos fio-fio para formar uma única alça (= n_a) escala como $n_{ff} = 2290 p^{1,8\pm0,1}$, isto é, próximo a p^2 dentro das barras de erro (veja Figura 2.19).



Figura 2.18: Dependência do número de contato entre alças, n_{aa} , contra a fração de empacotamento, tanto em relação a p (gráfico maior) quanto em $p-p_c$ (gráfico menor).

O último resultado experimental é compatível com o argumento de campo médio de Flory [38], o qual sugere que n_{ff} deve escalar com a densidade de energia repulsiva dentro de uma configuração particular de fio amassado, ou seja, com p^2 (veja Seção 2.3 para esclarecimentos). Como conseqüência, o número de coordenação ou contatos por alça, $\gamma = n_{aa}/n_a$ varia assintoticamente como $\gamma \sim p^{0.7\pm0.2}$, no intervalo de 0, 047 $\leq p \leq$ 0, 140.



Figura 2.19: No gráfico maior mostramos a dependência do número de contatos fio-fio, n_{ff} , contra p. A linha contínua indica o melhor ajuste e concorda com o argumento de Flory, que sugere $n_{ff} \sim p^2$. O gráfico interno mostra o número de coordenação, γ , variando assintoticamente com $p^{0.7\pm0.2}$.

2.6 DISTRIBUIÇÃO DE ÁREAS DELIMITADAS POR ALÇAS

O limite de empacotamento rígido em nossos experimentos está associado a configurações de fios amassados com um número total de alças variando no intervalo $n_a = 22$ a $n_a = 45$. No total, tínhamos 249 alças em 7 experimentos equivalentes de fios amassados com os comprimentos maiores (isto é, $\approx 35,5$ alças por experimento com $L = L_{max}$). Se as alças são discretizadas de acordo com suas respectivas áreas s, obtemos a função distribuição n(s) que é mostrada na Figura 2.20. O ajuste linear nesta figura sugere um comportamento lei de potência em torno de uma década:

$$n(s) = s^{-1,4\pm0,2}.$$
(2.14)

A distribuição esperada de área obtida com o modelo hierárquico introduzido na Seção 2.8 é

$$n(s) = s^{-\tau}, \ \tau = 1,45 \pm 0,10,$$
 (2.15)

portanto, em concordância com os dados experimentais.



Figura 2.20: Função distribuição experimental normalizada n(s) para alças com área s. A linha reta indica o melhor ajuste e tem uma inclinação de 1, 4 ± 0, 2 próximo à estimativa $\tau = 1,45 \pm 0,10$, obtido com o modelo hierárquico discutido na Seção 2.8.

2.7 Relação Perímetro-Área

Para objetos Euclidianos bidimensionais a razão $\rho = h/s^{1/2}$, onde *s* é a área delimitada pelo perímetro *h*, é independente do tamanho do polígono [41], sendo esta razão característica do tipo de objeto. Assim, $\rho = 2\sqrt{\pi}$ para círculos e $\rho = 4$ para quadrados, por exemplo.

As áreas $s(20mm^2 < s < 2000mm^2)$ e os perímetros das alças das 7 amostras que compõe a família de configurações amassadas no regime de alta densidade ($L = \bar{L} = 438cm$), foram medidas e a relação área-perímetro obtida como indicado na Figura 2.21. A área de cada alça foi determinada contando o número de pontos num conjunto conexo definindo uma alça, enquanto o comprimento do perímetro foi obtido contando o número de pontos do fio identificados como vizinhos da referida área. A razão ρ para as alças, obtida em nossos experimentos, no regime de alta densidade pode ser expressa na forma $\rho = 3, 17 \sqrt{\pi}$; este resultado é igual a $\pi \sqrt{\pi}$ dentro de incerteza inferior a 1%.



Figura 2.21: Relação perímetro contra área para as alças no limite de alta densidade. A linha reta representa o melhor ajuste dos dados com $h = 3, 17 \sqrt{\pi} s^{0.48\pm0.01}$ (curiosamente círculos perfeitos satisfazem $h = 2 \sqrt{\pi} s^{1/2}$).

2.8 Modelo hierárquico

Como se pode observar nas Figuras 2.3- 2.5, alças são as unidades constitutivas das configurações espaciais de fios amassados estudadas no presente trabalho. Neste Capítulo vamos introduzir uma explicação para os dados experimentais baseados num modelo de amassamento hierárquico. Como ponto de partida vamos dividir o número total de alças dentro da cavidade em uma hierarquia de iterações i = 1, 2, 3, ... de uma forma tal que na iteração *i* haja n_i alças com um perímetro característico unitário h_i . O perímetro total de todas as alças é o comprimento *L* do fio introduzido dentro da cavidade, isto é

$$L = \sum_{i=1}^{i} n_i h_i,$$
 (2.16)

onde *I* é o número máximo de iterações. Se supormos que há cascatas de h_i e n_i controladas, respectivamente, por duas constantes $\eta \in v$ tal que

$$\frac{h_{i+1}}{h_i} = \eta < 1, \tag{2.17a}$$

$$\frac{n_{i+1}}{n_i} = \nu > 1,$$
 (2.17b)

isto é,

$$h_i = \eta^{i-1} h_1, (2.18a)$$

$$n_i = v^{i-1}, \quad i = 1, 2, \dots, I,$$
 (2.18b)

onde h_1 é o perímetro da maior alça, associado a situação de primeito contato fio-fio, como explanado na Seção 2.2. Das duas últimas equações pode-se eliminar *i* para obter a função distribuição de perímetros das alças

$$n(h) = (\frac{h}{h_1})^{-D},$$
 (2.19a)

$$D = D(\eta, \nu) = \frac{\ln \nu}{\ln \eta^{-1}},$$
 (2.19b)

onde *D* é a dimensão fractal [41] dos fios amassados no limite de empacotamento rígido (veja Seção 2.3 para detalhes). Se assumirmos que a área *s* delimitada por uma alça de perímetro *h* escala como $s \sim h^d$, encontramos que

$$n(s) \sim \left(\frac{s}{s_1}\right)^{-\tau},$$
 (2.20a)

$$\tau = \frac{D+d-1}{d}, \qquad (2.20b)$$

sendo d a dimensão do espaço na qual a estrutura está embebida.

com

Usando o expoente Euclidiano d = 2 e tomando $D = 1,9 \pm 0,1$, como estimado nos dois diferentes métodos nas Seções 2.3 e 2.4 para o regime de alta densidade, encontramos

i. $\tau = 1,45 \pm 0,10$, que está em concordância com o expoente obtido para os dados experimentais ($\tau = 1,4 \pm 0,2$) reportado na Seção 2.6 (veja novamente Figura 2.20).

Além disso, se adotarmos a suposição mais simples v = 2 na expressão da Eq. (2.19b), isto é, se o número de alças duplica a cada iteração, obtemos

ii.
$$\eta = 0,69 \pm 0,01,$$

que é essencialmente o valor experimental introduzido na Seção 2.2 para a razão do perímetro da maior alça, h_1 , pelo perímetro da célula, $2\pi R_0$. A forma geométrica da primeira (e maior) alça dentro da cavidade é muito robusta e já foi apresentada na Figura 2.4.

De agora em diante assumiremos que a razão $\frac{h_{i+1}}{h_i} = \eta = \eta_c = 0,68, \forall i$. Se substituirmos as Eqs. (2.17a) com $\eta = \eta_c$ e (2.17b) na Eq. (2.16), temos

$$L = \frac{L_c[(\eta_c \nu)^I - 1]}{[\eta_c \nu - 1]},$$
(2.21)

onde $L_c = 2\pi R_0 \eta_c$, $\eta_c = 0,68 \pm 0,01$ e $\nu = 2$.

Se resolvermos a Eq. (2.21) para I e aplicarmos o resultado na expressão para o número total de alças

$$n_a = \sum v_i = \frac{v^I - 1}{v - 1},$$
(2.22)

obtemos

$$n_a = (26, 5p+1)^{2,11} - 1, (2.23)$$

depois de substituirmos $L = \frac{p\pi R_0^2}{\zeta}$ e $\frac{R_0}{\zeta} = 100$.

A última expressão para n_l (Eq. (2.23)) é exibida como uma linha sólida na Figura 2.16 e mostra uma boa concordância com os dados experimentais.

Novamente da Eq. (2.21), obtemos

$$\frac{L}{L_c} \cong 2,7 [1,3^{I} - 1]$$
(2.24a)
ou
$$L \cong 11 [1,2^{I} - 1]$$
(2.24b)

$$\frac{1}{R_0} \cong 11 [1, 3^{\prime} - 1]$$
(2.24b)

e o comprimento máximo de fio que pode ser introduzido dentro da cavidade, L_{max} , depende da estimativa do número máximo de iterações, I_{max} .

Um limite superior para I_{max} é facilmente obtido se considerarmos um processo de amassamento regular iterativo em 2D para um fio de comprimento *L* e espessura ζ submetido a uma razão de encurtamento de 1/2 em seu comprimento

$$x_i = (1/2)^i L, (2.25)$$

e um alargamento na direção transversal dada por

$$y_i = 2^i \zeta. \tag{2.26}$$

como ilustrado na Figura 2.22.



Figura 2.22: Ilustração de uma cascata simples de amassamento para estimar um limite superior para o número máximo de iterações associadas com o modelo de fios amassados em 2*d*.

Esse processo de empacotamento termina, isto é, uma estrutura rígida é alcançada, quando $i \rightarrow I_0$ e $x_i = y_i$, ou seja, para

$$I_0 = \frac{\ln(\frac{L}{\zeta})}{\ln 4}.$$
(2.27)

Se este limite superior para I_{max} é introduzido na Eq. (2.24b), obtemos:

$$\frac{L_{max}}{R_0} \simeq 11 \ [1.3^{\frac{\ln(\frac{L_{max}}{\zeta})}{\ln 4}} - 1].$$
(2.28)

A solução numérica para a Eq. (2.28) com os parâmetros usados em nosso experimento, $\zeta = 0, 1$ cm e $R_0 = 10$ cm, dá $L_{max,teorico} \cong 420$ cm, que está em boa concordância com o valor experimental, $\langle L_{max,experimental} \rangle = 438$ cm. Contudo, conseguimos $I_{max} < \frac{\ln(\frac{L_{max,teorico}}{\zeta})}{\ln 4} = 6, 0$, que significa que o limite superior teórico usado para I_{max} é superestimado em torno de 13% relativo ao valor médio experimental, $\langle I_{max,experimental} \rangle \cong 5, 2$.

Capítulo 3

Fração de empacotamento para fios em duas dimensões

No Capítulo anterior nós mostramos que a fração máxima para empacotamento de fios de cobre em cavidades circulares independe do esforço feito na injeção e é próxima a $p \rightarrow p_{max} \approx 15\%$. Neste Capítulo centraremos nossa atenção em estudar quais aspectos físicos são relevantes no controle do processo de empacotamento, bem como examinar se há um limite para p_{max} menor que a unidade, para uma distribuição heterogênea de fio dentro de uma cavidade, como ilustrado pela Figura 3.1(a).

A descrição qualitativa do processo de empacotamento pode ser dividida em três etapas:

- Na primeira, uma pequena força, essencialmente constante, *F*, é necessária para injetar o fio na cavidade;
- Na segunda etapa, o sistema começa a sinalizar que o aumento da fração de empacotamento, p, está ficando difícil, uma vez que a força de injeção, F, aumenta de uma ou mais ordens de grandeza;
- Finalmente, na terceira etapa, a força de injeção aparentemente "diverge" em relação ao ganho no aumento de *p*. Qualitativamente estas três etapas estão

representadas no gráfico da Figura 3.1(b).



Figura 3.1: (a) Célula com distruibuição *heterogênea* de fio. (b) Ilustração qualitativa de *F* contra *p* para as etapas descritas anteriormente.

Na Figura 3.1(a) mostramos uma célula circular bidimensional com uma distribuição heterogênea de fio. A espessura do fio ζ , o diâmetro da cavidade 2*R* e a força *F* estão apontadas na mesma. A fração de empacotamento é dada por

$$p = \frac{\zeta L}{\pi R^2},\tag{3.1}$$

onde $L \equiv é$ o comprimento do fio injetado. Na Figura 3.1(b), tipicamente $p_1 \simeq 0, 12$, $p_2 \simeq 0, 15$, e $p_3 - p_2 \ll p_2$. Ou seja, se $p_{max} \equiv p_3 = 0, 152 \Rightarrow p_3 - p_2 = 0,002 \ll 0,15$. Aqui 1, 2 e 3 se referem às três etapas descritas anteriormente.

Podemos considerar que pressão ~ deformação ⇒ pressão = constante × deformação. Como

pressão
$$\equiv \frac{\text{Força}}{\text{Área}} \Rightarrow \frac{F}{A} = Y \frac{\Delta R}{R},$$
 (3.2)

onde

- *Y* : módulo de elasticidade da estrutura;
- $\zeta \in R$: o diâmetro do fio e o raio da estrutura, respectivamente;
 - ΔR : deformação linear feita na estrutura ao longo da direção de compressão, quando a força é *F*.

Ou seja, se aumentarmos a deformação, ΔR , com ζ , Y e R constantes, F aumentará correspondentemente.

Ao usarmos $A = \pi r^2 = \pi \left(\frac{\zeta}{2}\right)^2 \approx \zeta^2$ (r = raio do fio), a eq. 3.2 fica mais convenientemente expressa como

$$\frac{F}{\zeta^2} = Y \frac{\Delta R}{R},\tag{3.3}$$

onde $\frac{F}{\zeta^2}$ = pressão no canal de injeção e $\frac{\Delta R}{R}$ é a deformação relativa. A equação 3.3 nada mais é do que uma expressão da "Lei de Hooke" (F = -kx) para o problema. Como tal fica subentendido que ela é aplicável para deformações muito pequenas: $\frac{\Delta R}{R} \ll 1$. Uma mensuração típica descrevendo as três etapas anteriores é:

Etapa 1: A força $F \simeq 1N$ (ou kgf) consegue deformar o sistema de $\Delta R \simeq 1mm$. Como $A \simeq \zeta^2 = 1mm^2 = 10^{-6}m^2$ e R = 100mm = 0, 10m podemos usar 3.3 para achar o módulo da elasticidade:

$$Y \to Y_1 = \frac{F}{\zeta^2} \frac{R}{\Delta R} = \frac{1N}{10^{-6}m^2} \frac{100mm}{1mm} = 10^8 \frac{N}{m^2} = 10^8 Pa.$$

Etapa 2: Podemos, ao contrário, determinar o valor típico F_2 da força, supondo que o sistema começa a ficar rígido e controlado, portanto, pelo próprio módulo da elasticidade, digamos, do cobre $\approx O(10^2 GPa)$, ou seja $Y_2 \approx 10^{11} Pa$. Note, por exemplo, que $Y_{cobre} \cong 110 - 120 GPa$, enquanto $Y_{aço} \cong 190 - 210 GPa$; em geral

 $Y_{metais} \simeq O(10^2 GPa); Y_{nylon} \simeq 3 \times 10^9 Pa = 3GPa$. Desses últimos valores numéricos concluiremos que se a fração de empacotamento p fosse controlado apenas por "Y" então injetar nylon na cavidade seria muito mais fácil e, consequentemente $p_{max}(nylon) \gg p_{max}(cobre)$. Isso, contudo, não é verdade: enquanto $p_{max}(cobre) \simeq 0, 15; p_{max}(nylon) \simeq 0, 37^1$.

Para a etapa 2, usando a Equação (3.3), mas resolvendo para a força F temos: $F_2 = \zeta^2 Y \frac{\Delta R}{R}$. Neste caso, com $\zeta^2 = 10^{-6}m^2$, $Y \simeq 10^{11}Pa$, $\Delta R \simeq 1mm$ e $R = 10^2 mm$ obtemos:

$$F_2 \simeq (10^{-6})(10^{11}) \left(\frac{10^0}{10^2}\right) = 10^3 N \text{ ou } 10^2 kgf.$$

Aqui é bom ressaltar que, experimentalmente, nesse estágio freqüentemente tínhamos que usar alicate para injetar o fio, com avanços (ΔR) tipicamente de 1*mm*, fazendo para tanto forças que eram da ordem de nosso peso (50 – 100*kg f*).

Etapa 3: Finalmente, nessa etapa, o processo *pára*, $F_3 > F_2$ e $\frac{\Delta R}{R} \rightarrow 0$. Portanto: $\frac{F}{\Delta R/R} = \frac{F_3}{\Delta R/R} \rightarrow \infty.$

O que determina, efetivamente, a interrupção da injeção do fio na cavidade é que F_3 é tão grande que a injeção fica *instável*. Basicamente, três processos podem ocorrer:



Figura 3.2:

(i) Se o recuo "x" entre a ponta do alicate e a borda do fio for $\geq 3\zeta$ pode haver uma quebra de simetria do fio, formando o "U" mostrado na Figura 3.2.

Esquematicamente:

¹M. A. F. Gomes, comunicação particular





Forma de injeção ao longo de F é estável apenas para pequenas forças.

Aumentamos progressivamente a força. O sistema fica mais vulnerável às flutuações transversais. Direção ao longo de Fvai ficando instável, ou seja, o fio fica vulnerável às flutuações transversais. Quando $F \approx F_3$, o sistema "quebra a simetria".

Ou seja, para $F \ll F_3$, a *injeção* se dá em 1*d*; quando $F \approx F_3$, o sistema lembra que existe outra dimensão transversal.

(ii) Caso o recuo seja pequeno, $x \ge \zeta$, outra instabilidade mostrada esquematicamente na Figura 3.3 pode ocorrer.







(iii) Podemos regular o recuo "x" de forma até mesmo a obter $x < \zeta$. Em tal situação extrema, poderíamos ter deformações do tipo mostrada na figura ao lado.

O que todos esses processos que acabamos de enumerar tem em comum é que eles envolvem o deslocamento de planos atômicos deslizando uns sobre os outros; ou seja, envolvem cisalhamento (= shear). Fisicamente, vemos então que o *aumento de F* \Rightarrow *instabilidade envolvendo cisalhamento*. Desse modo a tensão de cisalhamento ("shear stress") tem que ser introduzida na descrição; portanto, o processo não é controlado apenas por Y = módulo (de Young) de elasticidade, mas também por C = módulo de cisalhamento.

Vamos usar uma aproximação de campo médio para transformar o sistema heterogêneo da Figura 3.1(a) em um sistema homogêneo bidimensional. Para tanto, suponha que "derretemos" o fio, de tal forma que ele agora ocupe homogeneamente a cavidade (Figura 3.4). Supondo que o volume do fio é conservado temos que a altura, ζ' , da camada de material ocupando homogeneamente a cavidade é dada por $\zeta' \pi R^2 = \pi \left(\frac{\zeta}{2}\right)^2 L$, onde L = comprimento de fio injetado. Ou seja,



 $\zeta' = \frac{\zeta^2 L}{4R^2}.$ (3.4)

Figura 3.4: Cavidade ocupada pela mesma quantidade de fio da Figura 3.1, mas agora distribuída homogeneamente. Os pontos P_1 e P_2 estão em equilíbrio hidrostático.

Podemos usar (3.4) e a expressão para a fração de empacotamento p, dada por (3.1), para reescrever a relação "stress-strain" (pressão-deformação) da seguinte forma:

$$\frac{\text{Força}}{\text{Área}} = \frac{F}{\zeta\zeta'} = Y\frac{\Delta R}{R},$$

onde agora a área $\zeta\zeta'$ é a mostrada hachurada na Figura 3.5 - esta é a nova área na qual *F* está distribuída; ou seja, após homogeneizar o sistema como indicado na Figura 3.4, nós o reduzimos a um problema unidimensional, estudando a força aplicada axialmente no prisma de comprimento 2R e seção transversal $\zeta\zeta'$.



Figura 3.5: Transformação do sistema bidimensional homogêneo mostrado na Figura 3.4 em um prisma de comprimento 2R e seção transversal $\zeta\zeta'$.

Assim:

$$\frac{F}{\zeta \frac{\zeta^2 L}{4R^2}} = Y \frac{\Delta R}{R} \quad \text{ou} \quad \frac{F}{\zeta^2 \frac{p \pi R^2}{4R^2}} = Y \frac{\Delta R}{R},$$

e, portanto,

$$p = \frac{4}{\pi} \frac{F}{Y\zeta^2 \frac{\Delta R}{R}}.$$
(3.5)

Esta relação mostra que enquanto mantivermos *Y*, ζ , $\frac{\Delta R}{R}$ constantes, a fração de empacotamento é proporcional a *F*, em particular, $p \xrightarrow{F \to 0} 0$ e $p \to p_{max}$ quando $\left(\frac{F}{\Delta R/R}\right)$ for máximo. Este último quociente será máximo na etapa 3, quando *F* é grande e $\frac{\Delta R}{R} \to 0$. Portanto:

$$p_{max} = \frac{4}{\pi} \frac{1}{Y\zeta^2} \left(\frac{F}{\Delta R/R}\right)_{max}.$$
(3.6)

A razão $\left(\frac{F}{\Delta R/R}\right)_{max}$ e " p_{max} "podem ser vistas como, respectivamente, uma razão crítica $\left(\frac{F}{\Delta R/R}\right)_{crit}$, onde ocorre a quebra de simetria explicada na etapa 3 e uma probabilidade ou fração de empacotamento crítica, quando a injeção de fio é sustada.

Para progredir, precisamos descrever essa quebra de simetria. Consideremos, então, a seguinte geometria:



Seja κ = constante de elasticidade para a flexão do fio de comprimento "*x*"e diâmetro " ζ ". Vamos associar a κ uma energia elástica

$$U_{el} = \frac{\kappa}{2}\theta^2,$$

onde θ = ângulo de deflexão relativo à direção de \mathcal{F} (i.e. $\theta = 0 \Rightarrow$ fio está paralelo à \mathcal{F} ; $\theta \neq 0$ para $\mathcal{F} >$ força crítica). Esquematicamente:

Figura 3.6:



Figura 3.7: Ilustração mostrando a deflexão relativa devida a aplicação da força \mathcal{F} : para $\theta = 0$ o fio está paralelo à \mathcal{F} ; quando $\theta \gtrsim 0$, $\mathcal{F} >$ força crítica e tem início a instabilidade que leva a defleção δ da carga em relação à direção de \mathcal{F}

A energia total relevante será:

$$\mathcal{U} = \mathcal{U}_{el} + \mathcal{U}_{def}$$
$$= \frac{\kappa \theta^2}{2} - \mathcal{F} x (1 - \cos \theta)$$

Estamos interessados em descrever o que acontece no início da instabilidade, i.e.

$$\theta \ll \frac{\pi}{2} \quad \Rightarrow \quad \mathcal{U} \simeq \frac{\kappa \theta^2}{2} - \mathcal{F}x \left(1 - \left[1 - \frac{\theta^2}{2} + \frac{\theta^4}{24} \right] \right),$$

ou
$$\mathcal{U} = \left(\frac{\kappa - \mathcal{F}x}{2} \right) \theta^2 + \frac{\mathcal{F}x \theta^4}{24}.$$
 (3.7)

O termo em θ^4 é sempre maior que zero para x > 0, mas o termo em θ^2 é positivo apenas para $\kappa > \mathcal{F}x$, ou \mathcal{F} pequena. Quando $\kappa < \mathcal{F}x$, o termo em θ^2 fica negativo e temos a quebra de simetria. Veja a Figura 3.8.



Figura 3.8: Em (a) o equilíbrio para injeção está ao longo de \mathcal{F} ($\theta = 0$); já em (b) o sistema fica sujeito a flutuações muito fortes e em (c) ocorre a quebra de simetria com o aparecimento de dois mínimos globais.

Minimizando (3.7), obtemos:

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial \theta} = 0 \Rightarrow (\kappa - \mathcal{F}x)\theta = \frac{-\mathcal{F}x\theta^3}{6}$$

$$\therefore \quad \theta \rightarrow \begin{cases} \theta_{eq} = 0 & \text{raiz trivial } (\kappa > \mathcal{F}x) \\ \theta_{eq} = \pm \sqrt{\frac{6(\mathcal{F}x - \kappa)}{\mathcal{F}x}} & \text{raiz não-trivial } (\kappa < \mathcal{F}x) \end{cases}$$
(3.8)

Ou seja: se $\mathcal{F}x < \kappa$ só temos a solução trivial $\theta_{eq} = 0$ e a injeção pode (com dificuldade) continuar. Para $\mathcal{F}x > \kappa$, a solução trivial $\theta_{eq} = 0$ fica instável e a solução (3.8), não trivial, aponta para outro regime em que $\theta_{eq} \neq 0$. Como a simetria original foi quebrada; as dobras mostradas nas Figuras 3.2 e 3.3 são formados e a injeção de arame na cavidade fica impossível. Tudo isso pode ser resumido no seguinte diagrama de bifurcação mostrado na Figura 3.9.



Figura 3.9: Parâmetro de ordem, θ_{eq} , con tra $\mathcal{F}x$, mostrando a perda de instabilidade do ramo $\theta = 0$ (linha tracejada) e também mostrando os dois novos regimes de instabilidade: $\theta_{eq} = \pm \sqrt{\frac{6(\mathcal{F}x-\kappa)}{\mathcal{F}x}} \neq 0.$

Portanto a força crítica \mathcal{F}_{crit} quando o sistema perde a estabilidade é dada por

$$\mathcal{F}_{crit}x = \kappa. \tag{3.9}$$

Examinando esta última equação, bem como (3.6) podemos fazer a seguinte identificação:

$$\mathcal{F}_{crit} \equiv \left(\frac{F}{\frac{\Delta R}{R}}\right)_{crit} \equiv \left(\frac{F}{\frac{\Delta R}{R}}\right)_{max}$$
(3.10)

$$\kappa \equiv \frac{\pi}{4} \zeta^2 C x. \tag{3.11}$$

Portanto: $\mathcal{F} = \frac{\kappa}{x} = \frac{\pi}{4}\zeta^2 C$, que substituindo em (3.6) dá:

$$p_{max} \approx \frac{C}{Y}.$$
 (3.12)

Apontamos na Tabela 3.1 a razão $\frac{C}{Y}$ para alguns materias:

Material	alumínio	bronze	cobre	ferro	aço	nylon
$\frac{C}{Y}$	0,37	0,37	0,38	0,39	0,39	0,39

Tabela 3.1:

Ou seja, $\frac{C}{Y} \simeq$ universal [42]. Com a equação 3.12 mostramos que: (*i*) o processo de empacotamento 2*d* de fios pode chegar a um máximo com p < 1; (*ii*) o processo seria controlado pela razão $\frac{C}{Y}$; e (*iii*) como corolário de (*ii*), p_{max} tenderia a ser universal ($\simeq 0, 3...$), independente do material.

Concluindo, vamos tecer um breve comentário sobre as identificações (3.10) e (3.11): $F \in \mathcal{F}$ tem dimensão de força. $\mathcal{F} \notin F$ reescalada pelo fator $\frac{\Delta R}{R}$. Não é apenas F que é importante no problema e sim, $\frac{F}{(\Delta R/R)}$. F isoladamente não é uma força muito grande. O que é interessante é o fato de F_{max} produzir uma deformação relativa ($\Delta R/R$) $\rightarrow 0$. Portanto, o parâmetro relevante na transição de travamento é $\frac{F}{\frac{\Delta R}{R}}$. Quanto à identificação $\kappa = \frac{\pi}{4}\zeta^2 Cx$, note que isso é fisicamente razoável, pois κ envolve torção e assim tem de estar ligada a cisalhamento (i.e. $\sim C$). Por outro lado, C age em uma área $\approx \zeta^2$, daí $\zeta^2 C$ para expressar a força de cisalhamento. Quanto à distância x, note que a dimensão de κ é energia, ou seja, precisamos multiplicar força ($\zeta^2 C$) por comprimento (no caso *x*).

Capítulo 4

Transições geométricas em estruturas heterogêneas de fios amassados sob stress axial

Desde que Galileu Galilei publicou, em 1638, *Discorsi e dimostrazioni matematiche intorno a due nuove science*, a mecânica é a subárea da Física que lida com os efeitos das forças aplicadas sobre os objetos, quer estes sejam deformáveis ou não. As primeiras leis da mecânica são as três leis do movimento, devidas à Isaac Newton (1687), e a lei da elasticidade de materiais sólidos (F = -kx), introduzida por Robert Hooke em 1660.

Existem três formas de provocar deformações que são importantes no estudo das propriedades mecânicas, quais sejam: compressão, cisalhamento e tração [43,44]. Em particular, estudos de deformações plásticas resultantes de compressão envolvendo sistemas físicos como os exemplificados por folhas amassadas sujeitas a ação de uma força externa tem sido investigada [45, 46]. No presente Capítulo nos limitaremos a esse tipo de deformação, pois pretendemos investigar o comportamento das estruturas de fios empacotadas sujeitas a aplicação de uma força axial.

Os resultados reportados neste Capítulo referem-se a análise dos dados obtidos em

colaboração com o professor Valdemiro Brito, da Universidade Federal do Piauí, responsável pela realização experimental que passaremos a detalhar nas próximas seções.

4.1 DETALHE EXPERIMENTAL E PROCEDIMENTO DE MEDIDA

No Capítulo 2 reportamos os resultados do experimento original para processos de empacotamento de fios em duas dimensões. Naquela ocasião, o material utilizado foi fio de cobre com 1*mm* de diâmetro. Agora, avançamos no estudo desses processos, a partir da diversificação do material utilizado, representado por fio de solda (liga composta por 60% de estanho e 40% de chumbo) com $\zeta = 1,5mm$ de espessura. Nosso intuito é comparar os resultados obtidos no processo de empacotamento de materiais metálicos, bem como estender as análises elaboradas naquele momento.

O aparato experimental utilizado para obter as configurações amassadas com os fios de solda difere ligeiramente daquele descrito no Capítulo 2, quando tratamos do empacotamento de fios de cobre, e por isto faremos uma breve descrição do mesmo. Além disso, foi adotado um procedimento adicional que permite o reamassamento das estruturas empacotadas. Este novo experimento acontece basicamente em duas etapas: a primeira, em que se realiza o empacotamento dos fios; enquanto a segunda consiste no amassamento dos arranjos obtidos na fase anterior. A seguir, então, apresentamos a descrição dos detalhes deste empacotamento e amassamento de fios de solda.

Os canais de injeção de fios ficam assim localizados a 180° , identificando o diâmetro principal da cavidade. Pedaços de fios de solda são dispostos inicialmente esticados, com metade do comprimento ficando disponível para ser injetado pelo canal esquerdo e o restante pelo direito. O processo de injeção ocorre simultaneamente pelos dois canais de forma manual, à velocidade constante, com a força manual aplicada necessária para forçar a acomodação do fio na cavidade, até não ser mais possível continuar a injeção, quando os arranjos apresentam uma estrutura "travada". Nessa altura, o comprimento *L* de fio acomodado dentro da cavidade é registrado. Vencida a etapa Para o processo de empacotamento, uma cavidade circular é preparada com diâmetro, $\phi = 15,0cm$ e a altura ζ de aproximadamente 1,6mm, com paredes reais de contorno da célula compostas a partir da junção de duas placas em forma de cavidade semicircular de raio 7,5cm cada uma, cuja função é manter o fio injetado confinado, conforme ilustra a Figura 4.1, em uma perspectiva do plano superior.



Figura 4.1: Ilustração esquemática da parte superior da célula usada para empacotar fios de solda.

do empacotamento, a estrutura formada é transposta para um *scanner* e uma imagem digitalizada da mesma é gerada. O processo é repetido e obtêm-se assim um conjunto com seis arranjos de fios empacotados, os quais são apresentados na Figura 4.2.

Ao compararmos os arranjos mostrados na figura anterior com os arranjos obtidos no empacotamento de fios de cobre, conforme Figura 2.7, podemos notar diferenças globais sutis entre ambos. É possível observar, por exemplo, que os arranjos de fio de solda não apresentam uma hierarquia de laços tão acentuada quanto as estruturas de fio de cobre; além disso, nos arranjos com fio de solda, alças de tamanhos menores com áreas aproximadamente iguais são mais freqüentes, as quais aparecem regularmente distribuídas em certa disposição que, macroscopicamente, lembram colunas.

Na etapa seguinte, cada um dos arranjos mostrados anteriormente, são transportados para outro aparato, no formato de uma caixa composta por duas placas quadradas de vidro (espessura 12*mm*), com lado a = 30cm, separadas por lâminas espassadoras com aproximadamente $\zeta = 1, 6mm$ colocadas nas extremidades laterais das placas de vidro, enquanto na base da caixa foi colocado uma lâmina metálica rígida (espessura $\simeq 1, 6mm$) para suportar a carga transferida pela lâmina compressora, formada por um



Figura 4.2: Arranjos típicos obtidos no empacotamento de fio de solda em 2*D* com comprimento *L*(*cm*) igual a 369,50 [a], 352,30 [b], 325,60 [c], 461,10 [d], 318,10 [e] e 390,70 [f].

êmbulo móvel, de igual espessura, capaz de aplicar uma força constante (ou carga) ao arranjo empacotado, com altura inicial $\phi = 15cm$. O conjunto todo foi fixado em uma base de madeira, com parafusos de ajuste, como pode ser visto na Figura 4.3.

Essa nova célula é mantida em posição vertical fixa, e uma força F constante, é então aplicada à estrutura. Tomou-se o cuidado de sempre dispor o arranjo de modo que inicialmente a ação da força F incidisse paralelamente ao longo do eixo unindo os dois canais de injeção da cavidade. Como o lado a da caixa é bem maior que o diâmetro ϕ dos arranjos, o que simula laterais de contorno abertas, e dá certa mobilidade ao arranjo, a aplicação da força que comprime a estrutura ocasiona o espalhamento da mesma transversalmente à direção da carga, produzindo a deformação dos arranjos. As forças aplicadas externamente foram aumentadas o suficiente para provocar defor-



Figura 4.3: Aparato usado para reempacotar fios de solda.

mações verticais controladas, sem contudo, ter seus valores numericamente ajustados; no entanto, tais forças ficam no intervalo $0 \le F(Newtons) \le 590$.

Duas variáveis quantitativas podem ser obtidas nesse processo: a altura do arranjo ao longo da vertical, y, e o conseqüente alongamento horizontal, x, como mostra a Figura 4.4.



Figura 4.4: Arranjos antes e após a aplicação da força F necessária para compactar a estrutura amassada. As quantidades R, $y \in x$ que aparecem na figura são o raio da cavidade e as dimensões vertical e horizontal, respectivamente.

Quando não há força aplicada, ou seja F = 0, nenhuma deformação aconteceu ainda e assim, $y = x = \phi \approx 15 cm$. Por outro modo, à medida que *F* aumenta a estrutura se reorganiza, com a atuação da carga compactando o arranjo, que se espalha em torno de um eixo perpendicular ao da carga (i.e., *x* aumenta e *y* diminui). O aumento da força externa é interrompido quando nenhuma alteração na altura, *y*, é mais observada. Este estado final de amassamento para as estruturas mostradas na Figura 4.2 pode ser averiguado na Figura 4.5, onde a correspondência dos arranjos individuais é direta aos arranjos da Figura 4.2. Observa-se que no estágio final a reorganização interna antes citada pode ser tal que chega a ocasionar uma rotação de 90° (Figura 4.5(d)), por exemplo.



Figura 4.5: Respectivos arranjos de fios de solda da Figura 4.2 após sofrerem processo de reempacotamento.

4.2 **Resultados**

4.2.1 Propriedades plásticas em deformações axiais

Nesta seção passamos a detalhar a resposta plástica das configurações de fios sujeitas à aplicação de uma carga representada pela força F.

Ao discutirmos acerca dos efeitos da aplicação de uma força em um material sólido, conceitos como *stress* e *strain* são importantes para uma abordagem mais profunda. A aplicação de uma força mecânica, ou *stress*, acarreta uma deformação ou *strain*. Convém lembrarmos que alguns fatores envolvidos na aplicação de forças influenciam as respostas dos corpos às cargas. Esses fatores podem ser descritos como sendo a magnitude, localização, direção, freqüência, duração, variabilidade e ritmo da aplicação de força. Dessas grandezas, apenas a magnitude da força irá variar controladamente em nosso estudo, estando as demais fixas.

No nosso experimento a resposta plástica foi medida quando a força era aplicada ao longo do eixo paralelo ao de injeção do fio, aqui definido como *eixo y*, passando pelo centro da cavidade, em uma configuração de fio amassado colocada entre duas placas paralelas, conforme ilustra a Figura 4.4. Definimos então as quantidades $\delta_x = \frac{x-2R}{2R}$, como a deformação perpendicular ao eixo da força, e $\delta_y = \frac{2R-y}{2R} \equiv \delta$, como a deformação paralela ao eixo de compressão. Portanto, x = y = 2R corresponde a força externa nula, F = 0.

Durante o processo em que que a força externa F atua, duas quantidades foram medidas:

- a compressão linear macroscópica, $\delta_y \equiv \delta$, ao longo do eixo y,
- e o diâmetro equatorial médio, *x*.

A deformação equatorial x é estudada como uma função da deformação δ , cuja variabilidade considerada foi $0, 0 \le \delta \le 0, 7$, com intervalos de deformação tomados a cada $\Delta \delta = 0,033$.

A resposta experimental obtida, devido a esse reempacotamento, é mostrada na Figura 4.6 em termos do diâmetro equatorial *x* como uma função de $(1 - \delta)$, para as seis configurações sobre as quais foram realizados os experimentos, onde cada curva corresponde ao reempacotamento de cada arranjo mostrado nas Figuras 4.2 e 4.5, respectivamente.



Figura 4.6: Gráficos log-log do diâmetro equatorial x em função de $1 - \delta$, referentes às configurações de fios de solda achatadas. O detalhe mostra a curva cujo comportamento mais destoa das demais (único caso em que o arranjo sofreu uma transição descontínua em x [para $\delta \simeq 0, 6$]), correspondente ao arranjo mostrado na Figura 4.5(c).

Dessa última figura, vemos que a maior variabilidade em *x* ocorre em $(1 - \delta) = 0,433$, ou seja, quando a deformação é da ordem de 56%, dada pelas curvas representadas pelos símbolos \blacklozenge e \blacktriangleleft , cuja diferença é igual a $\Delta x = 4,8cm$, correspondendo a um valor relativo de $(\frac{\Delta x}{\bar{x}}) = 0,25$. Contudo, como destacado no detalhe no canto di-

reito da figura 4.6, a curva denotada por \triangleleft apresenta um comportamento diferente das demais, com um espalhamento equatorial bem inferior às outras no domínio $\delta < 0,567$ (veja Figura 4.5(c)) e uma descontinuidade quando $(1 - \delta) = 0,433$. Além disso, com excessão da referida curva as demais apresentam um decaimento próximo a uma lei de potência, como veremos a seguir. Dada estas observações, optamos por excluí-la do conjunto de dados no levantamento da relação de escala entre as duas grandezas em questão.

Na Figura 4.7 mostramos um gráfico log – log no qual reapresentamos o conjunto relativo ao achatamento dos arranjos empacotados (a), a menos da citada curva e mostramos estas curvas em separado ((b)-(f)), assinalando o intervalo (linha sólida) em que obtivemos o expoente para o comportamento em lei de potência na forma $x \sim (1-\delta)^{-\xi}$, com ξ igual a 0,6 (b); 0,3 (c); 0,4 (d); 0,5 (e) e 0,5 (f), respectivamente. O expoente médio, $\overline{\xi}$, é obtido como a média aritmética dos expoentes individuais e as barras de erro como a média da diferença entre o maior e menor expoente, ou seja, $\Delta \xi = \frac{\xi_2 - \xi_2}{2}$. Deste modo, podemos escrever que $x \sim (1 - \delta)^{-\xi}$, com $\xi \equiv \overline{\xi} \pm \Delta \xi = 0, 50 \pm 0, 15$.

Para relacionarmos o expoente ξ ao expoente de dimensão fractal *D* faremos uso de um argumento de glóbulos [47]. Nós assumimos que as configurações reempacotadas comportam-se como uma coleção de glóbulos fractais de diâmetro *y*, e com massa $m \sim y^D$, onde *m* é a massa média dentro dos glóbulos [34]. Um glóbulo pode ser pensado como um subconjunto qualquer do arranjo reamassado circunscrito num círculo imaginário. Para o especificarmos, vamos considerar uma configuração achatada, com diâmetro equatorial *x* medido perpendicularmente ao eixo da carga e altura *y* (*y* < *x*) medida ao longo do eixo de carga, na qual teremos que os glóbulos de maior tamanho serão de diâmetro *y*. Para nossa aquisição tomamos basicamente subconjuntos como o ilustrado na Figura 4.8.

Seguindo nossa argumentação, temos que a massa média total M escala com a massa encontrada dentro dos glóbulos na forma $M \simeq nm$, onde n dá o número de discos de diâmetro y cobrindo a configuração achatada, ou seja, $n = \frac{x}{y}$. Assim, $M \sim xy^{D-1}$,



Figura 4.7: Reamostragem dos resultados da figura 4.6 para os diâmetros equatoriais em função de $(1 - \delta)$, com a retirada de uma das curvas (veja texto para detalhe); o ajuste em forma de lei de escala como $x \sim (1 - \delta)^{-\xi}$, onde ξ associado à linha sólida é 0,6 (b), 0,3 (c) 0,4 (d), 0,5 (e) e 0,5 (f).

ou ainda

$$x \sim M y^{1-D} \sim (2R)^D y^{1-D}.$$
 (4.1)

Do argumento experimental temos que

$$x = 2R(1-\delta)^{-\xi},\tag{4.2}$$

onde $\delta = \frac{2R-y}{2R} = 1 - \frac{y}{2R}$ é a deformação devido a ação da força *F*. Ou ainda $1 - \delta = \frac{y}{2R}$.



Figura 4.8: Ilustração para o argumento dos glóbulos; n é o número de glóbulos de diâmetro y necessários para cobrir a estrutura de diâmetro equatorial x.

Substituindo esta última expressão na eq. (4.2) e comparando com a eq. (4.1), com M e R fixos, encontramos

$$\xi = D - 1. \tag{4.3}$$

Configurações de fios amassados lembram conformações de polímeros, tanto por terem efetivamente a mesma dimensão topológica ($d_T = 1$, a dimensão da linha), quanto pela existência de fortes interações de auto-exclusão. Nós poderíamos pensar que o expoente ξ seria explicado qualitativamente com o uso de um modelo de campo médio tipo Flory para uma cadeia polimérica auto-excludente sem ramificações, ou uma caminhada aleatória auto-excludente (*SARW*, do inglês *self-avoiding random walk*) embebida em um espaço bidimensional, d = 2 [38]. Uma aplicação das idéias de Flory para um polímero ou *SARW* em duas dimensões indica para tais estruturas uma dimensão fractal D = 4/3. Portanto, aproximando as configurações reempacotadas de fios (como aquela da Figura 4.8) por um *SARW* em d = 2, poderíamos esperar que $\xi = D - 1 = 1/3$.

Na Figura 4.9 mostramos a resposta plástica média, *x*, contra $(1 - \delta)$ obtida experimentalmente (**I**) juntamente com o ajuste para a equação $x = 2R(1 - \delta)^{-\xi}$, com $\xi = 1/3$ (**•**). A linha sólida representa o ajuste para os dados experimentais no intervalo $0, 4 \le (1 - \delta) \le 0, 9$, i.e, em aproximadamente meia década de escala. O expoente


Figura 4.9: A resposta plástica experimental *x* contra $(1 - \delta)$, concorda com a prevista com o uso do modelo *SARW*: $x \sim (1 - \delta)^{-\xi}$, com $\xi = D - 1 = 1/3$. A linha sólida aponta $\xi = 0,35 \pm 0,05$. Aqui a flutuação em torno da média foi obtida como $\Delta x = \sum_{i=1}^{n=5} \frac{|x_i - \bar{x}|}{n}$.

obtido pelo ajuste em lei de potência é $\xi = 0,35 \pm 0,05$. De fato, este último valor coincide, dentro das incertezas estatísticas, com a previsão baseada no modelo *SARW*.

4.2.2 Estudo da razão de Poisson

Uma quantidade muito importante para a compreensão do comportamento mecânico dos materiais quando estes são submetidos a cargas dinâmicas é a razão de Poisson [43,44]. Esta razão mostra a tendência de um material sólido manter seu volume total quando é deformado e é definida como

$$\eta \equiv \frac{\delta_x}{\delta},\tag{4.4}$$

onde δ_x é a deformação ao longo do eixo perpendicular à ação da carga, e δ é a deformação ao longo do eixo de aplicação da carga.

Das definições anteriores $\delta_x = \frac{x-2R}{2R}$ e $\delta = \frac{2R-y}{2R}$, com *x* especificado pela eq. (4.2), reescrevemos η em termos do parâmetro δ e do expoente ξ na forma

$$\eta = \frac{(1-\delta)^{-\xi} - 1}{\delta}.$$
(4.5)

Expandindo o numerador em série de Taylor para $\delta \ll 1$ obtemos, finalmente

$$\xi = D - 1 = \lim_{\delta \to 0} \eta, \tag{4.6}$$

ou seja, encontramos que o limite $\delta \to 0$ da razão de Poisson nada mais é do que o expoente crítico ξ que aparece na lei de potência de *x* versus $(1 - \delta)$.

Na Figura 4.10 mostramos o gráfico da razão de Poisson η contra a deformação δ . De acordo com a eq. (4.6), neste gráfico, quando $\delta \rightarrow 0$ devemos comprovar o valor de ξ obtido experimentalmente. Notamos na figura que para $\delta \approx 0,03$ temos aproximadamente $\eta = 0,5 \pm 0,3$, valor que dentro das flutuações estatísticas se aproxima do obtido pela lei de potência da Figura 4.9. Mostramos também na mesma figura o ajuste para a eq. (4.5), com o expoente $\xi = 1/3$ corresponde ao expoente esperado para *SARW* de acordo com a conjectura discutida na seção 4.2.1. Observamos que os dados experimentais concordam com os dados fornecidos pela eq. (4.5), quando utilizamos o expoente $\xi = 1/3$ previsto para *SARW*, reafirmando assim que fios reempacotados parecem assimilar o comportamento devido as interações de auto-exclusão observados em polímeros embebidos em 2*D*.



Figura 4.10: Razão de Poisson η contra a deformação vertical δ , para os dados experimentais (**■**), juntamente com o ajuste da eq. (4.5) com $\xi = 1/3$ (\circ). Veja texto para detalhes.

4.2.3 DIMENSÃO FRACTAL

Na seção anterior, mostramos que o uso do argumento de glóbulos nas deformações plásticas por que passam as estruturas de fios reempacotados, indica que as fortes interações de auto-exclusão regulam a conformação dos arranjos bidimensionais, aparentemente de forma similar ao observado para *SARW*. O uso da dimensão fractal para este último, $D_{SARW} = 4/3$, na eq. (4.3) resulta na concordância de uma argumentação teórica com o valor experimental obtido para o expoente de escala ξ . Contudo, não sabemos se de fato a dimensão fractal das configurações de fios de solda é a mesma (ou próxima) da dimensão para *SARW* em 2*D*. Objetivamos agora verificar qual é esta dimensão fractal para as configurações de fios de solda e compará-la com o resultado anterior. Uma vez encontrada esta dimensão podemos ainda verificar sua consistência ou não com a dimensão fractal obtida anteriormente para fios de cobre, conforme descrito no Capítulo 2. Para cumprir ambas as metas, executaremos tanto o estudo da dimensão para os arranjos empacotados quanto para os reempacotados. Similar ao procedimento para o caso dos fios de cobre, para classificar quantitativamente as estruturas obtidas nas Figuras 4.2 e 4.5, aplicamos dois métodos de análise fractal: o de massa reentrante e o de contagem por caixas. Lembramos que o primeiro consiste em cobrir a estrutura com círculos concêntricos de raio R, medindo-se sucessivamente a massa M dentro dos mesmos, o que para uma estrutura com característica fractal leva a uma relação de escala tipo lei de potência na forma $M \sim R^{D_M}$, sendo D_M a dimensão fractal de massa. Já o segundo consiste em cobrir a estrutrura com uma grade de quadrados de lado ϵ sucessivamente menores, com ϵ na primeira iteração sendo o tamanho do objeto em estudo, e encontrar o número de caixas de lado ϵ , $N(\epsilon)$, que incluem partes do objeto. A dimensão fractal de caixas, dada por D_B , advém da relação de escala $N(\epsilon) \sim \epsilon^{-D_B}$.

A distribuição de massa para as configurações circulares é mostrada no gráfico da Figura 4.11. Nele o símbolo \blacksquare representa a massa de arame dentro de círculos concêntricos com origem no centro geométrico da cavidade. A escolha de uma única origem para as caixas circulares pode acarretar um peso maior à região central, como se percebe pelo rápido crescimento de *M* para *R* pequeno (*R* < 1*cm*) em alguns dos arranjos. Para corrigir tal distorção, procedemos substituindo a massa desse intervalo por uma massa média em cinco discos com centros tomados ao acaso sobre a estrutura. O resultado dessa nova amostragem para a distribuição de massa está denotado por \bullet .

Na Figura 4.12 as seis médias com a correção anterior foram agrupadas em um único gráfico. Destes resultados depreendemos que a distribuição de massa satisfaz a relação de escala para massa reentrante citada no segundo parágrafo desta seção.



Figura 4.11: Dependência de massa-tamanho para fio de solda empacotado, referente aos arranjos da figura 4.2: resultados para círculos centrados na origem (\blacksquare); resultados com correção para R < 1cm (\bullet). Veja texto para detalhes.

O ajuste em lei de potência no intervalo 0, 16 < R(cm) < 4, 0, representado pela linha sólida, fornece $D_M = 1,9 \pm 0,1$. Observamos que este resultado é igual ao encontrado para o empacotamento de fios de cobre [36], sugerindo que a dimensão D_M deve ser constante para materiais metálicos diversos injetados em células de diferentes tamanhos.

No caso das configurações achatadas, para calcular o expoente de massa, nos atemos a glóbulos (*blobs*) selecionados dentro de cada uma destas configurações [34], conforme ilustrado na Seção 4.2.1, Figura 4.8. A idéia é que esses glóbulos circula-



Figura 4.12: Distribuição massa-tamanho para seis configurações de fios de solda empacotados. A massa média na região de escala, 0, 16 < R(cm) < 4, 0, comporta-se como $M \sim R^{D_M}$, com $D_M = 1, 9 \pm 0, 1$ dado pela linha sólida.

res mantenham, estatisticamente, a mesma forma (e a mesma dimensão fractal) que as configurações originais de fios amassados antes da deformação plástica, como é confirmado pelo gráfico na Figura 4.13, no qual mostramos o resultado conjunto das seis configurações achatadas. A linha sólida nessa figura mostra que $M \sim R^{D_M^{reem}}$, com $D_M^{reem} = 1,9 \pm 0,1$, i.e., o mesmo expoente de massa para as configurações anteriores ao achatamento.

Tanto as configurações circulares quanto as achatadas foram ainda analisadas pelo citado método de contagem por caixas. O resultado desta investigação é mostrado nos gráficos log – log das Figuras 4.14(a) e 4.14(b), para os arranjos empacotados e reempacotados, respectivamente.



Figura 4.13: Distribuição massa-tamanho dentro de glóbulos para configurações de fios de solda reempacotadas mostram mesmo comportamento em lei de escala que antes desta ação, com expoente $D_M^{emp} = D_M^{reemp} = 1,9 \pm 0,1$ (linha sólida).

Nestes gráficos cada curva representa o comportamento individual dos arranjos em termos de lei de potência na forma $N(\epsilon) \sim \epsilon^{-D_B}$. O expoente médio D_B obtido pelo ajuste linear em mais de uma década, no mesmo intervalo $0, 2 < \epsilon(cm) < 4, 0$, e representado pela linha sólida é $D \equiv D_B = 1,75 \pm 0,05$ tanto para os arranjos com simetria circular quanto para os arranjos achatados.

Temos, assim, dois métodos para medir *D* e compará-la antes e depois da deformação plástica. O fato de *D* ser a mesma para os dois casos, dentro das flutuações observadas, mostra que o processo mecânico de achatamento, apesar de violento, não consegue modificá-la. A princípio, a topologia tende sempre a ser invariante na maioria dos processos físicos; excessões são processos violentos em que o próprio sistema



Figura 4.14: (a) Gráfico do número de caixas $N(\epsilon)$ de tamanho ϵ necessárias para cobrir cada uma das configurações de fio de solda empacotados em 2D. O expoente de escala devido a relação $N(\epsilon) \sim \epsilon^{-D_B} \operatorname{com} D_B \to D_B^{emp}$ obtido no intervalo $0, 2 < \epsilon(cm) < 16, 0$ e apontado pela linha sólida vale $D_B^{emp} = 1, 75 \pm 0, 05$. (b) Contagem por caixas para configurações reempacotadas. O mesmo comportamento como lei de escala na forma $N(\epsilon) \sim \epsilon^{-D_B}$ é encontrado, com $D_B \to D_B^{reem}$ no intervalo de 0, $2 \le \epsilon(cm) \le 4, 0$, no qual o ajuste médio representado pela linha sólida fornece $D^B_{reem} = 1, 75 \pm 0, 05$. muda a sua natureza, como em processos de espalhamento em altíssimas energias e em processos de fragmentação. No caso das configurações de fios amassados a topologia é a topologia do fio a qual permanece invariante antes e após o reempacotamento. Contudo, a dimensão fractal muda freqüentemente em processos físicos, pois D não é um conceito topológico. No nosso caso, além da topologia, a dimensão fractal é também invariante. Isto é tanto mais interessante quanto pelo fato das deformações axiais serem altíssimas, da ordem de 20%-70%. Normalmente, na engenharia, quando se trabalha com metais e ligas, deformações de 0,5% já são plásticas. Nós, contudo, estamos trabalhando com deformações da ordem de 100 vezes estas últimas; e mesmo assim D permanece constante.

Uma vez que *D* está determinado para as configurações de fios de solda, vamos voltar a nossa conjectura da Seção 4.2.1. De acordo com o apresentado lá, o expoente ξ , que regula o processo de deformação plástica é relacionado com o expoente de dimensão fractal *D*, de acordo com a eq. (4.3), i.e., $\xi = D - 1$. Se substituirmos *D* para as configurações achatadas nesta equação temos que $\xi = 0, 8 \pm 0, 1$ o que difere daquele expoente obtido do ajuste experimental mostrado na Figura 4.9 e que representa $x \sim (1 - \delta)^{-\xi} \operatorname{com} \xi = 0, 35 \pm 0, 05$.

4.2.4 CORRIGINDO O MODELO DE GLÓBULOS

Como indicado pelas áreas hachuradas da Figura 4.15, uma parte substancial da massa total do arame reempacotado localiza-se fora do domínio dos glóbulos.

Para corrigir o modelo dos glóbulos devido a esse fenômeno vamos assumir que a massa total do sistema *M* será agora dada por

$$M = n^{1+\epsilon}m,\tag{4.7}$$

onde n = número de glóbulos $\equiv \frac{x}{y}$, $\epsilon > 0$, e $m \sim y^{D}$ é a massa média em um único glóbulo. Neste caso temos $M \sim x^{1+\epsilon}y^{D-1-\epsilon}$ o que implica que



Figura 4.15: Destaque para regiões (área hachurada) não cobertas pelos discos disjuntos e que influenciam na previsão do expoentes teórico ξ .

$$x \sim M^{\frac{1}{1+\epsilon}} y^{\frac{(1+\epsilon-D)}{(1+\epsilon)}}$$

$$\sim (2R)^{\frac{D}{(1+\epsilon)}} y^{\frac{(1+\epsilon-D)}{(1+\epsilon)}}.$$
(4.8)

Como $x = 2R(1 - \delta)^{-\xi}$, e como $y \equiv 2R(1 - \delta)$, encontramos após utilização desses resultados em (4.9):

$$2R(1-\delta)^{-\xi} \quad \leftrightarrow \quad (2R)^{\frac{D}{(1+\epsilon)}} [2R(1-\delta)]^{\frac{(1+\epsilon-D)}{(1+\epsilon)}}, \tag{4.9}$$

$$(1-\delta)^{-\xi} \leftrightarrow (1-\delta)^{\frac{(1+\epsilon-D)}{(1+\epsilon)}},$$
 (4.10)

ou seja, $\xi = \frac{(D-1-\epsilon)}{(1+\epsilon)}$. Dessa forma, para obtermos o expoente experimental $\xi = 0, 35 \pm 0, 05$, com estrutura de fios de dimensão $D = 1, 8 \pm 0, 1$, necessitamos de $\epsilon = 0, 33 \pm 0, 12$. Esta correção ϵ aparecendo em (4.7) pode, de fato, ser estimada a partir de argumentos puramente geométricos associdos à Figura 4.8, ao assumirmos que o arame se distribui uniformemente em *n* glóbulos de diâmetro *y* e 2(*n*-1) triângulos circulares, onde $n \approx 4$ (valor este correspondente à condição das maiores deformações).

Como a estrutura da Figura 4.8 é aproximadamente bidimensional e assumindo que ela ocupa uniformemente a área da "panqueca", dado que a massa deve ser conservada durante todo o processo de achatamento, devemos ter M = nm, sendo $n = \frac{x}{y}$ e *m* o

número de glóbulos recobrindo a estrutura e a massa dentro de um glóbulo, respectivamente. Contudo, esta relação não é completamente satisfeita, visto que parte da massa M não é contemplada pelos n glóbulos, já que os mesmos são disjuntos. Deste modo M não deve ser linear com n, mas sim com a correção apresentada na equação (4.7). Como uma conseqüência de considerarmos a massa M distribuída de modo uniforme, ela pode ser imediatamente identificada com a área da panqueca, i.e., $M \equiv A$. A área da "panqueca"equivale a soma da área de um retângulo de base (x - y) e altura y, com a área de dois semicírculos de raio y/2. Segue então

$$\frac{\pi y^2}{4} + (x - y)y = n^{1 + \epsilon} \frac{\pi y^2}{4}$$

Resolvendo para ϵ encontramos

$$\epsilon = \frac{\log\left(1 + \frac{4}{\pi}\left(\frac{x}{y} - 1\right)\right)}{\log n} - 1.$$
(4.11)

A razão x/y nada mais é do que o próprio números de glóbulos recobrindo a "panqueca", ou seja x/y = 4. Usando este valor numérico na última equação encontramos $\epsilon = 0, 14$. Este valor apesar de não ser idêntico ao valor previsto ($\epsilon = 0, 33 \pm 0, 12$) pelo uso dos expoentes experimentais $D \in \xi$ na equação $\xi = \frac{(D-1-\epsilon)}{(1+\epsilon)}$, pode ser considerado, dentro das flutuações observadas, como uma válida primeira aproximação.

Capítulo 5

Propriedades conformacionais de estruturas heterogêneas de um fio amassado em cavidade bidimensional com obstáculos

Um questionamento passível de ser levantado é se os arranjos obtidos pela injeção de fio em uma cavidade bidimensional sofreriam alterações configuracionais qualitativas, ou mesmo estatísticas, na presença de obstáculos.

Para tal fim, introduzimos na célula bidimensional de 15*cm* de diâmetro (já mostrada no Capítulo 4) obstáculos na forma de pinos, os quais têm o mesmo diâmetro $\zeta \simeq 1,5mm$ do fio de solda utilizado. Os obstáculos são dispostos dentro do cavidade, em distribuições de posição simétricas, conforme mostraremos a seguir. Esses obstáculos mudam a topologia do espaço e tendem, naturalmente, a dificultar o empacotamento dos fios.

5.1 PADRÕES DE FIOS EM CAVIDADES COM OBSTÁCULOS

Para observarmos os efeitos na acomodação do fio dentro da cavidade, utilizamos células com n = 1, 2, 4, 9, 25, 63, 80, 109 e 160 obstáculos [48]. Nas Figuras 5.1 a 5.7 mostramos configurações (seis réplicas para cada número de pinos) para todos esses casos, com excessão dos arranjos para n = 63 e 109 (as quais apresentam igual fração de ocupação $p \equiv \frac{\zeta L}{\pi R_0^2}$ que os arranjos com 80 e 160 pinos, respectivamente). As imagens referentes a n = 4 e 9 pinos foram rotacionadas para melhor adequação ao *layout* da página.





(b)

(c)



Figura 5.1: Arranjos de fios de solda empacotados com 1 obstáculo colocado no centro geométrico da célula.



(a)

(b)





Figura 5.2: Arranjos de fios de solda empacotados com 2 pinos, com condição de contorno inicial para o fio cruzando os dois obstáculos (veja Figura 5.8 (b)).

Algumas observações qualitativas podem ser depreendidas dos arranjos com obstáculos. Inicialmente, notamos que mesmo a presença de um único obstáculo na cavidade, n = 1, já induz modificações sutis em relação a ausência do mesmo, como pode ser visto ao compararmos os arranjos da Figura 5.1 com os da Figura 4.2. Pode-se notar, por exemplo, a presença ainda menor de alças grandes, e o conseqüente aparecimento de mais alças de tamanhos menores, freqüentemente formando empilhamentos. Já para n = 2 (Figura 5.2) a condição de contorno inicial apresentada na Figura 5.8 (b), com o fio passando por entre os dois obstáculos, ocasiona a formação de estruturas mais distintas das anteriores; há uma aparente ocupação da cavidade influenciada pela



Figura 5.3: Arranjos de fios de solda empacotados com 4 obstáculos (veja Figura 5.8 (c) para situar a posição dos obstáculos).



Figura 5.4: Arranjos de fios de solda empacotados com 9 obstáculos (veja Figura 5.8 (d) para visualizar a posição dos obstáculos).



Figura 5.5: Arranjos de fios de solda empacotados com 25 pinos.



Figura 5.6: Arranjos de fios de solda empacotados com 80 pinos.



Figura 5.7: Arranjos de fios de solda empacotados com 160 pinos.

posição dos dois obstáculos, com os arranjos divididos em dois hemisférios da cavidade. Nas Figuras 5.2(a) e (f) podemos notar uma simetria de inversão incipiente, refletindo provavelmente a condição inicial de injeção do fio, a qual também exibe essa simetria.

Com o aumento no número de pinos para n = 4 e 9, o que se observa é uma mudança radical na distribuição das alças dentro da cavidade: antes distribuídas por toda a cavidade e agora empilhadas ao longo do canal definido pelos pinos centrais. Com 4 pinos as alças ainda apresentam uma tentativa de escape ao canal central, com algumas poucas soltando-se da coluna principal, enquanto para 9 pinos as alças ficam muito mais restritas a um único canal, sendo raras as alças de tamanhos maiores.

Para n = 25 a fração de ocupação da cavidade cai sensivelmente, com o fio ocu-

pando todos os quadrantes da célula de forma muito heterogênea. Neste caso, a fase de empilhamento de alças (muito evidente nos casos n = 4 e n = 9) é suprimida e podemos notar a formação de grandes áreas sem o padrão das alças. Vale observar ainda que a mudança na condição de contorno inicial, representada pelo acréscimo de dezesseis pinos, em particular os oito localizados ao longo do canal de injeção, afeta dramaticamente a formação das estruturas, as quais saem da fase de empilhamento para uma fase completamente distinta.

Para n = 80 e 160 temos configurações com forte anisotropia, uma vez que as poucas alças geradas concentram-se nas regiões próximas aos canais de injeção.

A disposição dos pinos para os arranjos com n = 1, 2, 4 e 9 obstáculos, que não fica clara nas Figuras 5.1 a 5.4, pode ser visualizada na Figura 5.8, que traz imagens representativas para cada um dos quatro diferentes números de pinos citados, com a posição dos mesmos apontada por asteriscos (*).



Figura 5.8: Ilustração da disposição dos obtásculos na cavidade para n = 1 (a), 2 (b), 4 (c) e 9 (d). Estes obstáculos, quando da injeção do fio, levam aos arranjos mostrados nas Figuras 5.1 a 5.4. Note a posição dos obstáculos assinalados por asterisco (*).

Para clarificar a influência da disposição dos obstáculos na cavidade, repetimos o experimento com n = 2 pinos, mas com a condição inicial de que o fio fosse disposto paralelo aos dois obstáculos, como mostramos na Figura 5.9. O comprimento máximo

de fio injetado na cavidade nesta situação apresenta um valor $\overline{L} = 312cm$, média em seis arranjos, ligeiramente menor que no caso anterior ($\overline{L} = 348cm$).



Figura 5.9: Arranjos de fios de solda empacotados com 2 pinos, com condição de contorno inicial para o fio passando pelos dois obstáculos paralelamente.

5.2 Fração de ocupação da cavidade em função do número de obstáculos

O comprimento médio de fio injetado e correspondente fração de empacotamento, $p = \frac{\zeta L}{\pi R_0^2}$, para cada quantidade de pinos são mostrados na Tabela 5.1.

A quantificação da influência do aumento do número de pinos nos padrões de empacotamento foi realizada, considerando-se inicialmente a mudança na densidade ou taxa de ocupação da cavidade, p, com o aumento do número de obstáculos, n. O resultado é apresentado no gráfico da Figura 5.10. Para $1 \le n < 9$ a taxa de ocupação varia pouco, enquanto que para $n \ge 9$ escala como $p \sim n^{-\beta} \operatorname{com} \beta = 0, 60 \pm 0, 05$ (linha

Número de pinos (<i>n</i>)	Comprimento médio ($\overline{L}(cm)$)	Fração média (\bar{p})
1	371,0	0,32
2	331,0	0,28
4	277,0	0,24
9	245,0	0,21
25	143,0	0,13
63	68,0	0,06
80	68,0	0,06
109	34,0	0,03
160	34,0	0,03

5.2 Fração de ocupação da cavidade em função do número de obstáculos

Tabela 5.1: Comprimento médio e fração de empacotamento média de fio injetado. Há 6 arranjos para cada quantidade de obstáculos.

sólida).



Figura 5.10: Variação na taxa de ocupação com o aumento no número de pinos. Veja texto para detalhes.

Considerando a dependência empacotamento de arames com o número de obstáculos como uma lei de potência do tipo $p \sim n^{-\beta}$, podemos estimar o expoente β a partir da seguinte argumentação simples. Suponha que temos uma distribuição de obstáculos formando uma rede quadrada e recobrindo a cavidade, de tal forma que podemos identificar uma célula unitária composta por quatro quartos de obstáculos adjacentes em que a separação entre os mesmos seja igual a um certo número de vezes, α , o diâmetro do fio injetado, ζ ; i.e., $\alpha = 2$ corresponderia ao fio praticamente dobrado, como indicado na Figura 5.11.



Figura 5.11: Célula unitária. No caso ilustrado $\alpha \approx 2$.

Vamos considerar que a taxa de ocupação, p, seja uma lei de escala em ternos do número de pinos, n, na forma

$$p(n) = p_1 n^{-\beta}, \ n \ge 1,$$
 (5.1)

onde $p_1 = \frac{\zeta \bar{L}_1}{\pi R_0^2}$ é a taxa de ocupação média para n = 1, ou seja, $p(n = 1) = p_1$; e \bar{L}_1 é o comprimento máximo de fio injetado quando temos um obstáculo na cavidade, como discutido previamente (média de *ensemble*). Para os experimentos com fios de solda, $p_1 = 0, 32 \pm 0, 02$. Assumindo ainda que existe um número particular de pinos n^* , que torna a densidade de fio dentro da cavidade a menor possível, ou seja, $p(n^*) = p_{min} \equiv \frac{2R_0\zeta}{\pi R_0^2} = \frac{2\zeta}{\pi R_0}$ (essa densidade correspondente ao fio passando reto pela cavidade, alinhado com os dois canais de injeção), podemos reescrever (5.1) em termos de n^* como

experimental da fração máxima de

$$p(n^*) = p_1(n^*)^{-\beta}.$$
 (5.2)

A célula unitária, mostrada na Figura 5.11 e com $\alpha = 2$, é a que assegura essa densidade mínima $p(n^*)$ do fio; portanto $n^* = \frac{4 \times 1/4}{\left(2\zeta + \frac{\zeta}{2} + \frac{\zeta}{2}\right)^2} \times \pi R_0^2 = \frac{\pi}{9} \left(\frac{R_0}{\zeta}\right)^2 = 872$. Conseqüentemente,

$$p(n^*) = \frac{2\zeta}{\pi R_0} = p_1 \left(\frac{\pi}{9}\right)^{-\beta} \left(\frac{R_0}{\zeta}\right)^{-2\beta}.$$
 (5.3)

Como $\frac{2\zeta}{\pi R_0} (= \frac{2 \times 1.5 mm}{\pi \times 75 mm}) \simeq 0,0127$ e p_1 são dados pelo experimento, podemos encontrar o expoente β que controla a distribuição da densidade na eq. (5.1) como

$$\beta = \frac{\log\left[\frac{p_1}{p(n^*)}\right]}{\log(n^*)} = \frac{\log\left[\frac{\pi R_0 p_1}{2\zeta}\right]}{\log\left[\left(\frac{\pi}{9}\right)\left(\frac{R_0}{\zeta}\right)^2\right]}.$$

$$\approx 0,47 \pm 0,03.$$
(5.4)

Devemos observar que o valor dado em (5.4) é próximo ao valor de β proveniente da Figura 5.10 ($\beta = 0, 60 \pm 0, 05$). Na Figura 5.12 repetimos a figura anterior juntamente com o gráfico da eq. (5.1), com β dado por (5.4): $p = p_1 n^{-0.47}$, e também com o ponto relativo do valor n^* explicitado. Podemos notar que a linha sólida, correspondente à nossa estimativa acima delineada aproxima-se razoavelmente bem dos dados experimentais ao longo de quase três décadas de variabilidade em n. Acreditamos que uma concordância melhor entre a nossa estimativa e o experimento tenderá a acontecer se os obstáculos dentro da cavidade estiverem sempre distribuídos de acordo com uma rede quadrada. Tal condição não foi observada para o estudo experimental nos casos $n \le 25$ obstáculos, justo no intervalo de maior discrepância entre os resultados experimentais e nossa estimativa teórica.



Figura 5.12: Comparação da fração de ocupação p contra o número de pinos n entre o resultado obtido a partir da predição teórica (linha sólida) e os dados experimentais (linha tracejada). As linhas representam o ajuste para $p \sim n^{-\beta}$, onde $\beta_{experimental} =$ $0, 60 \pm 0, 05$ e $\beta_{teorico} = 0, 47 \pm 0, 03$. O ponto $n \equiv n^*$ representa a estimativa para o número de pinos que torna a densidade de fio na cavidade mínima. Veja texto para detalhes.

5.2.1 *Box-counting* para os padrões observados em função do número de obstáculos

A análise de dimensão fractal via contagem por caixas também foi realizada para as configurações com pinos. Na Figura 5.13, gráfico principal, exibimos as médias para $N(\epsilon)$ nos *ensembles*, para todos os valores de *n*. Como se pode observar, à medida que o número de pinos aumenta, a declividade da reta diminui, indicando sutil alteração no valor numérico do expoente de contagem por caixas. No detalhe da mesma figura mostramos como se dá a evolução do expoente D_B , advindo da relação de escala $N(\epsilon) \sim$ ϵ^{-D_B} , com o número de obstáculos *n*. Podemos notar que para poucos obstáculos (*n* < 9) D_B permanece praticamente constante, apresentando uma leve declividade para $n \ge$ 25, onde $D_B \sim n^{-1/10}$, como indicado pela linha sólida.



Figura 5.13: No gráfico principal, mostramos a média na contagem por caixas para os arranjos com *n* obstáculos. O gráfico no detalhe, mostra a evolução da dimensão fractal com o número de obstáculos: para poucos obstáculos, $n \le 9$, *D* é praticamente constante, enquanto para n > 9 decai lentamente como $D \sim n^{-1/10}$.

5.2.2 DIFUSÃO DE FIOS EM CAVIDADES BIDIMENSIONAIS

Queremos examinar agora como a difusão, aqui definida como o deslocamento quadrático médio do fio, $\langle x^2 \rangle$, medido transversalmente ao eixo de injeção varia com o tempo. Esta análise ocorre em dois grupos, quais sejam: cavidade com e sem obstáculos, envolvendo fios de solda e cobre. Para o estudo dessa difusão novos experimentos foram realizados com o fio de solda, como detalharemos mais adiante.

Para a cavidade com obstáculos, nós trabalhos com as imagens digitais das configurações mostradas nas Figuras 5.1 a 5.7. Para cada conjunto com determinado número de pinos, *n*, medimos $\langle x^2 \rangle$ como segue: coletamos o afastamento de cada ponto do fio em relação ao eixo de injeção na linha perpendicular ao canal de injeção e então tomamos a média sobre todos os pontos encontrados na linha. Já que a célula na qual o fio foi injetado é circular, esse deslocamento quadrático médio na linha deve ser normalizado pela maior corda também elevada ao quadrado, que compõe a cavidade nesta linha, de modo que possamos tomar a média final sobre todas as linhas e assim conseguir um ponto no gráfico de $\langle x^2 \rangle_{norm}$ contra *n*, o qual é mostrado na Figura 5.14.



Figura 5.14: Distância quadrática média normalizada, $\langle x^2 \rangle_{norm}$, em relação ao número de pinos, *n*. Dentro das flutuações estatísticas os dados experimentais recaem sobre a linha sólida que representa o ajuste em lei de potência como $\langle x^2 \rangle_{norm} \sim n^{-0.50}$.

Na Figura 5.15 mostramos $\langle x^2 \rangle_{norm}$ versus *p*; este gráfico indica que $\langle x^2 \rangle_{norm}$ escala de forma aproximadamente linear com a fração de empacotamento. Mais exatamente, o gráfico (5.15) mostra que o fio difunde-se na cavidade perpendicularmente ao eixo de injeção como $\langle x^2 \rangle_{norm} \sim p^{0,90\pm0,14}$. Como o fio é injetado na cavidade a uma velocidade constante, ou seja, a cada unidade de tempo é inserido uma unidade de comprimento de fio, deduzimos deste resultado que a difusão do fio escala com o tempo *t* da mesma forma: $\langle x^2 \rangle_{norm} \sim t^{0,90\pm0,14}$, já que a taxa de ocupação *p* é proporcional ao comprimento *L* de fio injetado na cavidade. Ao começarmos com uma cavidade com muitos pinos e progressivamente irmos retirando-os, vemos que a difusão aumenta segundo $\langle x^2 \rangle_{norm} \sim$ tempo; ou seja, a diminuição do número de pinos *simula* uma difusão browniana.



Figura 5.15: Deslocamento quadrático médio normalizado em relação a taxa de ocupação, *p*. Como o fio é injetado a velocidade constante, tem-se que $\langle x^2 \rangle_{norm} \sim$ tempo $\sim L \sim p$, como representado pela linha sólida. A variação no número de pinos pode ser entendida como uma *simulação* de difusão que apresenta caráter browniano.

Como discutimos no parágrafo anterior, a variação do número obstáculos na cavidade pode ser usada para simular a difusão do fio ao longo do tempo. Para dirimir eventuais dúvidas quanto ao resultado devido ao método empregado, vamos agora analisar a difusão do fio a partir do nosso banco de dados com o material de cobre (Figura 2.7), bem como novos experimentos com fio de solda, em que não mais usamos o artifício dos pinos, mas partimos da observação da difusão com a variação real do comprimento L de fio injetado na cavidade. Além disso, para o material de solda, trabalhamos com uma nova geometria de cavidade, uma célula quadrada. Para ilustração, mostramos na Figura 5.16(a)-(c) exemplos típicos dos arranjos obtidos para diferentes L's, dentro da cavidade circular, de diâmetro $\phi = 150mm$, enquanto a Figura 5.16(d)-(f) contempla a nova cavidade quadrada de lado l = 150mm.



(a)

(b)





Figura 5.16: Configurações típicas de fio de solda para cavidade circular ((a)-(c)), e quadrada ((d)-(f)). As linhas tracejadas perpendiculares ao canal de injeção indicam as trilhas sobre as quais mediu-se a difusão transversal do fio.

As linhas tracejadas nas imagens que aparecem na Figura 5.16 representam as trilhas sobre as quais o deslocamento transversal foi medido. Assim a difusão aqui pode ser definida como $\langle x^2 \rangle_{norm} \equiv \left\langle \left[\frac{\text{deslocamento transversal}}{\text{deslocamento máximo por trilha}} \right]^2 \right\rangle$. Na Figura 5.17(a) mostramos o gráfico dessa quantidade contra o tempo (em unidades de $\eta = \frac{L}{2\pi R_0}$) para a cavidade circular, enquanto a Figura 5.17(b) é o resultado para a cavidade quadrada.

A medida de $\langle x^2 \rangle_{norm}$ foi realizada também para as configurações de cobre mostradas na Figura 2.7, cujo resultado pode ser conferido na Figura 5.18.

A unidade de tempo adotada nos gráficos das Figuras 5.17 e 5.18, dada pela razão $\eta = \frac{L}{2\pi R_0}$, fornece a normalização necessária para melhor visualização dos resuldados, uma vez que estamos trabalhando com cavidade de diferentes tamanhos. Além disso, associado a esta variável há um dado comprimento crítico $L \rightarrow L_c$, tal que $\eta \rightarrow \eta_c$, quando o fio dobra para formar a primeira alça e que é praticamente independente do material utilizado e da geometria da cavidade:

$$\eta_c \equiv \frac{L_c}{2\pi R_0} = \begin{cases} 0,684 \pm 0,008 \text{ cavidade circular, cobre} \\ 0,671 \pm 0,001 \text{ cavidade circular, solda} \\ 0,663 \pm 0,001 \text{ cavidade quadrada, solda} \end{cases}$$

Na Figura 5.19 dispomos conjuntamente os resultados de um mesmo material, no caso solda, para as cavidades circular e quadrada. Podemos observar que o deslocamento quadrático médio para ambas geometrias concordam consideravelmente. Destacamos nesta figura ainda o momento imediatamente anterior ao início da formação da primeira alça, quando o fio toca a borda da cavidade, dado por $\eta \approx 0,45$.

Em uma primeira aproximação o instante em que o fio encontra a primeira barreira ante sua livre propagação pode ser assumida como um triângulo inscrito na cavidade circular, de modo que a razão $\eta = \frac{2 \times \text{hipotenusa do triângulo-retângulo}}{\text{perímetro da cavidade}}$, ou seja, $\eta = \frac{2\sqrt{2}R_0}{2\pi R_0} = 0,45$. Este ponto assinala também a mudança no comportamento do sistema: para $\eta < 0,45$ o fio se projeta livremente pela cavidade e $\langle x^2 \rangle_{norm}$ aumenta rapidamente; após o contato com a borda da cavidade o fio dobra até acontecer o pri-



Figura 5.17: Gráficos log – log do deslocamento quadrático médio normalizado, $\langle x^2 \rangle_{norm}$, contra o tempo para fio de solda na cavidade circular (a) e quadrada (b). O polígono formado pela ligação dos extremos das barras de flutuação destaca a semelhança de $\langle x^2 \rangle_{norm}$ nas duas geometrias.

meiro contato fio-fio, ou seja para 0, 45 < η < 0, 67 o deslocamento quadrátido médio diminui conforme o fio vai se dobrando até duas partes se tocarem e ocorrer a formação da primeira alça; finalmente, para η > 0, 67, conforme aumenta a complexidade da estrutura, com o aumento de fio injetado na cavidade, < x^2 >_{norm} volta a crescer,



Figura 5.18: Gráfico log – log do deslocamento quadrático médio normalizado, $\langle x^2 \rangle_{norm}$, contra o tempo para fio de cobre na cavidade circular.

convergindo para um valor estável à medida que a estrutura torna-se cada vez mais rígida.

Finalmente, na Figura 5.20 mostramos o colapso de todos os dados, tanto os obtidos com fio de solda, quanto os obtidos para o cobre. O deslocamento quadrático médio para o fio de cobre, em particular após o primeiro contato, assume valores ligeiramente menores que os encontrado para o fio de solda, mas ainda assim com comportamento similar. A linha sólida no primeiro regime ($\eta < 0, 45$) assinala uma projeção de tipo essencialmente balística; i.e. $\langle x^2 \rangle_{norm} \sim \text{tempo}^2$, como ilustra a imagem inferior a esquerda; após a queda abrupta em $\langle x^2 \rangle_{norm}$ e a formação da primeira alça em $\eta \rightarrow \eta_c$ (imagem central), $\langle x^2 \rangle_{norm}$ volta a crescer, assinalando o segundo regime ($\eta > \eta_c$) no qual o comportamento de $\langle x^2 \rangle_{norm}$ passa a ser difusivo, com $\langle x^2 \rangle_{norm} \sim \text{tempo}$, como mostra a linha tracejada; nesse último intervalo a estrutura já apresenta um maior nível de complexidade, como mostra a imagem inferior à direita.

É interessante ainda compararmos a difusão discutida neste Capítulo com aquela



Figura 5.19: Gráfico log – log de $\langle x^2 \rangle_{norm}$ contra o tempo mostrando a sobreposição dos resultados para as cavidades circular e quadrada (apenas para fios de solda). A área hachurada ligando os pontos experimentais mostra o colapso dos dados em uma região restrita. O destaque para $\eta = 0, 45$ mostra em primeira aproximação que quando o fio encontra a primeira barreira (borda da cavidade, figuras 5.16(a) e (d)) pode ser visto como como a razão da soma de duas hipotenusas de um triângulo-retângulo inscrito no círculo que define a borda da cavidade. Este ponto ($\eta \approx 0, 45$) assinala ainda a mudança no comportamento de $\langle x^2 \rangle_{norm}$, a qual persiste até o ponto de primeiro contato ($\eta = 0, 67 \pm 0, 01$), conforme assinalado (* marca).

dada pelo movimento Browniano usual. Esta última consiste na descrição de uma partícula em movimento aleatório por meio de uma seqüência de passos discretos de comprimento fixo. Notadamente os fios consistem em objetos contínuos, de modo que estamos falando então de sistemas distintos. Apesar disso, aspectos relevantes do movimento Browniano usual podem ser caracterizados pela difusão de fios. Um deles é a influência da topologia do substrato no qual se dá o movimento. Por exemplo, a difusão



97

a qual nos reverimos convencionalmente pode se dar tanto em uma rede Euclidiana, em que temos uma topologia livre, ou então em uma rede cuja topologia oferece restrição ao movimento, como é o caso das redes com topologia fractal. Na difusão de fios que mencionamos estes dois tipos de substratos são considerados: inicialmente, quando analisamos o comportamento do fio difundindo-se numa célula livre, sem obstáculos (fios de cobre); depois, quando inserimos os obstáculos na cavidade, modificando a topologia (fios de solda). Um outro aspecto digno de nota é que a difusão realizada pelos fios inclui características de auto-exclusão, tanto na interação fio-fio, quanto do fio com o obstáculo, fato este que pode ser implementado na difusão convencional a partir de mudanças nas regras da caminhada, modelo conhecido como caminhada aleatória auto-excludente (*SARW*).

Para finalizar, devemos esclarecer o papel do número de obstáculos na difusão. No movimento Browniano, o número de passos que a partícula caminha está diretamente ligado ao tempo que ela permanece na caminhada. Assim, em uma unidade de tempo, ela percorre uma unidade de comprimento. Na difusão de fios com obstáculos, os *n* obstáculos representam o evoluir do tempo. Assim, cada vez que alteramos *n* permitimos que o sistema evolua por um dado período até ficar estável, quando então medimos o quanto o fio se difundiu. De tal modo, que cada *n* representa um dado instante de tempo no qual observamos a difusão do fio no cavidade.

Capítulo 6

DIFUSÃO ANÔMALA EM FIOS AMASSADOS EM DUAS DIMENSÕES

6.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo estudamos a estatística de caminhadas aleatórias em estruturas de fios metálicos empacotados, no limite de densidade máxima, $p_{max} \approx 0, 15$.

Embora as estruturas em estudo tenham dimensão topológica $d_T = 1$, a topologia delas é complexa, em decorrência de contatos fio-fio, de multiplicidade variável, os quais não são distribuídos homogeneamente dentro da cavidade. Vimos, contudo, que apesar dessa heteregenoidade, a quantificação dessas estruturas feita com diferentes métodos de contagem por caixas, indica uma variação muito reduzida de dimensões fractais, as quais se encontram no intervalo D = 1, 7 - 1, 9 [36]. Contudo, tal informação não é suficiente para classificarmos os fios amassados (*FA*) em duas dimensões em qualquer classe de problemas bem estabelecida, uma vez que estruturas de geometrias e conformações muito diferentes podem apresentar mesma dimensão fractal, como as exemplificadas por aglomerados de percolação, tapetes de Sierpinski e os já mencionados arranjos de fios de cobre, como ilustramos na Figura 6.1.

Além disso, a caracterização da dimensão fractal D é concernente a conformação



Figura 6.1: Exemplos de estruturas bidimensionais bastante diferentes do ponto do vista estrutural, mas com dimensão fractal muito próximas, $1, 8 \leq D \leq 2, 0$.

geométrica da estrutura e independente de sua topologia. Muitas propriedades físicas, tais como aquelas envolvendo fenômenos de transporte, dependem, por outro lado, da topologia da estrutura [10, 49]. O levantamento de expoentes associados à dinâmica, os quais dependem da geometria e da topologia da estrutura, contribuem de modo relevante para a melhor compreensão de sistemas com as características apresentadas por *FA*, possibilitando esclarecer ainda se, de fato, eles pertencem a classe de universalidade de algum dos sistemas mencionados no parágrafo anterior.

Para procedermos no estudo proposto, usamos um conjunto de cinco das sete imagens digitais de alta resolução relativas à configurações independentes e equivalentes de fios de cobre amassados no limite de máximo empacotamento (Figura 2.7). Esta limitação em cinco imagens deve-se apenas ao fato de termos observado que os resultados obtidos eram suficientes para conclusões sólidas, como se observará mais adiante. Nestas imagens nós simulamos caminhadas aleatórias considerando as seguintes regras:

- O caminhante aleatório tem tamanho ζ idêntico a largura do fio.
- Cada caminhada começa em um ponto escolhido aleatóriamente no fio amassado.
- Em regiões livres de contato fio-fio, o caminhante aleatório na posição r_i tem

iguais probabilidades de avançar (para r_{i+1}) ou retroceder (para r_{i-1}) em passos unitários, como em uma caminhada típica em uma trilha unidimensional.

De outro modo, em regiões com contato fio-fio, a maior complexidade na topologia local deve ser considerada e o caminhante pode mover-se com igual propabilidade de r_i para um de seus sítios vizinhos mais próximos δ (i.e. um número de vizinhos > 2) localizados em r_{i+δ}. Para ilustração, nós mostramos na figura 2.7 (c) um detalhe de uma região tomada da figura 2 em que um grande número de contatos fio-fio ocorre. Nestas regiões o caminhante pode saltar de uma alça a outra, e esta possibilidade modifica drasticamente a topologia da caminhada aleatória. Da figura 6.2 se pode notar uma grande variabilidade de contatos envolvendo, por exemplo, 2, 3, 4 e 5 trilhas.

6.2 **RESULTADOS E DISCUSSÃO**

Devido a possibilidade da difusão tranversal nas trilhas em regiões com um número variável de contatos entre alças, um estudo extensivo das propriedades estatísticas dos caminhantes aleatórios em *FA* é necessário. Usando as regras definidas no final da Seção 6.1, nós calculamos o deslocamento quadrático médio de um caminhante aleatório, $< r^2(N) >$, como uma função do número de passos *N* como mostrado no gráfico log – log da Figura 6.3.

Este conjunto médio foi obtido a partir de 1.150 caminhadas de 10.000 passos para todas as configurações de *FA* consideradas. Nós vemos do gráfico principal da Figura 6.3 que $\langle r^2(N) \rangle \leq$ bem descrito por uma função em lei de potência: $\langle r^2(N) \rangle \sim N^{\alpha}$, com a declividade α assumindo o valor 0, 66 ± 0,01 (obtido no intervalo 100 $\langle N \rangle < 3.000$; i.e. para número de passos relativamente não muito grande ["limite de curto-tempo"] para prevenir efeito de tamanho-finito da cavidade associado com caminhadas muito longas). Assim, o expoente de caminhada aleatória $d_w^{(FA)} \equiv \frac{2}{\alpha}$ assume o valor anômalo 3,03 ± 0,05, sensivelmente maior que o expoente


Figura 6.2: Um detalhe da figura 2.7 (c) mostrando a geometria dos contatos fio-fio. A distribuição de pontos dentro da trilha (esqueleto do fio) representa as posições de um caminhante aleatótio de 10.000 passos. Se pode notar que o caminhante é aprisionado em uma região muito restrita do fio amassado - uma indicação de que o processo é difusivo, com um expoente de difusão anômalo $d_w > 2$. Veja seções 6.1 e 6.2 para detalhes.

browniano $d_w^{(B)} = 2$ para difusão normal [50]. Para exibirmos claramente o melhor ajuste em lei de potência que leva a determinação do expoente α (linha contínua) e as barras de flutuação típicas no gráfico principal, nós mostramos esta figura com apenas 26 pontos. A completa sobreposição dos dados simulados é apresentado no detalhe na parte inferior. Para complementar, nós mostramos no detalhe superior, à esquerda da Figura 6.3, a dependência do expoente α com o inverso do número de caminhadas aleatórias (#*rw*) usadas nas simulações, para alguns valores de #*rw* no intervalo [150, 1150]. O ajuste linear (linha contínua) neste detalhe sugere que α converge para o valor 0,655 dentro de incertezas de 0,010 no limite #*rw* $\rightarrow \infty$. Obviamente, um estudo de escala de tamanho-finito para caminhadas aleatórias ao longo da linha sugerida na



Figura 6.3: O gráfico principal mostra a dependência log – log do deslocamento quadrático médio para caminhadas aleatórias em configurações de FA, $< r^2(N) >$, como uma função do número de passos N (apenas 26 pontos selecionados estão representados para evidenciar o ajuste em lei de potência e as barras de flutuação. Os dados escalam como $< r^2(N) > \sim N^{\alpha}$, com α assumindo o valor 0, 66 ± 0, 01 (obtido no intervalo 100 < N < 3.000). O expoente da caminhada aleatória $d_w^{(CW)} \equiv \frac{2}{\alpha}$ assume o valor anômalo 3, 03 ± 0, 05 [50]. O detalhe superior mostra a dependência do expoente α com o número de caminhadas aleatórias usadas no conjunto. O detalhe inferior mostra os dados completos da simulação. Veja seção 6.2 para detalhes.

referência [51] seria interessante nesse problema. Contudo, a realização de experimentos com cavidades de vários tamanhos diferentes está diretamente ligado com muitas dificuldades técnicas.

As Figuras 6.4(a) e 6.4(b) complementam com informações adicionais sobre as flutuações de amostra para amostra para $< r^2(N) >$: na Figura 6.4(a), diferentemente da Figura 6.4(b), a saturação em $< r^2(N) >$ já é evidente para N próximo de



(a)



(b)

Figura 6.4: (a) e (b) mostram o deslocamento quadrático médio para um caminhante aleatório para duas amostras individuais (veja texto para detalhes).

10.000 – 13.000 passos. Nós notamos que o expoente d_w obtido a partir de uma única configuração de *FA* exibido nessas figuras são próximos ao expoente encontrado a partir da Figura 6.3. Em particular, a partir da Figura 6.4(b) nós obtemos $d_w = 2,86\pm0,04$, para $10 < N < 10^4$.

O valor obtido a partir da Figura 6.3 para o expoente d_w^{FA} é próximo do valor $d_w^{(AP)} = 2,87 \pm 0,02$ obtido para difusão anômala no aglomerado auto-similar de percolação (*AP*) em d = 2 [52]. Embora *FA* e *AP*, ambos em 2*d*, tenham aspectos geométricos diferentes, ambas estruturas possuem várias outras similaridades:

- FA têm dimensão D^(FA) = 1,9±0,1 [36] e AP tem uma dimensão fractal próxima
 D^(AP) = 1,89±0,03;
- Ambos, *FA* e *AP* têm estrutura com a mesma dimensão topológica, $d_T = 1$;
- Ambos tem uma hierarquia de buracos ou espaços vazios sem qualquer tamanho característico;
- E ambos podem igualmente suportar esforços mecânicos.

O expoente $d_w^{(FA)}$ reportado aqui para *FA* está em concordância com a conjectura de Aharony e Stauffer [53] a qual prediz que $d_w = D + 1$, para um sistema com dimensão fractal D < 2. De acordo com esta conjectura, o valor experimental observado $D^{(FA)} =$ $1,9 \pm 0, 1$ [36], aponta para o valor $d_w^{(FA)} = 2, 9 \pm 0, 1$, que é igual a $d_w^{(FA)} = 3, 03 \pm 0, 05$ dentro das flutuações estatísticas.

Como uma observação adicional, é interessante comparar o expoente $d_w^{(FA)}$ com o expoente de difusão para uma caminhada aleatória auto-excludente (*SARW*) em 2*d* com uma distribuição (aleatória) de pontes locais sem massa conectando dois primeiros vizinhos quaisquer de sítios visitados pelo *SARW*. Esta estrutura que poderia ser especulada em princípio como uma aproximação de *ordem zero* válida para *FA* 2*d* permite tanto difusão ao longo do esqueleto do *SARW* bem como difusão transversal ao esqueleto do *SARW* (via saltos do caminhante ao longo das pontes) foi estudada por Manna e Roy [54]. Este *SARW* com pontes tem a mesma dimensão fractal do *SARW*, que é $D \approx 1,33$. Manna e Roy encontraram que $d_w = 2,56 \pm 0,01$ para o *SARW* com pontes, um valor ligeiramente diferente mas não muito distante de $3,03 \pm 0,05$ observado para *FA* em 2*d*.

Uma conseqüência do expoente de difusão reportado nesta tese está conectada com a dependência da resistência elétrica \mathfrak{R} de um *FA* com seu tamanho (raio) *R*. Aqui nós estamos assumindo que a condução no *FA* pode acontecer tanto ao longo do esqueleto do fio, bem como transversalmente a ele (em regiões de contato fio-fio). Em geral, a resistência elétrica de um sistema Euclidiano *d*-dimensional de tamanho *R* escala como $\mathfrak{R} \sim \frac{R}{Area} = \frac{R}{R^{(d-1)}} = R^{(2-d)}$. Para um sistema fractal, a relação correspondente é $\mathfrak{R} \sim R^{(d_w-D)}$, onde *D* é a dimensão fractal $D \leq d$, e d_w é o expoente da caminhada aleatória obtido das caminhadas aleatórias definidas no fractal [52]. A baixa conectividade dos fractais leva a $d_w > 2$, i.e., para um expoente bem maior que o valor normal (browniano). Usando os valores observados $D^{(FA)}$ e $d_w^{(FA)}$ para *FA*, nós prevemos que a resistência elétrica para tais sistemas escala como $\mathfrak{R}^{(FA)} \sim R^{(1,1\pm0,1)}$, enquanto a difusão normal para um sistema Euclidiano 2*d* implica que $\mathfrak{R} \sim R^{(2-2)} = R^0$. Assim, a resistência elétrica para um *FA* do tipo considerado acima comporta-se muito próxima de um resistor 1*d* ($\mathfrak{R} \sim$ tamanho).

Podemos comparar essa previsão com a medida experimental da resistência elétrica \mathfrak{R} obtida para configurações de fios amassados em forma de bolas aproximadamente esféricas de raio médio R [33]. Neste experimento, a resistência elétrica varia como $\mathfrak{R} \sim R^{-0.64}$, enquanto o expoente de massa obtido é $D^{FA-3d} = 2,75$, como mostra a Figura 6.5. Com tais dados experimentais segue então que o valor previsto para d_w é $d_w^{FA-3d} = 2,11$. Neste caso, como a conectividade aumenta, d_w aproxima-se aparentemente do valor esperado para uma difusão normal. De outro modo, se considerarmos que a condução pode acontecer apenas ao longo do esqueleto do fio (i.e. excluindo saltos de corrente nos contatos fio-fio) a resistência elétrica para FA escala como $\mathfrak{R} \sim (\text{comprimento do fio dentro da cavidade}) \sim R^D \sim R^{1.9\pm0.1}$.



Figura 6.5: (a) Gráfico log – log de *L* contra $2R/\rho$; 2R é o diâmetro médio do *FA* de comprimento *L* e diâmetro do fio ρ ($\rho = 0, 1cm(\circ), \rho = 0, 08cm(\Box), e \rho = 0, 05cm(\Delta)$). Todos os pontos experimentais recaem sobre a linha hachurada dada por $L \sim (R/\rho)^{2.75}$. Como $L \sim$ massa, $D^{FA-3d} = 2,75$ é o expoente de massa. (b) Gráfico experimental de $100\rho \Re(\Omega cm)$ contra R(cm) para fios com diâmetros $\rho = 0, 1cm(\circ), \rho = 0, 08cm(\Box), e \rho = 0, 05cm(\Delta)$. O melhor ajuste para estes dados é obtido como a função $100\rho \Re \sim R^{-0.64}$, representada pela linha hachurada.

Capítulo 7

Condensação de energia no

CONFINAMENTO DE FIOS EM DUAS DIMENSÕES

7.1 Introdução

Amassamento é um problema tanto interessante quanto familiar. Podemos observálo em diferentes fenômenos físicos tais como no colapso de estruturas metálicas (Figuras 7.1(a) e 7.1(b)); na colisão entre as placas tectônicas terrestres; ou ainda no comportamento de vesículas ou membranas, sob condições físicas apropriadas, como exemplificado pela estrutura das frutas desidratadas (Figura 7.1(c)), entre tantos outros.



Figura 7.1: Diferentes fenômenos físicos de amassamento: materiais metálicos ((a) e(b)) e frutas desidratadas (c).

O amassamento de materiais sólidos induz transformações morfológicas na estrutura dos mesmos, as quais podem variar de deformações puramente elásticas à deformações plásticas, dependendo da tensão aplicada. Um exemplo típico e particulamente familiar à cientistas é o amassamento de uma folha de papel, como o ilustrado na Figura 7.2(a). Dentre as várias características comum em todos os exemplos aqui citados, podemos observar o surgimento de uma estrutura rugosa, com pontos de pronunciada curvatura, normalmente ligados por pontes (veja o detalhe assinalado na Figura 7.2(b)).



(a)

(b)



Para o amassamento de uma superfície, no limite de tamanho muito maior que sua espessura, a deformação pode ser descrita por meio de teoria elástica contínua. Neste caso, ocorrem dois tipos de contribuição para a energia elástica: a energia de estiramento e a energia de dobramento [55]. Vários estudos mostram que a energia de dobramento torna-se localizada nas regiões que apresentam maior singularidade, quais sejam, os cones formados na folha e as pontes ligando-os [16, 17]. Estas regiões contém algo em torno de 80% da energia total armazenada [16].

Configurações de fios amassados geradas pelo confinamento em uma cavidade bidimensional, podem por sua vez, ser analogamente estudados. As singularidades (partes curvas das alças) neste experimento são menos acentuadas do que aquelas que aparecem no amassamento de folhas de papel, mas devem representar um custo adicional para serem formadas em comparação com as partes que permanecem retas, cuja curvatura é zero. Assim, o custo energético para gerá-las deve ser maior. Neste Capítulo pretendemos estudar o dobramento de fios dentro da cavidade, em particular as configurações geradas com material de cobre, propondo um método que nos permite medir a dimensão do conjunto onde a energia é dissipada ou armazenada.

7.2 Medindo a dimensão D_E do suporte onde a energia é dissipada ou armazenada

Para lembrar ao leitor, mostramos na Figura 7.3 um exemplo típico de estrutura obtida com o confinamento de fio em uma cavidade bidimensional circular. Ressaltamos que o interesse será centrado no regime de maior ocupação, que no caso do cobre equivale a 15% da área da cavidade.



Figura 7.3: Configuração típica para fio de cobre no regime de máxima densidade de empacotamento, $p_{max} \simeq 0, 15$.

A unidade constituinte fundamental da configuração de fio amassado do tipo ilustrado na Figura 7.3 é o laço (Figura 7.4(a)). Isoladamente um laço pode ser aproximado como a combinação de uma cauda composta por dois segmentos divergentes de reta formando certo ângulo de abertura e completados, no lado oposto, por uma semicircunferência. Exceções podem ser vistas nas pequenas torções, ora para a esquerda, ora para a direita, no início da cauda, as quais assumiremos aqui que em média se cancelam, formando as caudas retas.



Figura 7.4: (a) Unidade básica observada nas estruturas de fio amassado. (b) Curvatura de um fio de diâmetro ζ segundo um raio de curvatura *R*.

Argumentos mecânicos e geométricos simples indicam que a energia elástica por unidade de área envolvida na curvatura de um fio de diâmetor ζ segundo um raio de curvatura *R* (Figura 7.4(b)) é dada por

$$\frac{\text{Energia}}{\text{Área}} \sim \frac{Y\zeta^3}{R^2},\tag{7.1}$$

onde *Y* é o módulo de Young. A razão $\frac{1}{R} \equiv C$ é a curvatura devido ao dobramento. Assim, vemos que a energia será proporcional ao quadrado da curvatura, bem como à área formada.

Em termos da curvatura, as partes dos laços formadas por segmentos de retas, têm raio de curvatura aproximadamente infinito, $R \approx \infty$ e a curvatura $C = 1/R \rightarrow 0$. Deste modo, podemos considerar que estas regiões têm contribuição nula para o cômputo da energia dissipada ou armazenada na estrutura. Assim, para procedermos no estudo da energia dissipada (e/ou armazenada) pelo confinamento do arame na cavidade, faremos uma espécie de filtragem, selecionando na estrutura apenas as regiões cuja curvatura seja diferente de zero. Como exemplo, mostramos na Figura 7.5 a seleção para a imagem mostrada na Figura 7.3.



Figura 7.5: Filtragem mostrando as regiões da Figura 7.3 selecionadas segundo o critério devido à contribuição do raio de curvatura na dissipação de energia quando do confinamento de fio na cavidade bidimensional. Veja Seção 7.2 para detalhes.

O critério empregado na seleção anterior é o de inicialmente retirar da estrutura regiões cuja curvatura seja muito pequena (aproximadamente segmentos de retas), selecionando nas extremidades mais curvas intervalos de arco que serão inversamente proporcionais ao raio de curvatura de um círculo inscrito no bojo do laço. As regiões selecionadas da Figura 7.3 e mostradas na Figura 7.5 representam o subconjunto no qual a energia empregada para gerar as configurações de fio amassado em duas dimensões está armazenada (ou foi dissipada). Assim, em vez de analisarmos a massa de toda a configuração, devemos nos ater em estudar como este subconjunto que contém a energia está distribuído. O número $N(\epsilon)$ de caixas de tamanho ϵ (lado da caixa) necessárias para o recobrimento deste subconjunto escala como $N(\epsilon) \sim \epsilon^{-D_E^C}$ (Figura 7.6), onde $D_E^C = 1, 0 \pm 0, 1$ para aproximadamente uma década e meia. Neste gráfico, o símbolo **■** representa a média para a seleção descrita no parágrafo anterior para um conjunto de cinco imagens daquelas mostradas na Figura 2.7.



Figura 7.6: Contagem por caixas média para regiões onde a energia está mais condensada. Linha contítua: ajuste em lei de potência na forma $N(\epsilon) \sim \epsilon^{-1,0\pm0,1}$, para $0, 1 < \epsilon(cm) < 5, 0$.

Outros cenários para a seleção da região onde a energia está concentrada foram testados para averiguarmos se o procedimento adotado poderia afetar o estudo dessa dimensão. Por exemplo, experimentamos circunscrever um círculo dentro das alças na região do bojo (mais larga) e tomamos o comprimento de arco do laço correspondente aproximadamente igual a semi-circunferência do círculo inscrito. O resultado dessa seleção pode ser visualizado na Figura 7.7(a). A análise por contagem por caixas (Figura 7.7(b)), mostra que esta escolha praticamente não altera o resultado obtido no caso anterior, com $D_E^C(2^0 \text{caso}) = 1, 1 \pm 0, 02$.



Figura 7.7: (a) Seleção de arcos de comprimento aproximados a semi-circunferência de um círculo inscrito no bojo do laço; (b) Contagem por caixas para a seleção em (a) mostra que o expoente de energia dado por $N(\epsilon) \sim \epsilon^{-D_E^C}$, com $D_E^C = 1, 1 \pm 0, 02$, sofre fraca influência do critério escolhido. Veja texto para detalhes.

Adicionalmente, as configurações com as curvas de energia mostradas na Figura 7.5 foram analisadas pelo método de massa reentrante, o qual consiste em estudar o comportamento da massa $M(\rho)$ do sistema dentro de um círculo de raio ρ . Esta quantidade é mostrada no gráfico principal da Figura 7.8, com as respectivas barras de flutuação (média nas cinco configurações selecionadas). Nesse gráfico $M(\rho)$ é a massa média dentro de 5 círculos equivalentes de raio $R \le 4, 0cm$ com centros tomados aleatóriamente em diferentes pontos que contenham fio, mas restritos a não ultrapassarem a borda da cavidade. O procedimento de mediar a massa em diversos círculos tomados em diferentes pontos dentro da cavidade é importante para melhorar a estatística de contagem como explicado no Capítulo 2. No detalhe da Figura 7.8 mostramos o gráfico de $M(\rho)$ para cada uma das cinco configurações antes do procedimento citado.



Figura 7.8: O gráfico principal mostra a distribuição de massa corrigida para as regiões selecionadas (de acordo com o segundo método) das configurações de fios de cobre amassados, a qual mostra uma boa tendência para lei de escala na forma $M(\rho) \sim \rho^{D_E^M}$, com $D_E^M = 1, 0 \pm 0, 1$ apontado pela linha sólida. O gráfico no detalhe mostra as distribuiões sem correção para cada uma das configurações. Veja Seção 7.2 para detalhes.

Podemos notar que a massa das regiões de maior energia mostra uma tendência a escalar como uma lei de potência em ρ como $M(\rho) \sim \rho^{D_E^M}$, manifestando aparentemente dois regimes de escala: para o intervalo 0, $1 < \rho < 1, 0$ temos um crescimento linear com $D_E^M = 1, 0 \pm 0, 01$; enquanto para o intervalo $1, 0 < \rho < 4, 0$, o melhor ajuste

aponta para um expoente com valor um pouco mais elevado, $D_E^M = 1, 4 \pm 0, 05$. Mas, como o leitor pode observar, o ajuste dado para a lei de escala com expoente rigorosamente igual a um ($D_E^M = 1, 0$, linha sólida) recobre praticamente todo o intervalo em estudo, dentro das barras de flutuação estatística. Esse último valor é relevante pois captura, em torno de 1,3 década, o mesmo resultado apontado pelo método de contagem por caixas. A mudança fragmentando em dois intervalos de escala talvez possa ser atribuída ao fato de que dispomos de uma cavidade de tamanho único. Eventualmente, se dispuséssemos de cavidades de tamanhos maiores, a alteração no valor numérico do expoente se dissolvesse e os resultados apontados pelos diferentes métodos convergissem para o mesmo valor. Independente da pequena flutuação no valor de D_E^M este resultado evidencia mais fortemente que, de fato, a energia dissipada na formação das configurações de fios confinados se distribui num suporte de menor dimensão que o da massa: $D_E < D_{massa} = 1, 9 \pm 0, 1$.

7.3 Argumento de campo médio para cálculo de D_E

O expoente de massa (dimensão fractal) $D = 1,9 \pm 0,1$ (para configurações de cobre) pode ser relacionado aos parâmetros $\eta \, e \, v$ que controlam a evolução do tamanho dos laços e do número destes a cada iteração, como mostramos no Capítulo 2 [37]. Como vimos anteriormente, a massa M de fio dentro de uma cavidade circular escala com o raio R

$$M \sim R^D, \tag{7.2}$$

onde D no modelo hierárquico já mencionado no Capítulo 2 é dado por $D = \frac{\ln v}{\ln \eta^{-1}}$.

Nosso objetivo agora é estimar o expoente D_E da condensação de energia definido na seção anterior. Para tanto, usaremos argumentos de escala como feito por Flory na teoria de campo médio para o cálculo do expoente v das caminhadas aleatórias autoexcludentes [38,56]. Na discussão apresentada a seguir supomos que a força F necessária para manter a injeção de arame na cavidade é constante durante todo o processo. Isso de fato é verdadeiro experimentalmente e já foi descrito no Capítulo 3. Mas é importante ressaltar que nosso experimento foi realizado para uma única cavidade, de tamanho fixo (dada as dificuldades técnicas, principalmente na construção de cavidades de tamanhos maiores). Podemos supor que, caso dispuséssemos de uma variedade de cavidades de diferentes tamanhos R, deveríamos ter $F \rightarrow F(R) =$ constante para R fixo. Ou seja, F(R) seria tipicamente a força média necessária para a injeção do fio numa cavidade de raio R. O trabalho realizado no processo de injeção seria dado por:

$$W = F(R)L. \tag{7.3}$$

Tal quantidade de trabalho pode ser convertida em energia potencial elástica de dobramento, no caso de fios de aço ou de nylon, ou poderia ainda ser dissipada em transformações plásticas irreversíveis, no caso de fios de solda, com alto teor de chumbo.

Vamos testar inicialmente uma dependência em R na força da forma Hookeana F(R) = kR, onde k = constante. Nesse caso, $W \sim R^{1+D}$, onde $D \simeq 1, 9$ é o expoente de massa $(L \sim R^D)$. Tal resultado implicaria em $D_E \simeq 2, 9$ o que não faz, evidentemente, sentido para um sistema bidimensional. Inspirando-se na teoria de Flory de polímeros, devemos lembrar que a constante elástica k não poderá ser constante, mas sim deverá depender inversamente com o comprimento do arame, de forma a simular as propriedades elásticas de uma associação de molas em série, i.e. com a topologia da linha. Assim, vamos assumir agora que

$$F = k(L)R, \ k(L) = \frac{k_0}{L}.$$
(7.4)

Esta última expressão nos diz que, para uma dada cavidade de tamanho fixo R à medida em que mais fio é injetado, ou seja, L cresce, a força necessária para injetar mais fio diminui, o que parece ir contra o esperado, a princípio. No entanto, algumas observações experimentais se fazem pertinentes. Por exemplo, imediatamente no

início quando o fio está esticado e L = 2R (Figura 2.2(c)), uma força inicial F relativamente alta é necessária para ocasionar uma primeira instabilidade no fio de forma que ele se projete no plano da cavidade para formar a primeira alça (Figura 2.4), esta é a força de Euler, devido à instabilidade de empenamento. Imediatamente após o empenamento inicial do fio, essa força F diminui e permanece basicamente constante para comprimentos L crescentes de fio injetado. No entanto, à medida que L se avizinha do comprimento máximo, L_{max} , novas instabilidades surgem e a força para injeção cresce abruptamente (veja, por exemplo, a fenomenologia descrita no Capítulo 3).

Para entendermos o comportamento da força durante o processo intermediário de injeção de fio na cavidade vamos considerar uma relação de escala efetiva entre o comprimento *L* de fio injetado e o raio da cavidade *R* do tipo $L \sim R^D$, onde $1 \le D \le 2$, para $L_{min} < L < L_{max}$, com $D \simeq 1$ para *L* próximo a $L_{min} = 2R$ e $D \simeq 2$ para *L* próximo a L_{max} (veja Seção 2.3, em particular Figura 2.10). Com estas considerações a equação (7.4) fornece $F \sim k_0 L^{-1+\frac{1}{D}}$, isto é, $F \sim L^0$ para *L* próximo a L_{min} e $F \sim L^{-1/2}$ para *L* próximo a L_{max} . Assim a força *F* aparenta, de fato, ter uma *fraca dependência* com *L* para $L_{min} \le L \le L_{max}$. Tal fraca dependência com *L* só deve desaparecer nos instantes finais da injeção. Dessa forma, constatamos que a equação (7.4) é capaz de acomodar a fenomenologia do processo no que diz respeito à força típica necessária para a injeção de fio. Assim, o trabalho feito pela compressão dos fios amassados será

$$W = k_0 R \int_{L_{min}}^{L} \frac{dL}{L}$$

= $k_0 R \ln\left(\frac{L}{L_{min}}\right)$
~ $R^{1+\epsilon} \equiv R^{D_E}$, (7.5)

onde $\epsilon \ll 1$, $D_E = 1 + \epsilon \simeq 1$.

Portanto, este argumento simples indica que a dimensão na qual a energia deve se concentrar é igual a unidade, em concordância com os resultados experimentais da seção anterior. Além disso, o argumento que prevê $D_E = 1$ para cavidades bidimensionais, também seria válido para cavidades de qualquer dimensão Euclidiana.

7.4 Comentários finais

Para concluir nossa discussão acerca do assunto, gostaríamos de explorar uma analogia entre os aspectos energéticos das configurações de fios discutidos nas seções anteriores com a teoria geofísica conhecida como *Tectônica das Placas*.

Em termos geológicos, uma placa é uma grande laje, formada por rochas rígidas. A teoria da tectônica de placas nos diz que a camada superficial da terra (litosfera) está fragmentada numa meia dúzia de placas maiores, e algumas outras menores, que estão em movimento relativo umas em conexão com as outras, enquanto assentam sobre uma camada estrutural mais quente, menos rígida e mais móvel (astenosfera) [57]. A tectônica de placas é um conceito científico relativamente recente, introduzido há cerca de 40 anos, que revolucionou a nossa compreensão do planeta como algo dinâmico. Esta teoria forneceu explicações, por exemplo, do porque dos terremotos e erupções vulcânicas ocorrerem em áreas muito específicas do globo terrestre, e de como se deu a formação de grandes montanhas, como os Alpes e os Himalaias.

As placas tectônicas, conforme essa teoria, incluem continentes e partes de assoalhos oceânicos, que movem-se em mútua aproximação ou distanciamento, a velocidades medidas em unidades de centímetros por ano, assim contribuindo para a incessante evolução do relevo e da distribuição dos continentes e oceanos na superfície terrestre. Representam pois, as lentas formas de manifestação da dinâmica interna, em contrapartida aos vulções e terremotos que representam as formas mais rápidas e energéticas de manifestação geológica do planeta. Na Figura 7.9 [58] aparece a delimitação das placas tectônicas no globo, bem como pontos de atividade vulcânica (pontos circulares) e a região onde se concentra esta última é conhecida como *Anel de Fogo*.

Os limites entre as placas podem ser divergentes, onde elas separam-se, criando fundo oceânico, ou convergentes, onde elas colidem, formando cadeias montanhosas



Figura 7.9: Mapa mostrando a concentração dos vulcões ao longo das divisões das placas tectônicas, assinaladas pelos pontos circulares e que formam o chamado "Anel de Fogo".

continentais ou fechando oceanos. Podem ainda ser limites transfomantes, onde uma placa passa ao lado da outra, com atrito, mas sem criar nem consumir material. Todos estes tipos de limites são zonas de instabilidade tectônica, ou seja, sujeitas a terremotos e vulcões.

O que o movimento das placas tem em comum com os fios amassados?

As placas representam o movimento de zonas basicamente bidimensionais, embebidas no espaço tridimensinal. A energia deste movimento se dissipa nas regiões de contato entre as placas, as quais tem a topologia da linha. Nas regiões de contato entre as placas estas se curvam, mergulhando, em geral, para as camadas mais profundas da Terra. Portanto, a região de dissipação geológica também está associada àquelas regiões onde os raios de curvatura são menores, da mesma forma como no processo de empacotamento de arame estudado nesta tese. Nos fios, temos o movimento de uma estrutura efetivamente unidimensional, mas embebida na superfície bidimensional da cavidade. No caso dos arames amassados, a energia se dissipa não exclusivamente nas regiões de contato fio-fio, mas é este contato que também força o dobramento do fio, fazendo com que mais energia seja gasta neste processo.

Para aprofundar esta analogia entre estes dois sistemas, procedemos ao estudo da dimensão do suporte de dissipação de energia dos pontos que assinalam os locais de atividade vulcânica. Na Figura 7.10 estão assinalados (símbolo °) a localização destes pontos no globo.



Figura 7.10: Subtração do fundo da imagem mostrada na Figura 7.9, deixando apenas os pontos de atividade vulcânica.

O estudo de contagem por caixas, mostrado na Figura 7.11, aponta o comportamento em forma de lei de escala como $N(\epsilon) \sim \epsilon^{-D_E^V}$, com $D_E^V = 1,08 \pm 0,02$, como o expoente de energia dissipada na atividade dos vulcões. Veja que aqui (como no caso dos arames) não estamos atribuindo nenhuma intensidade à qualquer das atividades vulcânicas, tendo elas o mesmo peso. Estamos nos centrando apenas em estudar como esta atividade está mapeada na superfície da Terra. O resultado que encontramos é muito próximo, de fato, àquele obtido no estudo da distribuição de energia no confinamento dos fios apresentado nas seções anteriores nesse Capítulo.



Figura 7.11: Gráfico log – log do número de caixas $N(\epsilon)$ de tamanho ϵ para a região onde a energia é dissipada devida a atividade das placas tectônicas. A linha sólida mostra o ajuste na forma $N(\epsilon) \sim \epsilon^{-D_E^V}$, com $D_E^V = 1,08 \pm 0,02$.

Capítulo 8

CONCLUSÕES GERAIS E PERSPECTIVAS

Nesta tese nós discutimos vários aspectos de estruturas heterogêneas de fios amassados em duas dimensões, tanto do ponto de vista experimental quanto do ponto de vista de simulações computacionais e de argumentos de escala, os quais nos permitiram uma melhor compreensão das propriedades geométricas e estatísticas e da física associada a esses sistemas. Muitas leis de escala conectando variáveis de interesse foram reportadas nos Capítulos 2 a 7. Em particular, expoentes críticos associados a dimensão fractal das estruturas amassadas foram encontrados como sendo independentes do material em estudo, quais sejam, cobre e ligas de chumbo e estanho. A seguir, apresentamos os principais resultados e conclusões para cada capítulo desta tese.

No Capítulo 3 apresentamos uma discusão fenomenológica acerca do que acontece com a fração de empacotamento p à medida que o comprimento de fio L injetado na cavidade aumenta e a estrutura evolui para um estado de rigidez. Mostramos que enquanto $p \ll p_{max}$ valores típicos da força F associada ao processo de injeção podem ser obtidos em termos do módulo de Young. Nesse limite, o processo de injeção acontece como se fosse basicamente unidimensional. Contudo, à medida que a taxa de ocupação da cavidade torna-se alta, ocorrem instabilidades envolvendo o módulo de cisalhamento do material, e este necessita ser considerado na descrição. Concluimos que, quando estas duas grandezas (módulo de Young, Y, e módulo de cisalhamento, C) são consideradas, a fração de empacotamento máxima fica dependente da razão entre esses módulos, ou seja, $p_{max} \approx \frac{C}{Y} \approx 0,37$ para diversos materiais (veja Tabela 3.1, para detalhe). Ou seja, tais processos de empacotamento de fios, fortemente controlados por interações de auto-exclusão, geram estruturas cuja fração de ocupação, p, são limitadas a um valor sensivelmente menor do que a unidade. É interessante observar ainda que o valor $p_{max} \approx 0,37$ é muito próximo aos valores encontrados para dois outros problemas envolvendo transição de rigidez, quais sejam, percolação e empacotamento de discos, ambos em 2d. No primeiro, para o caso particular em que se considera percolação com segmentos (bond-percolation) na rede triangular como relevantes, a fração crítica de pontos da rede que deve ser preenchida para criar um aglomerado percolante é $p_c = 2\sin(\frac{\pi}{18}) \approx 0,34729$. No segundo, quando do empacotamento de discos em uma disposição hexagonal, acredita-se que a menor densidade de empacotamento possível para uma estrutura rígida é $p_c = (7\sqrt{3} - 12) \approx 0,390675$ (Figura 8.1). Ou seja, empacotamento de fios em cavidades bidimensionais leva a uma fração p de transição de estado macio para um de estado rígido intermediário a estes dois últimos, $p_c^{AP-T} < p_c^{FA-2d} < p_c^{discos}$.



Figura 8.1: Empacotamento rígido de círculos em uma rede hexagonal obtido pela remoção do disco central e substituição de três discos iguais inscritos. A menor fração de ocupação possível que leva a esse estado de rigidez é $p \simeq 0, 39$.

No Capítulo 4 introduzimos e analisamos novos experimentos de amassamento 2*d* feitos em colaboração com o grupo do Prof. V. P. Brito da UFPI. Nesses experimentos utilizamos fios de solda ($S n_{0,60} Pb_{0,40}$), com espessura $\zeta = 1,5mm$. Estudamos a in-

jeção contínua desse fio ao longo do diâmetro de uma cavidade circular plana de raio R = 75mm e altura $\zeta = 1, 6mm$. As estruturas geradas pelo confinamento na cavidade bidimensional foram submetidas à ação de uma força externa, aumentadas o suficiente para provocar deformações controladas. A análise experimental mostra que o diâmetro equatorial médio, x medido em função da deformação linear macroscópica δ varia como $x \sim (1 - \delta)^{-\xi}$, com $\xi = 0, 50 \pm 0, 15$. Usando um argumento de glóbulos conjecturamos que esse último expoente pode ser relacionado ao expoente de dimensão fractal D das estrututas amassadas como $\xi = D - 1$. Consideramos que, devido às peculiaridades em comum, configurações de caminhantes aleatórios auto-excludentes (SARW) são boas aproximações para as estruturas de de fios amassados, cujo valor de dimensão fractal D = 4/3 implica em $\xi = 1/3$, valor próximo do obtido experimentalmente. Este resultado é também validado pelo estudo da razão de Poisson η , mostrando que no limite em que a deformação δ é infinitesimalmente pequena, ξ pode ser obtido como $\xi = D - 1 = \lim_{\delta \to 0} \eta$ (Figura 4.10). Contudo, o expoente de dimensão fractal $D^{FA} = 1,9\pm0,1$ obtido para as estruturas amassadas, através de diversos métodos, é diferente do expoente para SARW, $D^{SARW} = 4/3$. Como esse expoente ($D^{FA} = 1, 9 \pm 0, 1$) é robusto, uma correção no argumento dos glóbulos utilizado faz-se necessário.

Queremos aqui acrescentar uma argumentação simples a qual prevê que de fato o valor do expoente de dimensão fractal encontrado para as configurações de fios amassados em cavidades bidimensionais deve ser o reportado nesta tese. Para tanto, vamos considerar que o expoente de dimensão fractal *D* dependa da dimensão topológica d_T da estrutura com um certo parâmetro α e da dimensão *d* do espaço no qual ela está embebida com β , ou seja, $D = \alpha d_T + \beta d$, com α e β sujeitos a condição de normalização $\alpha + \beta = 1$. Devemos notar que essa condição vem do fato de que se $d = d_T$, então *D* será necessariamente igual à *d*, e portanto $\alpha + \beta = 1$. É bem estabelecido que para d = 3 configurações de fios amassados têm $D = 2,75 = \frac{11}{4}$ [33], de modo que se substituirmos estes valores nas duas equações anteriores encontramos $\alpha = \frac{1}{8} e \beta = \frac{7}{8}$. Ou seja, de forma genérica *D* ficaria escrito como $D = \frac{d_T}{8} + \frac{7d}{8}$. De acordo com este

argumento, o valor esperado para a dimensão fractal de fios amassados ($d_T = 1$) em cavidades bidimensionais (d = 2) seria D = 1,875. Esse último valor vem de encontro aos resultados reportados nesta tese para os arranjos de fios amassados, qual seja $D^{FA} = 1,9$ dentro das incertezas estatísticas, tanto para estruturas de arame de cobre quanto de solda (Capítulos 2 e 4). Além disso, D^{FA} mostrou-se invariante mesmo para o processo de achatamento mecânico a que foram submetidas as configurações de fios de solda (Capítulo 4, Figura 4.13).

No Capítulo 5 estudamos a injeção de fio ao longo do diâmetro da cavidade circular, a qual agora possui n obstáculos circulares de tamanho igual ao diâmetro do fio injetado. A existência de obstáculos modifica a topologia da cavidade e introduz uma dificuldade crescente para o seu preenchimento. Após um certo intervalo de tempo o processo de empacotamento do fio na cavidade é interrompido quando a densidade média das interações de auto-exclusão fio-fio alcança um limiar, o qual acarreta uma instabilidade no processo de injeção do fio e esta cessa. Experimentalmente é encontrado que a taxa máxima de ocupação da cavidade pelo fio decai com a lei de potência $p \sim n^{-0.60\pm0.05}$. Um método heurístico baseado em argumentos muito gerais de mecânica dos meios contínuos indica que $p \sim n^{-\beta}$, onde $\beta = 0, 50 \pm 0, 03$ é independente da velocidade de injeção. A análise de dimensão fractal pelo método de contagem por caixas mostrou que a mesma é constante para $n \le 9$ e decai muito lentamente como lei de potência na forma $D \sim n^{-1/10}$ para n > 9 (ao longo de duas décadas). A difusão medida pelo deslocamento quadrático médio normalizado do fio, $\langle x^2 \rangle_{norm}$, transversalmente ao eixo de injeção também decai como uma lei de potência do tipo $\langle x^2 \rangle_{norm} \sim n^{-\gamma}$, de tal forma que $\langle x^2 \rangle_{norm} \sim p^{(\frac{\gamma}{\beta})}$, com $(\frac{\gamma}{\beta}) = 1, 0$. Uma vez que p escala linearmente com o tempo (t) para o regime de injenção usado, que é o de velocidade constante, obtemos $\langle x^2 \rangle_{norm} \sim t$, configurando-se então uma dinâmica difusiva de tipo browniano para esse processo fortemente dependente de interações de auto-exclusão. Complementando, nós examinamos a difusão do fio na cavidade sem o artifício dos pinos, a partir de medidas diretas do deslocamento do mesmo. Os resultados experimentais apontam para dois regimes distintos: balístico, no início do preenchimento, seguido de uma ocupação difusiva do tipo browniana. Notamos que o comportamento difusivo browniano aparece tanto quando na presença de obstáculos de tamanho ζ diluídos na cavidade, quanto na ausência dos mesmos.

No Capítulo 6, usando simulações numéricas extensivas nós estudamos o comportamento de um caminhante aleatório evoluindo diretamente sobre as configurações experimentais complexas de fios de cobre amassados confinados em uma cavidade bidimensional, no limite de fração de empacotamento máxima (Figura 2.7). Em particular, nós obtivemos a dependência da distância quadrática média $< r^2(N) > das$ caminhadas aleatórias como uma função do número de passos N. Nós encontramos que estas quantidades escalam como < $r^2(N) > N^{\alpha}$, onde $\alpha = \frac{2}{d_{\alpha}} = 0,66 \pm 0,01$, corresponde ao expoente de difusão $d_w^{(FA)} = 3,03 \pm 0,05$, quando a fração de empacotamento do fio na cavidade aproxima-se do valor limite $0, 14 \pm 0, 01$. Este valor para o expoente difusivo é próximo ao obtido para difusão anômala no aglomerado auto-similar de percolação em 2*d* [52]. O expoente $d_w^{(FA)}$ enfocado aqui implica que a resistência elétrica dessas estruturas heterogêneas de fios, $\Re^{(FA)}$, escala com o tamanho (raio) como $\Re^{(FA)} \sim R^{(1,1\pm0,1)}$, um resultado bastante diferente do obtido para um resistor 2d Euclidiano "normal", para o qual \Re independe do tamanho. A previsão anterior poderia ser testada a partir de medidas elétricas precisas. Vale ressaltar dois outros aspectos deste problema: (1) o expoente d_w encontrado satisfaz antiga conjectura devido a Aharony e Stauffer [53], a qual prediz, para D < 2: $d_w = D + 1 \rightarrow 2, 9 \pm 0, 1$, a partir do valor medido de D. (2) Apesar de D ser diferente da correspondente dimensão $(\approx 4/3)$ de caminhadas auto-excludentes (SARW) 2d, o valor d_w discutido aqui não é muito diferente do obtido por Manna e Roy [54], $d_w = 2,56$, para caminhadas sobre SARW com pontes locais sem massa.

Finalmente, no Capítulo 7 propomos um método para determinar a dimensão do suporte onde se encontra a energia dissipada ou armazenada no processo de amassamento de fios em 2*d*. Seguindo resultados de amassamento de variedades bidimensionais, como folha de papel, os quais sugerem que a energia no processo de amassamento deve estar concentrada em regiões da estrutura amassada com maior singularidade, assumimos que o mesmo ocorre com o amassamento de fios. Neste caso, as singularidades, representadas pelas regiões de dobramento do fio, são menos acentuadas que naquele. Os resultados experimentais mostram que a energia se concentra num subconjunto da estrutura (massa), com dimensão $D_E = 1$. Argumentos de campo médio tipo-Flory corroboram o resultado obtido. Neste aspecto, os fios amassados apresentam um curioso paralelo com a atividade vulcânica distribuída sobre o globo terreste. De fato, a análise de contagem por caixas para os pontos que assinalam atividade vulcânica sobre a Terra mostra o mesmo expoente de dissipação de energia como no caso dos fios $(D_E^V = D_E^F = 1, 0)$.

Embora muitos resultados tenham sido obtidos nessa tese, vários aspectos do problema de amassamento em 2*d* ainda podem ser explorados. Vimos, por exemplo, que alguns resultados apontam para similaridades entre aspectos comuns de fios amassados e aglomerados de percolação (Capítulos 2 e 6). Um resultado bem estabelecido em problemas de percolação está associado ao expoente d_{min} , o qual é obtido para a relação de escala entre as distâncias direta e topológica entre dois pontos selecionados ao acaso sobre a estrutura [59,60]. A determinação desse expoente para as configurações de fios é importante como uma medida complementar para os resultados encontrados, os quais parecem indicar que a injeção de fio em uma cavidade 2*d* até o limite em que a estrutura se torna rígida seria uma forma, não sintonizável, de gerar agregados de percolação.

Outro objeto interessante a ser determinado é a forma canônica média do laço (Figura 7.4(a)), a unidade central das configurações de fios amassados e estudar diferentes formas de distribuí-las em um substrato 2*d*, comparando as frações de empacotamento com aquelas comumente obtidas para o empacotamento de objetos euclidianos, como discos. Supondo que esta forma seja precisamente conhecida, poderemos realizar experimentos de empacotamento dessas unidades em diversos regimes. Seria interessante estudar algumas propriedades destas estruturas amassadas sob a forma de simulações computacionais em uma rede bidimensional triangular, envolvendo classes específicas de caminhadas auto-excludentes numa cavidade circular, como tentativa de gerar padrões semelhantes aos dos fios amassados. Simulação com tal característica é uma candidata natural, haja visto que captura a auto-exclusão do contato fio-fio.

Glossário dos principais símbolos

D	Expoente de dimensão fractal (Capítulos 1, 2, 4 e 5).
d	Dimensão espacial.
$L, L_c \in L_{max}$	Comprimento, comprimento para formar a primeira alça e compri- mento máximo de fio injetado, respectivamente (Capítulos 2 a 5).
R_0	Raio da cavidade (Capítulos 2, 4 e 5).
d_T	Dimensão topológica (Capítulos 2 e 6).
ϕ	Diâmetro da cavidade (Capítulo 4).
ζ	Calibre do fio (Capítulos 2 a 6).
θ	Ângulo formado pelos canais de injeção do fio (Capítulo 2) e ângulo de deflexão (Capítulo 3).
р	Fração de ocupação da cavidade (Capítulos 2 a 5).
n _a e n _{aa}	Número de alças e número de contatos entre alças, respectivamente (Capítulo 2).
λeγ	Perímetro médio e número de coordenação, respectivamente (Capí- tulo 2).
n_{ff}	Número de contatos fio-fio (Capítulo 2).

S	Áreas das alças (Capítulo 2).
n(s)	Função distribuição do úmero de alças de tamanho s (Capítulo 2).
τ	Expoente da relação de escala entre a distribuição de alças de área <i>s</i> (Capítulo 2).
F	Força (Capítulos 3, 4).
С, Ү	Módulos de cisalhamento e de elasticidade (Young), respectivamente (Capítulo 3).
X	Comprimento transversal (Capítulo 4).
δ	Compressão linear (Capítulo 4).
ξ	Expoente da relação de escala entre o comprimento transversal x e a compressão linear δ (Capítulo 4).
n	Número de obstáculos de espessura ζ (Capítulo 5).
β	Expoente experimental e teórico da relação de escala entre a fração de ocupação e o número de obstáculos (Capítulo 5).
$\langle x^2 \rangle_{norm}$	Deslocamento quadrático médio normalizado (Capítulo 5).
$< r^2(N) > e N$	Deslocamento quadrático médio e número de passos em uma cami- nhada aleatória, respectivamente (Capítulo 6).
d_w	Expoente de caminhada aleatória (Capítulo 6).
D_E	Expoente de dimensão do suporte no qual a energia é dissipada (Capí- tulo 7).

Referências Bibliográficas

- T. A. Witten. Insights from soft condensed matter. *Reviews of Modern Physics*, 71(2):367–373, 1999.
- [2] T. C. Lubensky. Soft condensed matter physics. *Solid State Communications*, 102(2):187–197, 1997.
- [3] D. Frenkel. Soft condensed matter. *Physica A*, 313:1–31, 2002.
- [4] R. Mezzenga, P. Schurtenberger, A. Burbidge, and M. Michel. Understanding foods as soft materials. *Nature Materials*, 4:729–740, 2005.
- [5] D. Durian and H. Diamant. In search of soft solutions. *Nature*, 412:391–392, 2001.
- [6] W. Poon. Soft condensed matter: where physics meets biology. *PhysicsWeb*, 2001.
- [7] P. G. de Gennes. Soft matter. Reviews of Modern Physics, 64(3):645–648, 1992.
- [8] K. Wiesenfeld. Scaling laws. American Journal of Physics, 69(9):938–942, 2001.
- [9] P. Bak and M. Paczuski. Complexity, contingency, and criticality. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 92:6689–6696, 1995.
- [10] H. E. Stanley and N. Ostrowsky. On Growth and Form: Fractal and Nonfractal Patterns in Physics. Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, Boston, 1986.

- [11] A. E. Lobkovsky. Boundary layer analysis of the ridge singularity in a thin plate. *Physical Review E*, 53(4):3750–3759, 1996.
- [12] S. Chaieb, F. Melo, and J.-C. Géminard. Experimental study of developable cones. *Physical Review Letters*, 80(11):2354–2357, 1998.
- [13] E. Cerda and L. Mahadevan. Conical surfaces and crescent singularities in crumpled sheets. *Physical Review Letters*, 80(11):2358–2361, 1988.
- [14] J. Wilhelm and E. Frey. Elasticity of stiff polymer networks. *Physical Review Letters*, 91(10):108103, 2003.
- [15] D. L. Blair and A. Kudrolli. Geometry of crumpled paper. *Physical Review Letters*, 94:166107, 2005.
- [16] G. Gompper. Patterns of stress in crumpled sheets. *Nature*, 386:439–441, 1997.
- [17] A. E. Lobkovsky, S. Gentges, H. Li, D. Morse, and T. A. Witten. Scaling properties of stretching ridges in a crumpled elastic sheet. *Science*, 270:1482–1485, 1995.
- [18] P. A. Houle and J. P. Sethna. Acoustic emission from crumpling paper. *Physical Review E*, 54(1):278–283, 1996.
- [19] E. M. Kramer and A. E. Lobkovsky. Universal power law in the noise from a crumpled elastic sheet. *Physical Review E*, 53(2):1465–1469, 1996.
- [20] E. M. Kramer and T. A. Witten. Stress condensation in crushed elastic manifolds. *Physical Review Letters*, 78(7):1303–1306, 1997.
- [21] B. A. DiDonna and T. A. Witten. Singularities, structures, and scaling in deformed *m*-dimensional elastic manifolds. *Physical Review E*, 65:016603, 2001.
- [22] A. J. Wood. Witten's lectures on crumpling. *Physica A*, 313:83–109, 2002.

- [23] M. A. F. Gomes. Fractal geometry in crumpled paper balls. American Journal Physics, 55(7):649–650, 1987.
- [24] M. A. F. Gomes. Paper crushes fractally. Journal Physics A: Math. Gen., 20:L283–L284, 1987.
- [25] Y. Kantor, M. Kardar, and D. R. Nelson. Statistical mechanics of tethered surfaces. *Physical Review Letters*, 57(7):791–794, 1986.
- [26] Y. Kantor and D. R. Nelson. Crumpling transition in polymerized membranes. *Physical Review Letters*, 58:2774–2777, 1987.
- [27] Elisabeth Bouchaud and Jean-Philippe Bouchaud. Self avoiding surfaces at interfaces. *Journal de Physique*, **50**(7):49–841, 1989.
- [28] M. Plischke and D. Boal. Absence of a crumpling transition in strongly selfavoiding tethered membranes. *Physical Review A*, 38(9):4943–4945, 1988.
- [29] F. F. Abraham, W. E. Rudge, and M. Plischke. Molecular dynamics of tethered membranes. *Physical Review Letters*, 62:1757–1759, 1989.
- [30] D. Boal, E. Levinson, D. Liu, and M. Plischke. Anisotropic scaling of tethered self-avoiding membranes. *Physical Review A*, 40:3292–3300, 1989.
- [31] A. Johner, E. Bouchaud, and M. Daoud. Stretching of a polymer by an attractive wall. *Journal de Physique*, 51(6):495–502, 1990.
- [32] A. Baumgärtner. Does a polymerized membrane crumple? J. Phys. I France, 1(11):1549–1556, 1991.
- [33] J. Albino Aguiar, M. A. F. Gomes, and A. S. Neto. Geometrical and electrical properties of crumpled wires. *Journal Physics A: Math. Gen.*, 24:L109–L112, 1991.

- [34] M. A. F. Gomes, F. F. Lima, and V. M. Oliveira. Plastic properties of crumpled wires. *Philosophical Magazine Letters*, 64(6):361–364, 1991.
- [35] M. A. F. Gomes and V. M. Oliveira. Repacking of crumpled systems. *Philosophi-cal Magazine Letters*, 78(4):325–329, 1998.
- [36] C. C. Donato, M. A. F. Gomes, and R. E. de Souza. Scaling properties in the packing of crumpled wires. *Physical Review E*, 67(026110), 2003.
- [37] C. C. Donato, M. A. F. Gomes, and R. E. de Souza. Crumpled wires in two dimensions. *Physical Review E*, 66(015102(R)), 2002.
- [38] P.-G. de Gennes. Scaling concepts in polymer physics. Cornell University Press, Ithaca-N.Y., 1979.
- [39] B. B. Mandelbrot. *The fractal geometry of nature*. W. H. Freeman and Company, New York, 1983.
- [40] H. J. Herrmann and H. E. Stanley. Building blocks of percolation clusters: Volatile fractals. *Physical Review Letters*, 53(12):1121–1124, 1984.
- [41] J. Feder. Fractals. Plenum Press, New York, 1988.
- [42] J. C. Anderson, K. D. Leaver, R.D. Raelings, and J. M. Allexander. *Materials Science*. Chapman & Hall, London, 1973.
- [43] A. S. Khan and S. Huang. Continuum theory of plasticity. J. Wiley, New York, 1995.
- [44] L. H. van Vlack. *Elements of materials science and engineering*. Campus, Rio de Janeiro, 1984.
- [45] M. A. F. Gomes and G. S. V. Melo. Topological aspects in the plastic deformation of spherical bodies. *Philosophical Magazine Letters*, 68(4):191–194, 1993.

- [46] K. Matan, R. B. Williams, T. A. Witten, and S. R. Nigel. Crumpling a thin sheet. *Physical Review Letters*, 88(7):076101, 2002.
- [47] M.A.F. Gomes, T.I. Jyh, T.I. Ren, I.M. Rodrigues, and C.B.S. Furtado. Mechanically deformed crumpled surfaces. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 22:1217–1221, 1989.
- [48] C.C. Donato, V.P. Brito, and M.A.F. Gomes. A ser publicado. *Physica A*, 2006.
- [49] S. Havlin, Z. V. Djordjevid, I. Majid, H. E. Stanley, and G. H. Weiss. Relation between dynamic transport properties and static topological structure for the lattice-animal model of branched polymers. *Physical Review Letters*, 53(2):178– 181, 1984.
- [50] C. C. Donato, F. A. Oliveira, and M. A. F. Gomes. Anomalous diffusion on crumpled wires in two dimensions. *Physica A*, page In Press, 2006.
- [51] F.D.A. Aaraão Reis. Finite-size scaling for random walks on fractals. Journal Physics A: Math. Gen., 28(22):6277–6287, 1995.
- [52] M. A. F. Gomes and J. H. P. Soares. Electrical resistance of crumpled surfaces. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 22(989–990), 1989.
- [53] A. Aharony and D. Stauffer. Possible Breakdown of the Alexander-Orbach Rule at Low Dimensionalities. *Physical Review Letters*, 52(26):2368–2370, 1984.
- [54] S. S. Manna and A. K. Roy. Resistance and spectral dimension of self-avoiding walks with local bridges. *Physical Review A*, 35(9):4023–4026, 1987.
- [55] T. A. Witten and H. Li. Asymptotic shape of a fullerene ball. *Europhys. Lett.*, 23:51–55, 1993.
- [56] P. Flory. *Principles of Polymer Chemistry, Cap. XII*. Cornell University Press, Ithaca-N.Y., 1971.

- [57] C. Allègre. As Fúrias da Terra. Relógio DÁgua Editores, Lisboa, 1993.
- [58] U.S. Geological Survey. Active Volcanoes and Plate Tectonics, Hot Spots and the Ring of Fire. http://vulcan.wr.usgs.gov/home.html, 1987.
- [59] H. J. Herrmann and H. T. Stanley. The fractal dimension of the minimum path in two- and three-dimensinal percolation. *Journal Physics A: Math. Gen.*, 21:L829– L833, 1988.
- [60] J. B. C. Garcia, M. A. F. Gomes, T. I. Jyh, and T. I. Ren. Critical properties of non-equilibrium crumpled systems. *Journal Physics A: Math. Gen.*, 25:L353– L357, 1992.