



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PIAUÍ- UFPI  
CENTRO DE CIÊNCIAS DA NATUREZA - CCN  
PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Núbia Ribeiro Machado

**Contribuições ao estudo de sistemas  
amassados**

TERESINA/2016



Núbia Ribeiro Machado

## Contribuições ao estudo de sistemas amassados

Dissertação apresentada como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Física da Matéria Condensada pelo Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Piauí.

**Orientador: Valdemiro da Paz Brito**

(Universidade Federal do Piauí)

**Co-orientador: Marcelo Andrade Filgueiras Gomes**

(Universidade Federal de Pernambuco)

Teresina, Fevereiro 2016

Núbia Ribeiro Machado

## Contribuições ao estudo de sistemas amassados

Comissão Julgadora:

---

Prof. Dr. Valdemiro da Paz Brito/ UFPI  
(Orientador)

---

Prof. Dr. Marcelo Andrade Filgueiras  
Gomes/ UFPE  
(Co-orientador)

---

Prof. Dr. José Pimentel de Lima/ UFPI  
(Membro interno)

---

Prof. Dr. Ricardo Emmanuel de Souza/  
UFPE  
(Membro externo)

Teresina, Fevereiro 2016

*”Aos meus pais, Virginia Maria Ribeiro de Freitas Machado e João de Macêdo Machado, pelo amor, dedicação e apoio às minhas decisões como profissional, e aos meus tios (Vera Lúcia e Elias) pelo apoio durante a graduação e pós-graduação.”*

# Agradecimentos

Os meus agradecimentos iniciais irão para meus pais Virgínia Maria e João, que sempre incentivaram os meus projetos de vida pessoal e profissional. Meus pais são exemplos de humildade, força de vontade, alegria e amor, nunca mediram esforços para que eu trilhasse meu caminho, minha gratidão a eles é sem fim.

Tenho que agradecer aos meus tios, Vera Lúcia e Elias, por me acolherem durante a graduação e o mestrado, sem eles tudo seria muito difícil. Ao meu irmão por sempre acreditar nos meus sonhos. Gostaria também de agradecer aos meus amigos de longa jornada de graduação e mestrado João Victor e Wellington, obrigado pelo companherismo, amizade, e discussões compartilhadas ao longo destes sete anos.

Agradecer aos meus amigos Isabel, Solano, Mariana, Giovane, Fabrício, Maria Lúcia e aos demais pelas conversas e alegrias compartilhadas. Não posso deixar de agradecer ao professor José Pimentel, um grande homem e professor que se dispôs a me ajudar com seus conselhos e ensinamentos. Obrigado ao meu orientador professor Valdemiro da Paz Brito, pelo convívio, cuidado, sempre demonstrados nesses 7 anos de convivência. Ao professor Marcelo Gomes pela colaboração, incentivo e ensinamentos durante a graduação e mestrado. Em fim não posso deixar de agradecer ao Thiago Sobral por sua ajuda e conselhos sempre válidos, à secretária da pós-graduação Eugênia pela amizade e os serviços agilizados.

# Resumo

A Física de estruturas formadas a partir do empacotamento de fios em cavidades bidimensionais tem sido explorada nos últimos anos em conexão com sistemas amassados e uma série de temas que vão desde aplicações para a embalagem de DNA em cápsulas virais à teoria de gravidade quântica bidimensional [1, 2]. O fio quando injetado numa cavidade bidimensional se dobra formando uma estrutura rígida composta por uma série de estruturas fechadas que chamamos de alças ou laços. Neste trabalho estudamos a extração de um fio empacotado em uma cavidade circular bidimensional com o objetivo de remover laços individualmente e mensurar a força necessária para desempacotar estas estruturas. O tamanho de cada alça removida, o valor máximo da força necessária para desempacotar cada alça, e o comprimento total do fio extraído foram medidos e relacionados com um crescimento exponencial e um modelo de campo médio consistentes com a literatura de arames amassados. Leis de escala para este processo são comentadas, bem como a relação entre os processos de empacotamento e desempacotamento do fio.

A estrutura da exposição desta dissertação é a que segue: no capítulo 1 fazemos uma revisão detalhada dos trabalhos existentes na literatura [1, 3, 4], os quais reportam informações importantes para o estudo de fios empacotados em cavidades bidimensionais até o momento. No capítulo 2 apresentamos nosso procedimento experimental de empacotamento e desempacotamento de fios nas cavidades circulares com  $d = 15$  cm e  $d = 22$  cm, enfatizando a formação e a construção do aparato e das estruturas formadas. No capítulo 3 discutimos modelos estatísticos dos processos a partir dos dados experimentais obtidos. Finalmente, no capítulo 4 apresentamos nossas conclusões sobre o tema aqui discutido.

**Palavras-chaves:** Empacotamento e desempacotamento de fios; Cavidades bidimensionais; Leis de escala.

# Abstract

The physics of structures built from packed wires in two-dimensional cavities has been explored in recent years in connection with crumpled systems and several topics going from applications to DNA packing in viral capsids to the theory of two-dimensional quantum gravity. When a long piece of wire is injected into two-dimensional cavities, it bends and originates in the jammed limit a series of closed structures that we call loops. In this work, we study the extraction of a packed wire from a circular cavity aiming to remove loops individually and to measure the force needed to unpack these loops. The size of each removed loop, the maximum value of the force needed to unpack each loop, and the total length of the extracted wire were measured and related to an exponential growth and a mean field model consistent with the literature of crumpled wires. Scaling laws for this process are reported as well as the relationship between the processes of packing and unpacking.

The structure of this work is the following: In chapter 1, we have a detailed review of already existing works, which bringing relevant information about the study of packed wires in two-dimensional cavities. In chapter 2, we present our experimental methods of packing and unpacking of wire in circular cavities with  $d = 15$  cm and  $d = 22$  cm, stressing the formation and construction of the apparatus and of the structures that were made. In chapter 3, we discuss the statistical models of the processes from the experimental data that we obtained. Finally, in chapter 4, we present the conclusions about our work.

## FICHA CATALOGRÁFICA

Serviço de Processamento Técnico da Universidade Federal do Piauí  
Biblioteca Setorial de Ciências da Natureza - CCN

M151c Machado, Núbia Ribeiro.  
Contribuições ao estudo de sistemas amassados / Núbia  
Ribeiro Machado. – Teresina: 2016.  
64 f.: il

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Piauí,  
Centro de Ciências da Natureza, Pós-graduação em Física,  
2016.

Orientador: Prof. Dr. Valdemiro da Paz Brito.

Coorientador: Prof. Dr. Marcelo Andrade de Filgueiras  
Gomes.

1. Física. 2. Matéria Condensada. 3. Fios Empacotados. 4.  
Empacotamento Bidimensional. I. Título.

CDD 530.41



# Sumário

## Lista de Figuras

## Lista de Tabelas

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	p. 15
1.1	Arames amassados em duas dimensões . . . . .	p. 15
1.2	Relação massa-tamanho para fios amassados em 2D . . . . .	p. 18
1.3	Método de contagem por caixas para fios amassados em cavidades 2D . . . . .	p. 20
1.4	Estrutura do empacotamento do fio em 2D . . . . .	p. 21
1.5	O modelo hierárquico . . . . .	p. 23
1.6	Condensação de energia para fios confinados em cavidades 2D . . . . .	p. 24
1.7	DNA <i>versus</i> arames empacotados em 2D . . . . .	p. 28
<b>2</b>	<b>Procedimento Experimental</b>	p. 31
2.1	Montagem experimental . . . . .	p. 31
2.2	Taxa de ocupação . . . . .	p. 35
2.3	Processo de desempacotamento das alças . . . . .	p. 36
2.4	Definição de uma alça . . . . .	p. 37
<b>3</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	p. 39
3.1	Tamanho médio de uma alça . . . . .	p. 39
3.2	A força para desempacotar um único laço . . . . .	p. 41
3.3	O comprimento extraído . . . . .	p. 44

3.4 A força para desempacotar o fio . . . . .	p. 45
<b>4 Conclusões</b>	p. 50
<b>Apêndice A - Artigo publicado</b>	p. 51
<b>Referências</b>	p. 65

# Lista de Figuras

1.1	Esquema da disposição do ângulo de injeção do fio, na cavidade bidimensional utilizada nos experimentos realizados na literatura [1]. . . . .	p. 16
1.2	Disposição do fio na cavidade para (a) $L = 50$ cm, (b) $L = 150$ cm, (c) $L = 300$ cm e (d) $L = 470$ cm [1]. . . . .	p. 17
1.3	Dependência massa-tamanho para configurações de fios amassados em duas dimensões, com comprimento $L$ médio igual a 438 cm [1]. . . . .	p. 19
1.4	Gráfico log-log do número médio $N(\varepsilon)$ . . . . .	p. 20
1.5	Número de laços em função da fração da área ocupada pelo arame [1]. A linha contínua corresponde ao valor teórico encontrado através do modelo hierárquico, seção 1.5. . . . .	p. 21
1.6	Função distribuição de áreas delimitadas por alças normalizadas [1]. . . . .	p. 22
1.7	Unidade básica (alça) isolada observada nas estruturas de fio amassado (à esquerda) e curvatura do fio de diâmetro $\zeta$ segundo um raio de curvatura $R$ [5]. . . . .	p. 25
1.8	Gráfico do número $N(\varepsilon)$ de caixas de tamanho $\varepsilon$ necessárias para o recobrimento das regiões onde a energia está mais condensada [6]. . . . .	p. 26
1.9	Distribuição de massa corrigida para as regiões selecionadas das configurações de arame de cobre amassados em cavidades bidimensionais [6]. . . . .	p. 26
1.10	Regiões onde a energia elástica de curvatura está concentrada. . . . .	p. 26
1.11	Estrutura do DNA e suas bases nitrogenadas [7]. . . . .	p. 28
1.12	Dependência do comprimento do DNA com o diâmetro da cápsula viral para 45 espécies de vírus diferentes [8]. . . . .	p. 29
2.13	Cavidade circular bidimensional utilizada para o estudo do desempacotamento controlado de fios. . . . .	p. 32

2.14	Padrão de empacotamento realizado com fio de cobre, na cavidade com diâmetro $d = 15$ cm. . . . .	p. 33
2.15	Padrão de empacotamento realizado com fio de cobre, na cavidade com diâmetro $d = 22$ cm. . . . .	p. 33
2.16	Padrão de empacotamento realizado com fio de nylon, na cavidade com diâmetro $d = 15$ cm. . . . .	p. 34
2.17	Padrão de empacotamento realizado com fio de nylon, na cavidade com diâmetro $d = 22$ cm. . . . .	p. 34
2.18	Arranjo utilizado para o processo de desempacotamento de fios em cavidades bidimensionais de diâmetro, $d = 15$ cm e $d = 22$ cm. . . . .	p. 36
2.19	Processo de formação das alças, caracterizadas pelos contatos fio-fio. . .	p. 37
2.20	Sequência de imagens reais em um experimento mostrando o desempacotamento controlado de uma única alça da cavidade bidimensional [9].	p. 37
3.21	Tamanho médio dos laços (isto é, o comprimento do arco), $\lambda$ (cm), em função da ordem da fração de desempacotamento, $n/N$ , para fios de cobre na cavidade com $d = 15$ cm (quadrados escuros) e $d = 22$ cm (círculos abertos). As linhas inclinadas mostram o melhor ajuste da equação 3.1 para os dados com $d = 15$ cm (linha contínua) e $d = 22$ cm (linha tracejada) [9]. . . . .	p. 40
3.22	Gráfico da força $F$ (em Newtons) necessária para puxar uma alça para fora da cavidade em função de $\zeta/\lambda$ , para fios de cobre na cavidade de diâmetro de $d = 15$ cm [9]. . . . .	p. 42
3.23	Gráfico da força $F$ (em Newtons) necessária para puxar uma alça para fora da cavidade em função de $\zeta/\lambda$ , para fios de cobre na cavidade de diâmetro $d = 22$ cm [9]. . . . .	p. 42
3.24	Esquema de dobramento de um arame reto em uma alça [9]. . . . .	p. 43
3.25	Gráfico da variável $(l + A)$ como uma função de $n$ , para as cavidades com $d = 15$ cm e $22$ cm [9]. . . . .	p. 45
3.26	Gráfico da força $F$ (em Newtons) necessária para retirar um pedaço de arame cuja fração de comprimento fora da cavidade é $l$ para fios de cobre na cavidade de diâmetro com $d = 15$ cm [9]. . . . .	p. 46

3.27 Gráfico da força  $F$  (em Newtons) necessária para retirar um pedaço de arame cuja fração de comprimento fora da cavidade é  $l$  para fios de cobre na cavidade de diâmetro com  $d = 22$  cm [9]. . . . . p. 47

# Lista de Tabelas

1	Média da taxa de ocupação na cavidade bidimensional utilizada. . . . .	p.35
---	--	------

# 1 Introdução

Neste capítulo apresentaremos uma revisão dos estudos publicados nas últimas duas décadas sobre amassamentos de fios em duas dimensões.

## 1.1 Arames amassados em duas dimensões

O amassamento é um processo que muda determinadas características de um material, como por exemplo a ocupação do espaço no qual ele está inserido. Este processo desperta um grande interesse científico, por ser observado em diferentes fenômenos físicos na natureza. O trabalho publicado por M. A. F Gomes na década de 1980 sobre amassamento [10], descreve propriedades estatísticas através da análise de superfícies amassadas de papel comum. Nesse trabalho observou-se que objetos como o papel comum, com dimensão topológica  $d_t = 2$ , quando amassado em um formato aproximadamente esférico ocupam um espaço tridimensional. No entanto análises realizadas para essas estruturas mostram que a dimensão ocupada é fractal ( $D = 2,5$ ) [10], visto que o papel não preenche todo o espaço tridimensional disponível. Após a análise das superfícies de papel comum amassadas [10], iniciou-se o estudo do amassamento de fios de cobre e de solda em cavidades tridimensionais [3]. Posteriormente, o interesse em sistemas bidimensionais com propriedades físicas geradas a partir dos processos de amassamentos de materiais foi despertado, isto se deve à necessidade de compreensão de sistemas complexos presentes na natureza [11].

Os primeiros processos de amassamento de arames em duas dimensões abordados na literatura foram realizados por Gomes, Donato e Souza (2002, 2007) [1, 6, 12]. Nestes o fio era injetado numa cavidade circular transparente, formada pela superposição de dois discos de acrílico, fixados por parafusos, com diâmetro interno de 20 cm e espaçamento de 0,11 cm de altura entre as placas de acrílico. O espaçamento controlado entre os discos de acrílico impedia a superposição do fio no interior da cavidade. A injeção do fio ocorria de forma progressiva com velocidade média constante aproximadamente de 1 cm/s, sendo

o fio injetado simultaneamente por dois canais de injeção que formavam um ângulo entre si de  $10^\circ$ ,  $90^\circ$  e  $180^\circ$ , ver Figura 1.1.

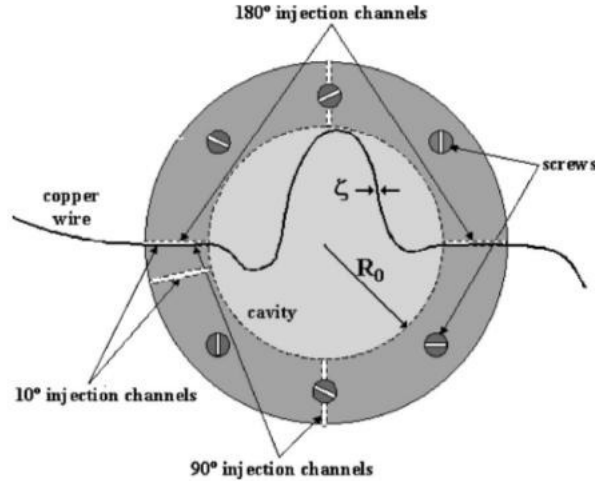


Figura 1.1: Esquema da disposição do ângulo de injeção do fio, na cavidade bidimensional utilizada nos experimentos realizados na literatura [1].

Quando inserido na cavidade o arame se acomodava preenchendo aleatoriamente o interior da célula. À medida que o processo de empacotamento avançava identificava-se o primeiro contato fio-fio, formando uma curva fechada simples que denominava-se laço ou alça, Figura 1.2(a), [1]. A estrutura formada quando o fio era injetado na cavidade tornava-se rígida à medida que o sistema evoluía, aumentando a dificuldade de injeção. No entanto o processo de amassamento era independente da velocidade de injeção. Novos laços surgiram formando uma cascata de laços até alcançar a máxima taxa de ocupação (empacotamento rígido), quando se tornava impossível introduzir mais arame na cavidade.

Uma das primeiras características observadas no sistema amassado foi o comprimento crítico para a formação de uma alça. O fio fino de comprimento  $L$  quando empacotado se curvava e seu comprimento era levemente maior que o diâmetro da cavidade,  $2R_0$ , dado pela razão adimensional:

$$\eta = \frac{h_1}{2\pi R_0} = 0,684 \pm 0,008, \quad (1.1)$$

onde  $h_1$  era o comprimento total de fio necessário para formar o primeiro contato fio-fio.

As figuras geométricas formadas pelo conjunto de alças, apresentavam uma estrutura com padrões heterogêneos e características complexas como podemos observar na Figura 1.2. O estudo realizado em [1], foi concentrado nas configurações com taxa de ocupação



máxima da cavidade bidimensional, com ângulo de inserção igual a  $180^\circ$ , este limite de empacotamento comportava diferentes valores do comprimento  $L$  do fio inserido na cavidade, variando de 410 a 470 cm.

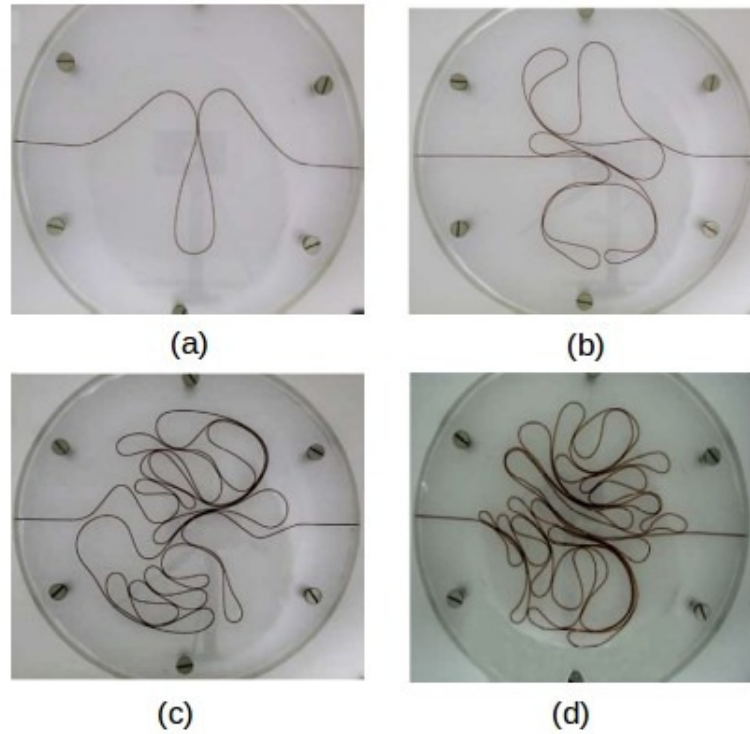


Figura 1.2: Disposição do fio na cavidade para (a)  $L = 50$  cm, (b)  $L = 150$  cm, (c)  $L = 300$  cm e (d)  $L = 470$  cm [1].

O fio quando injetado na cavidade bidimensional, aumentava gradualmente o número de contatos fio-fio e conseqüentemente ocorreria a formação de alças (delimitando áreas) no interior da cavidade bidimensional, as quais dificultavam a injeção do fio. Segundo C. C. Donato e co-autores, as interações progressivas formavam o empacotamento rígido, observado quando a força do injetor era incapaz de introduzir mais fio no interior da cavidade.

A taxa de ocupação para o empacotamento rígido na cavidade circular bidimensional foi estimada pela razão entre a área do fio injetado e a área da cavidade, dada pela equação (1.2), obtendo-se:

$$P_m = \frac{\zeta L_m}{\pi R_0^2} = 0,140 \pm 0,006 \quad (1.2)$$

para  $\theta = 180^\circ$ , onde  $L_m$  correspondia ao comprimento máximo injetado e  $R_0$  ao raio da cavidade circular. Os processos de injeção do fio no interior da cavidade, também foram realizados para outras geometrias de injeção,  $10^\circ$  e  $90^\circ$  entre os canais, mostrados na

Figura 1.1. A taxa de empacotamento máximo encontrada, respectivamente, para estas disposições foram,  $p_m = 0,135 \pm 0,01$  e  $p_m = 0,11 \pm 0,02$ . Através da análise da fração de empacotamento, para os ângulos disponíveis de injeção mostrados na Figura 1.1, foi observado que a taxa de ocupação na cavidade independe da velocidade e do ângulo de injeção do fio. critério este estabelecido para a restrição da análise aos dados obtidos através da injeção pelos canais com  $180^\circ$ , entre si. Para verificar os efeitos do atrito na formação dos arranjos, foi utilizado um lubrificante (óleo mineral), onde os valores obtidos estavam em perfeito acordo com o regime de empacotamento rígido sem o uso de lubrificante [1]. Veremos nas próximas seções que estudos detalhados das configurações de fios amassados foram realizados e discutidos, através do uso de diversas propriedades estatísticas realizadas na literatura [1, 6, 8].

## 1.2 Relação massa-tamanho para fios amassados em 2D

A noção de dimensão é um ponto fundamental no estudo de propriedades físicas. Segundo o matemático Kolmogorov, a noção de dimensão fractal está ligada à capacidade de um conjunto ou objeto preencher o espaço no qual está imerso. Os fractais são conjuntos cujas formas são irregulares ou fragmentadas e possuem, em geral, uma dimensão fractal não-inteira [13]. A dimensão fractal, de certo modo, mensura o grau de liberdade ou fragmentação do sistema considerado. Existem várias maneiras de se definir um fractal, uma delas talvez a mais simples, seja a que diz respeito à condição de invariância geométrica do objeto quando observado em escalas diferentes. As leis ou comportamento tipo lei de escala que surgem em muitos fenômenos naturais com características fractais, descrevem sistemas que evoluem longe do equilíbrio através das propriedades de escalas. A relação massa-tamanho para fios amassados discutida na literatura [1], nos mostrou uma lei de escala caracterizada pelas propriedades da estrutura geométrica do sistema que caracterizam a dimensão fractal das estruturas. Esta relação massa-tamanho é dada pela dependência de massa  $M(R)$  dentro de um círculo com raio ( $R$ ):

$$M(R) \sim R^D, \quad (1.3)$$

onde o expoente  $D$  é a dimensão fractal.

O método estatístico definido através da relação massa-tamanho para fios amassados

apresentou uma lei de potência de  $M(R)$  escalonando com  $R$  ao longo de duas décadas de variabilidade do raio, de  $R = 0,1$  cm a  $R = 10$  cm. Para esta análise, foram utilizados configurações de fios amassados associados a 7 empacotamentos rígidos com comprimento médio de  $L = 438$  cm, correspondente à média dos comprimentos variando de 410 a 470 cm .

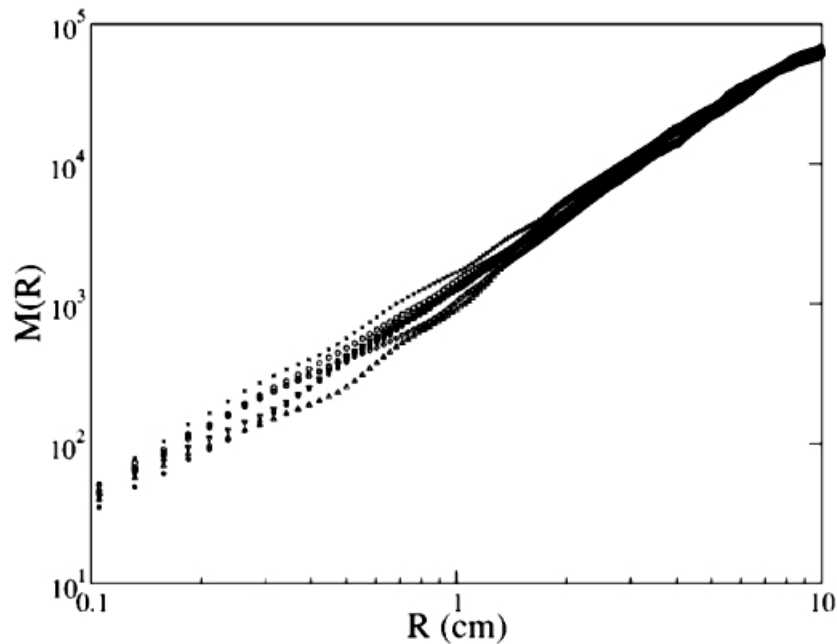


Figura 1.3: Dependência massa-tamanho para configurações de fios amassados em duas dimensões, com comprimento  $L$  médio igual a 438 cm [1].

O expoente encontrado através do gráfico log-log na Figura 1.3 acima, determinou a dimensão fractal para o fio amassado em uma cavidade bidimensional, referente ao empacotamento rígido, com valor igual a  $D = 1,9 \pm 0,17$  [1]. Este expoente se observarmos difere do expoente do espaço no qual a estrutura está mergulhada (dimensão euclidiana topológica  $d=2$ ), embora possa ser considerado igual pelas barras de incerteza. Outra forma de obter a dimensão fractal da estrutura é o método de contagem por caixas discutido na literatura [1] e abordado na seção 1.3.

### 1.3 Método de contagem por caixas para fios amassados em cavidades 2D

As estruturas amassadas como vimos na seção anterior, seção 1.2, são estruturas que possuem dimensão fractal definida. O método de contagem de caixas consiste em fixarmos uma malha sobre a figura fractal, determinando a quantidade de caixas necessárias para cobrir a figura. Posteriormente o tamanho das caixas são refinados, diminuindo o tamanho das caixas e aumentando a quantidade de caixas necessárias para cobrir a figura fractal. As propriedades geométricas das estruturas amassadas também foram analisadas através do método de contagem de caixas, estabelecendo a dependência do número de caixas  $N(\epsilon)$  de tamanho  $\epsilon$  necessárias para cobrir a estrutura confinada no interior da cavidade. A Figura 1.4, mostra a relação seguinte:

$$N(\epsilon) \sim \epsilon^{-D'}, \quad (1.4)$$

sendo que  $D'$  corresponde à dimensão fractal para fios amassados em cavidades bidimensionais encontrada através do método de contagem de caixas com regime de empacotamento rígido. Através do gráfico, Figura 1.4, foi obtido o expoente  $D' = 1,7 \pm 0,1$ . Dentro das flutuações estatísticas o valor do expoente encontrado possui comportamento semelhante ao expoente encontrado através da relação massa-tamanho apresentado na literatura por C. C. Donato, seção 1.2. O método de contagem de caixas confirma a dimensão fractal das estruturas amassadas em cavidades bidimensionais obtidas na relação massa-tamanho discutida na seção 1.2.

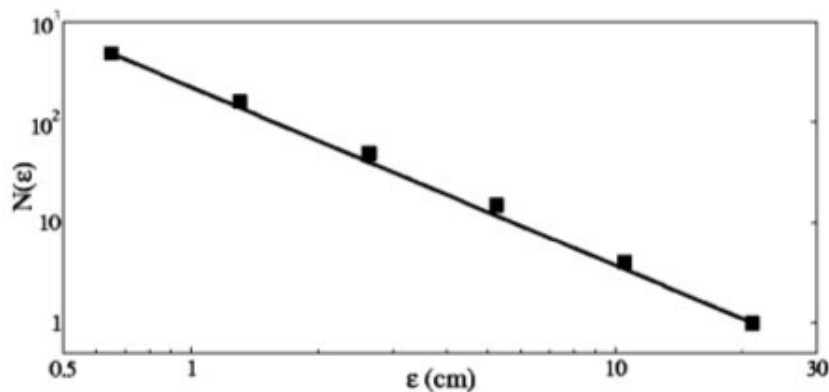


Figura 1.4: Gráfico log-log do número médio  $N(\epsilon)$  de caixas de tamanhos  $\epsilon$  necessárias para cobrir cada configuração de fio amassado na cavidade 2D.

Os estudos aqui abordados até o momento, relacionam leis de escalas com a dimensão fractal determinada para o sistema amassado descrito na literatura [1]. A partir disso novas relações foram discutidas, e uma delas é a distribuição do número de alças em função da área ocupada pelo arame, seção 1.4.

## 1.4 Estrutura do empacotamento do fio em 2D

O fio quando injetado na cavidade se dobra aumentando os contatos fio-fio designados por alças ou laços, Figura 1.2(d), em consequência o número total de alças  $n_l$  também aumentava. O estudo da dependência experimental do número de laços com a fração de ocupação da cavidade foi analisado a partir da evolução da quantidade de laços ( $n_l$ ) em função da fração da área ocupada pelo arame ( $p$ ).

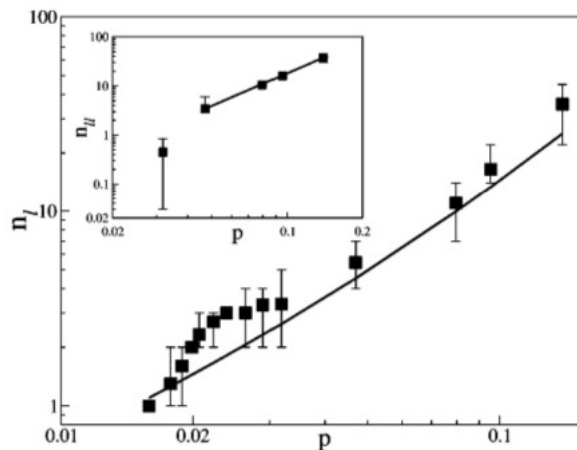


Figura 1.5: Número de laços em função da fração da área ocupada pelo arame [1]. A linha contínua corresponde ao valor teórico encontrado através do modelo hierárquico, seção 1.5.

A partir do gráfico principal, Figura 1.5, verificou-se a existência de dois comportamentos distintos no gráfico. Na região onde a taxa de ocupação é,  $p \lesssim 0,032$ , observou-se uma alta taxa de formação de laços, região esta com aspecto de um ombro. A lei de potência é observada para a região onde  $0,032 \lesssim p \lesssim 0,14$ , através da relação:

$$N(p) \sim p^\gamma, \quad (1.5)$$

com  $\gamma = 1,8 \pm 0,2$  [1].

O número de contatos entre as alças representado por  $n_{ll}$ , obtido através da interação

do fio, quando alcançado o empacotamento rígido, foi observado através da relação (1.6) mostrada no gráfico interno da Figura 1.5.

$$n_l \sim p^{2,20 \pm 0,01} \quad (1.6)$$

O expoente encontrado experimentalmente mostra, segundo C. C. Donato, ser compatível com o argumento de campo médio tipo-Flory [1]. Isto sugeria, a partir das idéias de Flory, através da existência de interações auto-excludentes (energia repulsiva), que o número de contatos entre alças deveria escalar com a densidade de energia repulsiva, com  $p^2$ . Os experimentos realizados na literatura [1], possuem o mesmo limite de empacotamento rígido e estão associados a configurações de fios amassados com um número total de alças variando no intervalo de  $n_l = 22$  a  $n_l = 45$  [1].

A função distribuição de áreas delimitadas por alças, Figura 1.6, mostra um ajuste linear com um comportamento de lei de potência, a partir da relação:

$$n(s) = s^{-1,4 \pm 0,2} \quad (1.7)$$

O expoente encontrado experimentalmente na relação (1.7), mostra o comportamento da lei potência obtido através da distribuição de áreas discretizadas,  $s$ , das alças.

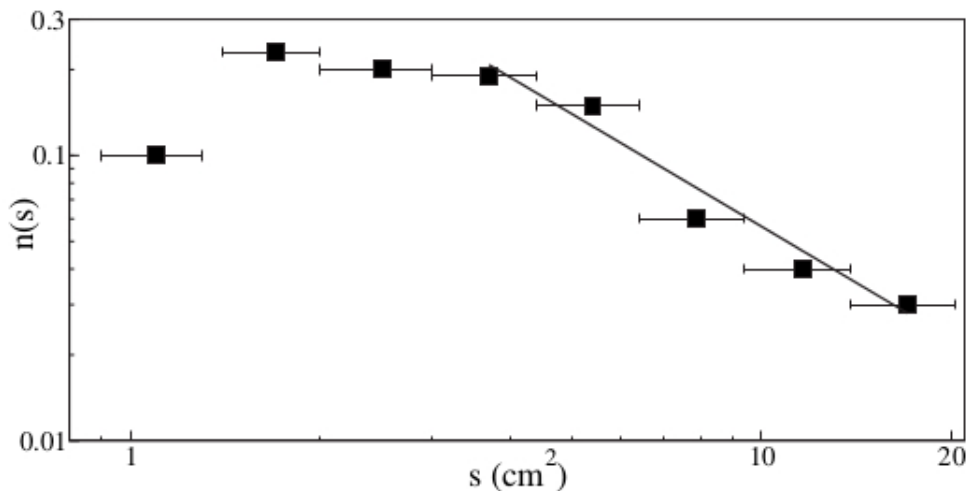


Figura 1.6: Função distribuição de áreas delimitadas por alças normalizadas [1].

Na seção 1.5, iremos apresentar o modelo hierárquico adequado em [1], para estimar a função distribuição de áreas delimitadas por alças, através das configurações espaciais de fios amassados. Veremos que o modelo hierárquico criado a partir das interções fio-fio, se mostrou adequado aos dados experimentais encontrados na Figura 1.6.

## 1.5 O modelo hierárquico

O modelo hierárquico descrito na literatura [1], introduz uma explicação para os dados experimentais obtidos a partir da distribuição de áreas delimitadas por alças. Verificando a estrutura, Figura 1.2, as alças são unidades básicas que constituem o padrão geométrico obtido através da injeção do fio na cavidade bidimensional. A equação 1.1, descrita anteriormente estabelece que a razão adimensional entre o comprimento injetado para a formação do primeiro laço e o perímetro da cavidade crítico de uma alça é  $\eta \equiv \frac{h_1}{2\pi R_0} = 0,684 \pm 0,008$ , onde  $h_1$  é o comprimento da primeira alça formada e  $R$  o raio da cavidade. Dentro da cavidade foi observada a existência de uma hierarquia de interações  $i = 1, 2, 3 \dots$ , para que haja  $n_i$  alças na interação  $i$  com um perímetro característico, ( $h_i$ ), para a formação de uma nova alça. O perímetro total de todas as alças é o comprimento  $L$  do fio introduzido dentro da cavidade:

$$L = \sum_{i=1}^I n_i h_i, \quad (1.8)$$

onde  $I$  corresponde ao número máximo de interações. Admitiu-se que  $h_i$ , o perímetro característico unitário, e  $n_i$ , o número de alças formadas, sejam controlados, respectivamente, por duas constantes  $\eta$  e  $\nu$ :

$$h_i = \eta^{i-1} h_1, \quad (1.9)$$

com  $\eta < 1$ ; e,

$$n_i = \nu^{i-1}, \quad (1.10)$$

com  $\nu > 1$ , eliminando (i) das equações, 1.9 e 1.10, obteve-se a função distribuição de perímetro das alças,

$$n(h) = \left( \frac{h}{h_i} \right)^D ; D = D(\eta, \nu) = \frac{\ln \eta}{\ln \nu^{-1}}. \quad (1.11)$$

A dimensão fractal, segundo C. C. Donato e co-autores, está relacionada aos parâmetros descritos à hierarquia de laços de fios amassados, no limite de empacotamento rígido, apresentados no modelo hierárquico. O modelo hierárquico sugere que, com  $\eta < 1$ , os laços diminuem de tamanho e com  $\nu > 1$ , a quantidade de laços aumenta a cada interação obtida no padrão geométrico. Se substituirmos, por exemplo,  $\nu = 2$  na equação 1.11, obtem-se  $\eta = 0,69 \pm 0,01$ , que corresponde ao valor encontrado experimentalmente para

o primeiro laço ou alça formado no interior da cavidade.

Em seguida admitiu-se que a área delimitada por uma alça de perímetro  $h$  escala como  $s \sim h^d$ , obtendo:

$$n(s) = \left( \frac{s}{s_1} \right)^{-\tau}, \quad (1.12)$$

onde  $s_1$  é a área delimitada pela primeira alça, e

$$\tau = \frac{D + d - 1}{d}. \quad (1.13)$$

Através da relação massa-tamanho, seção 1.2, encontrou-se o valor da dimensão fractal  $D = 1,9 \pm 0,1$ , para fios amassados. Substituindo a dimensão fractal encontrada experimentalmente e  $d = 2$ , sendo o expoente euclidiano do espaço no qual a estrutura está imersa, verificou-se que o valor numérico encontrado na relação (1.13), é  $\tau = 1,45 \pm 0,10$ . O modelo hierárquico desenvolvido em [1], tem a capacidade de explicar a distribuição de tamanhos das alças delimitadas numa área  $s$ . Se verificarmos na seção 1.4, podemos observar a distribuição de alças médias por áreas delimitadas  $s$  encontrada experimentalmente, com expoente igual a  $(1,4 \pm 0,2)$ , apresentando concordância com o expoente encontrado a partir do modelo hierárquico introduzido na literatura [1].

## 1.6 Condensação de energia para fios confinados em cavidades 2D

O simples ato de dobrarmos um fio, pode nos mostrar diferentes propriedades de um sistema amassado. Os materiais sólidos dependendo da tensão aplicada, sofrem transformações elásticas ou até mesmo plásticas. Estudos realizados com o dobramento do papel comum, mostram que ao amassarmos o papel iremos notar o surgimento de pontos curvos (cantos ou pontes), regiões estas que apresentam maior singularidade e possuem em torno de 80% da energia armazenada no sistema amassado [14]. No processo de empacotamento de fios foi observado que estas estruturas amassadas, podem ser estudadas de maneira análoga aos sistemas de papel amassado.

Observando as estruturas amassadas em [1, 6], verificou-se que as curvas das alças necessitam de uma quantidade maior de energia para serem geradas. Neste trabalho sobre estruturas amassadas foi introduzido o estudo do dobramento de fios em cavidades



bidimensionais, permitindo medir a dimensão do conjunto de alças onde a energia foi dissipada ou armazenada [6]. Os sistemas utilizados para análise possuem propriedades semelhantes aos sistemas abordados nas seções anteriores, seções (1.1 a 1.5). Os laços ou alças, nas análises apresentadas na literatura, até o momento, são unidades constituintes fundamentais das configurações de fios amassados e através da caracterização destas estruturas é possível determinar uma análise dimensional do sistema. A análise proposta na literatura [6], determina que a estrutura do laço, isoladamente, pode ser considerada como uma combinação de dois segmentos divergentes de retas, unidos por um arco de curvatura  $R$ , Figura 3.7. A partir desta configuração isolada de uma única alça, observou-se que através de argumentos mecânicos e geométricos, a energia elástica por unidade de área envolvida na curvatura de um fio de diâmetro  $\zeta$ , segundo um raio de curvatura  $R$ , é proporcional ao quadrado da curvatura. Para análise dos experimentos foram selecionados regiões cuja curvatura é diferente de zero, nas quais a energia empregada para obter as configurações de fio amassados em duas dimensões está armazenada [6].

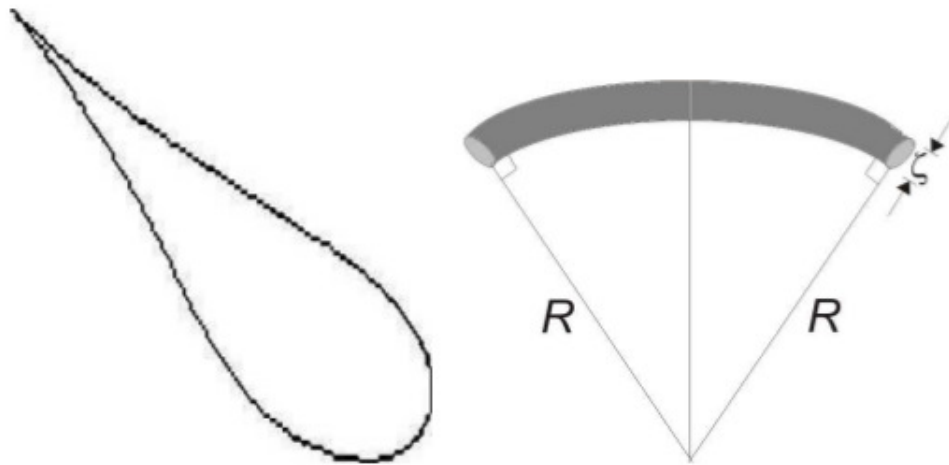


Figura 1.7: Unidade básica (alça) isolada observada nas estruturas de fio amassado (à esquerda) e curvatura do fio de diâmetro  $\zeta$  segundo um raio de curvatura  $R$  [5].

O método *box-counting* (método das caixas), seção 1.3, foi utilizado para testar a invariância de escala, a partir da observação do subconjunto formado pelas regiões com curvaturas diferentes de zero, regiões as quais se concentra a energia empregada para obter as configurações de fios amassados, está devidamente distribuída. A Figura 1.8, mostra a dependência de escala:

$$N(\epsilon) \sim \epsilon^{-D_E}, \quad (1.14)$$

com  $D_E = 1,0 \pm 0,1$ ,

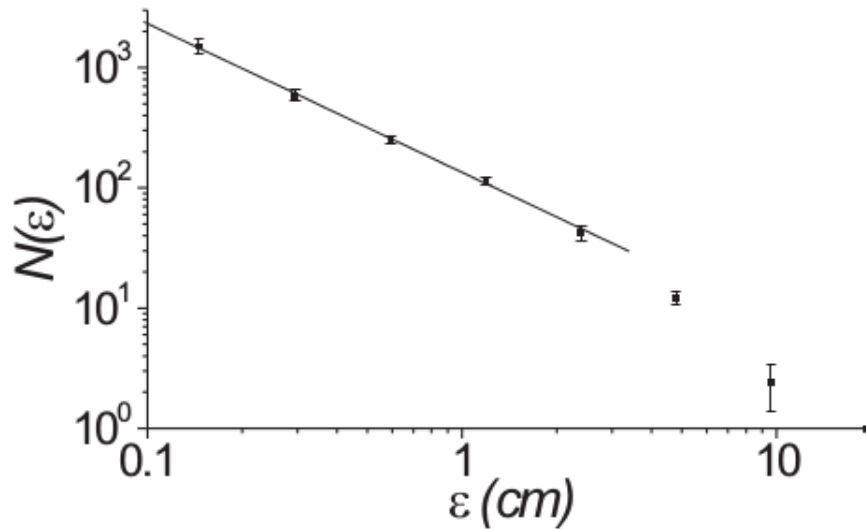


Figura 1.8: Gráfico do número  $N(\varepsilon)$  de caixas de tamanho  $\varepsilon$  necessárias para o recobrimto das regiões onde a energia está mais condensada [6].

expoente este diferente da dimensão fractal encontrada, quando a massa total do sistema é considerada, seções 1.2 e 1.3. Para confirmação do expoente do subconjunto formado pelas regiões com curvatura diferente de zero, Figura 1.10, C. C. Donato e co-autores analisaram adicionalmente a relação massa-tamanho, que determina a dependência da massa  $M(R)$  do sistema dentro de um círculo de raio  $R$ , Figura 1.9.

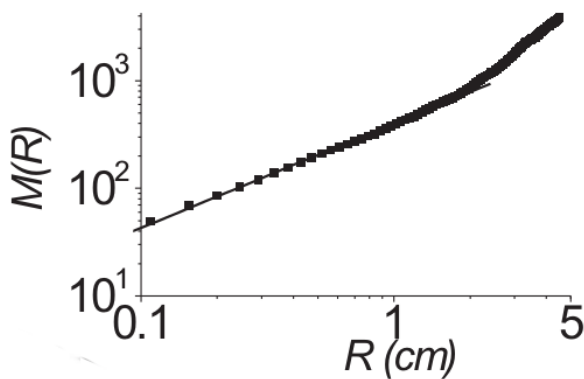


Figura 1.9: Distribuição de massa corrigida para as regiões selecionadas das configurações de arame de cobre amassados em cavidades bidimensionais [6].

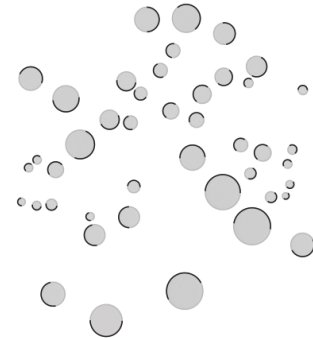


Figura 1.10: Regiões onde a energia elástica de curvatura está concentrada.

A relação de massa reentrante, baseada no comportamento da massa do sistema amassado dentro de um círculo, encontrada foi:

$$M(R) \sim R^{-D'_E}, \quad (1.15)$$

com  $D'_E = 1,0 \pm 0,1$  para o intervalo entre  $0,1 \text{ cm} < R < 1,0 \text{ cm}$ .

Os resultados dos expoentes obtidos nessa análise mostram que a energia armazenada na formação das configurações de fios amassados em cavidades bidimensionais, ocupa uma dimensão topológica menor que a dimensão fractal da massa do sistema [6].

## 1.7 DNA *versus* arames empacotados em 2D

O estudo do amassamento de arames em cavidades bidimensionais apresenta diversas características físicas, geométricas e estatísticas estudadas na literatura [1, 6]. Estas características são observadas em diferentes fenômenos físicos na natureza, como por exemplo: em sistemas de cadeias poliméricas longas, colóides, emulsões, membranas e cristais líquidos [11, 15, 16]. Sistemas amassados apresentam analogia com sistemas físicos presentes na natureza, podendo esclarecer pontos importantes no estudo dos mesmos.

O DNA até o século XIX, era uma molécula desconhecida pelos cientistas. A partir de 1952, foram realizados experimentos que caracterizavam a molécula de DNA, como a responsável pela transmissão genética. A molécula de DNA descoberta por Alfred Herhey e Martha Chase através de experimentos com o vírus bacteriógrafo T2, foram aceitos após James D. Watson e Francis Crick publicarem a hipótese da dupla-hélice em 1953. A partir destas descobertas a sociedade científica passou a investigar as propriedades físicas e químicas da molécula [11].

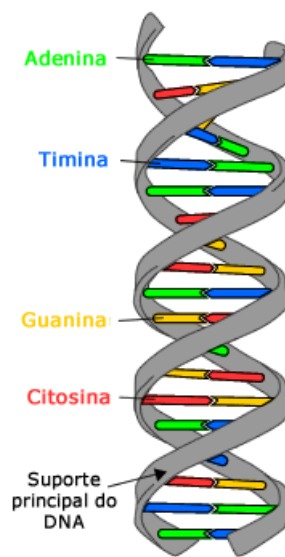


Figura 1.11: Estrutura do DNA e suas bases nitrogenadas [7].

Os vírus são organismos vivos, formados pelo material genético (DNA ou RNA) enclausurado numa cápsula protéica, podendo ser envolvida ou não por um envelope bilipídico. A grande maioria dos vírus apresenta geometria icosaédrica, sendo os bacteriófagos os mais estudados na literatura [11]. O processo de empacotamento do DNA tornou-se um problema de grande interesse, assim como a biologia molecular em geral, a partir do momento em que foi mostrado que, no processo de replicação de vida dos

vírus, as cápsulas protéicas eram formadas vazias e o DNA viral era levado e empacotado através da casca durante o processo de replicação.

Dos estudos do material genético confinado dentro de uma cápsula viral até o momento, não se sabe ao certo como a longa molécula se acomoda nos vírus, surgindo diversos modelos para explicar imagens de cristalografia e raios X, assim como as propriedades físicas envolvidas nos processos de empacotamento e ejeção de DNA em cápsulas virais [11]. Estudos realizados na literatura [3, 8], com base na relação massa-tamanho para o diâmetro das cápsulas virais e o comprimento do material genético de 45 vírus diferentes apresentados na Ref. [11], fornecem um expoente  $D = 1,8 \pm 0,2$ , ver Figura 1.12.

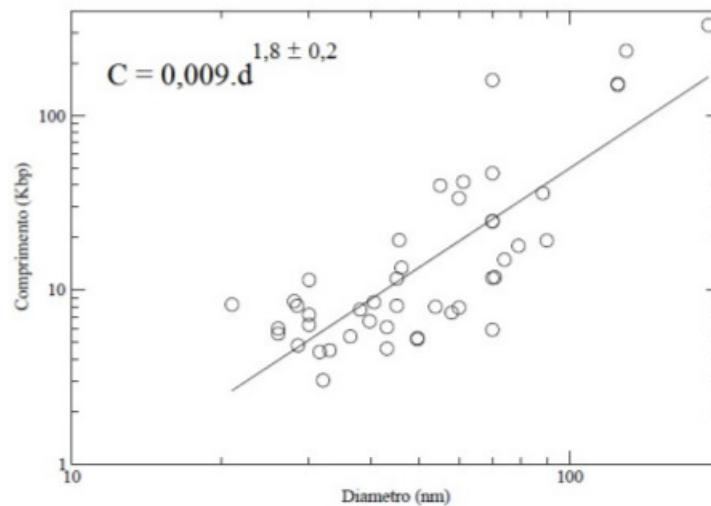


Figura 1.12: Dependência do comprimento do DNA com o diâmetro da cápsula viral para 45 espécies de vírus diferentes [8].

Este resultado obtido através da Figura 1.12, mostrou-se bastante interessante, pois as cápsulas virais configuram um ambiente tridimensional, no entanto o expoente encontrado sugere que o DNA viral se acomoda em uma dimensão fractal quase bidimensional [3, 8]. Se observamos o expoente da relação massa-tamanho obtido para experimentos com arames amassados em cavidades bidimensionais [1, 6], podemos verificar que os mesmos são compatíveis com os expoentes encontrados na relação massa-tamanho para o DNA em cápsulas virais.

No capítulo seguinte, iremos introduzir o estudo do processo de desempacotamento controlado de fios empacotados em cavidades bidimensionais, visto que as estruturas utilizadas possuem a mesma dimensão fractal do DNA empacotado em uma cápsula viral [11]. As discussões realizadas podem acrescentar informações relevantes no que diz respeito às forças envolvidas no processo de empacotamento e desempacotamento do DNA.

O nosso objetivo neste trabalho é, a partir do desempacotamento controlado de arames, determinar a força necessária para extrair uma alça do interior da cavidade bidimensional, buscando estabelecer um modelo exponencial e outro de campo médio para o processo de desempacotamento do fio em cavidades bidimensionais.

## 2 Procedimento Experimental

Neste capítulo descreveremos o processo de confecção das estruturas amassadas em cavidades bidimensionais, e o processo de desempacotamento controlado de suas alças.

### 2.1 Montagem experimental

Para realizar os experimentos de empacotamento de fios foram utilizadas cavidades circulares bidimensionais com diâmetros com  $d = 15$  cm e  $d = 22$  cm. Essas cavidades circulares foram constituídas com duas lâminas de vidro de 30 cm x 30 cm com espessura de 8 mm, superpostas e separadas por lâminas de acrílico com espessura média de 1,1 mm, para a acomodação do fio sem superposição, Figura 2.13. A injeção do fio foi realizada por um único canal de injeção, onde foram utilizados fios de cobre e de nylon com diâmetro  $\zeta = 1,0$  mm. A cavidade utilizada, Figura 2.13, foi fixada através de parafusos podendo rapidamente ser desmontada para a construção de uma série de 8 medidas equivalentes, nas cavidades com diâmetro  $d = 15$  cm e  $d = 22$  cm para os materiais cobre e nylon de modo a permitir um estudo detalhado do desempacotamento de fios em cavidades bidimensionais.

Inicialmente para o processo de empacotamento os fios eram retirados da bobina, medidos, alinhados aos poucos (de um em um metro) e injetados em regime seco (sem qualquer tipo de lubrificação), de acordo com a capacidade da cavidade. Posteriormente o fio foi injetado com velocidade aproximadamente uniforme de 1 cm/s com o auxílio de um alicate (quando necessário), para o controle da velocidade de injeção. As experiências realizadas foram observadas durante um longo período, visto que o tempo para a construção das estruturas, (no regime de empacotamento rígido), em média foi de 60 minutos para o nylon e de 90 minutos para o cobre, devido as propriedades elásticas diferentes dos dois materiais. O nylon, por exemplo, possui maior flexibilidade que o cobre e consequentemente o número de interações e a fração de empacotamento será relativamente maior. Essas estruturas quando preparadas foram observadas por um tempo de relaxação de 24

horas, para a realização do procedimento de desempacotamento dos fios, não havendo nenhuma mudança na estrutura inicialmente formada durante todo o tempo de observação. Após o empacotamento do fio o arranjo foi fotografado com uma câmera digital SONY (resolução de 7.2 Mpixel), utilizando sistema de iluminação especial montado para este fim. As fotografias arquivadas foram utilizadas para a construção da análise de medidas da resistência elétrica em trilhas de grafite em estruturas bidimensionais de laços, publicado em 2011 por M. A. F. Gomes e co-autores [17].

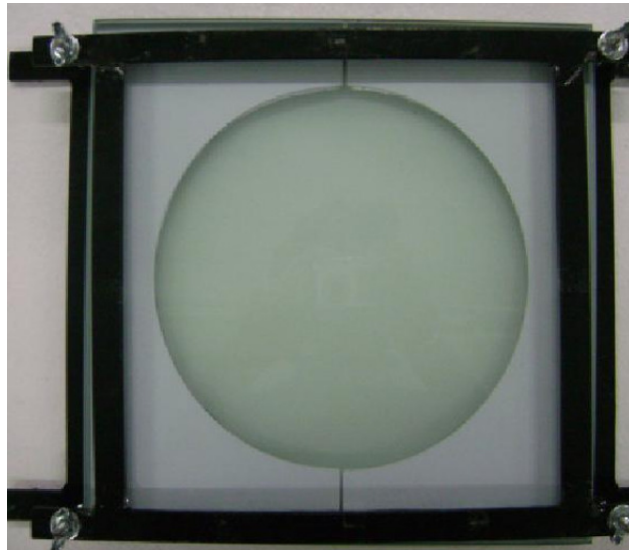


Figura 2.13: Cavidade circular bidimensional utilizada para o estudo do desempacotamento controlado de fios.

As configurações de fios amassados em 2D aqui realizadas, Figuras 2.14, 2.15, 2.16 e 2.17, possuem um padrão típico obtido em amassamento de um fio em cavidades bidimensionais encontrados na literatura [1, 17]. O fio quando dobrado forma estruturas com padrões heterogêneos e distintos de laços que se distribuem pela cavidade com posições e tamanhos diferentes para cada experimento realizado, onde para ambos os materiais observamos que as características plásticas e elásticas contribuem fortemente a formação dos arranjos. No caso do nylon o fio distribui-se ocupando uma maior fração da cavidade dificultando a visualização dos contatos fio-fio, já para o cobre, por ser um material mais rígido, observamos a formação de alças menores próximas ao canal de injeção nas duas cavidades utilizadas. As estruturas obtidas como já mencionamos, são formadas mediante o empacotamento rígido ou empacotamento máximo da célula. Este critério nos levou à discussão de alguns aspectos básicos e quantitativos das estruturas obtidas, como por exemplo, a fração de empacotamento que será discutida na próxima seção.



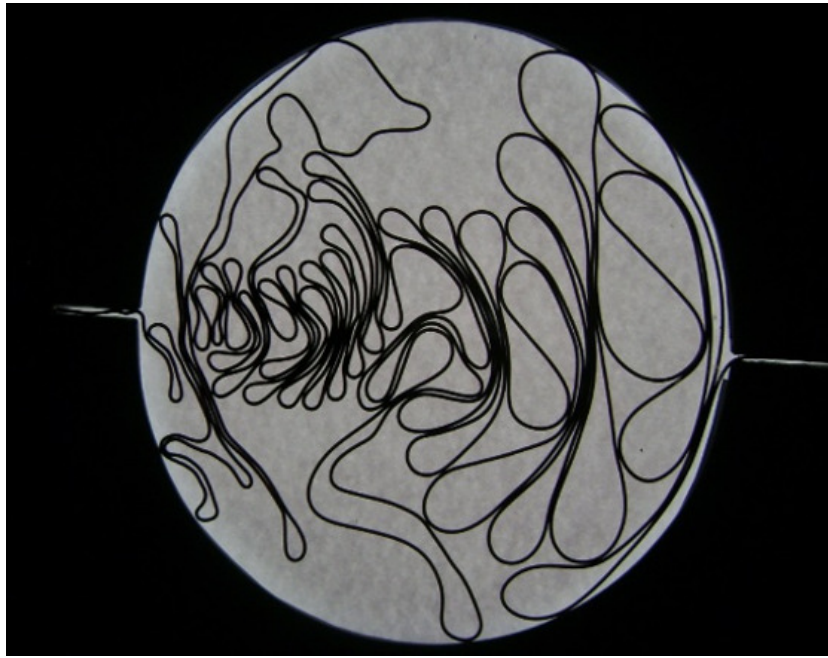


Figura 2.14: Padrão de empacotamento realizado com fio de cobre, na cavidade com diâmetro  $d = 15$  cm.



Figura 2.15: Padrão de empacotamento realizado com fio de cobre, na cavidade com diâmetro  $d = 22$  cm.

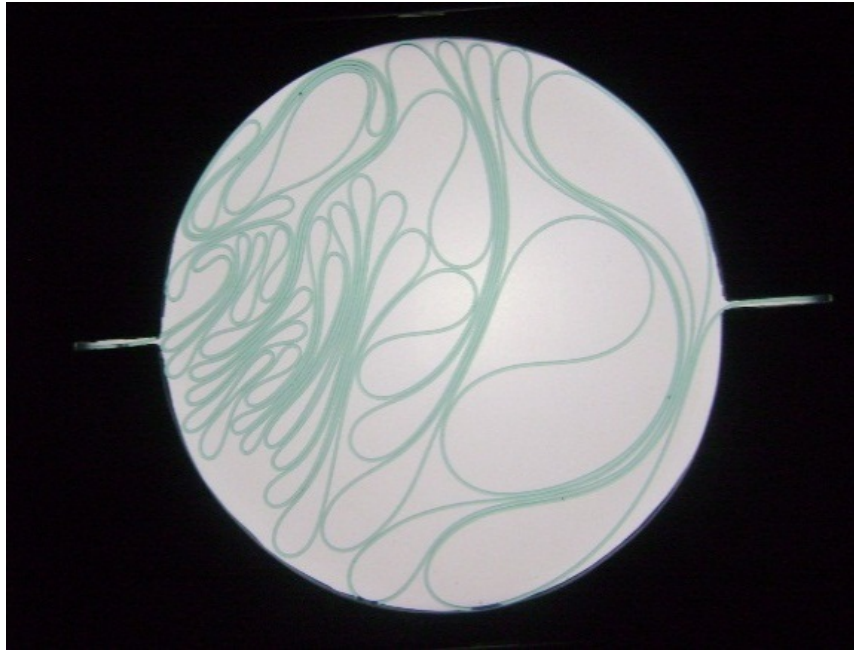


Figura 2.16: Padrão de empacotamento realizado com fio de nylon, na cavidade com diâmetro  $d = 15$  cm.



Figura 2.17: Padrão de empacotamento realizado com fio de nylon, na cavidade com diâmetro  $d = 22$  cm.

## 2.2 Taxa de ocupação

O avanço gradual do fio durante o processo de injeção nas cavidades seguia até um limite de saturação (chamado de empacotamento rígido), no qual a estrutura heterogênea formada não mais evoluía devido aos contatos fio-fio.

Estudos abordados na literatura [1, 12], mostram que a fração de empacotamento em uma cavidade bidimensional circular, é definida pela razão entre a área projetada do fio injetado e a área da cavidade, seção 1.1. Na Tabela 1 apresentamos as taxas de ocupação obtidas para os fios de cobre e de nylon nas cavidades com diâmetros  $d = 15$  cm e  $d = 22$  cm, para as experiências realizadas neste trabalho.

Tabela 1: Média da taxa de ocupação na cavidade bidimensional utilizada.

Fio utilizado	Diâmetro da cavidade (cm)	Taxa média de ocupação
cobre	15	$0,18\% \pm 0,01$
cobre	22	$0,19\% \pm 0,02$
nylon	15	$0,30\% \pm 0,02$
nylon	22	$0,31\% \pm 0,05$

Os experimentos aqui realizados, como podemos observar, diferem dos trabalhos existentes na literatura [1, 6, 12], no que diz respeito à disposição de injeção do fio e o diâmetro das cavidades utilizadas. Nos nossos experimentos a injeção foi realizada por único canal, até o limite de máxima taxa de ocupação, e foram utilizadas cavidades com diâmetro de 15 e 22 cm, respectivamente. Como consequência destas novas condições iniciais verificamos que os valores das taxas de ocupação obtidas são maiores, se comparados com as taxas de ocupação encontradas na literatura para cavidades com características semelhantes [1]. Para o nylon, se observarmos na Tabela 1, temos valores superiores da taxa de ocupação se comparada com a taxa de ocupação do cobre, onde esta diferença se deve à maleabilidade do material. Com as mesmas cavidades e condições anteriormente citadas, realizamos até o momento experimentos que nos auxiliarão na construção de um novo estudo, cujo objetivo é determinar as forças envolvidas no processo de desempacotamento das alças formadas através do empacotamento rígido de fios em cavidades bidimensionais.

## 2.3 Processo de desempacotamento das alças

Após a confecção de cada arranjo heterogêneo, respeitando-se o tempo de relaxação das estruturas, passou-se à fase de desempacotamento controlado com o auxílio de um dinamômetro digital portátil (modelo DD-200) com precisão de 0,1 N em sua escala de fundo. Inicialmente o fio foi fixado através de uma alça, confeccionada com o próprio fio e fixada no suporte do dinamômetro, Figura 2.18, em seguida alinhou-se o dinamômetro para o início do processo de desempacotamento. Neste processo a aplicação da força externa necessária para desempacotar a alça foi produzida manualmente e o seu valor verificado no leitor digital do equipamento utilizando a função pico máximo, função esta que determina o maior pico de força necessário para desempacotar uma alça. A partir deste procedimento, os dados experimentais das forças foram armazenados juntamente com o tamanho respectivo das alças,  $\lambda$ , retiradas. O tempo de retirada assim como o processo de empacotamento está ligado as propriedades do material, sendo em média de 25 a 30 minutos para cada arranjo de nylon e, de 15 a 20 minutos para cada arranjo de cobre. Se observarmos as alças no empacotamento com o material nylon, Figuras 2.16 e 2.17, veremos que as mesmas são maiores e demandam mais cuidados durante o processo de desempacotamento, já para o cobre os tempos de desempacotamentos das alças são mais curtos devido ao material ser mais resistente, formando então alças menores.

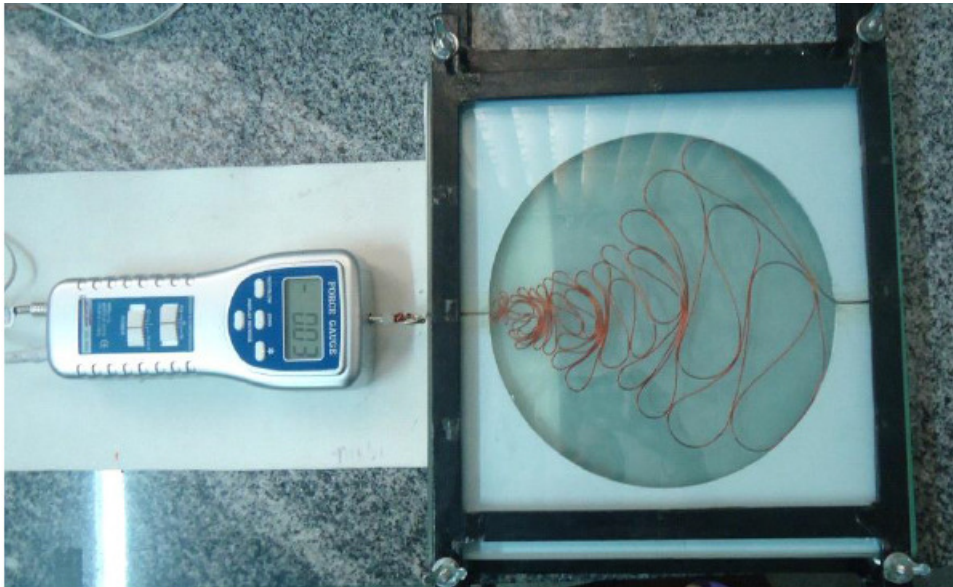


Figura 2.18: Arranjo utilizado para o processo de desempacotamento de fios em cavidades bidimensionais de diâmetro,  $d = 15$  cm e  $d = 22$  cm.

O mesmo protocolo experimental foi utilizado para todas as configurações de fios

obtidas em ambas as cavidades e materiais empregados. De antemão, ressaltamos que os estudos dos desempacotamentos neste trabalho foram centrados nas configurações obtidas com o fio de cobre nas cavidades com diâmetro  $d = 15\text{cm}$  e  $d = 22\text{ cm}$ , respectivamente, buscando acrescentar informações novas e relevantes aos dados já existentes na literatura para este material [1, 6, 12, 17].

## 2.4 Definição de uma alça

Assim como nos processos de empacotamentos de fios existentes na literatura, podemos observar em nossas experiências a formação de alças determinadas através do contato fio-fio, independente da configuração de injeção do fio proposta em nossos experimentos, Figura 2.19.

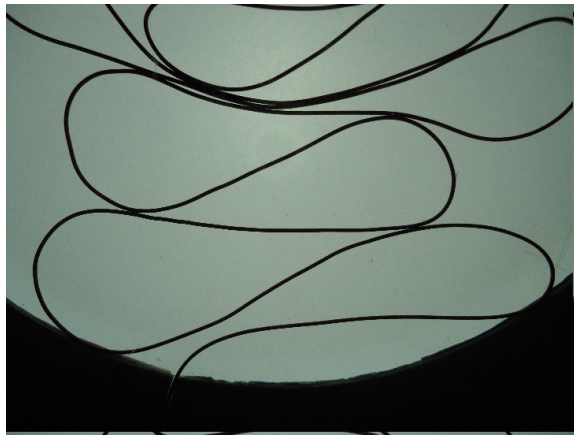


Figura 2.19: Processo de formação das alças, caracterizadas pelos contatos fio-fio.

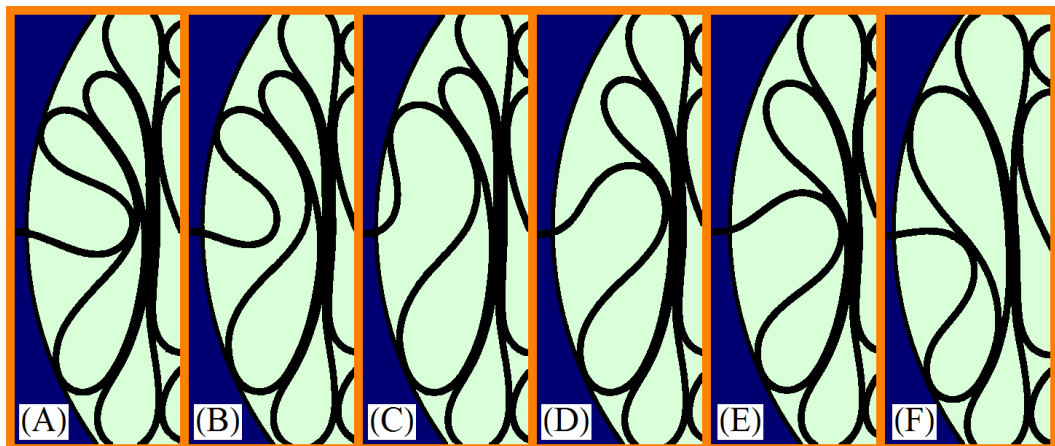


Figura 2.20: Sequência de imagens reais em um experimento mostrando o desempacotamento controlado de uma única alça da cavidade bidimensional [9].

A Figura 2.20 mostra o processo de desempacotamento progressivo das alças no interior da cavidade, para cada unidade retirada. Podemos observar que a estrutura no interior da cavidade tende a se expandir aumentando a dificuldade de alinhamento do fio. Outro fato importante e relevante é que à medida que o fio é retirado, a estrutura retorna ao seu estado estático mesmo com a diminuição de atrito no interior da cavidade. Isto acontece devido a restrição no canal de desempacotamento da cavidade ser muito forte para a curvatura do fio.

Os processos de desempacotamento estudados nos permitem analisar as forças envolvidas no mesmo, variáveis estas nunca abordadas até o momento no estudo de estruturas confinadas em cavidades bidimensionais. No capítulo seguinte, iremos abordar algumas propriedades sobre o estudo de desempacotamento de fios em cavidades bidimensionais. O estudo destes processos, busca acrescentar um modelo do processo de desempacotamento de fios em cavidades bidimensionais à literatura.

## 3 Resultados e Discussões

Neste capítulo apresentamos os resultados dos processos de empacotamento de fios através de um único canal da cavidade bidimensional, bem como também discutimos os processos de desempacotamento pelo mesmo canal, de modo controlado.

### 3.1 Tamanho médio de uma alça

Durante os processos de empacotamento, através de um único canal, observamos a formação de alças determinadas através do contato fio-fio. As alças são unidades constitutivas da estrutura amassada, como vimos no Capítulo 1 [1]. O número total de alças,  $N_i$ , nos experimentos realizados varia apesar do processo de empacotamento possuir condições iniciais semelhantes. Nos experimentos realizados,  $N_i$ , em média, varia entre 24 e 42, para experiências realizadas na cavidade com diâmetro  $d = 15$  cm, e entre, 24 e 38 para a cavidade com diâmetro igual a  $d = 22$  cm. A fim de obter-se um domínio universal ao realizar as médias, os números de laços remanescentes na cavidade  $n_i$  foram normalizados por  $N_i$ , de modo que  $n_i/N_i$  assume valores que variam de zero a um. Para confirmar que a média total do número de laços,  $N$ , é a quantidade final de pontos, nossas médias são tomadas em intervalos de  $N^{-1}$  de largura, sobre todos os dados. Decorre deste procedimento que cada ponto representa, em média, oito dados experimentais. O resultado para o tamanho médio (isto é, o comprimento do arco) da alça,  $\lambda$ , como uma função da ordem da alça desempacotada,  $n/N$ , é mostrado na Figura 3.21, para fios de cobre em cavidades de 15 cm e 22 cm de diâmetro.

No gráfico a seguir, Figura 3.21, verificamos que os comprimentos mínimos das alças,  $\lambda$ , obtidos para as cavidades com diâmetro  $d = 15$  cm e  $d = 22$  cm independem do diâmetro da cavidade, dependendo apenas das características do material. No entanto, a última alça desempacotada mostra-se com tamanho proporcional ao diâmetro da cavidade, conforme conjecturado na literatura [1, 17]. As barras de erros dos dados, mostram flutuações elevadas como em um experimento típico de empacotamento de um fio [17].

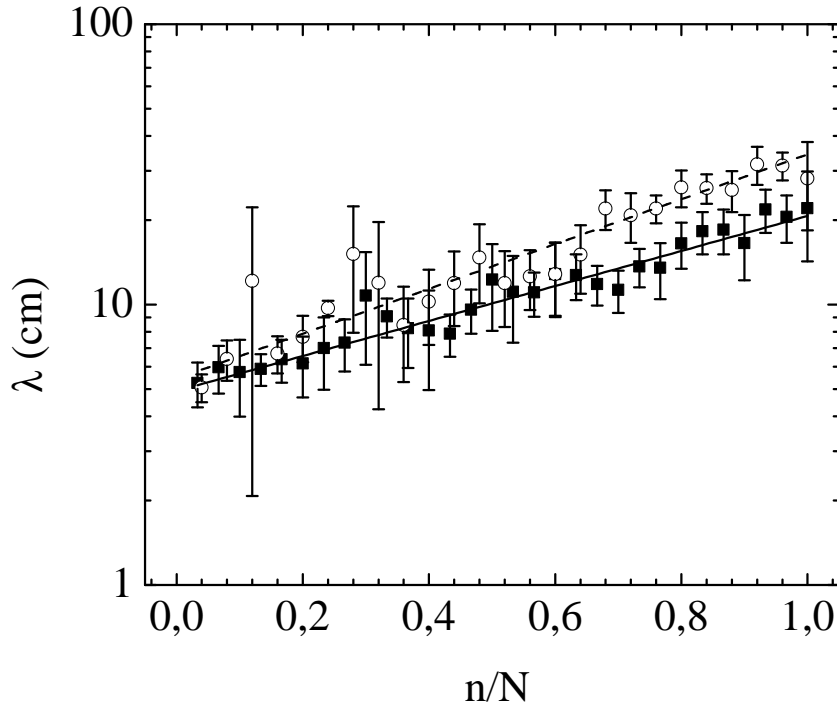


Figura 3.21: Tamanho médio dos laços (isto é, o comprimento do arco),  $\lambda(\text{cm})$ , em função da ordem da fração de desempacotamento,  $n/N$ , para fios de cobre na cavidade com  $d = 15$  cm (quadrados escuros) e  $d = 22$  cm (círculos abertos). As linhas inclinadas mostram o melhor ajuste da equação 3.1 para os dados com  $d = 15$  cm (linha contínua) e  $d = 22$  cm (linha tracejada) [9].

Podemos observar na Figura 3.21 que o crescimento das alças assemelha-se a um comportamento exponencial

$$\lambda_n = \lambda_0 e^{R_0(n/N)}, \quad (3.1)$$

onde  $\lambda_0$  é o tamanho inicial obtido numa extrapolação quando  $n/N \rightarrow 0$ , e  $R_0$  é uma taxa de crescimento contínuo. A equação 3.1 descreve satisfatoriamente os dados experimentais obtidos na Figura 3.21. Os ajustes da equação 3.1 aos dados experimentais, estão representados por uma linha contínua para os dados obtidos na cavidade com diâmetro  $d = 15$  cm, e por uma linha tracejada para a cavidade com diâmetro  $d = 22$  cm. Os parâmetros encontrados são  $\lambda_0 = 4,9 \pm 0,2$  cm e  $R_0 = 1,44 \pm 0,06$  para cavidade com  $d = 15$  cm e  $\lambda_0 = 5,4 \pm 0,2$  cm e  $R_0 = 1,84 \pm 0,07$  para cavidade com  $d = 22$  cm. As invariantes físicas esperadas são  $\lambda_0$ , o menor comprimento de alça possível, e  $\lambda_N$  o comprimento de escala, regulado pelo diâmetro da cavidade. Em consequência,  $R_0 = \ln(\lambda_N/\lambda_0)$  cm não varia entre as experiências realizadas numa mesma cavidade, (ao contrário de  $N_i$ ). Os



parâmetros encontrados correspondentes a última alça desempacotada, são  $\lambda_N = 21 \pm 2$  cm para cavidade com  $d = 15$  cm e  $\lambda_N = 34 \pm 3$  cm para a cavidade com  $d = 22$  cm. O crescimento total das alças é esperado escalar com o diâmetro da cavidade,  $\lambda_N/\lambda_0 \sim d$ , que implica em  $\Delta R_0 = \Delta(\ln d)$  onde o valor médio da taxa de variação de crescimento entre as cavidades com  $d = 22$  cm e  $d = 15$  cm é  $\Delta R_0 = 0,40$ , enquanto  $\Delta(\ln d) = \ln(22/15) = 0,38$ , mostrando um pequeno desvio de 5%. Este resultado sugere que o presente modelo é consistente para diferentes diâmetros de cavidades circulares.

O crescimento exponencial como indicado na equação 3.1, é obtido a partir da hipótese de que cada laço ocupa uma fração do espaço disponível na cavidade. No entanto, na literatura do estudo de empacotamento de fios em cavidades bidimensionais existe o modelo hierárquico [1], baseado numa hierarquia de interações o qual fornece uma relação mais complicada com um maior número de parâmetros. No presente estudo extraiu-se o fio da cavidade, laço a laço, fornecendo um perfil detalhado de  $\lambda(n)$  e observou-se que a equação 3.1 se ajusta suficientemente bem os dados obtidos para uma melhor compreensão da física do problema. Por estas razões, adotamos aqui um modelo exponencial para o estudo do desempacotamento de laços em cavidades bidimensionais.

## 3.2 A força para desempacotar um único laço

A fim de examinarmos a força  $F_j$  necessária para desempacotar um laço de tamanho  $\lambda_j$ , os dados foram armazenados em intervalos de  $\Delta\lambda$  e então uma força média,  $F$ , foi estimada como uma média do tamanho,  $\lambda$ .

A Figura 3.22 mostra o resultado do procedimento para os dados obtidos na cavidade com  $d = 15$  cm de diâmetro e a Figura 3.23 para a cavidade com  $d = 22$  cm de diâmetro. A lei de potência dada pela equação 3.2:

$$F = (\zeta/\lambda)^\alpha, \quad (3.2)$$

se ajusta muito bem aos dados, exceto para valores elevados de  $\zeta/\lambda$  (pequenos valores de  $\lambda$ ). O valor encontrado para  $\alpha$  através do ajuste mostrado na Figura 3.22 para a cavidade com  $d = 15$  cm, foi  $\alpha = 0,92 \pm 0,03$ . A Figura 3.23 mostra o valor  $\alpha$  para a cavidade com  $d = 22$  cm, com melhor ajuste para  $\alpha = 0,87 \pm 0,05$ .

Os pontos representados por círculos abertos são ignorados em ambos os gráficos das Figuras 3.22 e 3.23, pois desviam da tendência geral dos demais pontos. Observa-se que

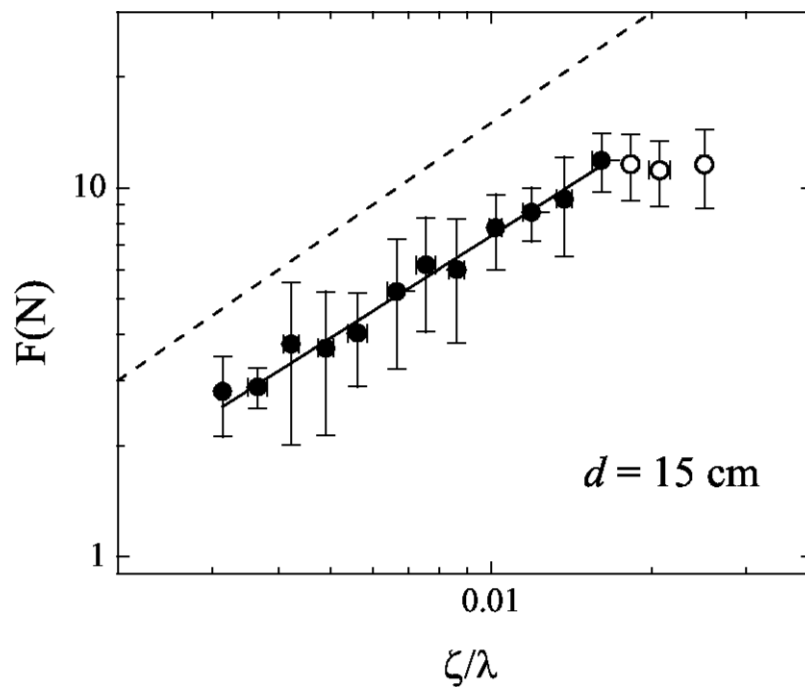


Figura 3.22: Gráfico da força  $F$  (em Newtons) necessária para puxar uma alça para fora da cavidade em função de  $\zeta/\lambda$ , para fios de cobre na cavidade de diâmetro de  $d = 15$  cm [9].

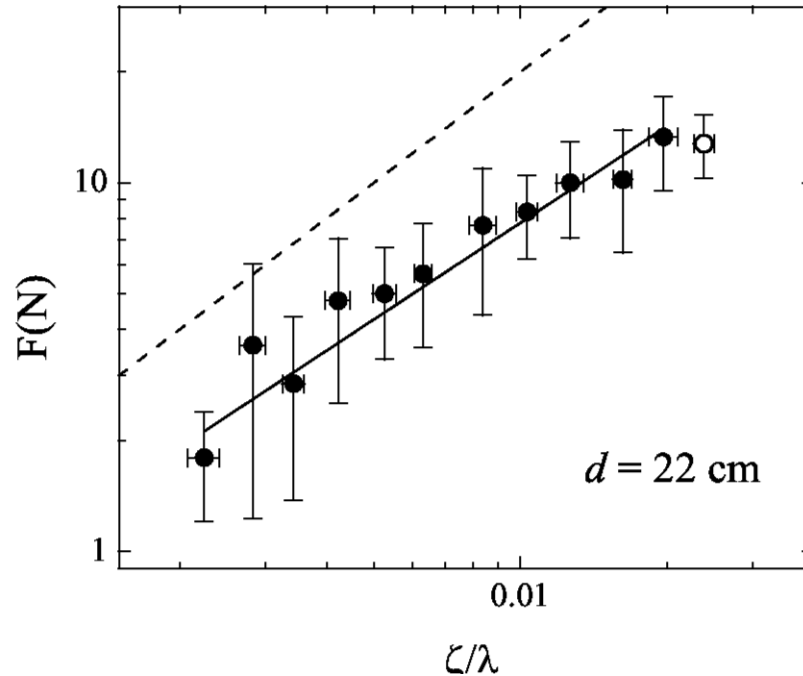


Figura 3.23: Gráfico da força  $F$  (em Newtons) necessária para puxar uma alça para fora da cavidade em função de  $\zeta/\lambda$ , para fios de cobre na cavidade de diâmetro  $d = 22$  cm [9].

os dados disponíveis mostrados na Figura 3.21 tem um intervalo estreito para o tamanho dos laços. Usando as relações  $R_0 = \ln(\lambda_N/\lambda_0)$  e  $\Delta R_0 = \Delta(\ln d)$ , podemos estimar que

uma década de variabilidade em  $\lambda$  é conseguida para uma cavidade de  $d = 35$  cm. O nosso fio possui diâmetro  $\zeta = 1,0$  mm. Isto implica em uma razão de diâmetro correspondente ( $d/\zeta$ ) de pelo menos 350, um número que impõe sérios problemas práticos para serem contornados no processo de fabricação das cavidades, especialmente para cavidades de vidro e acrílico, como no nosso caso. A razão dos diâmetros nos nossos experimentos são de 150 e 220, respectivamente, onde a razão máxima entre os diâmetros obtida na literatura é de 250 [18, 19]. Acreditamos que, embora possuindo uma gama limitada de experimentos, nossos resultados apresentam contribuições válidas para todos os estudos atuais de fios amassados em duas dimensões.

A Figura 3.24 mostra o dobramento de um fio linear de comprimento  $L = \lambda$  para formar um laço com raio de curvatura  $r$ . A haste dobrada é esticada na borda externa do laço e comprimida na sua borda interna. A energia de flexão elástica depende da curvatura  $\kappa(l)$  como:

$$E_b = I \int_0^L \kappa(l)^2 dl, \quad (3.3)$$

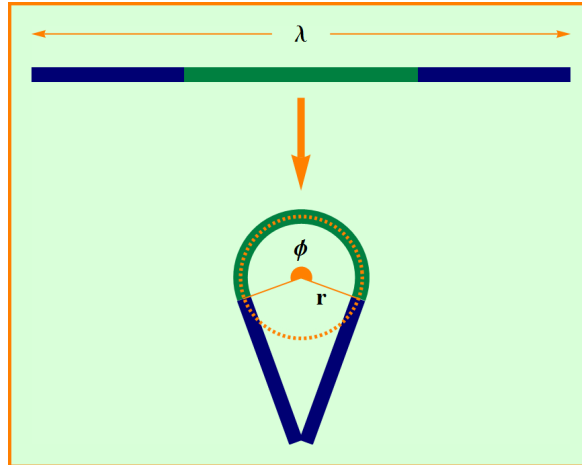


Figura 3.24: Esquema de dobramento de um arame reto em uma alça [9].

onde  $I$  depende da secção transversal do fio. A equação (3.3) mostra que qualquer forma fixa de alça terá:

$$E_b \sim \lambda^{-1} \quad (3.4)$$

portanto,  $F_b = -\frac{dE_b}{d\lambda} \sim \lambda^{-2}$ . Este resultado tem a forma da equação 3.2 com  $\alpha = 2$  e representa o dobramento puramente elástico [11, 18]. Nesse sentido os expoentes

encontrados experimentalmente são bastantes anômalos. No entanto, o nosso resultado experimental é mais seguro uma vez que os dois expoentes encontrados por ajuste dos dados são os mesmos dentro de um intervalo de erro de 6%, um resultado robusto em diferentes cavidades. A partir disto, podemos concluir que um modelo bruto de forma fixa de alça, conforme Figura 3.24 e a equação 3.3 não são adequados para descrever o nosso sistema. Outros fatores, como a parede da célula limitando o tamanho das alças e a elasticidade, são essenciais para a descrição realística do desempacotamento do fio em cavidades bidimensionais.

Veremos nas próximas seções que o expoente  $\alpha$  encontrado experimentalmente pode ser obtido aproximadamente se consideramos o comportamento coletivo dos laços no interior da cavidade, em vez de um modelo de laço único, como discutido no presente parágrafo.

### 3.3 O comprimento extraído

O comprimento do fio extraído da cavidade pode ser obtido pela soma do comprimento devido a cada alça removida do interior da cavidade,  $L_n = \sum_{j=1}^n \lambda_j$ . Assim o comprimento fracionado é:

$$l_n \equiv \frac{L_n}{L_N} = A(e^{R_o(n/N)} - 1), \quad (3.5)$$

onde  $A = (e^{R_o} - 1)^{-1}$  e  $R_o$  é o mesmo parâmetro da equação 3.1. A nova variável  $l_n$ , definida na equação 3.5, representa a fração do fio puxado com relação ao comprimento total, então deve ser  $l_0 = 0$ , no início do desempacotamento e  $l_n = 1$  no final. A equação 3.5 fornece uma curva que ajusta muito bem os dados coletados, com as constantes  $A$  e  $R_o$ , dependendo da combinação das propriedades da cavidade e do material, representados pelos parâmetros  $\lambda_n$  e  $\lambda_N$ , respectivamente.

A Figura 3.25 mostra o melhor ajuste da equação 3.5 para os dados nas cavidades utilizadas. Para a cavidade com  $d = 15$  cm encontramos,  $R_o = 1,43 \pm 0,05$  e  $A = 0,31 \pm 0,02$ , enquanto que para a cavidade com  $d = 22$  cm, encontramos  $R_o = 1,78 \pm 0,07$  e  $A = 0,20 \pm 0,02$ .

Estes valores de  $A$  estão relacionados com  $R_o$ . Além disso, estes valores de  $R_o$  são encontrados pela regressão da equação 3.1 para os dados da Figura 3.21. Eles nos fornecem  $\Delta R_o = 0,35$ , um valor 8% distante de  $\Delta(\ln d)$ .

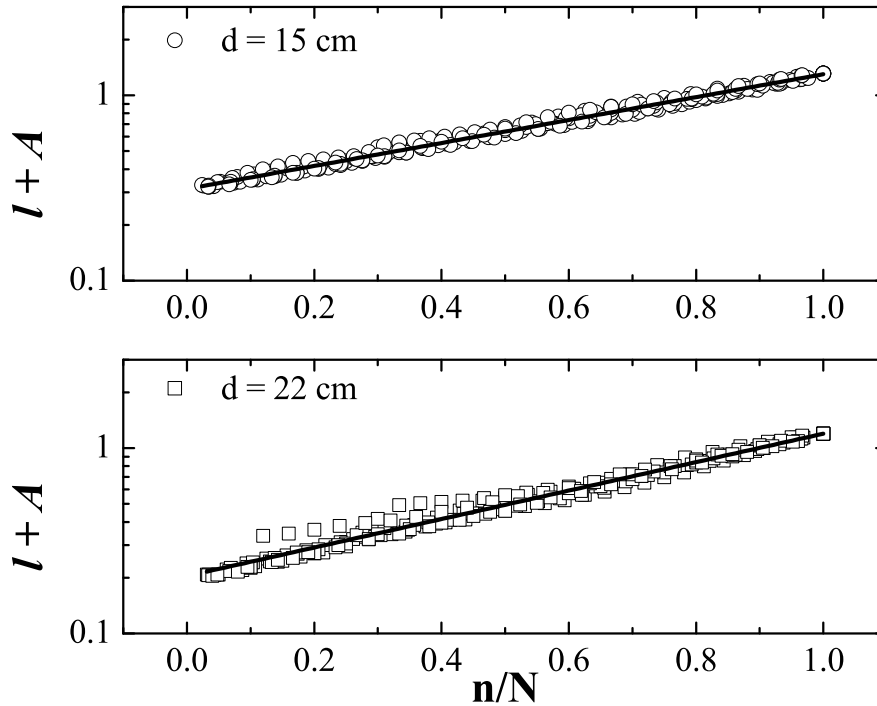


Figura 3.25: Gráfico da variável  $(l + A)$  como uma função de  $n$ , para as cavidades com  $d = 15$  cm e 22 cm [9].

O modelo exponencial definido pelas equações 3.1 e 3.5 fornece:

$$\lambda \equiv \frac{\lambda_0}{A}(l + A), \quad (3.6)$$

sugerindo que o tamanho do laço  $\lambda$  é uma função linear do comprimento fracional,  $l$  puxado. Decorre desta equação e da equação 3.2, que a força segue uma lei de potência de  $(l + A)$  com um expoente  $\alpha$ . Este é o segundo método teórico para obter o expoente  $\alpha$ , pois as altas flutuações em  $\lambda$  mudam rapidamente a ordem do laço no caso anterior. A lei de potência obtida a partir do comprimento total deve preservar a ordem do processo de desempacotamento.

### 3.4 A força para desempacotar o fio

A fim de apresentar a relação entre a força e o comprimento do fio no interior da cavidade, uma série de intervalos de largura  $\Delta(l + A)$  é necessária, nos quais se estimam a força média. As Figuras 3.26 e 3.27, mostram os dados experimentais e a lei de potência

do melhor ajuste para as cavidades de diâmetro  $d = 15$  cm e  $d = 22$  cm, respectivamente. Ambos têm a forma:

$$F \sim (l + A)^{-\alpha}, \quad (3.7)$$

onde  $\alpha = 0,90 \pm 0,08$  para a cavidade com  $d = 15$  cm e  $\alpha = 0,93 \pm 0,07$  para a cavidade com  $d = 22$  cm, no intervalo de  $A \leq (l + A) < 1$ . Estes expoentes são iguais dentro das barras de erro àqueles obtidos com o ajuste direto nas Figuras 3.22 e 3.23. No entanto, os expoentes podem aumentar para  $\alpha = 1,09 \pm 0,08$  para a cavidade com  $d = 15$  cm e  $\alpha = 1,20 \pm 0,08$  se o ajuste considera todos os dados experimentais. Nós escolhemos parar os ajustes até  $(l + A) = 1$ , pois os pontos posteriores desviam da tendência geral dos pontos anteriores, como pode ser visto pelos círculos abertos nas Figuras 3.26 e 3.27. Uma hipótese para este desvio é que o fio esteja fracamente ligado e em consequência disto perca as suas interações de contato, próximo ao fim do processo de desempacotamento.

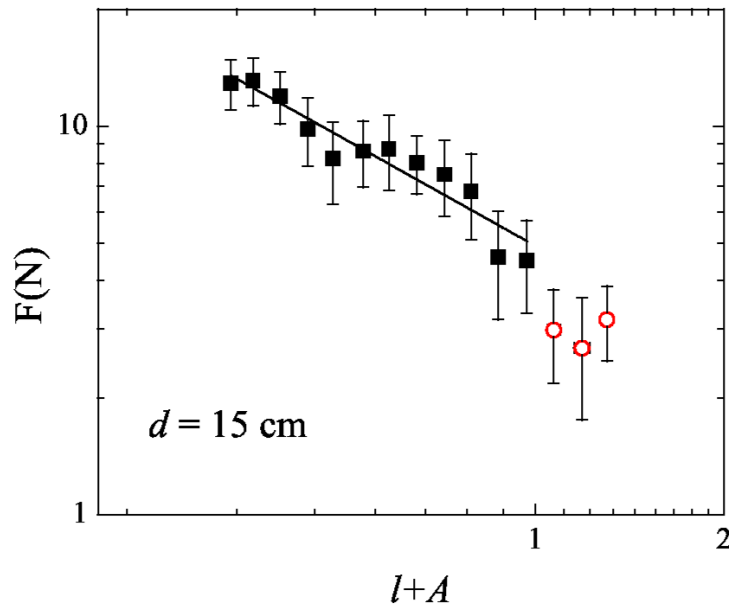


Figura 3.26: Gráfico da força  $F$  (em Newtons) necessária para retirar um pedaço de arame cuja fração de comprimento fora da cavidade é  $l$  para fios de cobre na cavidade de diâmetro com  $d = 15$  cm [9].

A seguir damos justificativa para a equação 3.6 com  $\alpha = 1$ . Nosso modelo é inspirado em resultados anteriores de análise de imagem, que indicavam que a energia elástica de flexão de fios amassados em cavidades bidimensionais está concentrada em um conjunto unidimensional, embora a massa do sistema seja distribuída num domínio bidimensional [6]. Isto é verdade para o limite de uma cavidade preenchida, onde o fio está densamente

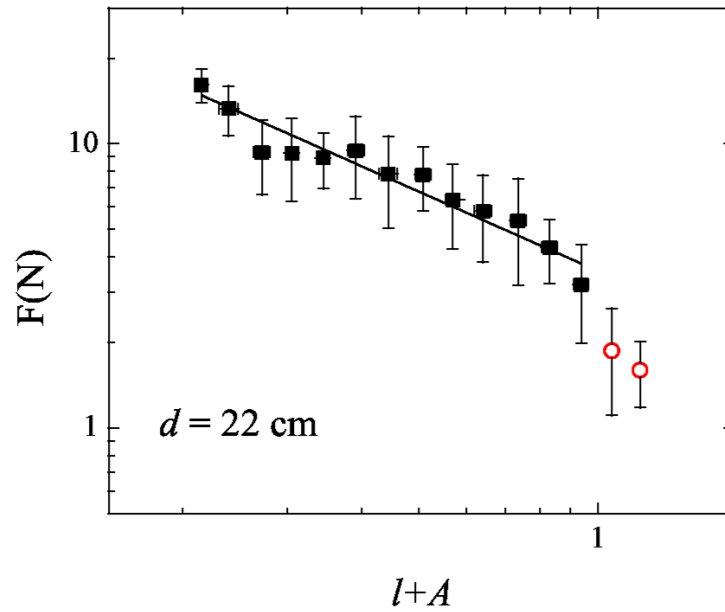


Figura 3.27: Gráfico da força  $F$  (em Newtons) necessária para retirar um pedaço de arame cuja fração de comprimento fora da cavidade é  $l$  para fios de cobre na cavidade de diâmetro com  $d = 22$  cm [9].

distribuído como linhas paralelas retas em grande parte da cavidade e a energia elástica devida aos comprimentos dos laços está concentrada ao longo do perímetro da cavidade. Interessantemente, neste caso limite, podemos afirmar que a energia é igual para todos os laços, independente do comprimento do seu arco. Certamente, esta conclusão a partir de uma configuração estática particular não precisa ser válida para a extração de uma série de laços. No entanto, argumenta-se que para uma abordagem de campo médio esta afirmativa pode ser estendida para o desempacotamento do fio.

O fio armazena energia elástica na protuberância dos laços em um processo que envolve a repulsão entre laços vizinhos. Esta interação entre pares de laços leva à troca de energia entre os mesmos quando confinados na cavidade. Entretanto, uma explicação detalhada apresenta algumas dificuldades, pois a interação entre as alças é complexa como pode ser visto na Figura 2.20. A energia para extrair um laço de comprimento  $\lambda_i$  é  $\varepsilon_i$  e pode ser identificada como um potencial químico. Em princípio, para se obter uma expressão para a energia total que considera as características globais do sistema, podemos afirmar que a energia média para extrair um único laço é  $\varepsilon_0 = E_0/N$ , onde  $E_0 = \sum_j \varepsilon_j$  é a energia total para retirar toda a estrutura do interior da cavidade. Numa abordagem significativa, a energia de extração de  $n$  laços é  $E = n\varepsilon_0$ , então:

$$E = n \frac{E_0}{N} = \frac{E_0}{R_0} \ln \left( \frac{l + A}{A} \right), \quad (3.8)$$

onde usamos a equação 3.5. Assim, a primeira igualdade na equação 3.8 é uma manifestação da equipartição de energia entre os laços. Destaca-se que a equação 3.8 é a melhor expressão para a energia deste sistema, quando comparada com a equação 3.3, pois leva em consideração toda a estrutura, o gradiente do tamanho de laços e, conseqüentemente, o confinamento do fio devido à cavidade. A proporcionalidade  $E \sim n$  garantida na equação 3.8 também é encontrada para a energia elástica na compactação unidimensional de uma folha fina de  $n$  camadas. Este processo é indicado como um protótipo para amassamentos onde a força é aplicada somente em uma direção [20].

A forma da funcional logarítmica apresentada na equação 3.8 não é inteiramente nova no empacotamento para fios [19], portanto, a equação 3.8 está em harmonia com a idéia de que modelos de dobramento são capazes de capturar algumas características do amassamento. Podemos ter acesso a alguns indícios sobre os laços consecutivos, adicionando as informações obtidas a partir da equação 3.8 para o modelo no qual os laços são descritos por linhas retas e círculos, como ilustrado na Figura 3.24. A fim de explicar toda a estrutura, estende-se a equação 3.3 para um arranjo de  $N$  laços e um comprimento total de arco  $L$ . A energia total de flexão do fio pode ser calculada laço a laço por:

$$E_b = I \int_0^L k(l)^2 dl = \sum_{i=1}^N I \int_{\lambda_i} k_i^2 dl \sim \sum_{i=1}^N k_i^2 \phi_i r_i, \quad (3.9)$$

onde  $k_i = 1/r_i$  é a constante de curvatura para círculos com protuberância de comprimento  $\phi_i r_i$ . A energia de cada laço é então  $\varepsilon_i \sim (\phi_i/r_i)$ . O argumento de campo médio mostrado anteriormente, equação 3.8, sugere que  $(\phi_i/r_i)$  é em média fixo, portanto os laços consecutivos devem ter diferentes formas geométricas.

A partir das considerações dos parágrafos anteriores, podemos dizer que este é um sistema conservativo e a força de extração  $F$  pode ser tomada como  $-dE/dl$ , onde  $L = L_N$  é o comprimento extraído obtido pela soma dos tamanhos dos laços. A partir da equação 3.8 obtemos:

$$F = \left( \frac{dE}{dl} \right) \left( \frac{dl}{dL} \right) \sim (l + A)^{-1}. \quad (3.10)$$

O sistema estudado experimentalmente no presente trabalho, envolve uma quantidade de dissipação de energia por meio de atrito e plásticidade do material, que nós acreditamos ser



responsável pela mudança de um 1,0 para 0,9 encontrada, para os expoentes na equação 3.6.

Na literatura, tem sido indicado algum paralelismo entre o empacotamento de fios amassados em duas dimensões e o empacotamento de DNA em cápsulas virais em três dimensões [3, 21]. Aqui nós observamos que a dependência da força é similar em ambos os casos. O custo elástico para dobrar uma molécula de comprimento  $L$  dentro de um círculo de raio  $R$  é  $E_b \sim L/R^2$  então neste contexto,  $F \sim R^{-2}$ . Seguindo a abordagem usual do modelo de DNA [11], esta molécula gira numa superfície interna da cavidade viral em uma configuração ordenada helicoidal de raio  $R$  e altura  $h$ . O número total de alças dentro de uma cápsula com uma forma constante é  $N \sim h \sim R$ , de tal maneira que o comprimento total é  $L = 2\pi NR \sim R^2$ . Portanto o comprimento total é proporcional à área da superfície da cápsula viral assim como no empacotamento de fios em cavidades bidimensionais. Isso reflete a dependência  $F \sim L^{-1}$  para o empacotamento de DNA numa cápsula viral e nos induz a estendermos nossos resultados obtidos para sistemas amassados em micro ou até mesmo em nano escalas.

## 4 Conclusões

O estudo de estruturas de fios empacotados é um tópico recente de grande interesse do ponto de vista da teoria e aplicação [2, 4, 6, 18, 22]. Neste trabalho realizamos experimentalmente a extração progressiva de uma estrutura inicialmente confinada em cavidade bidimensional com diâmetro de  $d = 15$  cm e  $d = 22$  cm, buscando estabelecer a correlação entre a força necessária para a extração das alças e os tamanhos das mesmas. O perfil médio de tamanhos das alças e a força necessária para desempacotar os laços foi encontrada por dois métodos diferentes, capítulo 3. No primeiro método examinamos a força  $F$  necessária para desempacotar um laço de tamanho  $\lambda$  através da lei de potência obtida da relação  $F \sim (\zeta/\lambda)^\alpha$ . O segundo método utilizado descreve um modelo para o laço simples com o argumento de campo médio para  $n$  laços. Com base nos resultados obtidos e analisados para a dependência da força de desempacotamento, podemos concluir que nossos resultados são melhor explicados por um comportamento de alças coletivas, através de um modelo de campo médio.

Concluimos portanto, que o estudo do desempacotamento de fios modelado neste trabalho, apresenta propriedades relevantes para o entendimento do processo de desempacotamento de DNA em cápsulas virais [3, 11].

## APÊNDICE A - Artigo publicado

RESEARCH ARTICLE

# Unpacking of a Crumpled Wire from Two-Dimensional Cavities

Thiago A. Sobral<sup>1</sup>, Marcelo A. F. Gomes<sup>1\*</sup>, Núbia R. Machado<sup>2</sup>, Valdemiro P. Brito<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50670-901, Recife, PE, Brasil, <sup>2</sup> Departamento de Física, Universidade Federal do Piauí, 64049-550, Teresina, PI, Brasil

\* [mafg@ufpe.br](mailto:mafg@ufpe.br)



**OPEN ACCESS**

**Citation:** Sobral TA, Gomes MAF, Machado NR, Brito VP (2015) Unpacking of a Crumpled Wire from Two-Dimensional Cavities. PLoS ONE 10(6): e0128568. doi:10.1371/journal.pone.0128568

**Academic Editor:** Mark G. Kuzyk, Washington State University, UNITED STATES

**Received:** October 31, 2014

**Accepted:** April 28, 2015

**Published:** June 5, 2015

**Copyright:** © 2015 Sobral et al. This is an open access article distributed under the terms of the [Creative Commons Attribution License](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

**Data Availability Statement:** All relevant data are within the paper and its Supporting Information files.

**Funding:** This work was done with resources from Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Programa Nacional de Cooperação Acadêmica (PROCAD), and Programa de Núcleos de Excelência (PRONEX), all Brazilian Government Agencies. The funders had no role in study design, data collection and analysis, decision to publish, or preparation of the manuscript.

**Competing Interests:** The authors have declared that no competing interests exist.

## Abstract

The physics of tightly packed structures of a wire and other threadlike materials confined in cavities has been explored in recent years in connection with crumpled systems and a number of topics ranging from applications to DNA packing in viral capsids and surgical interventions with catheter to analogies with the electron gas at finite temperature and with theories of two-dimensional quantum gravity. When a long piece of wire is injected into two-dimensional cavities, it bends and originates in the jammed limit a series of closed structures that we call loops. In this work we study the extraction of a crumpled tightly packed wire from a circular cavity aiming to remove loops individually. The size of each removed loop, the maximum value of the force needed to unpack each loop, and the total length of the extracted wire were measured and related to an exponential growth and a mean field model consistent with the literature of crumpled wires. Scaling laws for this process are reported and the relationship between the processes of packing and unpacking of wire is commented upon.

## Introduction

The process of extraction or unpacking of an object which has an effective one-dimensional topology is very common in nature, including the DNA molecule that is ejected from virus capsids [1] and the extraction of catheters in surgical interventions [2, 3] up to the unwinding of wires in industry, and the unpacking of polymers and long-chain biomolecules in drug delivery [4–12]. The initial conformation of such one-dimensional objects confined in a finite volume present some analogies with the patterns found in the packing or in the crumpling of a long piece of wire [13, 14]. The systematic study of crumpling processes began more than two decades ago with crumpled surfaces obtained from sheets of paper and aluminium foils submitted to rapid and ill-defined deformations typical of haphazard procedures aiming to confine them into small volumes [15, 16]. The packing of DNA in viral capsids has in recent years been associated with two-dimensional packing of wires, which presents the same fractal dimension [17, 18].

The research of crumpled wires in two dimensions, on the other hand, began in the last decade [19, 20]. When one injects, for instance, a long wire of copper into a two-dimensional

cavity that allows only a single layer of wire, inner structures of iterated loops are formed with a pattern of points of contacts generating jammed structures as those observed the classical problem of packing of discs [21]. The general two-dimensional pattern associated with the packing of a long piece of wire presents some morphological phases [22–24] which are related with physical properties of the structure. Recently, crumpled wires have been studied in connection with striking analogies with other different systems such as the electron gas at finite temperatures [25, 26], and two-dimensional quantum gravity [27].

In the present paper we are interested in the *unpacking* of a crumpled wire from two-dimensional cavities. In this case, when the wire is extracted with the aid of a dynamometer it is possible to record the force involved in the extraction and relate it with both the size of the loop which is released and the extracted length of the wire. A profile for the force is of great interest as indicated in several previous studies [22–24, 27, 28], but we did not find in the literature any paper concerning processes of unpacking of wires from two-dimensional cavities. In spite of the introduction of some level of irreversibility in the packing of wire in a cavity as a consequence of high values of deformation and due to the effects of plasticity ever present, important results are achieved. Basically we found that the force needed to extract the wire has a power law dependence with the size of the loops which it is better explained by the global features of the system. We also observed that the size of the loops decreases exponentially with its order of unpacking, allowing us to propose a differential equation for the (un)packed system. The overall framework is consistent with previous studies where the energy involved in the packing processes is well described by models of ordered folding [29].

## Experimental Details

The cavities used in our experiments consist in two plates of glass of 300 mm × 300 mm × 8 mm separated by circular acrylic molds of diameter  $d = 15$  cm and  $d = 22$  cm and 1.1 mm height that allows the wire to be accommodated without superposition. The simply connected cavities used in our experiments have two channels at opposite sides of the molds for the injection of the wire, but in this study one of them is used to fix one of the wire ends (Fig 1). The wires used were made of copper and had a diameter of  $\zeta = 1$  mm. Initially they were pushed manually into the cavity through one of the channels with an approximately uniform speed of about 1 cm/s until the system reached the jammed state. The experiments are performed in a dry regime without any lubrication, and its average velocity was estimated by the time needed to inject the wire. The inner structures formed in the injection process, shown in Fig 1, are quite similar to others previously reported in the literature [19, 20], and they were used as our initial condition. A heterogeneous cascade of loops (units that have a bulge in one extremity, and two branches of the wire merging in the other extremity) is distributed by the available inner area of the cavity so that the smallest loop is adjacent to the injection channel, while the largest one tends to be located as distant as possible from this channel. The rigid crumpled structures formed in the jammed limit presented on average a maximum packing fraction of 0.16 for both cavities.

For each diameter of the cavity, we repeated the following procedure for eight equivalent experiments: (i) after the jamming state is reached, we initiate the unpacking process; (ii) a digital dynamometer is attached to the outer end of the wire such that the force needed to unmake a single loop can be measured within 1% uncertainty and recorded; (iii) the wire is marked with a permanent marker at the point where the loop starts to be unmade; (iv) after extracting more and more wire the loop is totally unmade and the point associated with the second extremity of the loop is also marked. The difference between two consecutive marks is identified as the size of that particular loop. It is clear from the experimental procedure that the first (smaller)

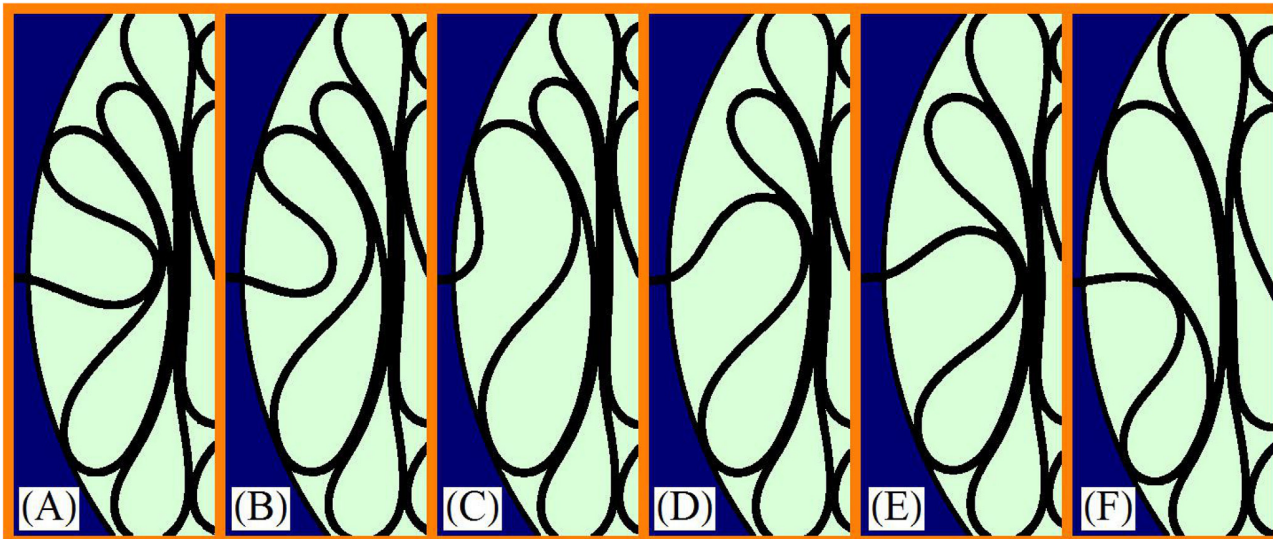


**Fig 1. A wire that is 5020 mm long at the jammed state in a circular cavity whose diameter is 22 cm.** Our experiment consists in measuring the force needed to pull that piece of copper outside the cavity.

doi:10.1371/journal.pone.0128568.g001

extracted loops are harder to pull than the successive (bigger) ones which is compatible with the intuitive idea of a jammed state.

[Fig 2](#) (from A to F) is a sequence of images of the unpacking of a single loop from a circular cavity, where the size of the loop is the extracted length between the images A and F. It is important to emphasize that, contrarily to what could appear intuitively, the structure of loops within the cavity is self-blocking and it is maintained static even with reduced friction. This result is, in fact, supported by additional experiments in which cavity and wire were previously treated with mineral oil. This happens because the passage through the extraction channel is a very strong constraint for the curvature of the wire. It can be noticed that the elastic structure inside the cavity tends to expand and it increases the difficulty of the alignment of the wire beyond the full extension of the extraction channel. During the extraction of a loop there is a restoring force, but after each extraction the system finds a new equilibrium state. Here it was useful as an advantage for the usage of the permanent marker. The profile of the force as a function of the length presents its maximum magnitude near the end of the extraction of the loop ([Fig 2D](#) and [2E](#)). Roughly speaking, the functional shape of the force is repeated for each extracted loop, with a progressive decrease of its maximum magnitude, as the size of the loops continues to increase.



**Fig 2. Sequence of images in a real experiment showing the extraction of a single loop from a two-dimensional cavity.**

doi:10.1371/journal.pone.0128568.g002

It is interesting to note that the reverse sequence (from F to A) in Fig 2 could illustrate the insertion of the loop as well. This last observation have inspired us in several points of this study, as it can be seen in the following pages. An important difference between the present work and the previous studies of packing of wire is that here the total number of loops and the total length inside the cavity are both initially known quantities.

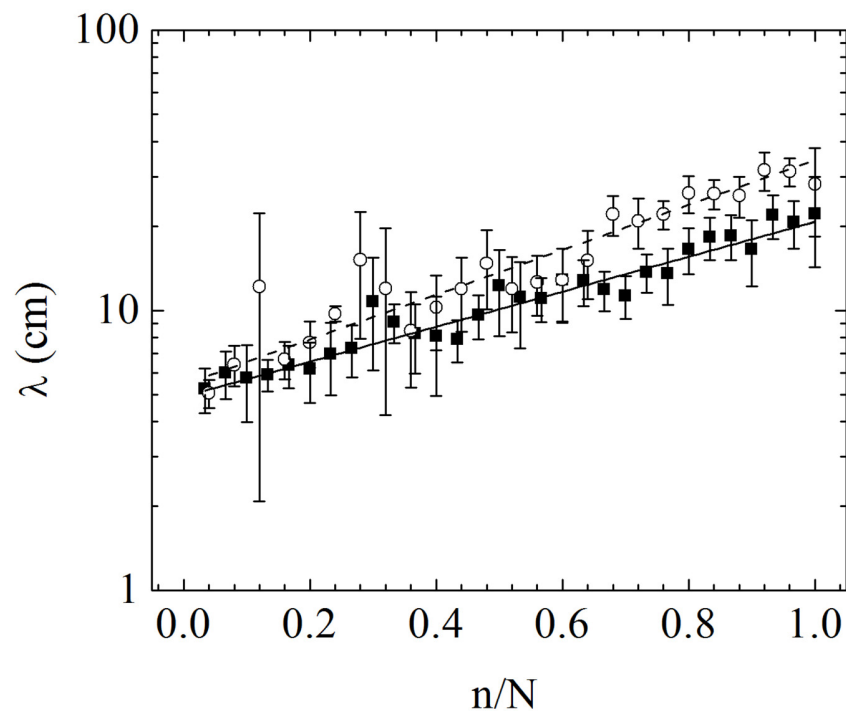
## Results and Discussions

### The size of a loop

Every experiment of jammed state  $i$  had its total number of loops  $N_i$  recorded. However, even under similar conditions, the total number of loops  $N_i$  varies among the experiments. In our experiments we obtained  $N_i$  ranging from 24 to 42, for  $d = 15$  cm, and ranging from 24 to 38, for  $d = 22$  cm. In order to have an universal domain to take averages, the number of loops remaining in the cavity  $n_i$  were normalized by  $N_i$ , so that  $n_i/N_i$  becomes a number that runs from zero to one. In order to assure that the average total number of loops,  $N$ , is the final quantity of points, our averages are taken over intervals of  $N^{-1}$  of width, over all data. Follows from this procedure that each point represents, in average, eight experimental data. The result for the average size (i.e. arc length) of the loop,  $\lambda$ , as a function of the fractional order of unpacked loop,  $n/N$ , is shown in Fig 3 for copper wires in cavities of 15 cm and 22 cm of diameter.

From Fig 3, it can be seen that the size of the smallest loop have the same values, within the error bars, for  $d = 15$  cm and for  $d = 22$  cm. This suggests that the minimum value for the size of the loop does not depend on the diameter of the cavity and, instead, depends only on features of the wire (the plasticity imposes a cutoff in size). On the other hand, the last unpacked loop seems to be proportional to the diameter of the cavity [19, 30]. The standard error of the data shows the high fluctuations involved in a typical experiment of packing of wire [30]. The overall growth of the data in Fig 3 resembles an exponential behavior

$$\lambda_n = \lambda_0 e^{R_0(n/N)}, \tag{1}$$



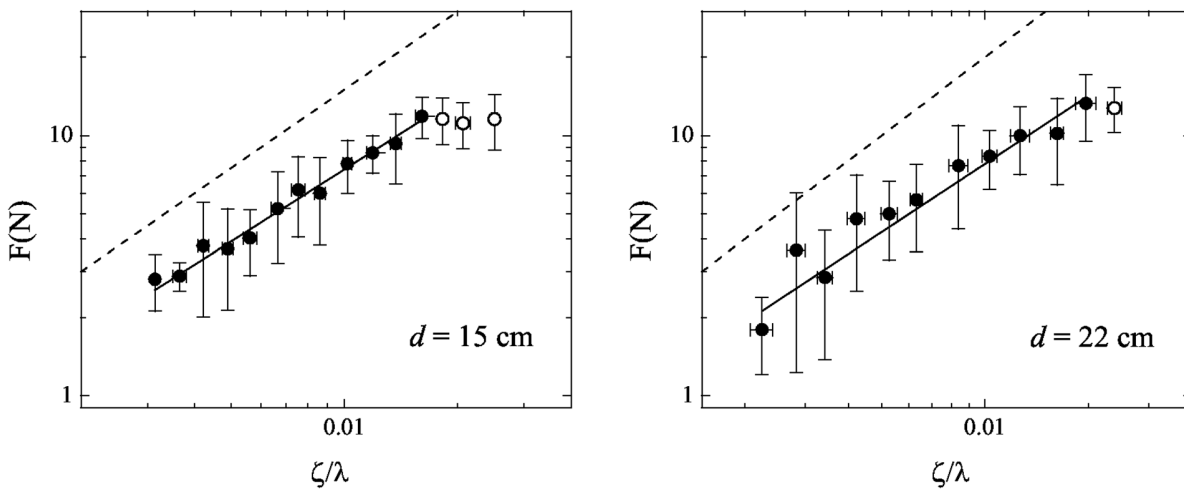
**Fig 3. The average size of loops (i.e. arc length),  $\lambda$  (cm), as a function of the fraction of its unpacking order,  $n/N$ , for copper wires in cavities with  $d = 15$  cm (black squares) and  $d = 22$  cm (opened circles). The lines show the best fit of Eq 1 for the data with  $d = 15$  cm (thick continuum line) and  $d = 22$  cm (dashed line). See text for details.**

doi:10.1371/journal.pone.0128568.g003

where  $\lambda_0$  is an initial size obtained by the  $n/N \rightarrow 0$  extrapolation, and  $R_0$  is a continuum growth rate. Fits from the experimental data with Eq 1 are represented in Fig 3 by a full line for  $d = 15$  cm and by a dashed line for  $d = 22$  cm. The parameters found were  $\lambda_0^{(15)} = 4.9 \pm 0.2$  cm, and  $R_0^{(15)} = 1.44 \pm 0.06$  for  $d = 15$  cm, and  $\lambda_0^{(22)} = 5.4 \pm 0.2$  cm, and  $R_0^{(22)} = 1.84 \pm 0.07$  for  $d = 22$  cm. As commented before, the expected physical invariants are  $\lambda_0$ , the smallest scale length, and  $\lambda_N$ , the scale length ruled by the cavity. Consequently,  $R_0 = \ln(\lambda_N/\lambda_0)$  does not vary among experiments performed in a same cavity (unlike  $N_i$ ). The parameters found correspond to  $\lambda_N^{(15)} = (21 \pm 2)$  cm and  $\lambda_N^{(22)} = (34 \pm 3)$  cm for the size of the last unpacked loop. The total growth of the loops is expected to scale with the diameter of the cavity,  $\lambda_N/\lambda_0 \sim d$ , which implies that  $\Delta R_0 = \Delta(\ln d)$ ; here  $\Delta R_0 = R_0^{(22)} - R_0^{(15)} = 0.40$  while  $\Delta(\ln d) = \ln(22/15) = 0.38$ , a small deviation of about 5%. This suggests that the present model is consistent among different cavities.

An exponential growth as stated in Eq 1 is obtained from the hypothesis that each loop occupies a fraction of the available space of the cavity discounting early loops. However, in the literature of packing of wires in two-dimensional cavities there is a hierarchical model [19] that fits the asymptotic limit  $n/N \rightarrow 0$ . That model is based on fractal scaling (iterations) and provides a more complicated relation with a bigger number of parameters. In the present study we pulled the wire loop-by-loop providing a very detailed profile of  $\lambda(n)$  and observed that Eq 1 fits sufficiently well the data obtained (Fig 3) and involves a better insight of the physics of the problem. For these reasons we adopt an exponential model here.





**Fig 4.** The force  $F$  in Newtons needed to pull a loop out the cavity as a function of  $\zeta/\lambda$ , for copper wires in cavities of diameter  $d = 15$  cm and  $d = 22$  cm. The dashed lines are guides for the eyes and represent the linear regime. See text for details.

doi:10.1371/journal.pone.0128568.g004

### The force to unpack a single loop

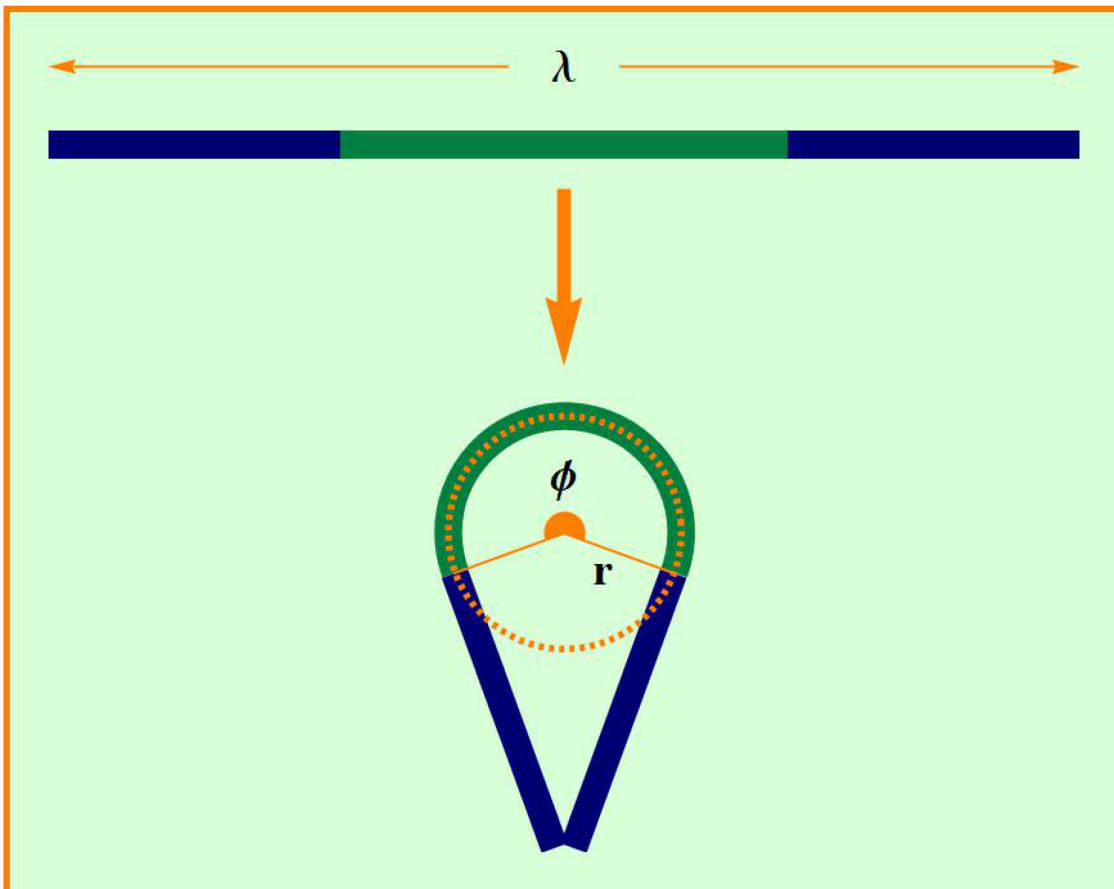
In order to examine the force  $F_j$  needed to unpack a loop of size  $\lambda_j$ , the data were binned over intervals of  $\Delta\lambda$  and then an average of the force,  $F$ , was taken as well as an average of the size,  $\lambda$ . [Fig 4](#) (left) shows the result of that procedure for the data of the cavity with  $d = 15$  cm. A power law

$$F \sim (\zeta/\lambda)^\alpha \tag{2}$$

fits the data very well except for high values of  $\zeta/\lambda$  (small values of  $\lambda$ ). The  $\alpha$  value found for the fit shown in the [Fig 4](#) (left) was  $\alpha^{(15)} = 0.92 \pm 0.03$ . [Fig 4](#) (right) shows the data for the cavity with  $d = 22$  cm, and the power law best fit found had  $\alpha^{(22)} = 0.87 \pm 0.05$ . We ignore the three last points in [Fig 4](#) (left) as well the last point in [Fig 4](#) (right) because they deviate from the general tendency since the elastic behavior fails and plasticity takes place. These points are represented by open circles.

We observe that the available data shown in [Fig 4](#) have a narrow range for the size of the loops. This is a very important point that we can not overcome right now. Following the relations  $R_0 = \ln(\lambda_N/\lambda_0)$  and  $\Delta R_0 = \Delta \ln(d)$ , we estimate that one decade in  $\lambda$  is achieved for cavities of about  $d = 35$  cm. Our wire has a diameter  $\zeta = 1.0$  mm. This entails a corresponding diameter ratio ( $d/\zeta$ ) of at least 350, a number that impose serious practical problems to be circumvented in the machining process of the cavities, especially for transparent cavities (glass or acrylic), as in our case. The diameter ratios in our experiment are 150 and 220, and the maximum diameter ratio in the literature is about 250 [[24](#), [28](#)]. From this we believe that, although with a limited range, our results have valid contributions for all current studies of crumpled wires in two-dimensions.

[Fig 5](#) illustrates the bending of a straight wire of length  $L = \lambda$  to form a loop with a circular bulge with radius of curvature  $r$ . The bent rod is stretched in the external edge of the bulge of the loop and it is shrunk in its internal edge. The elastic bending energy depends on the



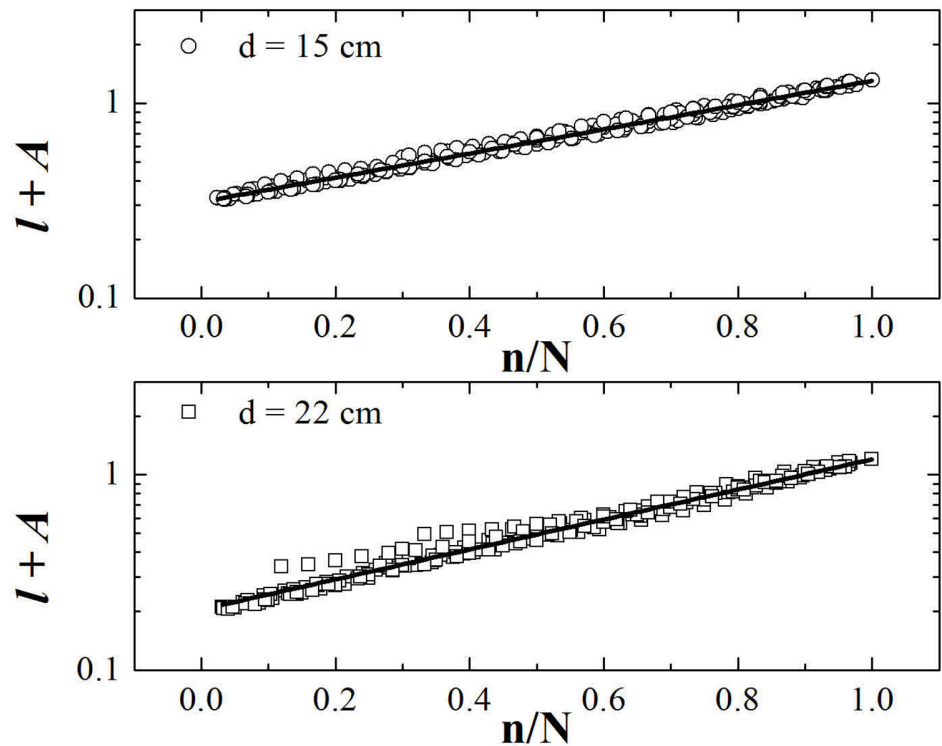
**Fig 5. Scheme of a bend of a straight wire into a loop.**

doi:10.1371/journal.pone.0128568.g005

curvature  $\kappa(l)$  as

$$E_b = I \int_0^L \kappa(l)^2 dl, \quad (3)$$

where  $I$  depends on the (supposedly fixed) cross section of the wire. Eq 3 shows that any fixed shape will have  $E_b \sim \lambda^{-1}$  and therefore  $F_b = -\frac{dE_b}{d\lambda} \sim \lambda^{-2}$ . This result has the form of Eq 2 with  $\alpha = 2$  and represents the purely elastic bending [1, 24]. In this sense the exponents found experimentally are quite anomalous. However, our experimental result is safer since the two exponents found by fitting the data are the same within an error interval of 6% and the result is robust over different binnings. From this, we conclude that a crude model of fixed shape as illustrated by Fig 5 and Eq 3 is not suitable in describing our system. Other ingredients as the confining cell, the associative elasticity of all loops and the gradient of the size of the loops, among others, are pivotal for a realistic description of the unpacking of wire in two-dimensional cavities. As we discuss later on this paper, the exponent  $\alpha$  found in the experiments can be approximately obtained if we consider the collective behavior of the loops inside the cavity instead of a model of single loop as discussed in the present paragraph.



**Fig 6. The variable  $l + A$  as a function of  $n$ .** See text for details.

doi:10.1371/journal.pone.0128568.g006

### The extracted length

The length of the wire extracted from the cavity can be obtained by summing the length due to each removed loop,  $L_n = \sum_{j=1}^n \lambda_j$ . Thus the fractional length is

$$l_n \equiv \frac{L_n}{L_N} = A(e^{R_0(n/N)} - 1) \tag{4}$$

where  $A = (e^{R_0} - 1)^{-1}$ , and  $R_0$  is the same as in Eq 1. The new variable,  $l_n$ , as defined above, is the fraction of the pulled wire with respect to the total length, then it must be  $l_0 = 0$  at the begin of the unpacking and  $l_N = 1$  at the end. Eq 4 provides a curve that fits all data very well, with the constants  $A$  and  $R_0$  depending on the combination of the cavity and the material properties, represented by the parameters  $\lambda_N$  and  $\lambda_0$ , respectively. Moreover, the reader can observe that the parameter  $A$  is determined by  $R_0$ , which indicates that Eq 4 depends on a single parameter.

Fig 6 illustrates the best fit of Eq 4 for the data without binning. For the cavity with  $d = 15$  cm we have found  $R_0^{(15)} = 1.43 \pm 0.05$  and  $A^{(15)} = 0.31 \pm 0.02$ , while for the cavity of  $d = 22$  cm we have found  $R_0^{(22)} = 1.78 \pm 0.07$  and  $A^{(22)} = 0.20 \pm 0.02$ . These values of  $A$  follow its relation with  $R_0$ . Moreover, these values of  $R_0$  are the same found by fitting Eq 1 to the data from Fig 3. They give us  $\Delta R_0 = 0.35$ , a value 8% distant from  $\Delta(\ln d)$ .

The exponential model defined by Eqs 1 and 4 provides

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{A}(l + A), \tag{5}$$

which suggests that the size of the loop  $\lambda$  is a linear function of the fractional pulled length  $l$ . It follows from this and Eq 2 that the force is expected to be a power law of  $(l + A)$  with an exponent  $\alpha$ . This is a second method to obtain the exponent  $\alpha$  experimentally, because the high fluctuations in  $\lambda$  scrambles the order of the loop in the previous case (observe the data shown in Fig 2). A power law obtained from the total length must preserve the order of the unpacking process.

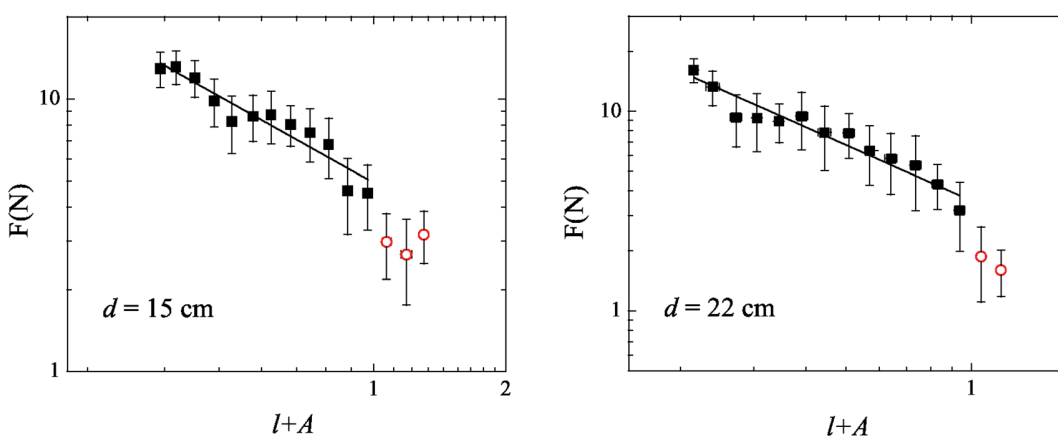
### The force to unpack the wire

In order to exhibit the relationship between the force and the length of the wire inside the cavity, an assortment into bins of width  $\Delta(l + A)$  is required, where a mean force is taken. Fig 7 shows the experimental data and the power law best fit for cavities of diameter  $d = 15$  cm and  $d = 22$  cm, respectively. Both have the form:

$$F \sim (l + A)^{-\alpha}, \tag{6}$$

and the resulting exponents are  $\alpha^{(15)} = 0.90 \pm 0.08$ , for  $d = 15$  cm, and  $\alpha^{(22)} = 0.93 \pm 0.07$ , for the cavity of  $d = 22$  cm, in the interval of  $A \leq (l + A) < 1$ . These exponents are equal to those obtained with the direct fits in Fig 4 within the error bars. However, the exponents increase for  $\alpha_2^{(15)} = 1.09 \pm 0.08$  and  $\alpha_2^{(22)} = 1.20 \pm 0.08$  if the fits consider all the experimental data. We choose to stop the fits at  $l + A = 1$  because after that the data fall from the general tendency as it can be seen by the open circles in Fig 7. This happens because the wire is much more loose and loses its contact interactions close to the end of the unpacking.

In the following we give justification for Eq 6 with  $\alpha = 1$ . Our model is inspired by previous results from image analysis which indicated that the elastic bending energy in two-dimensional crumpled wires is concentrated in an one-dimensional set, although the mass of the system is distributed in a two-dimensional domain [31]. This is true for the limit of a fulfilled cavity, where the rod is densely packed as parallel nearly straight lines in the bulk of the cavity and the elastic energy due to the compressed loops is concentrated on the perimeter of the cavity. Interestingly, in this limiting case we can state that *the energy is equal for all loops irrespective of its arc length*. Certainly, this conclusion from a particular static configuration does not need to be



**Fig 7. The force  $F$  in Newtons needed to pull out a piece of wire whose fraction of length out the cavity is  $l$  for copper wires in cavities of diameter  $d = 15$  cm and  $d = 22$  cm. See text for details.**

doi:10.1371/journal.pone.0128568.g007

valid for a serial extraction of loops. However, we argue that in a mean field approach this statement can be extended for the unpacking of wire.

The wire stores elastic energy in the bulge of its loops, which tend to be as big as they can, in a process which involves repulsion among the neighbor loops. This interaction between pairs of loops leads to the exchange of energy among the loops confined in the cavity. Of course, a detailed explanation presents some difficulty because the interaction among the loops is complex as can be inferred from Fig 2. The energy to extract a loop of length  $\lambda_i$  is  $\varepsilon_i$  which may be identified as a chemical potential. In order to obtain an expression for the total energy which considers the global features of the system, we can claim that the mean energy to extract a single loop is  $\varepsilon_0 = E_0/N$ , where  $E_0 = \sum_j \varepsilon_j$  is the total energy to pull out the whole structure. In a mean approach, the energy to extract  $n$  loops is  $E = n\varepsilon_0$ , then

$$E = n \frac{E_0}{N} = \frac{E_0}{R_0} \ln \left( \frac{l + A}{A} \right), \tag{7}$$

where we have used Eq 4. Thus, the first equality in Eq 7 is a manifestation of the equipartition of energy among the loops. We stress that Eq 7 is a better expression for the energy of this system when compared with Eq 3 because it takes into account: (i) the whole structure, (ii) the gradient of sizes of the loops, and therefore (iii) the confinement of the wire due to the cavity. The proportionality  $E \sim n$  which supports Eq 7 is also found for the elastic energy of the one-dimensional compactation of a thin sheet in  $n$  layers. This process is indicated as a prototype for crumpling where the force is applied in one direction [29].

The logarithm functional shape presented in Eq 7 is not entirely new in the packing of wires. The elastic energetic cost of bending a straight wire into a spiral follows a similar relationship with the length of the wire [28]. Therefore Eq 7 is in harmony with the idea that ordered models of folding are able to capture some features of crumpling [29].

We can access some clues about the consecutive loops by adding the information obtained from Eq 7 to the model where the loop is described by straight lines and circles as illustrated in Fig 5. In order to take in account the whole structure we extends Eq 3 to an array of  $N$  loops and a total arc length  $L$ . The total bending energy over the wire can be taken loop-by-loop:

$$E_b = I \int_0^L \kappa(l)^2 dl = \sum_{i=1}^N I \int_{\{\lambda_i\}} \kappa_i^2 dl \sim \sum_{i=1}^N \kappa_i^2 \phi_i r_i, \tag{8}$$

because the curvature is constant  $\kappa_i = 1/r_i$  in the circular bulges of length  $\phi_i$ ,  $r_i$ . The energy of each loop is then  $\varepsilon_i \sim (\phi_i/r_i)$ . The mean field argument before Eq 7 suggests that  $(\phi_i/r_i)$  is roughly fixed and therefore the consecutive loops may have different elongations.

From the considerations of the previous paragraph, this is a conservative system and the extraction force  $F$  can be taken as the negative of  $-dE/dL$ , where  $L = L_n$  is the extracted length obtained by summing the size of the removed loops. From Eq 7 follows

$$F = \left( \frac{dE}{dl} \right) \left( \frac{dl}{dL} \right) \sim (l + A)^{-1}. \tag{9}$$

The experimentally studied system involves an amount of energy dissipation through friction and plastic yielding that we believe is responsible for the shift from 1 to 0.9 found for the exponents in Eq 6.

There was indicated in the literature some parallelism between the packing of crumpled wires in two dimensions and the three-dimensional DNA package in viral capsids [17, 18]. Here we observe that the force dependence is similar in both cases. The elastic cost to bend a molecule of length  $L$  into a circle of radius  $R$  is  $E_b \sim L/R^2$  immediately after Eq 3. Then the

force is  $F \sim R^{-2}$ . Following the usual assumption in DNA models [1] this molecule twirls in the inner surface of a viral cavity in an ordered helicoidal configuration of radius  $R$  and height  $h$ . The total number of hoops inside a capsule with constant shape is  $N \sim h \sim R$  in such a way that the total length is  $L = 2\pi NR \sim R^2$ . Therefore the total length is proportional to the area of the surface of the virus capsule as well as in the two-dimensional packing of wires. This reflects the dependence  $F \sim L^{-1}$  for the DNA packaging in viral capsules and guide us in order to extend our results for crumpled systems in micro or even nano scales.

### Differential equation for the (un)packing of a rod

The model used in this study is originally a discrete model: The loops are extracted from the cavity in steps of  $\Delta n = 1$  with different sizes,  $\lambda_n$ , and the total length,  $L_n$ , is a geometrical series. In this sense the number of loops,  $n$ , is a discrete variable that goes until an unforeseeable number  $N$ . When we normalize,  $n/N$ , we still have a discrete variable, but when we consider a very large number of experiments this discrete behavior is diluted over a continuum of values. All fits made in our study were continuum ones, and they are in a very good agreement with the discrete expected behavior. In the thermodynamical regime, we expect  $\Delta(n/N) \rightarrow 0$ , while the variable  $n/N$  runs continuously from zero to one. Combining Eqs 1 and 4 we can write

$$\lambda_n = \left( \frac{\lambda_0}{R_0 A} \right)^{l(n/N)}, \tag{10}$$

where  $l'(n/N)$  denotes the derivative of  $l$  with respect to  $(n/N)$ . Then, the function  $l = l(n/N)$  obeys the differential equation

$$l' = R_0(l + A), \tag{11}$$

where the exponential ratio  $R_0$  is positive. The same equation can be written for the packing process, where  $l$  is the fractional *packed* length and  $n/N$  the fractional number of loops *inside* the cavity. In this case the exponential rate  $R_0$  is negative because the loops progressively decrease, but the product  $R_0 A$  remains positive. This term in Eq 11 is important because the variation of the length have always a forced element due to the injection or extraction process.

Eq 11 with  $R_0 < 0$  allows us to make an analogy between the packing of wires in two-dimensional cavities and an RC circuit from basic physics. The charge in the capacitor corresponds to the total length  $l$  in the cavity while the time corresponds to the number of loops  $(n/N)$ . The product  $R_0 A$  is seen as due to a “battery” potential. For a given time  $n$ , this mass-capacitor has a charge  $l$  and a current  $l'$  in such a way that the structure holds the wire inside the cavity as we can see from the static equilibrium shown in Fig 1. If we proceed in our analogy we should expect that the energy  $E$  is proportional to the square of the charge, here  $E \sim l^2$ . This last expression is in agreement with the self-exclusion energy commonly used to model this experiment [17, 25, 26]. We conjecture that the study of the packing of a wire in a two-dimensional cavity as a capacitor could be useful for the problem of delivery of biopolymers or polymers in biological tissues with the aid of natural or artificial nano carriers [7–12].

### Conclusions

The study of crumpled structures of wires is a recent topic of wide interest from the points of view of theory and application [20, 24–27]. Here it has been studied experimentally the progressive extraction of such a structure initially confined in two-dimensional cavities. The average profile of sizes of the constitutive loops was obtained and the force needed to unpack the loops was found for two different methods: as a function of the total length of the extracted wire as well as a function of the size of each loop. We have compared a model for a single loop

with a mean-field argument for  $n$  loops and concluded that our results for the dependence of the unpacking force is better explained by the collective behavior of loops. A hypothesis that each loop occupies a fixed fraction of the available space of the cavity discounting early loops lead us to an exponential model for the size of the loops and have yielded a differential equation for crumpled wires. Besides its intrinsic interest, the problem investigated here is of relevance for the unpacking of DNA from viral capsids [1, 17], as well as for the important problem of delivery of polymers and one-dimensional bio-polymers into specific biological tissues by artificial or natural nano-structures [4–12].

## Supporting Information

**S1 Dataset. The raw data from our experiments.** In all data files, the number in parenthesis corresponds to the label of the experience. Therefore “Cu15 (3).txt” corresponds to the third experiment of extraction of the copper wire from the cavity of 15 cm in diameter. (ZIP)

## Acknowledgments

We would like to acknowledge the anonymous reviewers whose questions and notes helped us to clarify critical arguments in several parts of this manuscript. We acknowledge Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Programa Nacional de Cooperação Acadêmica (PROCAD), and Programa de Núcleos de Excelência (PRONEX), all Brazilian Government Agencies, for financial support.

## Author Contributions

Conceived and designed the experiments: VPB MAFG. Performed the experiments: NRM TAS. Analyzed the data: TAS VPB MAFG. Wrote the paper: TAS MAFG.

## References

1. Purohit PK, Inamdar MM, Grayson PD, Squires TM, Kondev J, Phillips R. Forces during Bacteriophage DNA Packaging and Ejection. *Biophysical Journal*. 2005; 88(2):851–866. Available from: [http://www.cell.com/biophysj/abstract/S0006-3495\(05\)73160-X](http://www.cell.com/biophysj/abstract/S0006-3495(05)73160-X). doi: [10.1529/biophysj.104.047134](https://doi.org/10.1529/biophysj.104.047134) PMID: [15556983](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/15556983/)
2. Couldwell WT, Lemay DR, McComb JG. Experience with use of extended length peritoneal shunt catheters. *Journal of Neurosurgery*. 1996; 85(3):425–427. doi: [10.3171/jns.1996.85.3.0425](https://doi.org/10.3171/jns.1996.85.3.0425) PMID: [8751627](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/8751627/)
3. Gupta M, Digra NC, Sharma N, Goyal S, Agrawal A. Length of peritoneal end of shunt catheters in hydrocephalus in children and rate of complications. *J Cranio Max Dis*. 2012; 1(1):12. Available from: <http://www.cranioaxillary.com/text.asp?2012/1/1/12/102468>. doi: [10.4103/2278-9588.102468](https://doi.org/10.4103/2278-9588.102468)
4. Kataoka K, Harada A, Nagasaki Y. Block copolymer micelles for drug delivery: design, characterization and biological significance. *Advanced Drug Delivery Reviews*. 2001; 47(1):113–131. *Nanoparticulate Systems for Improved Drug Delivery*. doi: [10.1016/S0169-409X\(00\)00124-1](https://doi.org/10.1016/S0169-409X(00)00124-1) PMID: [11251249](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/11251249/)
5. Geng Y, Dalhaimer P, Cai S, Tsai R, Tewari M, Minko T, et al. Shape effects of filaments versus spherical particles in flow and drug delivery. *Nat Nano*. 2007; 2(4):249–255. doi: [10.1038/nnano.2007.70](https://doi.org/10.1038/nnano.2007.70)
6. Martin CR, Kohli P. The emerging field of nanotube biotechnology. *Nat Rev Drug Discov*. 2003; 2(1):29–37. doi: [10.1038/nrd988](https://doi.org/10.1038/nrd988) PMID: [12509757](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/12509757/)
7. Chan HK, Chew NYK. Novel alternative methods for the delivery of drugs for the treatment of asthma. *Advanced Drug Delivery Reviews*. 2003; 55(7):793–805. *Aerosol Delivery and Asthma Therapy*. Available from: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169409X03000784>. doi: [10.1016/S0169-409X\(03\)00078-4](https://doi.org/10.1016/S0169-409X(03)00078-4) PMID: [12842601](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/12842601/)
8. Schmaljohann D. Thermo- and pH-responsive polymers in drug delivery. *Advanced Drug Delivery Reviews*. 2006; 58(15):1655–1670. 2006 Supplementary Non-Thematic Collection. Available from: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169409X06001839>. doi: [10.1016/j.addr.2006.09.020](https://doi.org/10.1016/j.addr.2006.09.020) PMID: [17125884](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/17125884/)

9. Solovev AA, Xi W, Gracias DH, Harazim SM, Deneke C, Sanchez S, et al. Self-Propelled Nanotools. *ACS Nano*. 2012; 6(2):1751–1756. doi: [10.1021/nn204762w](https://doi.org/10.1021/nn204762w) PMID: [22233271](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/22233271/)
10. Needham D, Dewhirst MW. The development and testing of a new temperature-sensitive drug delivery system for the treatment of solid tumors. *Advanced Drug Delivery Reviews*. 2001; 53(3):285–305. Triggering in Drug Delivery Systems. Available from: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169409X01002332>. doi: [10.1016/S0169-409X\(01\)00233-2](https://doi.org/10.1016/S0169-409X(01)00233-2) PMID: [11744173](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/11744173/)
11. Tsapis N, Bennett D, Jackson B, Weitz DA, Edwards DA. Trojan particles: Large porous carriers of nanoparticles for drug delivery. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2002; 99(19):12001–12005. Available from: <http://www.pnas.org/content/99/19/12001.abstract>. doi: [10.1073/pnas.182233999](https://doi.org/10.1073/pnas.182233999)
12. Frenot A, Chronakis IS. Polymer nanofibers assembled by electrospinning. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*. 2003; 8(1):64–75. Available from: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359029403000049>. doi: [10.1016/S1359-0294\(03\)00004-9](https://doi.org/10.1016/S1359-0294(03)00004-9)
13. Aguiar JA, Gomes MAF, Neto AS. Geometrical and electrical properties of crumpled wires. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 1991; 24(3):L109. doi: [10.1088/0305-4470/24/3/002](https://doi.org/10.1088/0305-4470/24/3/002)
14. Vetter R, Wittel FK, Herrmann HJ. Morphogenesis of filaments growing in flexible confinements. *Nat Commun*. 2014 07; 5. doi: [10.1038/ncomms5437](https://doi.org/10.1038/ncomms5437)
15. Kantor Y, Kardar M, Nelson DR. Statistical Mechanics of Tethered Surfaces. *Phys Rev Lett*. 1986 Aug; 57:791–794. doi: [10.1103/PhysRevLett.57.791](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.57.791) PMID: [10034162](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/10034162/)
16. Gomes MAF. Fractal geometry in crumpled paper balls. *American Journal of Physics*. 1987; 55(7):649–650. Available from: <http://scitation.aip.org/content/aapt/journal/ajp/55/7/10.1119/1.15094>. doi: [10.1119/1.15094](https://doi.org/10.1119/1.15094)
17. Gomes MAF, Brito VP, Araújo MS. Geometric properties of crumpled wires and the condensed non-solid packing state of very long molecular chains. *Journal of the Brazilian Chemical Society*. 2008 00; 19:293–298. Available from: [http://www.scielo.br/scielo.php?pid=S0103-50532008000200014&script=sci\\_arttext](http://www.scielo.br/scielo.php?pid=S0103-50532008000200014&script=sci_arttext). doi: [10.1590/S0103-50532008000200014](https://doi.org/10.1590/S0103-50532008000200014)
18. Katzav E, Adda-Bedia M, Boudaoud A. A statistical approach to close packing of elastic rods and to DNA packaging in viral capsids. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2006; 103(50):18900–18904. Available from: <http://www.pnas.org/content/103/50/18900.abstract>. doi: [10.1073/pnas.0609079103](https://doi.org/10.1073/pnas.0609079103)
19. Donato CC, Gomes MAF, de Souza RE. Crumpled wires in two dimensions. *Phys Rev E*. 2002 Jul; 66:015102. doi: [10.1103/PhysRevE.66.015102](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.66.015102)
20. Donato CC, Gomes MAF, de Souza RE. Scaling properties in the packing of crumpled wires. *Phys Rev E*. 2003 Feb; 67:026110. doi: [10.1103/PhysRevE.67.026110](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.67.026110)
21. Conway JH, Sloane NJA. *Sphere Packings, Lattices and Groups*, 1988. Springer-Verlag, New York/Berlin,.
22. Boué L, Adda-Bedia M, Boudaoud A, Cassani D, Couder Y, Eddi A, et al. Spiral Patterns in the Packing of Flexible Structures. *Phys Rev Lett*. 2006 Oct; 97:166104. doi: [10.1103/PhysRevLett.97.166104](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.166104) PMID: [17155417](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/17155417/)
23. Boué L, Katzav E. Folding of flexible rods confined in 2D space. *EPL (Europhysics Letters)*. 2007; 80(5):54002. doi: [10.1209/0295-5075/80/54002](https://doi.org/10.1209/0295-5075/80/54002)
24. Stoop N, Wittel FK, Herrmann HJ. Morphological Phases of Crumpled Wire. *Phys Rev Lett*. 2008 Aug; 101:094101. doi: [10.1103/PhysRevLett.101.094101](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.094101) PMID: [18851615](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/18851615/)
25. Gomes MAF, Brito VP, Araújo MS, Donato CC. Crumpled states of a wire in a two-dimensional cavity with pins. *Phys Rev E*. 2010 Mar; 81:031127. doi: [10.1103/PhysRevE.81.031127](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.81.031127)
26. Gomes MAF, Pereira CCS, Brito VP. Crumpled states of a wire in a cubic cavity with periodic obstacles. *Phys Rev E*. 2013 May; 87:052103. doi: [10.1103/PhysRevE.87.052103](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.87.052103)
27. da Cunha BC. Crumpled wires and Liouville field theory. *EPL (Europhysics Letters)*. 2009; 88(3):31001. doi: [10.1209/0295-5075/88/31001](https://doi.org/10.1209/0295-5075/88/31001)
28. Bayart E, Boudaoud A, Adda-Bedia M. Tuning the ordered states of folded rods by isotropic confinement. *Phys Rev E*. 2014 Jan; 89:012407. doi: [10.1103/PhysRevE.89.012407](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.89.012407)
29. Deboeuf S, Katzav E, Boudaoud A, Bonn D, Adda-Bedia M. Comparative Study of Crumpling and Folding of Thin Sheets. *Phys Rev Lett*. 2013 Mar; 110:104301. doi: [10.1103/PhysRevLett.110.104301](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.104301) PMID: [23521261](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/23521261/)
30. Gomes MAF, Hora RR, Brito VP. Electrical resistance of complex two-dimensional structures of loops. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2011; 44(25):255401. doi: [10.1088/0022-3727/44/25/255401](https://doi.org/10.1088/0022-3727/44/25/255401)
31. Donato CC, Gomes MAF. Condensation of elastic energy in two-dimensional packing of wires. *Phys Rev E*. 2007 Jun; 75:066113. doi: [10.1103/PhysRevE.75.066113](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.75.066113)



# Referências

- [1] C. C. Donato, M. A. F. Gomes, and R. E. de Souza. Crumpled wires in two dimensions. *Phys. Rev. E*, 66:015102, Jul 2002.
- [2] B. Carneiro da Cunha. Crumpled wires and liouville field theory. *EPL (Europhysics Letters)*, 88(3):31001, 2009.
- [3] Marcelo A. F. Gomes and Maycon S. Brito, Valdemiro P. and. Geometric properties of crumpled wires and the condensed non-solid packing state of very long molecular chains. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 19:293 – 298, 00 2008.
- [4] M. A. F. Gomes, V. P. Brito, M. S. Araújo, and C. C. Donato. Crumpled states of a wire in a two-dimensional cavity with pins. *Phys. Rev. E*, 81:031127, Mar 2010.
- [5] Cássia Cristina Donato. *Estudo das propriedades físicas de estruturas heterogêneas de arames em cavidades bidimensionais*. PhD thesis, Universidade de Brasília, May 2006.
- [6] C. C. Donato and M. A. F. Gomes. Condensation of elastic energy in two-dimensional packing of wires. *Phys. Rev. E*, 75:066113, Jun 2007.
- [7] <http://helenadiasciencias.blogspot.com.br/2014/10/estrutura-e-composicao-do-dna.html>. (Acessado em 01/12/2015).
- [8] Victor Hugo Holanda Calvalcanti. Estudo de processo de empacotamento de interesse físico e biológico envolvendo sistemas com topologia uni- e bi-dimensional. Master's thesis, Universidade Federal de Pernambuco, 2011. Dissertação de Mestrado.
- [9] Thiago A. Sobral, Marcelo A. F. Gomes, Núbia R. Machado, and Valdemiro P. Brito. Unpacking of a crumpled wire from two-dimensional cavities. *PLoS ONE*, 10(6):e0128568, 06 2015.
- [10] M.A.F.Gomes. Paper crushes fractally. *J.Phys.A*, 20:L283, 1987.
- [11] K. P. Prashant, M. I. Mandar., D. Grayson. Paul, M. Squires. Todd, Kondev. Jané, and Phillips. Rob. Forces during bacteriophage dna packaging and ejection. *Biophysical Journal*, 88(2):851 – 866, 2005.
- [12] C. C. Donato, M. A. F. Gomes, and R. E. de Souza. Scaling properties in the packing of crumpled wires. *Phys. Rev. E*, 67:026110, Feb 2003.
- [13] B Mandelbrot. The fractal geometry of nature. *W.H.Freeman*, 1983.
- [14] G. Gompper. Patterns of stress in crumpled sheets. *Nature*, 386(3), 1997.

- [15] P.G. de Gennes. *Scaling concepts in polymer physics*. Cornell University Press, Ithaca-New York, 1979.
- [16] T.C. Lubensky. Soft condensed matter physics. *Solid State Communications*, 102(2–3):187 – 197, 1997. Highlights in Condensed Matter Physics and Materials Science.
- [17] M A F Gomes, R R Hora, and V P Brito. Electrical resistance of complex two-dimensional structures of loops. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 44(25):255401, 2011.
- [18] N. Stoop, F. K. Wittel, and H. J. Herrmann. Morphological phases of crumpled wire. *Phys. Rev. Lett.*, 101:094101, Aug 2008.
- [19] E. Bayart, A. Boudaoud, and M. Adda-Bedia. Tuning the ordered states of folded rods by isotropic confinement. *Phys. Rev. E*, 89:012407, Jan 2014.
- [20] S. Deboeuf, E. Katzav, A. Boudaoud, D. Bonn, and M. Adda-Bedia. Comparative study of crumpling and folding of thin sheets. *Phys. Rev. Lett.*, 110:104301, Mar 2013.
- [21] E. Katzav, M. Adda-Bedia, and A. Boudaoud. A statistical approach to close packing of elastic rods and to dna packaging in viral capsids. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 103(50):18900–18904, 2006.
- [22] M. A. F. Gomes, C. C. S. Pereira, and V. P. Brito. Crumpled states of a wire in a cubic cavity with periodic obstacles. *Phys. Rev. E*, 87:052103, May 2013.