

# ESCALONAMENTO DINÂMICO DE FRACTAIS LAPLACIANOS BASEADO NO MÉTODO SAND-BOX: Uma aplicação a filmes finos de SnO<sub>2</sub>

Christiane Ribeiro, Lucas Máximo Alves, Sandra Regina Masseto Antunes.

Al. Nabuco de Araújo, 469, Uvaranas, CEP - 84031-510, Caixa Postal 1007, Fone/Fax: (042) 223-9355 Ramal-38, lmalves@uepg.br, Centro Interdisciplinar de Pesquisas em Materiais, Universidade Estadual de Ponta Grossa-PR, - CIPEM/UEPG-PR.

## RESUMO

A dynamical scaling of laplacian fractals and multifractals is proposed based in the sand-box method. The multifractal growth of DLA structures in thin films of SnO<sub>2</sub> is modeled in function of the radius of grow and the time by a function that describe the number of seeds  $N(R,t)$ . From this our propositions we show that the multifractal dynamics can be infered from the static structure since the rate of grow  $V(R,t)$  is knew by a kinetic theory. The experimental results are fitted showing a good aggrement with the theoretical predictions. With our model we got a geometrical interpretation for the multifractal index  $q$  relating it to the instability coeficient of Sander,  $\beta$ . We concluded that the power dissipated in the fractal or multifractal process formation it is maximum when  $q = 0$  in agreement with the statical multifractal formalism.

Palavras chave: Filmes de SnO<sub>2</sub>, Método Sand-Box, Escalonamento dinâmico.

## INTRODUÇÃO

Na natureza ocorre diversos fenômenos cujo resultado é a formação de padrões ramificados, em processos que acontecem longe do equilíbrio termodinâmico<sup>(1)</sup>. Estes padrões podem ser: trincas, rupturas dielétricas ou relâmpagos, crescimento dendrítico em processos de solidificação, formação de agregados em procesos de gelificação, etc. Atualmente existe grande interesse científico em descrever o surgimento destas estruturas. A descrição matemática destes padrões pode ser feita em termos da geometria fractal. Esta classe específica de padrões ramificados é chamada de fractais laplacianos, devido a natureza da sua formação. Alguns destes padrões são formados em processos de crescimento baseados na agregação limitado por difusão (DLA). De um forma geral, como existe uma estreita relação, entre a fenomenologia e a estrutura formada, decorrente da sua geometria fractal, o entendimento dos processos de formação destas estruturas devem ser provenientes da sua análise matemática. Portanto, a sua descrição matemática deve transcender a simples caracterização geométrica, com a finalidade de relacionar o padrão formado com o processo de dissipação de energia que o gerou. Desta forma, é possível, utilizar a geometria fractal com a finalidade de se entender processos cada vez mais complexos.

Neste trabalho, estamos interessados em relacionar, a geometria fractal com o processo dinâmico de crescimento, pois é nesta situação que os padrões se formam e as ramificações surgem. O escalonamento dinâmico<sup>(2)</sup> corresponde a descrição temporal do crescimento das estruturas ou padrões fractais, uma vez que a dimensão fractal calculada pelos métodos conhecidos levam em conta o fractal estático já formado, o escalonamento dinâmico procura relacionar a descrição fractal durante seu tempo de formação. Para isso as escalas de medição são dinâmicas e a dimensão fractal pode ou não depender do tempo transcorrido na formação da estrutura fractal. Para isso nós usamos o método Sand-Box<sup>(1)</sup> como base para representar o escalonamento dinâmico de estruturas fractais ramificadas como a mostrada na Figura - 1 .

O método Sand-Box, permite calcular a dimensão de uma estrutura fractal imersa em qualquer dimensão euclidiana ( $d = 1,2,3,..etc$ ). O cálculo é feito, contando-se o número de estruturas  $N(R)$  autosimilares contidas em "caixas" de raio  $R$  variável, centradas na origem "O" de um sistema de coordenadas. A partir deste método, foi possível elaborar uma técnica de escalonamento dinâmico de fractais laplacianos, que possuem um raio de giração  $R(V,t)$  que cresce com o tempo, com uma velocidade  $V$  em torno de uma origem central fixada "O". Fractais laplacianos foram observados em filmes finos de SnO<sub>2</sub>, onde a técnica proposta neste trabalho foi utilizada. Com este escalonamento dinâmico, foi possível descrever a formação de estruturas fractais em termos da Função Dissipação da Termodinâmica dos Processos Irreversíveis. Este cálculo pode ser usado na descrição matemática de quaisquer processos de crescimento de estruturas fractais, como a gelificação, por exemplo. Pode-se através do escalonamento dinâmico estimar o numero de partículas que participam do processo, a taxa de crescimento da estrutura em função do raio de alcance e do tempo, e a energia gasta na formação da estrutura.

## O MODELO

A teoria fractal do ponto de vista da física diz respeito ao estudo de estruturas irregulares que apresentam a propriedade de auto-similaridade ou auto-afinidade (o fato de que as partes são similares ao todo, MANDELBROT 1972). A natureza intrigante destas propriedades existentes em estruturas, que se estendem desde o microcosmo ( ) até o macrososmo, é motivo de muitas investigações na física (HERMMANN, TSALLIS e outros). Sendo assim, a teoria fractal possui diversos

contextos, tanto na física como na matemática, tais como: na teoria do caos (LIVRO DE CAOS), no estudo das transições de fase e fenômenos críticos (LIVROS DE MEC. ESTATÍSTICA), no estudo de aglomeração de partículas (LIVRO DO MEAKIN), etc. O contexto que está mais diretamente relacionado ao processo de gelificação, por causa da natureza física do processo, é a que diz respeito ao crescimento fractal (Fractal Growth, SANDER, MEAKIN e PIETRONERO). Nesta sub-área são estudados os mecanismos de crescimento de estruturas que surgem em processos de instabilidade e dissipação de energia, tais como as trincas (HERMMANN, ROUX, etc) e padrões ramificados (MEAKIN). Neste sentido e que procuraremos abordar o problema da gelificação.

### 3.1 - O Modelo fractal de estruturas

Os conceitos básicos da teoria fractal desenvolvidos por Mandelbrot (1982) e outros, tem sido utilizados na descrição de estruturas irregulares, como superfícies de fratura e trincas (Herrmann), com o intuito de se relacionar a descrição geométrica destes objetos com as propriedades dos materiais (Arcangelis).

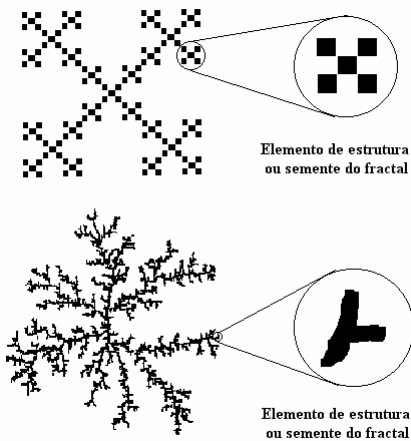


Figura – 2.1. Fractais ramificados, mostrando um elemento de estrutura a) Fractal Matemático auto-similar b) Fractal Físico estatisticamente auto-similar.

A teoria fractal torna-se cada vez mais presente na descrição de fenômenos que possuem uma desordem mensurável, chamado de caos determinístico (Livro de Modelos de Fratura e Estrutura Desordenada). O fenômeno da fratura e propagação de trincas, embora sendo estatístico, mostra que algumas regras ou leis são obedecidas, e a cada dia tornam-se mais claras através do entendimento das propriedades dos fractais (Livro do Herrmann & Roux 199X).

As propriedades básicas dos fractais são: a sua dimensão não-inteira e a auto-similaridade, isto é, o fato de suas partes se assemelharem ao todo em diferentes escalas. Esta última propriedade, se torna mais evidente quando se faz uma transformação de escala homogênea de uma parte qualquer de sua estrutura, em escalas sucessivas.

Existem dois tipos básicos de fractais: os fractais matemáticos, cujas relações de auto-similaridade são

exatas e não tem limites de escala superior ou inferior pois são gerados por regras de interações infinitas (Figura – 2.1b) e fractais físicos, cujas relações de auto-similaridade são obedecidas na média estatística feita ao longo de todo o fractal, desde uma escala inferior  $\varepsilon_{\min}$  até uma outra escala superior  $\varepsilon_{\max}$  (auto-similaridade), conforme mostra a Figura – 2.1a. Supondo-se que os fractais encontrados na natureza, ao se formarem, seguem regras ou leis do tipo citada acima, vemos que os intrigantes fatos concernentes a sua estrutura, apesar de serem curiosos do ponto de vista matemático, parecem esconder algum tipo de princípio de dissipação de energia (Alves 1997, Herrman 1993). Nestes fractais físicos ou naturais o escalonamento da extensão da estrutura é feito por meio de uma função homogênea da seguinte forma:

$$F(\delta) \sim \delta^{d-D} \quad (2.1)$$

onde  $d$  é a dimensão euclideana de projeção do fractal e  $D$  é a dimensão fractal da estrutura auto-similar.

Por outro lado, existem fractais com diferentes dimensões ao longo de suas direções ortogonais, que são chamados de fractais auto-afins. Fractais auto-afins são aqueles que aparecem imersos numa dimensão euclidiana superior ( $l = d + 1$ ) e possuem projeção sobre uma dimensão euclidiana inferior ( $d$ ), de tal forma que no limite de escalas muito grandes a dimensão deste é a dimensão euclidiana  $E$ . Por exemplo, uma trinca vista de uma escala muito distante pode ser considerada como uma reta, cuja dimensão é  $d = 1$  e superfícies de fratura, neste limite, são planos de dimensão  $d = 2$ . Neste fractais o escalonamento da extensão da estrutura é feito por meio de uma função homogênea da seguinte forma:

$$F(\delta) \sim \delta^{-D_x} \quad (2.2)$$

onde  $l$  é a dimensão euclideana de imersão do fractal e  $D_x$  é a dimensão fractal da estrutura auto-afim ao longo da direção  $x$ . O expoente da função acima é dado por  $\alpha = l - D_x$  onde  $\alpha$  é o expoente da rugosidade da estrutura. Um exemplo de um fractal auto-afim está mostrado mais oportunamente na Figura – 3.5, quando será modelado o perfil de uma trinca.

Definindo-se o “elemento padrão da estrutura” ou “semente” de um fractal, como sendo o elemento básico de formação do mesmo, que é auto-similar ou auto-afim a outro, em escalas sucessivas, o número de estruturas formadas numa determinada escala pode ser descrito de acordo com Sander<sup>(2)</sup> como sendo:

$$N_r(\varepsilon) = \varepsilon^{-D_r} \quad (2.3)$$

onde:

$\varepsilon$ : é o fator de transformação de escala usado

$N_r$ : é o número de elementos de estrutura na escala  $\varepsilon$  na direção  $r$ .

$D_r$ : é a dimensão fractal da estrutura na direção  $r$ . Para fractais auto-similares  $D_r = D$  e para fractais auto-afins  $D_r = D_x$ .

A grandeza  $\varepsilon$  é o fator de transformação de escala dado pela razão entre os tamanhos  $r$  e  $R$  do elemento de estrutura em duas escalas diferentes ou sucessivas:

$$\varepsilon = r/R \quad (2.4)$$

Para um mono-fractal o fator de escala  $\varepsilon$  é uma constante entre dois níveis consecutivos de escalonamento. Contudo uma generalização pode ser feita a partir da relação (2.21) para o caso onde a dimensão fractal depende da escala como é o caso de multifractais. Normalmente os fractais encontrados na natureza são multifractais, que correspondem àqueles que possuem uma dimensão que varia continuamente. Para estes fractais, as relações (1) e (2) são aproximações matemáticas que podem ser usadas para descreve-los em termos de uma medida média.

Conforme será descrito neste trabalho, considerando-se as trincas como sendo um fractal físico homogêneo estatisticamente auto-afim e as rupturas ramificadas, como sendo estatisticamente auto-similar, pode-se, partindo-se das expressões (1) e (2), com algumas modificações matemáticas, interpretar os fenômenos de propagação das trincas, tão importante em materiais, chegar a resultados úteis na descrição deste fenômeno. Será possível entender, de forma clara, desde o processo de fratura até o de fragmentação, sob uma visão da variação contínua dos graus de energia fornecido ao material, modificando apenas o número de trincas formadas, ramificadas e sobrepostas, conforme será mostrado mais adiante.

### 3.2 - Métodos de Medida da Dimensão Fractal.

Existem dois métodos principais de contagens de estruturas que podem levar a determinação da dimensão fractal de um objeto[3]. O primeiro é o método chamado Box-counting, exemplificado na Figura – 2.2. O segundo é o método Sand-box exemplificado na Figura - 10.

No primeiro método (Figura – 2.2), subdivide-se o objeto em  $n_k = T_r/c_k$  caixas iguais de lado  $c_k$  e conta-se quantas destas caixas cobrem o objeto. Em seguida, varia-se o tamanho das caixas e refaz-se a contagem. Fazendo-se o gráfico do logaritmo do número  $N_k$  de caixas que cobrem o objeto pela escala de cada subdivisão ( $\varepsilon_k = c_k/T_r$ ), obtém-se a partir da inclinação deste gráfico a dimensão fractal.

Do ponto de vista da medida experimental, pode-se pensar em usar diferentes métodos de visualização da trinca para a obtenção da dimensão fractal, tais como: microscópio ótico, microscópio eletrônico, microscópio de força atômica, etc., os quais apresentam naturalmente diferentes réguas  $c_k$  e conseqüentemente diferentes escalas de medida  $\varepsilon_k$ .

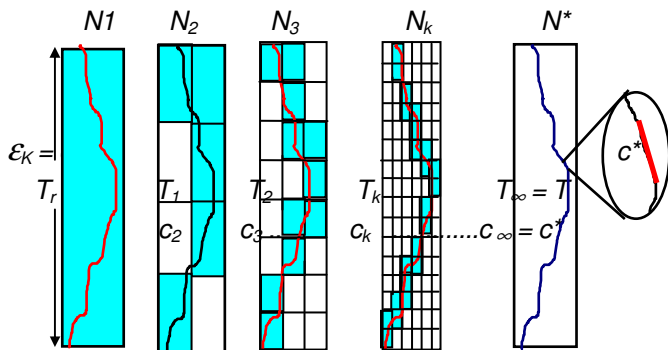


Figura – 2.2. Trecho de uma trinca sobre um corpo de prova, mostrando, a variação da medida do comprimento  $T_k$  da trinca com a escala de medida  $\varepsilon_k = c_k/T_r$  ou partição  $c_k$  variável ( $T_r = cte$ ), na contagem pelo método Box-Counting.

No segundo método (Figura – 2.3), cobre-se a figura com caixas de tamanhos  $T_r$  diferentes, não importando a forma, que podem ser retangulares ou esféricas, porém, fixadas em um ponto “O” qualquer sobre a figura, denominado origem, a partir do qual as caixas são ampliadas. Conta-se o número  $N_k$  de estruturas elementares, ou sementes, que cabem dentro de cada caixa. Fazendo-se o gráfico de  $\log N_k \times \log(c^*/T_r)$  obtém-se, da mesma forma que no método anterior a dimensão fractal. Do ponto de vista experimental, é preciso escolher um único método de medida, no qual são tomados diferentes extensões da trinca, para a variação da escala de medida  $\varepsilon_r$ , uma vez que o tamanho da régua ou partição  $c_k = c^*$  se mantém fixa.

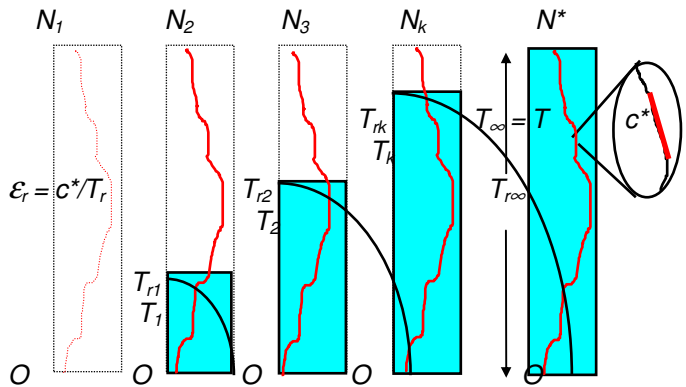


Figura – 2.3. Trecho de uma trinca sobre um corpo de prova, mostrando, a variação da medida do comprimento  $T_k$  da trinca com a escala de medida  $\varepsilon_r = c^*/T_r$ , para uma partição fixa  $c^* = cte$  ( $T_r = variavel$ ), na contagem pelo método Sand-Box.

### 3.3 - Diferença entre régua de medida e tamanho do elemento de estrutura

A régua de medida é o elemento geométrico que usamos para realizar a medida de um objeto (fractal ou não). Ela consiste de uma extensão finita com dimensão compatível com a do objeto. Na medida ela é usada para recobrir o objeto, com a finalidade de se alcançar a sua medida da extensão geométrica.

O elemento de estrutura corresponde a um elemento geométrico que forma o fractal em escalas sucessivas mantendo auto-similaridade do objeto. É certo, que a régua de medida pode colapsar sobre o elemento de estrutura cobrindo a sua extensão a fim de que a medida extensão do objeto seja obtida com maior precisão. No diagrama de Richardson, os pontos de coordenada  $x$  e  $y$ , correspondem a medidas de régua tomadas arbitrariamente sobre a extensão do fractal. Contudo, se o tamanho da régua foi escolhido

exatamente igual ao tamanho do elemento de estrutura em cada escala, então, haverá apenas pontos discretos sobre este diagrama .

Para uma medida que a acompanha um crescimento fractal, é necessário que a extensão da régua, coincida exatamente com o tamanho do elemento de estrutura. Desta forma, poderá se descrever a velocidade de seu crescimento. No caso das trincas, sua estrutura é contínua, portanto um tamanho da régua não necessita coincidir com o tamanho do elemento de estrutura. Mesmo porque a identificação deste sobre a trinca é de difícil visualização. A trinca é um fractal estatístico o seu elemento de estrutura possui um aspecto geométrico que pode modificar estatisticamente ao longo do seu crescimento. Isto dificulta a sua visualização localizada. Apenas é possível abstrair a partir da mecânica da fratura que tal elemento exista para que sejam feitas as considerações necessárias ao modelo fractal da trinca.

### 3.4 - Um princípio físico por detrás dos fractais na natureza

A teoria matemática fractal aplicada a descrição de fronteiras ou contornos de objetos fractais de tamanhos finitos, admite que estas fronteiras ou contornos, possuem uma extensão que tende ao infinito ( $P(\delta) \rightarrow \infty$ ) à medida que o tamanho da régua de medida tende a zero ( $\delta \rightarrow 0$ ), onde:  $0 \leq \delta \leq \delta_{m\acute{a}x}$  e  $P(\delta_{m\acute{a}x}) \leq P(\delta) \leq \infty$ , onde  $P(\delta_{m\acute{a}x}) = P_0$ . Isto tem sido largamente demonstrado pelo diagrama de Richardson aplicado ao estudo geométrico destes objetos (Mandelbrot 198X).

Por outro lado, os tamanhos de régua  $\delta$  para objetos fractais matemáticos, uniformes com auto-similaridade exata, são automaticamente determinados pelo tamanho das estruturas geométricas,  $\delta_k$ , que são auto-similares ao todo. Estas estruturas padrões são encontrados em cada nível de escalonamento  $k$  do fractal matemático ( $0 \leq k \leq \infty$ ). Porém os fractais que aparecem na natureza, chamados de fractais físicos, são estatísticos e limitados por tamanhos de estruturas auto-similares que determinam tamanhos de régua mínima  $\delta_{min} = l$  e máxima  $\delta_{m\acute{a}x} = L$  ( $\delta_{min} \leq \delta \leq \delta_{m\acute{a}x}$ ) em escalas arbitrárias  $\varepsilon = \delta/\delta_{m\acute{a}x}$  que se estendem desde o tamanho macroscópico do objeto,  $\delta_{m\acute{a}x} = L$  até o tamanho do menor detalhe,  $\delta_{min} = l$  onde a fractalidade se estende, isto é  $\varepsilon_{min} \leq \varepsilon \leq \varepsilon_{m\acute{a}x}$ . Como exemplos podemos citar: o pinheiro, o couve-flor, as dendritas, os relâmpagos, etc. O número das possíveis estruturas auto-similares de tamanho  $\delta_k$  existentes neste intervalo, definem os níveis de escalonamento  $k$  existentes no fractal ( $k_{min} \leq k \leq k_{m\acute{a}x}$ ).

O fator de transformação da escala (ampliação ou redução),  $\varepsilon_k$ , entre dois níveis quaisquer, tanto para uma fractal matemático como para um fractal físico, é determinado pela razão entre o tamanho da estrutura auto-similar ao todo, num nível  $k$ , isto é  $\delta_k$ , pelo tamanho da estrutura auto-similar ao todo num nível  $k+1$ , isto é  $\delta_{k+1}$  (onde  $\varepsilon_k = \delta_k/\delta_{k+1}$ ,  $\varepsilon_{min} \leq \varepsilon_k \leq \varepsilon_{m\acute{a}x}$ ).

Portanto, podemos utilizar a idéia geral de que o contorno de um objeto fractal seja ele matemático ou físico, tende a um valor máximo ( $P(\delta_k) \rightarrow P_{m\acute{a}x}$ ) à medida que o tamanho da estrutura auto-similar  $\delta_k$  tende a um valor mínimo ( $\delta_k \rightarrow \delta_{min}$ ,  $k \rightarrow k_{m\acute{a}x}$ ), onde  $P_0 = P(\delta_{m\acute{a}x}) \leq P(\delta) \leq P_{m\acute{a}x} = P(\delta_{min})$ , para propor um Princípio de Máxima Dissipação de Energia como consequência direta desta suposição, conforme veremos a seguir.

Pela relação de escalonamento fractal, o tamanho dos elementos de estruturas  $\delta_k$  em cada escala  $\varepsilon_k$  ou nível  $k$ , estão diretamente relacionadas com o número de objetos auto-similares por uma lei de potência do tipo:

$$N_k \sim \delta_k^{-D} \quad (5)$$

Para fractais de fragmentação  $\delta_{m\acute{a}x} = L = cte$  e  $\delta \rightarrow \delta_{min} = l$ , para fractais de crescimento  $\delta_{min} = l = cte$  e  $\delta \rightarrow \delta_{m\acute{a}x} = L$ . Portanto, o número máximo de elementos de estruturas formadas é dado por:

$$N_{m\acute{a}x} = (\delta_{min}/\delta_{m\acute{a}x})^{-D} \quad (6)$$

O número  $N$  em (12) é um número qualquer entre os limites máximo e mínimo onde o número mínimo é  $N_{min} = 1$ .

Supondo-se que a energia  $U_k$  utilizada para formar um padrão geométrico fractal deste tipo, em um processo físico, é diretamente proporcional a área ou perímetro do seu contorno, então tem-se:

$$U_k \sim P_k(\delta) = N(\delta)\delta^d \quad (7)$$

ou ainda

$$U_k = \mu N(\delta) \sim \mu \delta^{-D} \quad (8)$$

onde:

$k$ : é o índice do escalonamento fractal. Logo como no limite:

$$P_k(\delta \rightarrow \delta_{min}) = P_{m\acute{a}x} = N_{m\acute{a}x}(\delta_{min})\delta_{min}^d \quad (9)$$

temos que:

$$U_k(\delta \rightarrow \delta_{min}) = U_{m\acute{a}x} = \mu(\delta_{min}/\delta_{m\acute{a}x})^{-D} \quad (10)$$

A energia de formação de toda a estrutura fractal tende a um valor fixo. Portanto se a entropia  $S$  de formação da estrutura fractal depende da escala  $\varepsilon$ , isto é,  $S \sim 1/L$ , temos que:

$$S \rightarrow S_{m\acute{a}x} \Leftrightarrow N \rightarrow N_{m\acute{a}x} \quad (11)$$

Sendo a entropia uma grandeza extensiva, o grau de desordem do sistema estará diretamente relacionado com a extensão do contorno do padrão geométrico formado,  $P_k(\delta)$ , ou com o número de níveis  $k$  de escalonamento do fractal,  $N$ . Como a cada nível  $k$  tem-se um tamanho de estrutura auto-similar,  $\delta_k$ , diferente, a entropia como sendo uma grandeza extensiva dependerá do tamanho da escala  $\varepsilon = \delta/\delta_{m\acute{a}x}$ .

Se o tempo de criação de cada estrutura auto-similar em cada nível, for diretamente relacionado ao seu tamanho da seguinte forma:

$$t \rightarrow t_{min} \Leftrightarrow \delta^d \rightarrow \delta_{min}^d \quad (12)$$

Logo para a relação (14) temos que:

$$U_k - U_{k-1} \sim P_k(\delta) - P_k(\delta)_{k-1} \quad (13)$$

ou seja

$$\Delta U_k \sim \Delta P_k(\delta) \quad (14)$$

por outro lado temos de (19) que:

$$t_k - t_{k-1} \sim \delta_k^d - \delta_{k-1}^d \quad (15)$$

ou seja

$$\Delta t_k \sim \Delta \delta_k^d \quad (16)$$

Sistemas que apresentam um consumo de energia (no processo dinâmico de dissipação) que se reflete diretamente na estrutura dos padrões geométricos formados, podem ser tratados por uma relação diretamente proporcional a estas duas grandezas, a partir da expressão (14), onde a potência dissipada pode ser expressa a partir de (21) e (23) como:

$$\psi = \Delta U_k / \Delta t_k \sim \Delta P_k(\delta) / \Delta \delta_k^d \quad (17)$$

como no limite  $\text{Lim } \Delta t_k (\Delta \delta_k^d \rightarrow \delta_{min}^d) = \Delta t_{min}$  então:

$$\psi_{m\acute{a}x} = \Delta U_{m\acute{a}x} / \Delta t_{min} \sim \Delta P_{m\acute{a}x} / \delta_{min}^d \quad (18)$$

Para a estrutura fractal completamente formada temos que a potência máxima dissipada na formação da estrutura fractal é dada a partir de (16) e (17) por:

$$\psi_{m\acute{a}x} \sim \mu (\delta_{min} / \delta_{m\acute{a}x})^{-D} \quad (19)$$

Este é o Princípio da Máxima Dissipação da Energia (PMDE) para a formação de estruturas escalonadas. Sistemas que desenvolvem este tipo de estrutura podem ser chamados de Sistemas de Acúmulo Crítico de Energia com Dissipação de Caráter Geométrico (SACDCG). O valor deste acúmulo é dado pela relação (19). A relação entre energia dissipada e entropia é dada por:

$$\psi_{m\acute{a}x} \sim T \Delta S_{m\acute{a}x} / \Delta t_{min} \quad (20)$$

Portanto os processos dinâmicos que possui um aumento da entropia, demonstrado pelo aumento da quantidade de níveis de escalonamento  $k$  entre um valor mínimo e máximo, pode ter este aumento relacionado a um PMDE ou a um Princípio de Máxima Produção de Entropia (PMPE), num regime de instabilidade que dá origem ao padrão geométrico fractal conforme mostra a expressão abaixo:

$$T \Delta S_{m\acute{a}x} / \Delta t_{min} \sim \mu (\delta_{min} / \delta_{m\acute{a}x})^{-D} \quad (21)$$

Por outro lado, sistemas cuja relação (30) não é direta e sim inversa, a proposta de um princípio de

máxima Dissipação pode até existir em outras condições, mas possivelmente não estará refletido no caráter geométrico da estrutura formada.

## O escalonamento dinâmico

Considerando o processo de crescimento, para um fractal laplaciano ramificado<sup>(3,4)</sup>, que cresce a partir de uma semente de tamanho  $l$  centrada numa origem  $O$  fixa, podemos tratar o escalonamento dinâmico supondo que a medida que o fractal cresce em torno de  $O$ , a sua fronteira de raio  $R$  aumenta com o tempo, com uma velocidade  $V$  dada pela variação de  $R$  neste tempo, logo

$$V = dR/dt \quad (22)$$

Se nós considerarmos que o escalonamento dinâmico acontece continuamente dentro da fronteira de raio  $R$ . Poderemos usar esta grandeza  $R$  como sendo representativa para o fator de transformação de escala  $\varepsilon$ , a qual é dada pela razão entre os tamanhos  $r$  e  $R$  dos “elementos da estrutura” em duas escalas de tempo diferentes, de forma análoga ao escalonamento estático, temos:

$$N = \varepsilon^{-D} \quad (23)$$

onde

$$\varepsilon = r/R \quad (24)$$

O escalonamento dinâmico de um fractal físico, só terá validade dentro do intervalo de escalonamento  $\varepsilon_{min} \leq \varepsilon \leq \varepsilon_{max}$ . Logo o número de estruturas autosimilares dentro de um raio  $R$  que foram acrescentadas para formar uma outra estrutura autosimilar durante um tempo  $dt$ , onde  $R$  variou de  $R$  para  $R + dR$ , é dado por:  $dN = (dN/dR)dR$ .

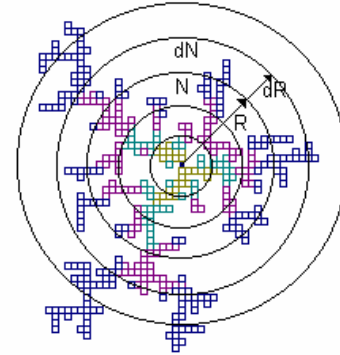


Figura - 1. Escalonamento dinâmico proposto baseado no método Sand-Box.

Como o método Sand-Box de contagem de estruturas, diferentemente dos outros métodos, possui uma origem fixa, a partir do qual as caixas de tamanho  $R$  variável são escalonadas (não importa a geometria das mesmas pois as caixas podem ser esféricas). Nós podemos portanto fixar este centro da caixa na origem central do fractal, ou em qualquer outra origem autosimilar a esta e, fazer escalonamento das caixas de acordo com a fronteira do fractal em crescimento,

conforme mostra a Figura - 1. Desta forma nós estaremos acompanhando o escalonamento do fractal de forma dinâmica, onde a taxa de crescimento  $dN/dt$  da estrutura dentro de um determinado nível  $k(t)$  de crescimento, pode ser expressa como:

$$dN(t)/dt = -D(N/\varepsilon)d\varepsilon/dt \quad (25)$$

a derivada da grandeza  $\varepsilon(t)$  em relação ao tempo, tem sua interpretação em termos da taxa de formação dos elementos de estrutura nas escalas correspondentes, desde a escala superior  $\varepsilon_{max}$  até a escala inferior  $\varepsilon_{min}$ . Observe que como  $\varepsilon$  é inversamente proporcional a taxa de formação do fractal  $dN/dt$ , a medida que este último aumenta, a escala  $\varepsilon$  tende a ser cada vez menor, até que o menor elemento de estrutura possível seja formado na escala inferior  $\varepsilon_{min}$ , e vice-versa, dando origem a propriedade de auto-similaridade, típico de estruturas fractais.

Porém, podemos substituir a expressão (3) em (4) e obter a descrição direta do processo de formação dos fractais em termos do tamanho dos elementos da estrutura. Logo a grandeza  $d\varepsilon/dt$  pode ser interpretada como a velocidade de crescimento do fractal numa determinada escala  $\varepsilon$ , que de acordo com (3) pode ser escrita como:

$$(1/\varepsilon)d\varepsilon/dt = (1/r)dr/dt - (1/R)dR/dt \quad (26)$$

Sander<sup>(5)</sup> define uma grandeza  $\beta$  como sendo o coeficiente de instabilidade dado por:

$$\beta = (1/r)dr/dt / (1/R)dR/dt - 1 \quad (27)$$

Onde ele classifica os regimes de crescimento das estruturas como sendo:

$$\beta \begin{cases} > 0 \text{ crescimento fractal incipiente} \\ = 0 \text{ crescimento com invariância de escala} \\ < 0 \text{ crescimento não-fractal.} \end{cases}$$

A grandeza  $dr/dt$  pode ser entendida como sendo a velocidade de formação do elemento de estrutura que no caso pode ser um pequeno trecho microscópico do fractal, e a grandeza  $dR/dt$  pode ser entendida como sendo a velocidade macroscópica de crescimento do fractal. O parâmetro  $\beta$  está relacionado com índice multifractal  $q$  pela relação  $\beta = q - 1$ .

## O modelo de crescimento multifractal

Uma mdelo de crescimento mltifractal pode ser obtido substituindo (6) e (5) em (4) temos:

$$dN/dt = -D_q(q-1)(N/R)(dR/dt) \quad (28)$$

Para o escalonamento estático podemos escrever:

$$dN/N = -D_q(q-1)dR/R \quad (29)$$

Observe que as relações (7) e (8) acima, descrevem o fenômeno fractal em duas interpretações:

fragmentação e crescimento<sup>(6)</sup>. Para o processo de fragmentação considera-se  $R_{max} = cte$  e  $r$ , variável de acordo com a escala, já no processo de crescimento considera-se  $r_{min} = cte$  (que corresponde ao tamanho das partículas ou elementos de estrutura na escala inferior) e  $R$  variável de acordo com o escalonamento do método Sand-Box.

É certo que se o método Sand-Box for realizado considerando-se uma caixa  $R = R_{máx}$  fixada e tomando-se os diversos tamanhos  $r$  das estruturas auto-similares encontradas dentro desta caixa, para cada nível de escalonamento  $k(t)$ , o processo de fragmentação também poderá ser escalonado dinamicamente.

Integrando (7) de uma forma geral temos:

$$N(R,t) = N_0 \exp\{-\int D_q(q-1)Vdt/R\} \quad (30)$$

Ainda de (8) temos que  $d(\ln N)/d(\ln R) = -D_q(q-1)$ , observe que para  $D_q(q-1) = cte$ , ficamos com  $N(r(t),R(t)) = [r/R(t)]^{D_q(q-1)}$ .

Da expressão (7) nós vemos que para inferir o resultado dinâmico a partir do estático é preciso necessariamente conhecer a função velocidade  $V(R,t)$  ao longo de toda a estrutura. Isto só é possível se houver algum princípio geral<sup>(6)</sup> que possa nos fornecer alguma informação sobre o comportamento desta função para estruturas fractais deste tipo.

Por outro lado a "Força Promotora do Crescimento" (FPCE),  $F$  que gera a estrutura, deve depender da variação da sua velocidade de crescimento no tempo  $dV/dt$  (que por sua vez está relacionado com a desaceleração das partículas que colam na estrutura gerada por DLA). Como o fractal é criado por uma situação de instabilidade, a energia inicialmente armazenada, é dissipada na formação da sua estrutura, logo a FPCE deve ser proporcional a variação da Energia Cinética de Crescimento da Estrutura (ECCE), ( $F \sim \Delta E_c$ ), desde um valor inicial  $E_{ci}$  até parar o crescimento, onde  $E_{cf} = 0$ .

Uma vez que existe um tamanho característico  $r_{min}$ , a energia cinética  $E_c$  está relacionada com o transporte das partículas que adere ao contorno da estrutura, ou seja:  $dV/dt \sim V^2$ . Por outro lado,  $dV/dt = (\partial V/\partial R)dR/dt$ , logo a partir de (A), nós temos que:  $(\partial V/\partial R) \sim V$ , integrando ficamos com:

$$V(R) = V_0 \exp(R/R_0) \quad (31)$$

substituindo (10) em (9) e considerando que o termo  $D_q(q-1)V(R)/R$  é independente do tempo  $t$  e integrando desde  $t_0$  até  $t$  temos:

$$N(R,t) = N_0 \exp\{-[D_q(q-1)/R]V_0 \exp(R/R_0)(t - t_0)\} \quad (32)$$

podemos chamar a parte que é independente do tempo  $t$  em (11) de uma constante  $\tau = R/[D_q(q-1)V_0 \exp(R/R_0)]$ , logo em (11) ficamos com:

$$N(t) = N_0 \exp\{-(t - t_0)/\tau\} \quad (33)$$

Da definição de  $\tau$  podemos ainda escrever:



$$D_q(q-1) = R \exp(-R/R_o) / \tau V_o \quad (34)$$

usando o resultado (13) em (8) e integrando desde 0 até R, temos:

$$N(R) = N_T \exp\{-[R_o/(V_o \tau)] \exp(-R/R_o)\} \quad (35)$$

Esta expressão (14) expressa o escalonamento estático, para um dado tempo t fixo (Figura - 3).

Como necessariamente o número N dado por (12) e (14) devem ser iguais, temos que:

$$N_o \exp\{-(t-t_o)/\tau\} = N_T \exp\{-[R_o/(V_o \tau)] \exp(-R/R_o)\} \quad (36)$$

Portanto, a expressão (10) pode ser escrita como:

$$V(R,t) = R_o [\tau \ln(N_T/N_o) + (t - t_o)] \quad (37)$$

chamando de:  $t_o = \tau \ln(N_T/N_o)$ , substituindo (16) em (9) e integrando desde t até  $t_\infty$  temos:

$$N(R,t) = N_o (t/t_\infty)^{-D_q(q-1)R_o/R} = N_o (t/t_\infty)^{-R_o \exp(-R/R_o) / (\tau V_o)} \quad (38)$$

Esta expressão (17) expressa o escalonamento dinâmico (Figura - 4).

Para satisfazer as condições de contorno devemos ter para o escalonamento total N(R,V,t) que:

$$N(R,V,t) = N_T \exp\{-Vt/(V_o \tau) \exp[-R/(Vt)]\} \quad (39)$$

Portanto a energia total de um fractal considerando  $\mu = dU/dN = cte$  é dada por:

$$dU(R,V,t)/dt = \mu dN(R,V,t)/dt \quad (40)$$

Esta é a expressão geral para a função que descreve o crescimento de uma estrutura fractal laplaciana em função da dimensão radial R e do tempo t. Substituindo (7) em (19) temos que a potência dissipada na formação do fractal é dada por:

$$dU(R,V,t)/dt = -\mu D_q(q-1) [N(R,V,t)/R] V(R,t) \quad (41)$$

onde N(R,V,t) é dado por (18) e V(R,t) é dado por (16). De acordo com Proccaccia<sup>(8)</sup>,  $D_q(q-1) = \tau_q = f(\alpha(q)) - q\alpha$ , é máximo para  $q = 0$ , ou seja, a dimensão fractal da estrutura possui um valor máximo,  $D_{q=0} = f_{\max}(\alpha(0))$  dentro do espectro multifractal de dimensões, quando  $q = 0$ . Então a potência dissipada possui um valor máximo quando esta condição é satisfeita.

## PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

O Método proposto neste trabalho, foi aplicado a três fractais simulados em um computador pelo método DLA, conforme descrevem Witten e Sander<sup>(3,4)</sup>. Eles foram escalonadas dinamicamente numa medida de tempo real, para comprovação da expressão (17) (Figura - 4). Em seguida as figuras destes fractais já formados foram escalonadas estaticamente de acordo com a metodologia descrita na Figura - 1, de onde foram extraídos os dados necessários a comprovação da expressão (14) cujo gráfico está mostrado na Figura - 3). Os dados obtidos foram comparados com os resultados de um fractal obtido experimentalmente em filmes finos

de SnO<sub>2</sub> obtido pelo processo Sol-Gel, conforme descreve Antunes<sup>(7)</sup>. No filme de SnO<sub>2</sub>, a contagem do número de estruturas do fractal, foi feita usando-se uma medida relativa da massa do fractal sobre a micrografia .

## RESULTADOS

Utilizando o método Sand-Box de forma análoga ao que está mostrado na Figura - 1, nós obtivemos os gráficos mostrados na Figura - 3. Estes gráficos foram ajustados de acordo com a expressão (N) onde obtivemos os resultados mostrados nas Tabelas - I e II. O ajuste da derivada da expressão (14) dado por (13) também apresentou boa precisão.

Calculando a dimensão fractal através da expressão  $D_{q=0} = \ln N / \ln(r/R)$  obtivemos, os resultados listados na Tabela - I. Observamos neste cálculo que para  $N \ll N_T$  os valores de  $D_q \sim cte$  enquanto que para  $N \approx N_T$  a dimensão fractal passa a variar continuamente em direção a um valor assintótico.

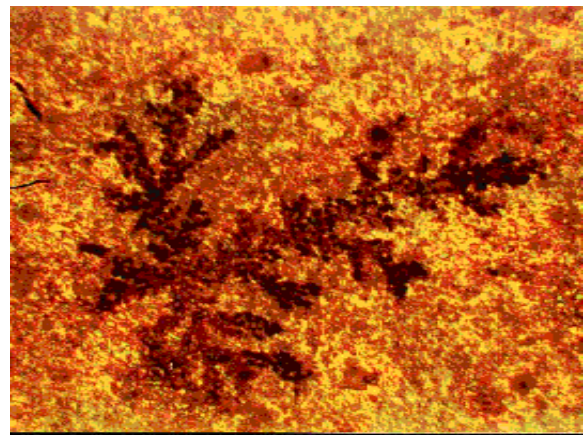


Figura - 2. Um dos fractais observado por microscopia ótica, em filmes finos de SnO<sub>2</sub> preparados de acordo com Antunes.

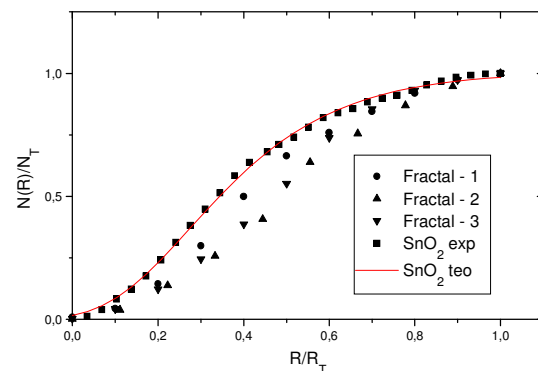


Figura - 3. Escalonamento estático: para os fractais simulados por DLA, para o fractal de SnO<sub>2</sub> experimental e teórico calculado por (14).

Fazendo o escalonamento dinâmico em tempo real, para os fractais simulados e considerando válida a expressão (17), nós ajustamos os gráficos da Figuras - 4

com considerável precisão, conforme mostra a Tabela - III.

**Tabela - I: Parâmetros dos gráficos da Figura - 3. expressão (N)**

Fractal	$D_{q=0}$	$N_T (teo)$	$N_T (exp)$
1	$1,73 \pm 0,02$	$104 \pm 1$	100
2	$1,67 \pm 0,04$	$446 \pm 13$	400
3	$1,60 \pm 0,01$	$439 \pm 10$	400
$SnO_2$	$1,61 \pm 0,02$	$0,583 \pm 0,004$	0,5782

**Tabela - II: Parâmetros do escalonamento estático (Sand-Box) expressão (N)**

Fractal	$R_o$	$\tau V_o$	$V_o$
1	$1,07 \pm 0,04$	$0,22 \pm 0,02$	$0,197 \pm 0,02$
2	$2,4 \pm 0,1$	$0,48 \pm 0,06$	$0,562 \pm 0,06$
3	$2,4 \pm 0,1$	$0,48 \pm 0,06$	$0,40 \pm 0,06$
$SnO_2$	$2,52 \pm 0,09$	$0,61 \pm 0,06$	$0,237 \pm 0,04$

**Tabela - III: Parâmetros da expressão (Q) para  $t_\infty = 40 \pm 2$**

Fractal	$D_q(q-1)R_o/R_T$	$N(R_T)$	$\tau$
1	$0,54 \pm 0,03$	$8,8 \pm 0,8$	$1,04 \pm 0,02$
2	$0,69 \pm 0,04$	$31 \pm 3$	$0,84 \pm 0,06$
3	$0,69 \pm 0,03$	$29 \pm 3$	$1,20 \pm 0,06$
$SnO_2$	-	-	$2,58 \pm 0,06$

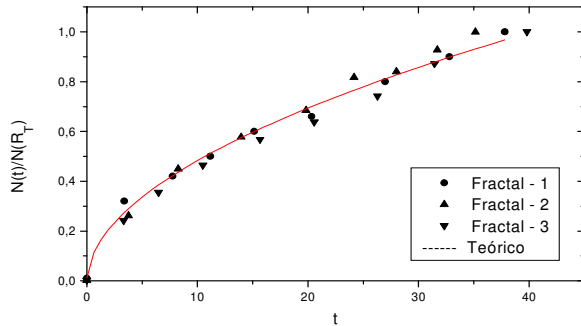


Figura - 4. Escalonamento dinâmico em tempo real: para os fractais simulados por DLA, para o fractal de  $SnO_2$  calculado por (17).

Observa-se um valor para  $R_o/(\tau V_o) \approx 5,0$ , em todos os fractais.

## DISCUSSÕES

Fractais deste tipo, são estruturas que aparecem em processos de gelificação<sup>(5)</sup>, que no caso de filmes finos, a princípio, são indesejáveis. Este estudo, servirá para esclarecer os mecanismos deste aparecimento, afim de se obter filmes homogêneos.

Estes resultados são válidos para fractais ramificados (como: dendritas, trincas, etc), onde a estrutura cresce a partir de um entroncamento principal, com bifurcações sucessivas ao longo de toda a história de crescimento. Neste caso, observamos que a trajetória de crescimento do fractal está intuitivamente registrada na estrutura, nos locais por onde o fractal passou, quando ele tinha uma determinada idade intermediária.

Isto significa que o crescimento se dá a partir das extremidades presentes a cada instante, ou seja um ramo não pode crescer em detrimento do outro.

Sabendo por onde o fractal passou durante o seu crescimento, é possível descrever em termos da coordenada radial, a sua velocidade de crescimento conforme foi mostrado neste trabalho. Portanto se esta velocidade for conhecida, a inferência do processo dinâmico a partir do estático é obtido com sucesso.

## CONCLUSÕES

Fractais que crescem a partir de um ponto central fixo e se ramificam em torno de um raio de giração  $R$ , podem ser a partir de agora escalonados dinamicamente pelas relações (7), (8), (14) e (17).

O trabalho descreve uma forma dinâmica de se calcular a energia gasta para formar uma estrutura fractal.

A taxa de crescimento da estrutura é inversamente proporcional ao raio de crescimento de acordo com a expressão (17). Isto implica que a potência dissipada tende a zero a medida que o fractal cresce conforme mostra a expressão (19). Portanto, se imaginarmos que uma situação de instabilidade deu origem a estrutura fractal, a energia inicialmente armazenada, foi dissipada durante o processo de formação da estrutura até que ela foi totalmente esgotada. Então o fractal que se iniciou numa escala  $\varepsilon_{max}$  cessou o seu crescimento numa escala  $\varepsilon_{min}$  e vice-versa.

De acordo com Proccaccia<sup>(8)</sup>,  $D_q(q-1) = \tau_q = f(\alpha(q)) - q\alpha$ , é máximo para  $q = 0$ , ou seja, a dimensão fractal da estrutura possui um valor máximo,  $D_{q=0} = f_{máx}(\alpha(0))$  dentro do espectro multifractal de dimensões, quando  $q = 0$ . Então a potência dissipada possui um valor máximo quando esta condição é satisfeita.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- (1) Mandelbrot, B. B., *The Fractal Geometry of Nature*, New York, 1983.
- (2) Family, Fereydoon; et al, *Dynamics of Fractal Surfaces*, chapter 3, pp. 73-77, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. Singapore, 1991.
- (3) Witten, T. A.; et al, *Diffusion Limited Aggregation*, Phys. Rev. B. Vol. 29, N.9, 1 May 1983, 5686-5697.
- (4) Witten Jr., T. A.; et al, *Diffusion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon*, Phys. Rev. Lett. Vol. 47, N. 19, 9 Nov. 1981, 1400-1403.
- (5) Sander, L. M., *Theory of Fractal Process*, KINETICS OF AGGREGATION AND GELATION, F. Family, D. P. Landau (editors) Elsevier Science Publishers B. V., 1984, 13-17.
- (6) Alves, Lucas Máximo, *Um Novo Principio de Dissipação de Energia...* neste congresso ref. 008/1.
- (7) Antunes, S. Masseto; et al - a ser publicado.



**DYNAMICAL SCALING OF LAPLACIAN FRACTALS  
BASED IN SAND-BOX METHOD: An Application to  
thin films of SnO<sub>2</sub>**

ABSTRACT

*The Sand-Box method, permit calculate the dimension of a fractal structure, emebed in anywhere euclidean dimension ( $d = 1, 2, 3, \dots$ ). The calculation is done, counting the number of autosimilar structures  $N(R)$  contained in "boxes" with variable radio  $R$ , centred in the origin "O" of a coordinate system. From this method, was possible elaborate, a technique to dynamical scaling on laplacians fractals, that have a gyration radio  $R(V,t)$  and grow in the time, with a velocity  $V$  around a central origin fixed "O". Laplacian fractals were observed in SnO<sub>2</sub> thin films, where the technique proposed in this work was used. With this dynamical scaling was possible describe the formation of fractals structures using Dissipation Function of the Thermodynamics of Irreversible Process.*

Key Words: SnO<sub>2</sub> films, Sand-Box method, dynamical scaling.