

Universidade Estadual de Maringá

Thiago Victor Moreno

Estudo das Técnicas de Lente e Espelho Térmico com excitação tipo Top-Hat

Maringá, Outubro de 2011.

Universidade Estadual de Maringá

Thiago Victor Moreno

Estudo das Técnicas de Lente e Espelho Térmico com excitação tipo Top-Hat

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Departamento de Física da Universidade Estadual de Maringá, sob orientação do professor Dr. Nelson Guilherme Castelli Astrath.

Maringá, Outubro de 2011.

*Dedico a melhor família:
Santiago, Tania, Tatiana e
Talita.*

*Se tiver o hábito de fazer as coisas
com alegria, raramente encontrará
situações difíceis.*

Robert Baden Powell

Agradecimentos

Agradeço à minha família. Meus pais, Santiago e Tania, por terem me dado educação, respeito e o apoio necessário para eu chegar aqui. Às minhas irmãs, Tatiana e Talita, pela amizade e companheirismo.

Agradeço Evellen Lima pela paciência, compreensão e carinho.

Ao professor Dr. Nelson Guilherme Castelli Astrath pela dedicação, paciência e bom humor durante a orientação deste trabalho.

Ao professor Dr. Luis Carlos Malacarne pela ajuda com o *Mathematica*, pela co-orientação neste trabalho e pelas "alucinantes" aulas de Mecânica Quântica.

Aos professores Antonio Medina Neto, Luiz Roberto Evangelista e Cesar Canesin Colucci pelas lições e discussões nas disciplinas.

À todos os professores e alunos do GEFM pela oportunidade de participar do grupo e aprender um pouco sobre fenômenos fototérmicos.

Aos colegas da graduação pela companhia nas aulas, ajuda e discussões físicas em momentos oportunos.

Aos amigos escoteiros pelos acampamentos fantásticos e amizade dentro e fora do movimento.

À Heineken por fazer cerveja de qualidade e proporcionar alegria nos momentos tristes.

Ao CNPQ pelo apoio financeiro.

Enfim, a todos que diretamente ou indiretamente contribuíram para este trabalho e para minha formação pessoal e acadêmica.

Muito Obrigado!

Sumário

Agradecimentos	ix
Resumo	xiii
Lista de Tabelas	xv
Lista de Figuras	xvii
1 Introdução	1
2 Perfil de Temperatura	5
2.1 Transformada de Laplace	6
2.2 Transformada Henkel	7
2.3 Transformada cosseno de Fourier	8
2.4 Transformada Inversa de Laplace	9
2.5 Transformada Inversa de Fourier	9
2.5.1 BLM	10
2.5.2 LAM	11
2.5.3 HAM	11
2.6 Transformada Henkel Inversa	12
2.6.1 BLM	12
2.6.2 LAM	13
2.6.3 HAM	13
2.7 Discussão	14
3 Perfil de Deslocamento	23
3.1 Equação de Poisson	25
3.2 Equação de Biharmônica e a Função de Love	26
3.2.1 BLM	28

3.2.2	LAM	29
3.2.3	HAM	30
3.3	Discussão	31
4	Transientes	39
4.1	Deslocamento de fase	39
4.1.1	Lente Térmica	39
4.1.2	Espelho Térmico	42
4.2	O campo U e a intensidade I	42
4.3	Discussão	43
5	Conclusão	47
	Referências Bibliográficas	49

Resumo

Neste trabalho apresentamos as técnicas de Lente e Espelho Térmico com excitação via fonte top-hat, para estudo das propriedades físicas de materiais sólidos. Os modelos teóricos de ambas as técnicas foram resolvidos e expressões semi-analíticas foram obtidas, considerando amostra semi-infinita e fluxo de calor para o meio sendo nulo. O perfil de temperatura e o perfil de deformação superficial foram determinados resolvendo a equação de difusão de calor e a equação termoelástica, respectivamente. A intensidade do sinal do feixe de prova no fotodetector é dada pela teoria de difração de Fresnel-Kirchoff. Uma solução geral para amostras cuja absorção óptica obedece a Lei de Beer, e aproximações para os limites de amostras com alta e baixa absorção foram obtidas. Verificamos a consistência dos resultados através de simulações numéricas para amostras reais de vidros LSCAS dopado com TiO_2 , nas concentrações de 0,5 %, 2,5 % e 3,5 % em massa, e Manganês metálico.

Lista de Tabelas

2.1	Parâmetros utilizados para as simulações. Onde P_e é a potência de excitação, β o coeficiente de absorção óptica, D a difusividade térmica, K a condutividade térmica, ω o raio do feixe de excitação na amostra, t_c o tempo característico, ϕ a taxa de energia convertida em calor, α_T o coeficiente de expansão térmica, ν a razão de Poisson e λ o comprimento de onda do laser de prova. [3]	14
-----	--	----

Lista de Figuras

1.1	Esquema da montagem experimental de LT e ET. As letras “L” , “M” e “P” indicam lentes, espelhos e fotodetectores respectivamente [1].	2
1.2	Perfil de distribuição de intensidade Gaussiano (linha tracejada) e Top-Hat (linha contínua).	3
2.1	Perfil de temperatura para amostra de LSCAS dopado com 0,5 % em massa de TiO ₂ . Simulação de $T_{LAM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 2.53.	15
2.2	Simulação de T_{LAM} , na superfície da amostra e no centro da excitação ($r = z = 0$), em função de t para a amostra de LSCAS dopado com 0,5 % de TiO ₂ . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 2.53.	15
2.3	Perfis de temperatura para amostra de LSCAS dopado com 0,5 % em massa de TiO ₂ , com excitação tipo top-hat (linha contínua) e gaussiana (elipses). Simulação de $T_{LAM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1, a equação de T_{LAM} com excitação top-hat é a 2.53, e com excitação gaussiana é encontrada nas referências [2, 3, 4, 5].	16
2.4	Perfil de temperatura para amostra de LSCAS dopado com 3,5 % em massa de TiO ₂ . Simulação de $T_{BLM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 2.50.	17
2.5	Simulação de T_{BLM} , na superfície da amostra e no centro da excitação ($r = z = 0$), em função de t para a amostra de LSCAS dopado com 3,5 % de TiO ₂ . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 2.50.	17
2.6	Perfis de temperatura para amostra de LSCAS dopado com 3,5 % em massa de TiO ₂ , com excitação tipo top-hat (linha contínua) e gaussiana (elipses). Simulação de $T_{BLM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1, a equação de T_{BLM} com excitação top-hat é a 2.50 e com excitação gaussiana é encontrada nas referências [2, 3, 4, 5].	18

2.7	Perfil de temperatura para amostra de Manganês metálico. Simulação de $T_{HAM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 2.55.	18
2.8	Simulação de T_{HAM} , na superfície da amostra e no centro da excitação ($r = z = 0$), em função de t para a amostra de Manganês metálico. Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 2.55.	19
2.9	Perfis de temperatura para amostra de Manganês metálico, com excitação tipo top-hat (linha contínua) e gaussiana (elipses). Simulação de $T_{HAM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1, a equação de T_{HAM} com excitação top-hat é a 2.55 e com excitação gaussiana é encontrada nas referências [2, 3, 4, 5].	19
2.10	Perfil de temperatura para as três concentrações de vidro LSCAS - TiO_2 na superfície da amostra, nos modelos LAM e BLM. Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e as equações usadas foram a 2.50 e 2.53.	20
2.11	Perfil de temperatura para as três concentrações de vidro LSCAS - TiO_2 1 mm abaixo da superfície da amostra, nos modelos LAM e BLM. Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e as equações usadas foram a 2.50 e 2.53.	21
3.1	Perfil de deslocamento superficial para amostra de LSCAS dopado com 0,5 % em massa de TiO_2 . Simulação de $u_{LAM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 3.46.	31
3.2	Simulação de u_{LAM} , na superfície da amostra e no centro da excitação ($r = z = 0$), em função de t para a amostra de LSCAS dopado com 0,5 % de TiO_2 . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 3.46.	32
3.3	Perfis de deslocamento superficial para amostra de LSCAS dopado com 0,5 % em massa de TiO_2 , com excitação tipo top-hat (linha contínua) e gaussiana (elipses). Simulação de $u_{LAM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1, a equação de u_{LAM} com excitação top-hat é a 3.46, e com excitação gaussiana é encontrada nas referências [1, 3, 4, 5].	32
3.4	Perfil de deslocamento superficial para amostra de LSCAS dopado com 3,5 % em massa de TiO_2 . Simulação de $u_{BLM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 3.41.	33
3.5	Simulação de u_{BLM} , na superfície da amostra e no centro da excitação ($r = z = 0$), em função de t para a amostra de LSCAS dopado com 3,5 % de TiO_2 . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 3.41.	33

3.6	Perfis de deslocamento superficial para amostra de LSCAS dopado com 3,5 % em massa de TiO_2 , com excitação tipo top-hat (linha contínua) e gaussiana (elipses). Simulação de $u_{BLM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1, a equação de u_{BLM} com excitação top-hat é a 3.41, e com excitação gaussiana é encontrada nas referências [1, 3, 4, 5].	34
3.7	Perfil de deslocamento superficial para amostra de Manganês metálico. Simulação de $u_{HAM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 3.51.	34
3.8	Simulação de u_{HAM} , na superfície da amostra e no centro da excitação ($r = z = 0$), em função de t para a amostra de Manganês metálico. Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 3.51.	35
3.9	Perfis de deslocamento superficial para amostra de Manganês metálico, com excitação tipo top-hat (linha contínua) e gaussiana (elipses). Simulação de $u_{HAM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1, a equação de u_{HAM} com excitação top-hat é a 3.51, e com excitação gaussiana é encontrada nas referências [1, 3, 4, 5].	35
3.10	Perfil de deslocamento para as três concentrações de vidro LSCAS - TiO_2 na superfície da amostra, nos modelos LAM e BLM. Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e as equações usadas foram a 3.46 e 3.41.	36
3.11	Perfil de deslocamento e temperatura na superfície de uma amostra de vidro LSCAS dopado com TiO_2 0,5 % em massa. Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e as equações usadas foram a 3.46 e 2.53, referentes a aproximação LAM.	36
4.1	Efeito de Lente Térmica em uma amostra sólida. Observa-se que a variação do índice de refração e da espessura contribuem para a variação do caminho óptico [3].	40
4.2	Efeito de Espelho Térmico em uma amostra sólida. Observa-se que o caminho óptico do laser de prova diminui com a dilatação da amostra [3].	40
4.3	Transientes de Lente Térmica para amostras de LSCAS dopadas com TiO_2 0,5 e 2,5 % em massa. A linha contínua de cor preta é o transiente gerado com o modelo BLM, enquanto a linha vermelha com pontos marcados em x é o transiente gerado com o LAM. Os parâmetros utilizados estão na tabela 2.1 e $\frac{ds}{dT}$ foi considerado igual à $11 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	44
4.4	Transientes de Espelho Térmico para amostras de LSCAS dopadas com TiO_2 0,5, 2,5 e 3,5 % em massa. A linha contínua de cor preta é o transiente gerado com o modelo BLM, enquanto a linha vermelha com pontos marcados em x é o transiente gerado com o LAM. Os parâmetros utilizados estão na tabela 2.1.	44
4.5	Transientes de Espelho Térmico para amostras de Manganês metálico. O modelo utilizado foi o HAM e os parâmetros estão contidos na tabela 2.1.	45

Capítulo 1

Introdução

O efeito físico conhecido como efeito fototérmico é extremamente comum ao ser humano, é natural em dias frios pessoas se aquecerem permanecendo sob a luz solar. A energia transportada por esta ao interagir com a matéria pode ser convertida em calor, neste caso, temos tal efeito. Técnicas fototérmicas consistem em utilizar este fenômeno para obter propriedades físicas e químicas de materiais [6].

De fato, a humanidade sempre soube e conviveu com a existência dos fenômenos fototérmicos. Provavelmente estudiosos do passado tentaram compreender o efeito, porém a falta de conceitos abstratos os impediram de obterem conclusões relevantes [7]. Com a formulação da mecânica quântica no começo de século passado, houve uma avalanche de conceitos e ideias novas que permitiram uma melhor compreensão da natureza, inclusive do efeito em questão. No entanto, as técnicas fototérmicas tiveram um desenvolvimento significativo apenas a partir da década de 60, quando Theodore Maiman fez o primeiro laser funcionar [8].

Em 1964 nos laboratórios da Bell Telephone, um grupo de pesquisadores, entre eles os brasileiros R. C. C. Leite e S. P. S. Porto, observaram pela primeira vez o efeito de Lente Térmica (LT). Com o intuito de obterem maior potência na amostra para o estudo da espectroscopia Raman, eles inseriram as mesmas no interior da cavidade de um laser de He-Ne e observaram um certo transiente, em que o feixe final era maior que o original. Imediatamente, o grupo chefiado por Gordon tratou matematicamente o efeito [9]. Como há certa divergência ou convergência do feixe laser ao passar pela amostra, juntamente com um aquecimento local do material inserido na cavidade, atribuíram ao efeito o nome de Lente Térmica.

Ao longo do tempo diversas tentativas e configurações experimentais foram propostas de forma a otimizar o sinal de LT. Obteve-se os melhores resultados em uma configuração onde a amostra é posta fora da cavidade laser e usa-se dois feixes em modo descasado. O primeiro feixe possui alta potência e é usado para excitar a amostra, ou seja, provocar o aquecimento local da mesma. O segundo possui

baixa potência e é usado para “provar” o efeito. É dito que os lasers estão em modo descasado pois os mesmos possui diâmetros diferentes na região da amostra, o laser de excitação é mais focado que o de prova. A modelagem teórica deste experimento foi proposta por Shen *et al.* em 1992 [2] e aprimorado pelos autores em 1994, com participação do brasileiro M. L. Baesso [10, 11]. Devido as dificuldades computacionais na época, este modelo limita-se às aproximações de amostra semi-infinita, com baixa absorção ótica e com fluxo de calor para o meio externo nulo.

O efeito fototérmico também pode ser usado para detecção de deformação superficial em amostras através de uma técnica chamada deslocamento fototérmico. Nesta técnica incide-se um feixe de alta potência perpendicularmente à amostra e outro de baixa potência obliquamente à mesma. Com um detector de posição mede-se o deslocamento do segundo feixe e determina-se, então, a deformação da amostra. Nos laboratórios do Grupo de Estudos de Fenômenos Fototérmicos (GEFF) da Universidade Estadual de Maringá (UEM), N. G. C. Astrath notou que parte da radiação incidente na superfície da amostra era refletida durante o experimento de LT, e nessa reflexão era possível determinar a deformação superficial do material em estudo.

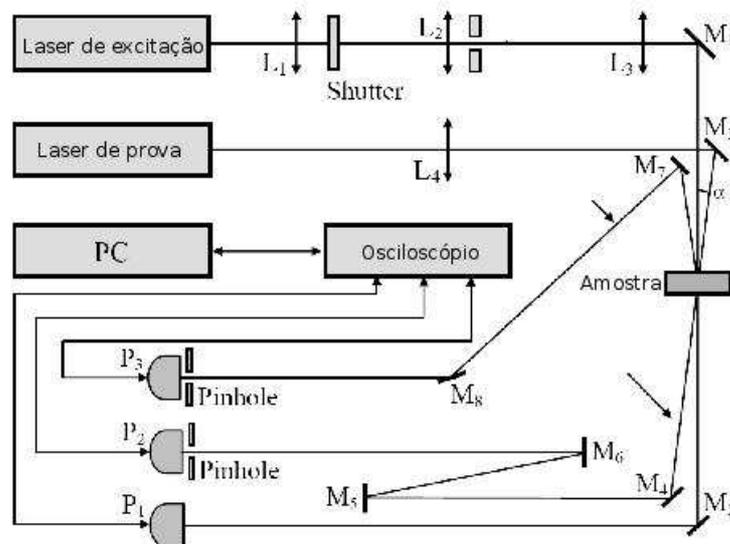


Fig. 1.1: Esquema da montagem experimental de LT e ET. As letras “L”, “M” e “P” indicam lentes, espelhos e fotodetectores respectivamente [1].

Em 2007, Astrath e colaboradores deram um novo tratamento matemático à esta reflexão, considerando uma amostra de baixa absorção ótica. Eles observaram a existência de um transiente neste feixe refletido e concluíram que o mesmo é gerado pela deformação superficial da amostra. Esta deformação ocorre devido ao aquecimento do material, formando uma espécie de “espelho” côncavo ou convexo. A técnica foi então batizada de Espelho Térmico [4]. No ano seguinte, Malacarne *et al.* resolveu o modelo considerando materiais com alta absorção ótica e mostrou que a técnica é viável

para análise de materiais opacos, desde que suas superfícies tenham reflexão não difusa [12]. Ainda em 2008, Sato e colaboradores deram um tratamento geral à técnica e obtiveram um modelo teórico para amostras com quaisquer valores de absorção [3, 5]. Todos os modelos aqui citados desprezam o fluxo de calor para o meio e consideram amostra semi-infinita.

A figura 1.1 traz um esquema da montagem experimental das técnicas de LT e ET. Um feixe laser de alta potência (Laser de excitação) incide na amostra para excitá-la. Paralelamente incide-se outro feixe, de baixa potência (Laser de prova), para “provar” o efeito. Uma porcentagem do feixe de prova é transmitido e o outra refletida pela amostra. Com um fotodetector, mede-se o sinal proveniente dos mesmos. Ao analisar o sinal transmitido temos a técnica de Lente Térmica, enquanto ao analisar o sinal refletido temos Espelho Térmico. Observe que as técnicas podem ser realizadas simultaneamente e que ambas tem caráter remoto e não destrutivo.

Todos os trabalhos até aqui citados utilizaram lasers de perfil de distribuição de intensidade gaussiano em modo TEM_{00} . Estas fontes, quando de alta potência, possuem custo elevado e são encontradas no mercado em poucos comprimentos de onda. Com o propósito de reduzir custos e aumentar as opções de comprimentos de onda de excitação, Astrath e colaboradores propuseram e resolveram um modelo teórico onde o laser de excitação possui perfil Top-Hat [13, 14, 15]. A figura 1.2 ilustra estes dois perfis.

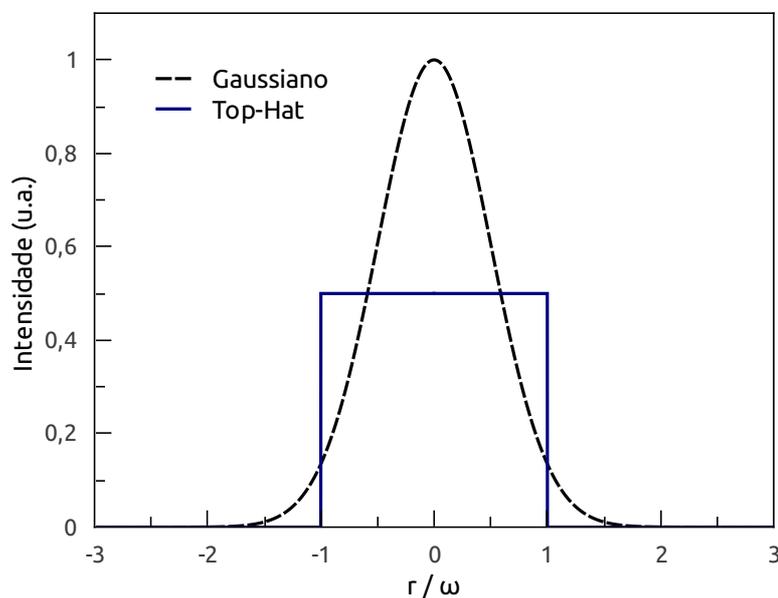


Fig. 1.2: Perfil de distribuição de intensidade Gaussiano (linha tracejada) e Top-Hat (linha contínua).

Adiante será apresentado o modelo teórico das técnicas de LT e ET com excitação tipo Top-Hat, considerando amostra semi-infinita e com aproximação de fluxo nulo. Os modelos consistem

em determinar o perfil de distribuição de temperatura na amostra via solução da equação de difusão de calor, calcular o perfil de deslocamento superficial através da equação termoelástica, definir o deslocamento de fase para as técnicas de Lente e Espelho Térmico, e por fim determinar a intensidade, resolvida no tempo, do laser de prova no plano do fotodetector, ou seja, os transientes. Os modelos foram resolvidos considerando três tipos de amostras, classificadas quanto a sua absorção óptica (β): Amostras cujo β obedece a Lei de Beer (BLM), amostras de baixa absorção óptica (LAM) e alta absorção (HAM). No final do trabalho providenciamos uma breve conclusão e perspectivas para a prossecução do trabalho.

Capítulo 2

Perfil de Temperatura

O primeiro passo na solução dos modelos teóricos das técnicas LT e ET é determinar o perfil de temperatura na amostra. Para isto é necessário resolver a equação de difusão de calor que segue

$$\frac{\partial T(r, z, t)}{\partial t} - D\nabla^2 T(r, z, t) = Q(r, z, t) \quad (2.1)$$

onde T é a variação local de temperatura, Q é o termo de fonte e $D = k/\rho c$ é a difusividade térmica¹, com k , ρ e c sendo a condutividade térmica², a densidade de massa e o calor específico respectivamente.

Adotando coordenadas cilíndricas e assumindo que o sistema tenha simetria radial, o Laplaciano fica dado por:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.2)$$

O termo de fonte é proveniente do laser de excitação e da absorção óptica da amostra, e pode ser escrito como

$$Q(r, z) = \frac{P_e \beta \phi}{\rho c \pi \omega^2} U(\omega - r) Q(z) \quad (2.3)$$

em que P_e e ω são a potência e o raio do laser de excitação respectivamente, β é a absorção óptica e $\phi = 1 - \eta \lambda_e / \langle \lambda_{em} \rangle$ é a taxa de energia convertida em calor, onde η é a eficiência quântica, λ_e o comprimento de onda de excitação e $\langle \lambda_{em} \rangle$ o comprimento de onda médio de fluorescência. A função $U(\omega - r)$ é a função degrau unitário, que assume o valor zero quando o argumento $(\omega - r)$ for menor que zero e 1 caso contrário. A dependência em z não foi explicitada pois adiante a definiremos de

¹A difusividade D é uma grandeza física que indica como o calor se difunde através de um material. Ela expressa quão rapidamente um corpo se ajusta por inteiro à temperatura de seu entorno.

²A condutividade térmica k quantifica a habilidade dos materiais em conduzir calor.

acordo com os limites de absorção óptica.

Para uma solução particular da equação 2.1 é necessário definirmos as condições de contorno referentes ao problema. Neste caso, consideraremos que a amostra seja semi-infinita. Esta condição é obtida, na coordenada radial, fazendo o raio da amostra ser muito maior que os raios dos feixes de prova e excitação. Na coordenada z esta condição é imposta para simplificar a matemática do problema. Considerar uma amostra com diâmetro finito levará à uma solução para T em termos de uma série e surgirá uma integração com infinitos polos. Assumiremos que o fluxo de calor para o meio externo seja nulo. Esta aproximação é válida quando a condutividade térmica do ar é muito menor que da amostra. Assumiremos também que inicialmente não há variação de temperatura. Assim temos:

$$\left. \frac{\partial T(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0 \quad (2.4)$$

$$T(\infty, z, t) = 0 \quad (2.5)$$

$$T(r, z, 0) = 0 \quad (2.6)$$

Observa-se que as condições iniciais e de borda são homogêneas, sendo assim, o método das transformadas integrais torna-se uma boa opção para solucionar o problema. Iremos usar as transformadas de Laplace, Henkel e Fourier cosseno.

2.1 Transformada de Laplace

A transformada de Laplace será aplicada à variável t , pois a condição inicial de $T = 0$ anulará um termo na transformada da derivada em t da equação de difusão de calor, como veremos. A transformada de Laplace é definida por:

$$\mathcal{L} [T(r, z, t)] = T(r, z, s) = \int_0^{\infty} T(r, z, t) \exp [-st] dt \quad (2.7)$$

e tem como propriedades

$$\mathcal{L} \left[\frac{\partial T(r, z, t)}{\partial t} \right] = sT(r, z, s) - T(r, z, 0) \quad (2.8)$$

$$\mathcal{L} [a] = \frac{1}{s}a \quad (2.9)$$

onde a é uma constante.

Aplicando a transformada de Laplace em 2.1, segue que

$$\mathcal{L} \left[\frac{\partial T(r, z, t)}{\partial t} - D \nabla^2 T(r, z, t) \right] = \mathcal{L} [Q(r, z)] \quad (2.10)$$

logo, usando a condição inicial 2.6,

$$sT(r, z, s) - D \nabla^2 T(r, z, s) = \frac{1}{s} Q(r, z) \quad (2.11)$$

2.2 Transformada Henkel

A transformada Henkel será aplicada à variável r , pois a transformada da parte radial do laplaciano será reduzido à apenas um termo como será visto nas propriedades adiante. A transformada Henkel é definida por:

$$H [T(r, z, s)] = T(\alpha, z, s) = \int_0^\infty T(r, z, s) J_0(\alpha r) r dr \quad (2.12)$$

onde J_0 é a função de Bessel de ordem zero. A transformada tem como propriedades

$$H \left[\frac{\partial^2 T(r, z, s)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T(r, z, s)}{\partial r} \right] = -\alpha^2 T(\alpha, z, s) \quad (2.13)$$

$$H [aT(r, z, s)] = aT(\alpha, z, s) \quad (2.14)$$

onde a é constante.

Aplicando a transformada Henkel em 2.11, temos

$$H \left[sT(r, z, s) - D \nabla^2 T(r, z, s) \right] = H \left[\frac{1}{s} Q(r, z) \right] \quad (2.15)$$

Podemos escrever o termo de fonte como

$$Q(r, z) = Q_0 Q(r) Q(z) \quad (2.16)$$

onde $Q_0 = P_e \beta \phi / \rho c \pi \omega^2$ e $Q(r) = U(\omega - r)$. Usando as propriedades e a equação para o termo de fonte acima, temos:

$$sT(\alpha, z, s) + D \alpha^2 T(\alpha, z, s) - D \frac{\partial^2 T(\alpha, z, s)}{\partial z^2} = \frac{1}{s} Q_0 Q(\alpha) Q(z) \quad (2.17)$$

em que

$$Q(\alpha) = H[Q(r)] = \frac{\omega J_1(\alpha\omega)}{\alpha} \quad (2.18)$$

onde J_1 é a função de Bessel de primeira ordem.

2.3 Transformada cosseno de Fourier

Esta transformada será aplicada à variável z pois, da condição de fluxo nulo, o segundo termo da transformada da derivada segunda em z , contida no laplaciano, será zerado como mostram as propriedades a seguir. A transformada cosseno de Fourier é definida por:

$$F_c [T(\alpha, z, s)] = T(\alpha, \lambda, s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} T(\alpha, z, s) \cos[\lambda z] dz \quad (2.19)$$

e tem como propriedades

$$F_c \left[\frac{\partial^2 T(\alpha, z, s)}{\partial z^2} \right] = -\lambda^2 T(\alpha, \lambda, s) - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\partial T(\alpha, z, s)}{\partial z} \Big|_{z=0} \quad (2.20)$$

$$F_c [aT(\alpha, z, s)] = aT(\alpha, \lambda, s) \quad (2.21)$$

onde a é constante.

Aplicando Fourier em 2.17 obtemos:

$$F_c \left[sT(\alpha, z, s) + D\alpha^2 T(\alpha, z, s) - D \frac{\partial^2 T(\alpha, z, s)}{\partial z^2} \right] = F_c \left[\frac{1}{s} Q_0 Q(\alpha) Q(z) \right] \quad (2.22)$$

usando a condição de fluxo nulo 2.4, segue que

$$sT(\alpha, \lambda, s) + D\alpha^2 T(\alpha, \lambda, s) + D\lambda^2 T(\alpha, \lambda, s) = \frac{1}{s} Q_0 Q(\alpha) Q(\lambda) \quad (2.23)$$

onde $Q(\lambda) = F_c[Q(z)]$. Isolando a temperatura na equação acima temos

$$T(\alpha, \lambda, s) = \frac{Q_0 Q(\alpha) Q(\lambda)}{s [s + D(\alpha^2 + \lambda^2)]} \quad (2.24)$$

que é a solução da temperatura no espaço das transformadas. Resta-nos determinar a dependência do termo de fonte em z e sua respectiva transformada de Fourier.

O termo $Q(z)$ esta relacionado com a absorção óptica da amostra. Vamos considerar 3 casos: Amostra com absorção segundo a Lei de Beer (BLM), baixa absorção (LAM) e alta absorção (HAM). O primeiro caso é o geral e deve ser válido para quaisquer valores de β , os demais casos serão

analisados e verificado sua validade. Definindo $Q(z)$ temos:

$$Q_{BLM}(z) = \exp[-\beta z] \quad (2.25)$$

$$Q_{LAM}(z) = 1 \quad (2.26)$$

$$Q_{HAM}(z) = \frac{2}{\beta} \delta(z) \quad (2.27)$$

onde δ é a função delta de Dirac. Aplicando Fourier temos:

$$Q_{BLM}(\lambda) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\beta}{\beta^2 + \lambda^2} \quad (2.28)$$

$$Q_{LAM}(\lambda) = \sqrt{2\pi} \delta(\lambda) \quad (2.29)$$

$$Q_{HAM}(\lambda) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\beta} \quad (2.30)$$

Feito isto, já temos a solução completa para a temperatura, porém no espaço das transformadas. Para voltar ao espaço real é necessário aplicar as transformadas inversa.

2.4 Transformada Inversa de Laplace

Começando por Laplace, temos que:

$$T(\alpha, \lambda, t) = \mathcal{L}^{-1} [T(\alpha, \lambda, s)] \quad (2.31)$$

Invertendo a equação 2.24 obtemos:

$$T(\alpha, \lambda, t) = \int_0^t Q_0 Q(\alpha) Q(\lambda) \exp[-D(\alpha^2 + \lambda^2)\tau] d\tau \quad (2.32)$$

2.5 Transformada Inversa de Fourier

A inversão de Fourier cosseno é definida por:

$$T(\alpha, z, t) = F_c^{-1} [T(\alpha, \lambda, t)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} T(\alpha, \lambda, t) \cos[\lambda z] d\lambda \quad (2.33)$$

Aplicando em 2.32 temos:

$$T(\alpha, z, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} Q_0 Q(\alpha) \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} Q(\lambda) \exp[-D(\alpha^2 + \lambda^2)\tau] \cos[\lambda z] d\lambda d\tau \quad (2.34)$$

Como temos três $Q(\lambda)$ distintos, vamos resolver o integral em λ separadamente para cada caso.

2.5.1 BLM

Substituindo $Q_{BLM}(\lambda)$ da equação 2.28 em 2.34, segue que

$$T(\alpha, z, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} Q_0 Q(\alpha) \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\beta}{\beta^2 + \lambda^2} \exp[-D(\alpha^2 + \lambda^2)\tau] \cos[\lambda z] d\lambda d\tau \quad (2.35)$$

Observe que não é possível fazer esta inversa diretamente, será necessário usar o teorema da convolução. Temos então que

$$F_c^{-1} [F(\lambda)G(\lambda)] = (f * g) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} f(\xi) [g^+(z - \xi) + g(z + \xi)] d\xi \quad (2.36)$$

onde g^+ é a extensão par de g , $f(z) = F_c^{-1} [F(\lambda)]$ e $g(z) = F_c^{-1} [G(\lambda)]$. Escolhendo F e G apropriados

$$F(\lambda) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\beta}{\beta^2 + \lambda^2} \quad (2.37)$$

$$G(\lambda) = \exp[-D(\alpha^2 + \lambda^2)\tau] \quad (2.38)$$

fazendo as inversas

$$f(z) = \exp[-\beta z] \quad (2.39)$$

$$g(z) = \frac{\exp\left[-\frac{z^2}{4D\tau} - D\alpha^2\tau\right]}{\sqrt{2D\tau}} \quad (2.40)$$

Substituindo f e g obtidos acima em 2.36, temos

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} \exp[-\beta\xi] \left[\frac{\exp\left[-\frac{(z-\xi)^2}{4D\tau} - D\alpha^2\tau\right]}{\sqrt{2D\tau}} + \frac{\exp\left[-\frac{(z+\xi)^2}{4D\tau} - D\alpha^2\tau\right]}{\sqrt{2D\tau}} \right] d\xi \quad (2.41)$$

Resolvendo a integral acima e substituindo o resultado da inversão em 2.35, obtemos

$$T_{BLM}(\alpha, z, t) = \int_0^t \frac{Q_0 Q(\alpha)}{2} \exp \left[-z\beta + \frac{(\beta^2 - \alpha^2)\tau\omega^2}{4t_c} \right] \times \\ \times \left(1 + \operatorname{Erf} \left[\frac{z - \beta\tau\omega^2/2t_c}{\sqrt{\tau/t_c\omega}} \right] + \exp [2z\beta] \operatorname{Erfc} \left[\frac{z + \beta\tau\omega^2/2t_c}{\sqrt{\tau/t_c\omega}} \right] \right) d\tau \quad (2.42)$$

que é a temperatura para o caso BLM no espaço Henkel-z-t. A função Erf é a função erro e Erfc a função erro complementar. O parâmetro t_c é o tempo característico da difusão térmica e é definido por

$$t_c = \frac{\omega^2}{4D} \quad (2.43)$$

2.5.2 LAM

Substituindo $Q_{LAM}(\lambda)$ da equação 2.29 em 2.34, segue que

$$T(\alpha, z, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} Q_0 Q(\alpha) \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{2\pi} \delta(\lambda) \exp [-D(\alpha^2 + \lambda^2)\tau] \cos[\lambda z] d\lambda d\tau \quad (2.44)$$

Logo, integrando e usando a definição de t_c , obtemos

$$T_{LAM}(\alpha, z, t) = Q_0 Q(\alpha) \int_0^t \exp [-\omega^2 \alpha^2 \tau / 4t_c] d\tau \quad (2.45)$$

que é a variação de temperatura no espaço Henkel-z-t para o limite de baixa absorção óptica. Observe a simplicidade desta equação comparada com 2.42.

2.5.3 HAM

Substituindo $Q_{HAM}(\lambda)$ da equação 2.30 em 2.34, temos

$$T(\alpha, z, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} Q_0 Q(\alpha) \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\beta} \exp [-D(\alpha^2 + \lambda^2)\tau] \cos[\lambda z] d\lambda d\tau \quad (2.46)$$

Integrando, obtemos

$$T(\alpha, z, t) = Q_0 Q(\alpha) \int_0^t \frac{\exp \left[-\frac{z^2}{4D\tau} - D\alpha^2\tau \right]}{\beta\sqrt{\pi D\tau}} d\tau \quad (2.47)$$

Considerando que estamos trabalhando no limite de alta absorção é razoável dizer que a amostra seja opaca e, portanto, podemos afirmar que toda a radiação proveniente do laser de excitação é absorvida na superfície da amostra. Logo vamos tomar esta solução apenas em $z = 0$ e usando a definição de t_c , temos

$$T_{HAM}(\alpha, 0, t) = Q_0 Q(\alpha) \int_0^t 2\sqrt{\frac{t_c}{\pi}} \frac{\exp[-\alpha^2 \omega^2 \tau / 4t_c]}{\beta \omega \sqrt{\tau}} d\tau \quad (2.48)$$

Novamente, observe a simplicidade desta equação comparada com 2.42.

2.6 Transformada Henkel Inversa

A transformada Henkel inversa é definida por:

$$H^{-1}[T(\alpha, z, t)] = T(r, z, t) = \int_0^\infty T(\alpha, z, t) J_0(\alpha r) \alpha d\alpha \quad (2.49)$$

2.6.1 BLM

Aplicando a definição acima na equação 2.42 e reagrupando alguns termos, obtemos uma expressão semi-analítica para a temperatura no caso geral em que a absorção óptica da amostra obedece a Lei de Beer.

$$T_{BLM}(r, z, t) = \frac{T_{0BLM} \beta \omega}{2} \int_0^\infty f_{BLM}(\alpha, z, t) J_1(\alpha \omega) J_0(\alpha r) d\alpha \quad (2.50)$$

onde

$$f_{BLM}(\alpha, z, t) = \int_0^t \exp\left[-z\beta + \frac{(\beta^2 - \alpha^2)\tau\omega^2}{4t_c}\right] \times \left(1 + \operatorname{Erf}\left[\frac{z - \beta\tau\omega^2/2t_c}{\sqrt{\tau/t_c}\omega}\right] + \exp[2z\beta] \operatorname{Erfc}\left[\frac{z + \beta\tau\omega^2/2t_c}{\sqrt{\tau/t_c}\omega}\right]\right) d\tau \quad (2.51)$$

e

$$T_{0BLM} = \frac{P_e \phi}{4\pi k t_c} \quad (2.52)$$

Esta solução é dita semi-analítica pois trata-se de uma expressão analítica em termos de integrais numéricas. Para obter o valor da variação de temperatura, deve-se necessariamente resolver estas

integrais numericamente.

2.6.2 LAM

Para o caso de baixa absorção, invertendo Henkel na equação 2.45 e resolvendo o integral em τ , temos

$$T_{LAM}(r, t) = 4T_{0LAM} \int_0^\infty \frac{1 - \exp[-\alpha^2 \omega^2 t / 4t_c]}{\omega^2 \alpha^2} J_1(\alpha \omega) J_0(\alpha r) d\alpha \quad (2.53)$$

onde

$$T_{0LAM} = \frac{P_e \beta \phi}{4\pi k} \quad (2.54)$$

que é a solução para a aproximação de amostras com baixa absorção.

2.6.3 HAM

Por fim, para o limite de alta absorção, aplicando a inversa em 2.48 e integrando em τ segue que

$$T_{HAM}(r, 0, t) = T_{0HAM} \int_0^\infty f_{HAM}(\alpha, t) J_1(\alpha \omega) J_0(\alpha r) d\alpha \quad (2.55)$$

onde

$$f_{HAM}(r, 0, t) = \frac{4t_c}{\alpha \omega} \text{Erf} \left[\frac{\alpha \omega}{2\sqrt{\tau/t_c}} \right] \quad (2.56)$$

e

$$T_{0HAM} = \frac{P_e \phi}{4\pi k t_c} \quad (2.57)$$

Novamente observe a simplicidade das equações para as aproximações, de alta e baixa absorção, comparadas com o modelo geral da Lei de Beer. Ambos os casos aproximados apresentam solução em termos de um integral numérico enquanto o primeiro caso tem-se duas integrações a serem feitas. Em termos computacionais, o ganho de tempo de processamento é considerável. Feito as transformadas inversas, temos as soluções da equação de difusão de calor que determinam o perfil de temperatura na amostra.

2.7 Discussão

Com o propósito de analisar os resultados obtidos na seção anterior (equações 2.50, 2.53 e 2.55), simulações foram realizadas para amostras de vidro LSCAS dopado com TiO_2 , nas concentrações 0,5%, 2,5% e 3,5% em massa, e para amostra de Manganês metálico. Nas páginas seguintes serão apresentados gráficos que ilustram a variação da temperatura em função do tempo de excitação, e a distribuição da mesma em função da posição radial com excitação top-hat e também gaussiana. Os valores dos parâmetros utilizados estão dispostos na tabela 2.1 e as equações utilizadas para gerar as curvas, com excitação via laser de perfil gaussiano, são encontradas nas referências [2, 3, 4, 5].

	Vidro LSCAS dopado com TiO_2			Manganês
	0,5 % wt	2,5 % wt	3,5 % wt	
P_e (mW)	20	20	20	5
β (m^{-1})	77	544	1061	8×10^7
D ($10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$)	6	6	6	22
K (W/mK)	1,5	1,5	1,5	7,8
ω (μm)	44	44	44	44
t_c (ms)	0,81	0,81	0,81	0,22
ϕ	0,87	0,7	0,72	1
α_T (10^{-6} K^{-1})	7,7	7,7	7,7	23,0
ν	0,29	0,29	0,29	0,24
λ (nm)	632.8	632.8	632.8	632.8

Tab. 2.1: Parâmetros utilizados para as simulações. Onde P_e é a potência de excitação, β o coeficiente de absorção óptica, D a difusividade térmica, K a condutividade térmica, ω o raio do feixe de excitação na amostra, t_c o tempo característico, ϕ a taxa de energia convertida em calor, α_T o coeficiente de expansão térmica, ν a razão de Poisson e λ o comprimento de onda do laser de prova. [3]

O gráfico da figura 2.1 mostra a distribuição de temperatura na superfície de uma amostra de vidro LSCAS dopado com TiO_2 0,5% em massa, em função da distância radial e para tempos de excitação iguais a $0, 1t_c, 1t_c$ e $5t_c$. A equação utilizada foi a 2.53 em que considera-se amostra com baixa absorção óptica. O material em questão possui $\beta = 77\text{m}^{-1}$ e portanto, enquadra-se nesta aproximação (adiante discutiremos esta afirmação). É possível observar que para tempos muito curtos, da ordem de $0, 1t_c$, o perfil de T apresenta um platô devido a excitação ser do tipo Top-Hat. Para tempos de excitação maiores, o platô desaparece e a distribuição toma forma mais arredondada.

Na figura 2.2 temos simulado o comportamento da temperatura em função do tempo na superfície da mesma amostra e no centro de simetria do laser de excitação ($r = z = 0$). Nota-se que o maior aumento de T ocorre no intervalo de tempo de aproximadamente $30 t_c$. Após este intervalo a temperatura tende de forma assintótica ao regime estacionário.

Em 2.3 temos ilustrado, ainda para a amostra de LSCAS 0,5% em massa de TiO_2 , a temperatura

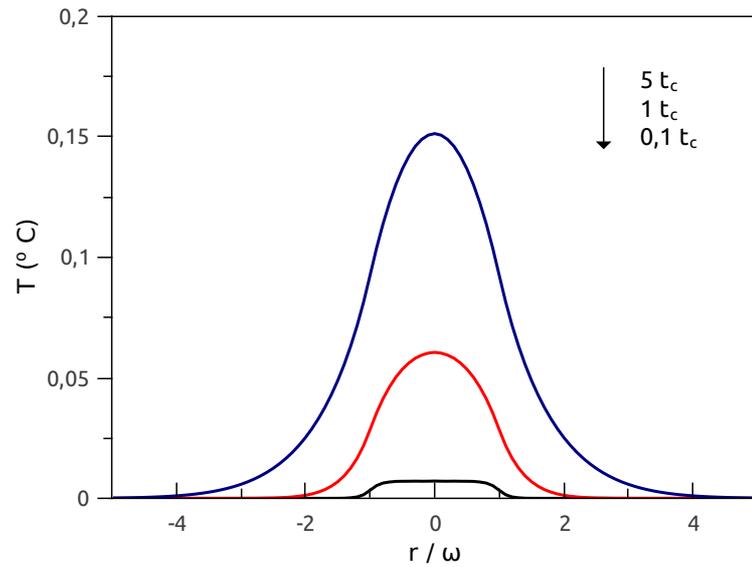


Fig. 2.1: Perfil de temperatura para amostra de LSCAS dopado com 0,5 % em massa de TiO_2 . Simulação de $T_{LAM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 2.53.

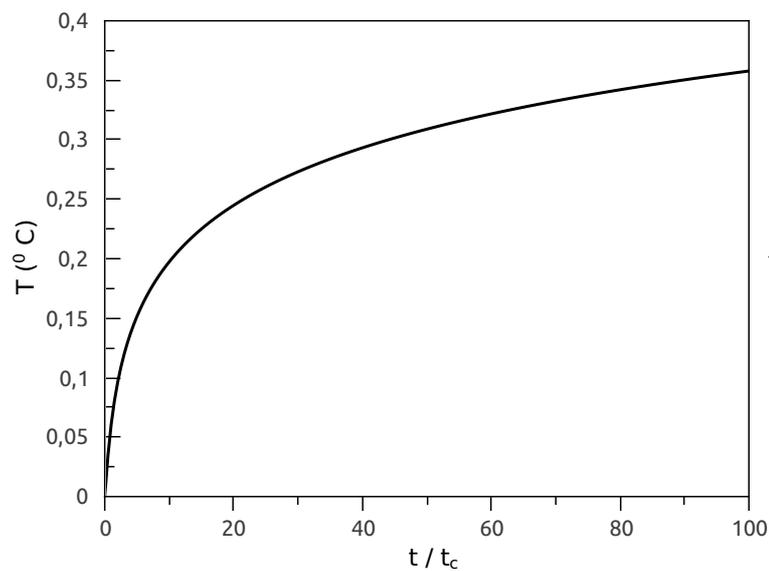


Fig. 2.2: Simulação de T_{LAM} , na superfície da amostra e no centro da excitação ($r = z = 0$), em função de t para a amostra de LSCAS dopado com 0,5 % de TiO_2 . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 2.53.

em função de r para excitação top-hat e gaussiana. Pelo fato de ter uma densidade de energia maior na região central, o laser gaussiano gera um pico de temperatura maior em $r = 0$ e uma distribuição

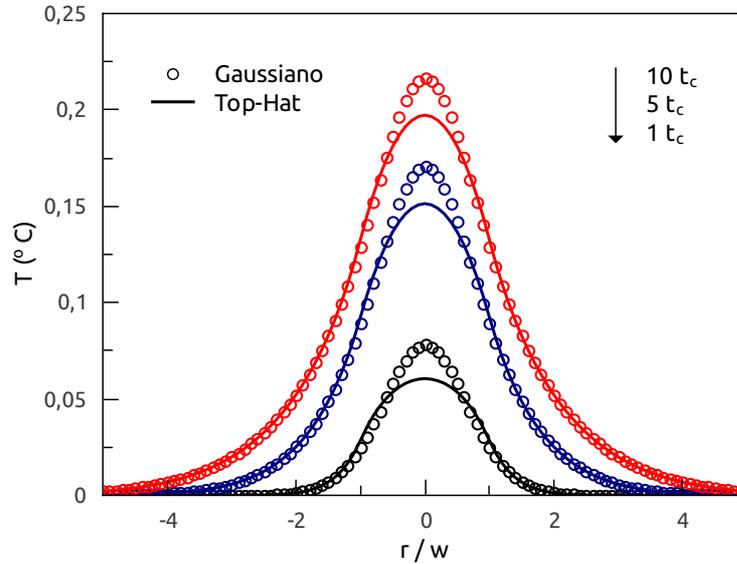


Fig. 2.3: Perfis de temperatura para amostra de LSCAS dopado com 0,5 % em massa de TiO_2 , com excitação tipo top-hat (linha contínua) e gaussiana (elipses). Simulação de $T_{LAM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1, a equação de T_{LAM} com excitação top-hat é a 2.53, e com excitação gaussiana é encontrada nas referências [2, 3, 4, 5].

mais abrupta da mesma. A fonte top-hat gera uma distribuição mais suavizada, porém esta não é “quadrada” como o perfil da mesma. Isto ocorre pois há fluxo de calor na direção radial da amostra e há a relaxação térmica do material. O mesmo efeito se aplica à fonte gaussiana, apesar da semelhança, o perfil de temperatura gerado não tem a mesma distribuição de intensidade da fonte.

Para o modelo geral (BLM), temos na figura 2.4 curvas de T_{BLM} (equação 2.50), em função de r , para alguns valores de t . A amostra em questão é LSCAS dopada com TiO_2 3,5% em massa. Observa-se que as curvas possuem formas parecidas com as do gráfico 2.1 onde foi usado o modelo de baixa absorção (LAM). A diferença se dá apenas nos valores da temperatura. No primeiro caso, estes são da ordem de décimos de grau Celsius, enquanto no segundo esta variação de T assume valores da ordem de 2 graus. Tal diferença se deve principalmente à absorção óptica das amostras, haja visto que os demais parâmetros em pouco se diferem.

No gráfico ilustrado em 2.5 temos representado, para o modelo BLM, a temperatura no centro do feixe de excitação e na superfície da amostra. Assim como no modelo LAM (figura 2.2), há um aumento significativo de T num período de tempo de aproximadamente $30 t_c$. Após isto o sistema tende assintoticamente ao regime estacionário.

Uma comparação entre os perfis de temperatura excitado com fonte top-hat e gaussiana, para o modelo BLM, é exibido na figura 2.6. As mesmas observações feitas para o caso de baixa absorção, aqui também são válidas.

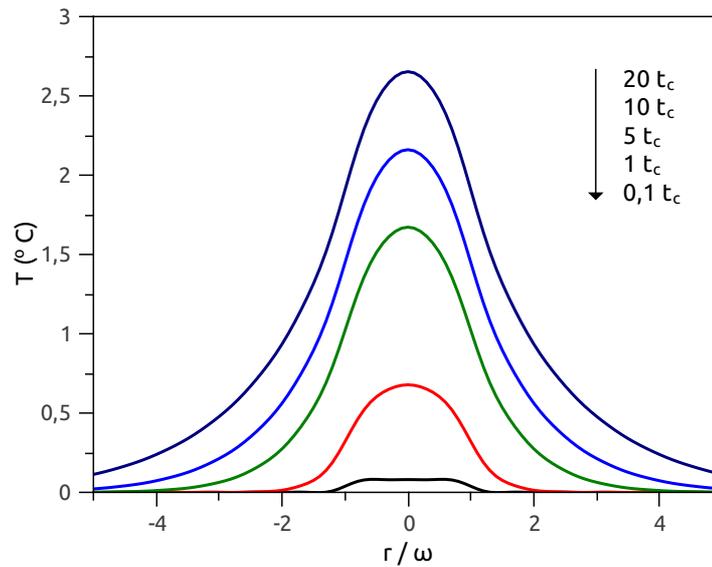


Fig. 2.4: Perfil de temperatura para amostra de LSCAS dopado com 3,5 % em massa de TiO_2 . Simulação de $T_{BLM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 2.50.

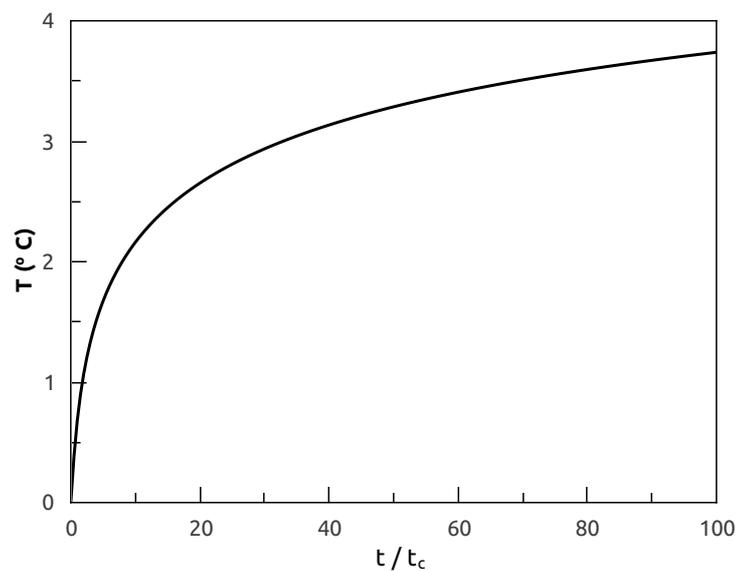


Fig. 2.5: Simulação de T_{BLM} , na superfície da amostra e no centro da excitação ($r = z = 0$), em função de t para a amostra de LSCAS dopado com 3,5 % de TiO_2 . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 2.50.

Para a aproximação de amostras com alto coeficiente de absorção óptica, a temperatura T_{HAM} obtida na equação 2.55, é ilustrada no gráfico da figura 2.7 para uma amostra de Manganês metálico. É

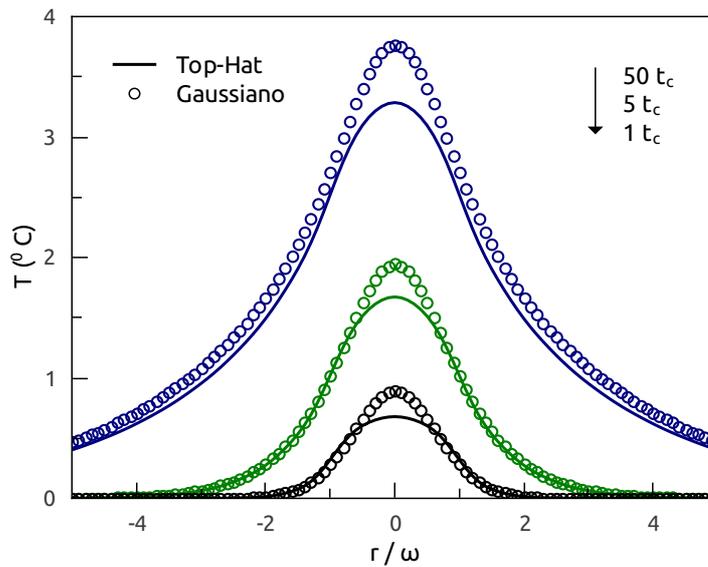


Fig. 2.6: Perfis de temperatura para amostra de LSCAS dopado com 3,5 % em massa de TiO_2 , com excitação tipo top-hat (linha contínua) e gaussiana (elipses). Simulação de $T_{BLM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1, a equação de T_{BLM} com excitação top-hat é a 2.50 e com excitação gaussiana é encontrada nas referências [2, 3, 4, 5].

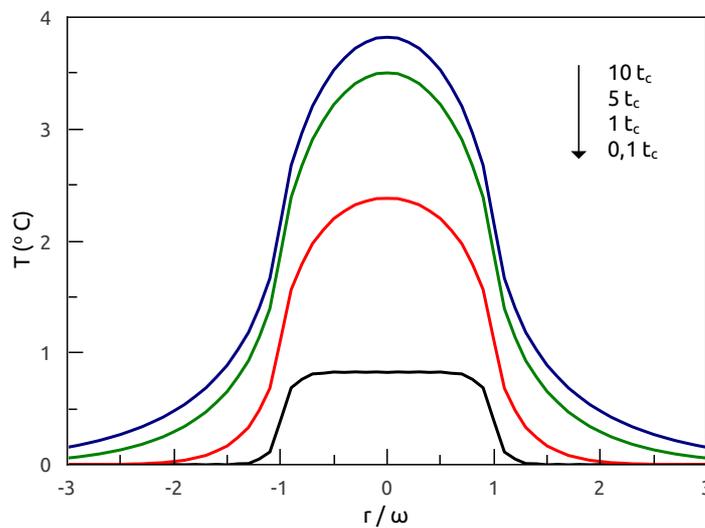


Fig. 2.7: Perfil de temperatura para amostra de Manganês metálico. Simulação de $T_{HAM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 2.55.

possível observar a forma "quadrada" do top-hat para o tempo de excitação da ordem de $0,1 t_c$, e nota-se também uma variação de T da ordem de 4 graus Celsius em um intervalo de tempo relativamente curto (aproximadamente $10 t_c$). Analisando o gráfico de T_{HAM} em função do tempo de excitação em

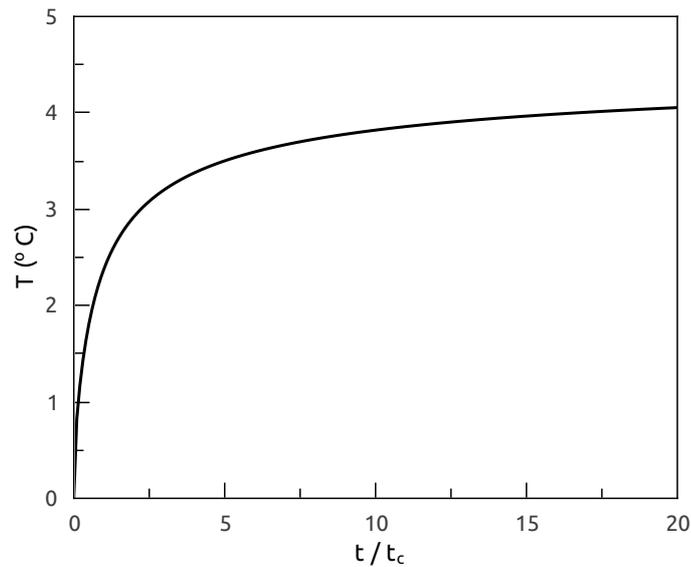


Fig. 2.8: Simulação de T_{HAM} , na superfície da amostra e no centro da excitação ($r = z = 0$), em função de t para a amostra de Manganês metálico. Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 2.55.

2.8, observa-se que o aumento de temperatura é muito mais rápido que nos casos anteriores. Em um intervalo de tempo da ordem de $10 t_c$ o sistema já atingiu o regime estacionário.

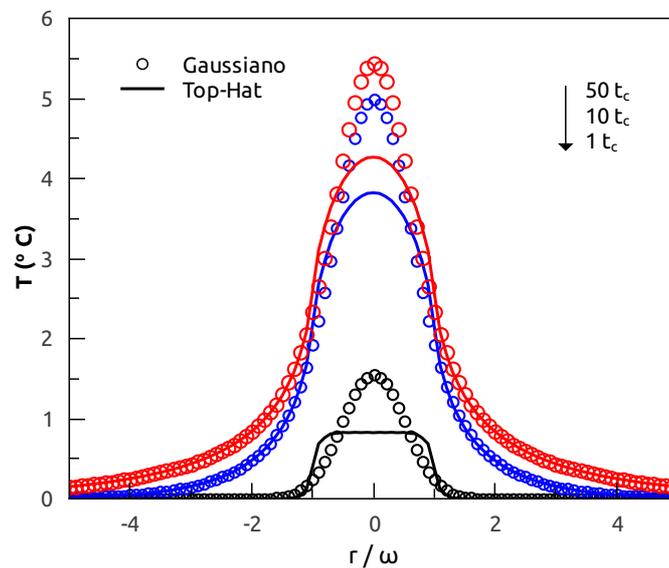


Fig. 2.9: Perfis de temperatura para amostra de Manganês metálico, com excitação tipo top-hat (linha contínua) e gaussiana (elipses). Simulação de $T_{HAM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1, a equação de T_{HAM} com excitação top-hat é a 2.55 e com excitação gaussiana é encontrada nas referências [2, 3, 4, 5].

Ainda no modelo HAM, a figura 2.9 compara a distribuição de temperatura, gerada na superfície da amostra de Manganês metálico, por meio de excitação com fonte top-hat e gaussiana. Novamente as observações feitas para os casos anteriores aqui se aplica.

Um ponto importante nas comparações entre o top-hat e o gaussiano (figuras 2.3, 2.6 e 2.9) é que mesmo para tempos longos (t da ordem de $2000 t_c$), a curva do top-hat continua apresentando uma leve divergência em relação ao gaussiano. Pelo *Teorema Central do Limite*, para tempos longos, as curvas deveriam igualar-se e aproximar-se de uma distribuição normal, o que não é observado. Acontece que a partir de $t = 0$, o sistema passa a ser excitado por uma fonte externa de distribuição top-hat. Mesmo que a amostra tenda a relaxar termicamente e assumir uma distribuição normal de T , a fonte continua injetando energia e impedindo que isto ocorra. Logo, o *Teorema Central do Limite* não é violado.

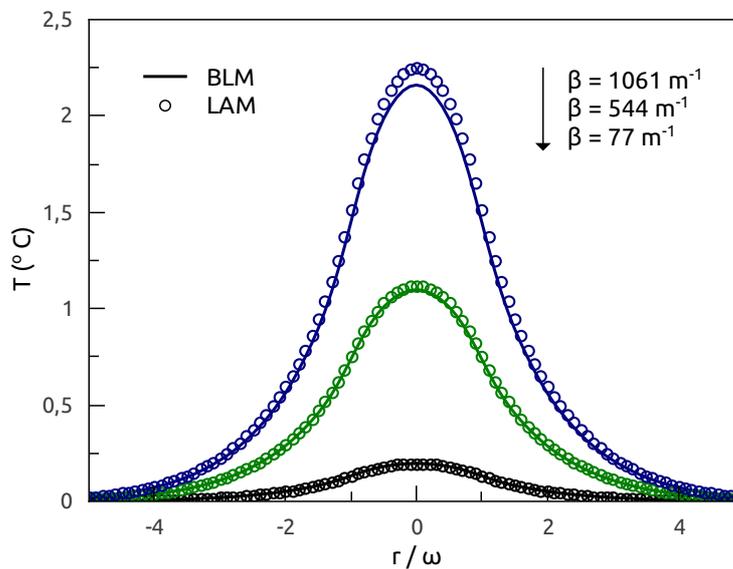


Fig. 2.10: Perfil de temperatura para as três concentrações de vidro LSCAS - TiO_2 na superfície da amostra, nos modelos LAM e BLM. Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e as equações usadas foram a 2.50 e 2.53.

Por fim, nas figuras 2.10 e 2.11, temos os perfis de temperatura nas superfícies das amostras de LSCAS dopadas com 0,5%, 2,5 % e 3,5% de TiO_2 em massa, e à uma distância de 1 mm abaixo das superfícies das mesmas. As curvas foram geradas com as equações dos modelos LAM e BLM (2.53 e 2.50). As amostras possuem coeficientes de absorção óptica iguais a 77 , 544 e 1061 m^{-1} respectivamente. Na superfície das mesmas, os modelos apresentam boa concordância havendo uma pequena diferença na distribuição de T da terceira amostra, como pode ser visto no gráfico 2.10. Pelo gráfico da figura 2.11, percebemos que no interior das amostras os modelos são equivalentes apenas para a amostra de menor β . Nas demais, as soluções diferem muito e portanto, a aproximação

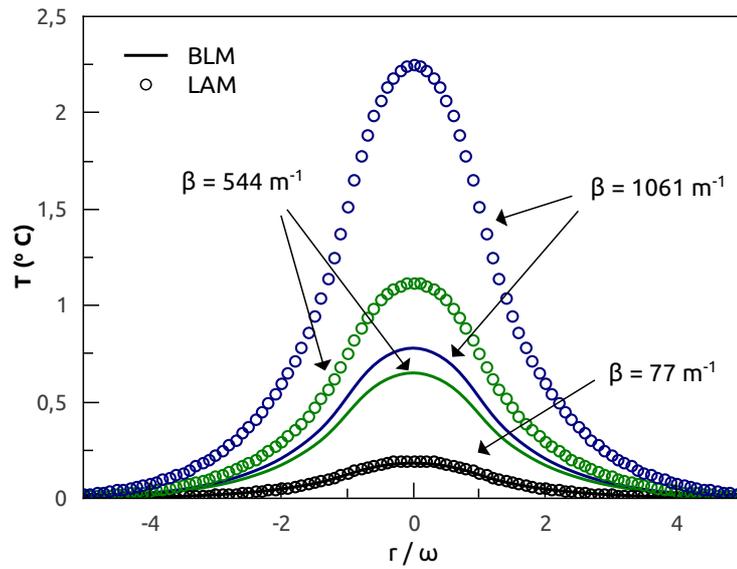


Fig. 2.11: Perfil de temperatura para as três concentrações de vidro LSCAS - TiO_2 1 mm abaixo da superfície da amostra, nos modelos LAM e BLM. Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e as equações usadas foram a 2.50 e 2.53.

LAM não é válida. Com base no gráfico 2.11 e em alguns trabalhos já publicados, podemos afirmar que a aproximação de baixa absorção apresenta boa concordância para amostras com β menores que 200m^{-1} [3, 15].

Capítulo 3

Perfil de Deslocamento

Para a técnica de Espelho Térmico, é necessário conhecermos a deformação superficial da amostra. Este perfil de deslocamento é obtido resolvendo-se uma equação termoelástica que na aproximação quase-estática¹ é dada por [16]

$$(1 - 2\nu)\nabla^2\vec{u} + \nabla(\nabla\vec{u}) = 2(1 + \nu)\alpha_T\nabla T(r, z, t) \quad (3.1)$$

onde \vec{u} é o vetor deslocamento, α_T o coeficiente de expansão térmico e ν é a razão de Poisson². A solução desta equação pode ser dividida em uma homogênea (\vec{u}') mais uma particular (\vec{u}'').

$$\vec{u} = \vec{u}' + \vec{u}'' \quad (3.2)$$

A solução particular é resolvida definindo-se um potencial deslocamento escalar (Φ)

$$\vec{u}'' = \nabla\Phi \quad (3.3)$$

onde Φ é determinado resolvendo-se a seguinte equação de Poisson

$$\nabla^2\Phi = \chi T(r, z, t) \quad (3.4)$$

em que

$$\chi = \alpha_T \frac{1 + \nu}{1 - \nu} \quad (3.5)$$

Considerando o problema com simetria axial, a componente do vetor deslocamento na direção φ será

¹Esta aproximação significa que um acréscimo de temperatura gera quase que instantaneamente um acréscimo do deslocamento. Em outras palavras, o deslocamento deve acompanhar a temperatura.

²A razão de Poisson é a razão da deformação transversal pela deformação longitudinal do material.

nula ($u_\varphi = u'_\varphi = u''_\varphi = 0$). As componentes da solução homogênea são obtidas pelas relações [16]:

$$u''_r = \frac{1}{1-2\nu} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \quad (3.6)$$

e

$$u''_z = \frac{1}{1-2\nu} \left[2(1-\nu) \nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi \quad (3.7)$$

onde ψ é a função de Love e é determinada resolvendo-se a equação Biharmônica que segue

$$\nabla^2 \nabla^2 \psi = 0 \quad (3.8)$$

A solução geral de ψ é

$$\psi(r, z) = \int_0^\infty (C + \alpha z G) \exp[-\alpha z] J_0(\alpha r) d\alpha \quad (3.9)$$

onde C e G são constantes que satisfazem as condições de contorno. Condições estas que são definidas admitindo que a amostra esteja livre de tensões em sua superfície ($z = 0$). Desta forma temos:

$$\sigma_{zz}|_{z=0} = \sigma'_{zz}|_{z=0} + \sigma''_{zz}|_{z=0} = 0 \quad (3.10)$$

e

$$\sigma_{rz}|_{z=0} = \sigma'_{rz}|_{z=0} + \sigma''_{rz}|_{z=0} = 0 \quad (3.11)$$

em que σ_{zz} e σ_{rz} são as tensões normais a superfície. As relações entre as tensões e as funções Φ e ψ são:

$$\sigma'_{zz} = \frac{E}{1+\nu} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} - \nabla^2 \Phi \right) \quad (3.12)$$

$$\sigma'_{rz} = \frac{E}{1+\nu} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \quad (3.13)$$

$$\sigma''_{zz} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \frac{\partial}{\partial z} \left[(2-\nu) \nabla^2 \psi - \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] \quad (3.14)$$

$$\sigma''_{rz} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \frac{\partial}{\partial r} \left[(1-\nu) \nabla^2 \psi - \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] \quad (3.15)$$

onde E é o módulo de Young³. Finalmente temos as condições necessárias para resolver o problema. Começaremos pela solução particular.

3.1 Equação de Poisson

Considerando que a amostra seja semi-infinita, que o fluxo de calor para o meio externo seja zero e adotando coordenadas cilíndricas, a equação de Poisson 3.4 pode ser resolvida pelo método das transformadas. Desta forma a solução para Φ é dada por

$$\Phi(r, z, t) = -\chi \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{T(\alpha, \lambda, t)}{\alpha^2 + \lambda^2} \cos(\lambda z) J_0(\alpha r) \alpha d\alpha d\lambda \quad (3.16)$$

É fácil observar que a função acima é solução da equação 3.4, basta substituir esta expressão, derivar e verificar sua validade. O termo $T(\alpha, \lambda, t)$ é a temperatura no espaço de Henkel-Fourier-t que é dada pela equação 2.32.

De posse desta solução, podemos determinar as tensões. Começando por 3.12 e usando o laplaciano em coordenadas cilíndricas dado por 2.2 obtemos

$$\sigma'_{zz} = -\frac{E}{1+\nu} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) \quad (3.17)$$

Como aparecem apenas derivadas em r , precisamos derivar apenas a função de Bessel.

$$\frac{\partial^2 J_0(\alpha r)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial J_0(\alpha r)}{\partial r} = -\alpha^2 J_0(\alpha r) \quad (3.18)$$

logo, em $z = 0$ temos que

$$\sigma'_{zz}|_{z=0} = -\chi \frac{E}{1+\nu} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{T(\alpha, \lambda, t)}{\alpha^2 + \lambda^2} J_0(\alpha r) \alpha^3 d\alpha d\lambda \quad (3.19)$$

Agora, resolvendo 3.13, repare que temos derivadas em r e z , logo

$$\frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial J_0(\alpha r) \cos(\lambda z)}{\partial z} = -\alpha \lambda \sin(\lambda z) J_1(\alpha r) \quad (3.20)$$

ao tomarmos o valor desta tensão na superfície ou seja, $z = 0$, o termo $\sin(\lambda z)$ se anulará, portanto

$$\sigma'_{rz}|_{z=0} = 0 \quad (3.21)$$

³O módulo de Young ou módulo de elasticidade é um parâmetro mecânico que proporciona uma medida da rigidez de um material sólido.

Por fim, determinamos a solução particular do deslocamento a partir da equação 3.3. Na direção r temos que

$$u'_r = \frac{\partial \Phi}{\partial r} \quad (3.22)$$

como apenas a função de Bessel apresenta dependência em r , segue que

$$\frac{\partial J_0(\alpha r)}{\partial r} = \alpha J_1(\alpha r) \quad (3.23)$$

portanto, em $z = 0$ temos

$$u'_r(r, 0, t) = -\chi \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{T(\alpha, \lambda, t)}{\alpha^2 + \lambda^2} J_1(\alpha r) \alpha^2 d\alpha d\lambda \quad (3.24)$$

apesar de obtermos uma expressão elaborada para u'_r , nota-se que sua contribuição para o vetor deslocamento é muito pequena, podendo ser desprezada.

A componente da solução particular na direção z (u'_z) é dada por

$$u'_z = \frac{\partial \Phi}{\partial z} \quad (3.25)$$

como a derivada em Φ é em relação a z , o vetor u'_z terá dependência com $\sin(\lambda z)$. Ao tomarmos um ponto na superfície, em $z = 0$ este termo será zero. Logo

$$u'_z = 0 \quad (3.26)$$

a contribuição particular na direção z é nula. Como u'_r pode ser desprezado, concluímos que a solução da equação de Poisson, ou seja, a solução particular, em nada contribui para a deformação superficial. Esta deformação será determinada pela solução homogênea de \vec{u} .

3.2 Equação de Biharmônica e a Função de Love

A solução da equação Biharmônica é a função de Love dada pela equação 3.9.

$$\psi(r, z) = \int_0^\infty (C + \alpha z G) \exp[-\alpha z] J_0(\alpha r) d\alpha$$

Utilizando os resultados obtidos na seção anterior (equações 3.19 e 3.21), juntamente com as condições de contorno (equações 3.10 e 3.11), temos que

$$\sigma''_{zz}|_{z=0} = \chi \frac{E}{1 + \nu} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{T(\alpha, \lambda, t)}{\alpha^2 + \lambda^2} J_0(\alpha r) \alpha^3 d\alpha d\lambda \quad (3.27)$$

e

$$\sigma''_{rz}|_{z=0} = 0 \quad (3.28)$$

Substituindo a função de Love nas equações 3.14 e 3.15, segue que

$$\sigma''_{zz}| = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \int_0^\infty (C + G + \alpha Gz - 2G\nu)\alpha^3 \exp[-\alpha z](\alpha r) d\alpha \quad (3.29)$$

e

$$\sigma''_{rz} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \int_0^\infty (C + \alpha Gz - 2G\nu)\alpha^3 \exp[-\alpha z] J_1(\alpha r) d\alpha \quad (3.30)$$

fazendo $z = 0$ em 3.30 e igualando a 3.28 obtemos

$$C = 2G\nu \quad (3.31)$$

substituindo C em 3.29, igualando a 3.27 e fazendo $z = 0$, temos que

$$\frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \int_0^\infty G\alpha^3 J_0(\alpha r) d\alpha = \chi \frac{E}{1+\nu} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{T(\alpha, \lambda, t)}{\alpha^2 + \lambda^2} J_0(\alpha r) \alpha^3 d\alpha d\lambda \quad (3.32)$$

obtemos então o valor de G

$$G = (1 - 2\nu)\chi f(\alpha, t) \quad (3.33)$$

onde

$$f(\alpha, t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \frac{T(\alpha, \lambda, t)}{\alpha^2 + \lambda^2} d\lambda \quad (3.34)$$

Substituindo C e G na função de Love temos

$$\psi(r, z) = \int_0^\infty (1 - 2\nu)(2\nu + \alpha z)\chi f(\alpha, z) \exp[-\alpha z] J_0(\alpha r) d\alpha \quad (3.35)$$

Com a função de Love determinada analiticamente, podemos explicitar os deslocamentos. Substituindo ψ em 3.6, derivando e fazendo $z = 0$, obtemos

$$u''_r(r, 0, t) = \int_0^\infty (2\nu - 1)\chi f(\alpha, t)\alpha^2 J_0(\alpha r) d\alpha \quad (3.36)$$

Novamente, consideramos que este deslocamento em r , aliado ao deslocamento da solução particular

(equação 3.24), é muito pequeno comparado com o deslocamento em z , portanto será desprezado.

Para determinar o deslocamento em z , substituímos a função de Love em 3.7, derivamos e tomamos em $z = 0$, logo

$$u''_z(r, 0, t) = -2\chi(1 - \nu) \int_0^\infty f(\alpha, t) \alpha^2 J_0(\alpha r) d\alpha \quad (3.37)$$

substituindo $f(\alpha, t)$ que é dado pela equação 3.34, $T(\alpha, \lambda, t)$ de 2.32, $Q(\alpha)$ da expressão 2.18, χ de 3.5, e Q_0 por $P_e \beta \phi / \rho c \pi \omega^2$, temos

$$\begin{aligned} u''_z(r, 0, t) &= -2\alpha_T(1 + \nu) \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{P_e \beta \phi}{\rho c \pi \omega} \int_0^\infty \int_0^t \int_0^\infty Q(\lambda) \times \\ &\times \frac{\exp[-D(\alpha^2 + \lambda^2)\tau]}{\alpha^2 + \lambda^2} \alpha J_1(\alpha \omega) J_0(\alpha r) d\alpha d\tau d\lambda \end{aligned} \quad (3.38)$$

que é uma expressão geral para o deslocamento superficial da amostra, em outras palavras, $\vec{u} = u''_z \hat{z}$. Observe que temos um termo $Q(\lambda)$, assim como na determinação da temperatura, ele será determinado de acordo com a absorção óptica da amostra. A seguir vamos calcular $|\vec{u}|$ para os três casos.

3.2.1 BLM

O termo de fonte para o caso de amostra cuja absorção óptica obedece a Lei de Beer é dado pela equação 2.28. Substituindo-o na equação do vetor deslocamento acima temos⁴

$$\begin{aligned} u_{BLM}(r, 0, t) &= -4\alpha_T(1 + \nu) \frac{P_e \beta^2 \phi}{\rho c \pi^2 \omega} \int_0^\infty \int_0^t \int_0^\infty \frac{1}{\beta^2 + \lambda^2} \times \\ &\times \frac{\exp[-D(\alpha^2 + \lambda^2)\tau]}{\alpha^2 + \lambda^2} \alpha J_1(\alpha \omega) J_0(\alpha r) d\alpha d\tau d\lambda \end{aligned} \quad (3.39)$$

Integrando em relação a λ obtemos

$$\begin{aligned} u_{BLM}(r, 0, t) &= -2\alpha_T(1 + \nu) \frac{P_e \beta \phi}{\rho c \pi \omega} \int_0^\infty \int_0^t \left(\alpha \exp[-D(\alpha^2 + \lambda^2)\tau] \operatorname{Erfc} \left[\beta \sqrt{D\tau} \right] - \right. \\ &\quad \left. - \beta \operatorname{Erfc} \left[\alpha \sqrt{D\tau} \right] \right) \frac{1}{\alpha^2 + \lambda^2} J_1(\alpha \omega) J_0(\alpha r) d\alpha d\tau d\lambda \end{aligned} \quad (3.40)$$

⁴Por simplicidade iremos denotar u como sendo o módulo do vetor deslocamento \vec{u} .

Integrando em τ , usando a relação $D = \omega^2/4t_c$ e com um pouco de álgebra segue que

$$u_{BLM}(r, 0, t) = -\frac{u_0}{4\omega t_c} \int_0^\infty h_{BLM}(\alpha, t) J_1(\alpha\omega) J_0(\alpha r) d\alpha \quad (3.41)$$

com

$$\begin{aligned} h_{BLM}(\alpha, t) = & \frac{t\beta^2\omega^2}{\beta - \alpha^2} \text{Erfc} \left[\frac{\alpha\omega}{2} \sqrt{\frac{t}{t_c}} \right] + \frac{2\sqrt{tt_c}/\pi\omega\beta^2}{\alpha^3 - \alpha\beta^2} \exp \left[-\frac{t\alpha^2\omega^2}{4t_c} \right] + \\ & + \frac{2\beta t_c}{\alpha^2(\alpha^2 - \beta^2)^2} \left((\beta^3 - \alpha^3\beta) \text{Erfc} \left[\frac{\alpha\omega}{2} \sqrt{\frac{t}{t_c}} \right] + \right. \\ & \left. + 2\alpha^3 \left(1 - \exp \left[\frac{(\beta^2 - \alpha^2)\omega^2 t}{4t_c} \right] \text{Erfc} \left[\frac{\beta\omega}{2} \sqrt{\frac{t}{t_c}} \right] \right) \right) \end{aligned} \quad (3.42)$$

e

$$u_0 = 2\alpha_T(1 + \nu) \frac{P_e\phi}{\pi k} \quad (3.43)$$

que é a solução do deslocamento superficial para o caso geral de amostra obedecendo a Lei de Beer. A seguir vamos determinar este mesmo deslocamento para os casos limites.

3.2.2 LAM

Para o caso limite de amostra com baixa absorção óptica, o termo de fonte $Q(\lambda)$ é dado pela equação 2.29. Substituindo em 3.38 temos

$$\begin{aligned} u(r, 0, t) = & -4\alpha_T(1 + \nu) \frac{P_e\beta\phi}{\rho c\pi\omega} \int_0^\infty \int_0^t \int_0^\infty \delta(\lambda) \times \\ & \times \frac{\exp[-D(\alpha^2 + \lambda^2)\tau]}{\alpha^2 + \lambda^2} \alpha J_1(\alpha\omega) J_0(\alpha r) d\alpha d\tau d\lambda \end{aligned} \quad (3.44)$$

Integrando em λ

$$u(r, 0, t) = -2\alpha_T(1 + \nu) \frac{P_e\beta\phi}{\rho c\pi\omega} \int_0^\infty \int_0^t \frac{\exp[-D\alpha^2\tau]}{\alpha} J_1(\alpha\omega) J_0(\alpha r) d\alpha d\tau \quad (3.45)$$

Por fim, integrando em τ , usando a definição de t_c para eliminar D e usando a definição de T_{0LAM} , tem-se

$$u_{LAM}(r, 0, t) = -2\alpha_T(1 + \nu) T_{0LAM} \int_0^\infty h_{LAM}(\alpha, t) \alpha^2 J_0(\alpha r) d\alpha \quad (3.46)$$

onde

$$h_{LAM}(\alpha, t) = \frac{4}{\alpha^5 \omega} \left(1 - \exp \left[-\frac{\alpha^2 \omega^2 t}{4t_c} \right] \right) J_1(\alpha \omega) \quad (3.47)$$

As equações acima definem a solução para o caso de baixa absorção. A simplicidade desta comparada com o primeiro caso é relevante. Em termos computacionais, o ganho de tempo de processamento é grande.

3.2.3 HAM

O termo de fonte para o caso de alta absorção é determinado pela equação 2.30. Aplicando-o em 3.38 segue que

$$u(r, 0, t) = -4\alpha_T(1 + \nu) \frac{P_e \phi}{\rho c \pi^2 \omega} \int_0^\infty \int_0^t \int_0^\infty \exp[-D(\alpha^2 + \lambda^2)\tau] \times \quad (3.48)$$

$$\times \frac{\alpha}{\alpha^2 + \lambda^2} J_1(\alpha \omega) J_0(\alpha r) d\alpha d\tau d\lambda \quad (3.49)$$

Integrando em τ

$$u_{HAM}(r, 0, t) = -4\alpha_T(1 + \nu) \frac{P_e \phi}{\rho c \pi^2 \omega} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{1 - \exp[-D(\alpha^2 + \lambda^2)t]}{D(\alpha^2 + \lambda^2)^2} \alpha J_1(\alpha \omega) J_0(\alpha r) d\alpha d\lambda \quad (3.50)$$

Finalmente, integrando em λ , substituindo D em função de t_c e com um pouco de álgebra, temos

$$u_{HAM}(r, 0, t) = -\frac{u_0}{4\omega t_c} \int_0^\infty h_{HAM}(\alpha, t) J_1(\alpha \omega) J_0(\alpha r) d\alpha \quad (3.51)$$

com

$$h_{HAM}(\alpha, t) = t\omega^2 \operatorname{Erfc} \left[\frac{\alpha \omega}{2\sqrt{t_c/t}} \right] - \frac{2\omega\sqrt{tt_c}}{\sqrt{\pi}\alpha} \exp \left[-\frac{\alpha^2 \omega^2 t}{4t_c} \right] + \frac{2t_c}{\alpha^2} \operatorname{Erf} \left[\frac{\alpha \omega}{2\sqrt{t_c/t}} \right] \quad (3.52)$$

obtemos então, uma expressão para o deslocamento no caso de alta absorção óptica. Adiante iremos simular estes resultados e discutir a sua validade.

3.3 Discussão

Assim como no capítulo anterior, para analisar os resultados obtidos simulações foram realizadas para as mesmas amostras de vidro LSCAS e de Manganês metálico. Adiante seguem gráficos do deslocamento superficial em função do tempo de excitação e em função da posição radial, para excitação top-hat e gaussiana. Os parâmetros utilizados encontram-se na tabela 2.1 e as equações usadas para gerar as curvas de deslocamento com excitação via fonte gaussiana encontram-se nas referências [1, 3, 4, 5].

Na figura 3.1 temos ilustrado o perfil de deslocamento superficial em uma amostra de vidro LSCAS, dopado com TiO_2 0,5% em massa, em função de r , para diferentes valores de t . Foi usado a equação $u_{LAM}(r, 0, t)$ (3.46), obtida para a aproximação de amostra com baixa absorção óptica. Verifica-se que o deslocamento é da ordem de nanômetros, que são imperceptíveis ao olho humano. Tal escala diminuta elucida a sensibilidade da técnica de espelho térmico.

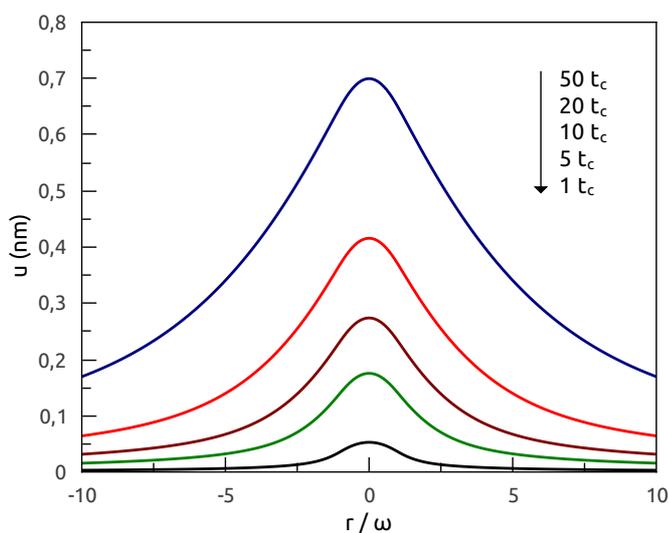


Fig. 3.1: Perfil de deslocamento superficial para amostra de LSCAS dopado com 0,5 % em massa de TiO_2 . Simulação de $u_{LAM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 3.46.

No gráfico seguinte (figura 3.2) temos a curva do deslocamento em função do tempo, na posição central ($r = 0$), para a mesma amostra de LSCAS, utilizando também o modelo LAM. Diferente da temperatura, o deslocamento superficial se dá de forma mais amenizada no tempo. Mesmo para um intervalo de tempo grande de $200 t_c$, o sistema encontra-se longe do regime estacionário.

O perfil de temperatura em função de r , para fonte de excitação gaussiana e top-hat, atuando sobre o vidro LSCAS, 0,5% de TiO_2 , é ilustrado em 3.3. O modelo utilizado foi o LAM. Observa-se claramente que este perfil em quase nada difere, mediante a troca da fonte.

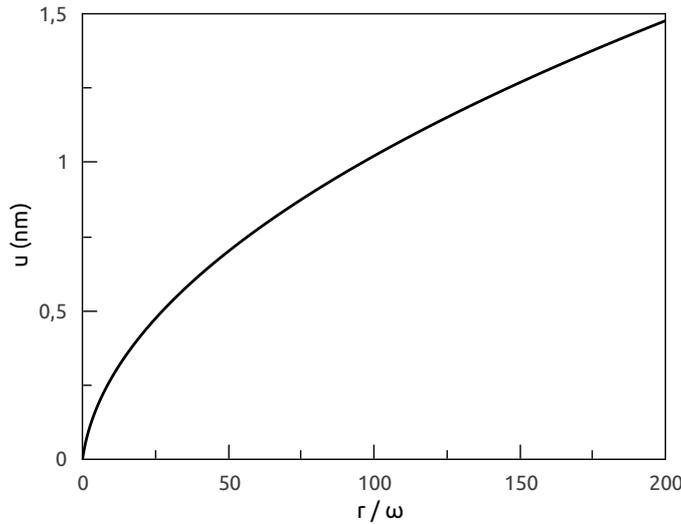


Fig. 3.2: Simulação de u_{LAM} , na superfície da amostra e no centro da excitação ($r = z = 0$), em função de t para a amostra de LSCAS dopado com 0,5 % de TiO_2 . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 3.46.

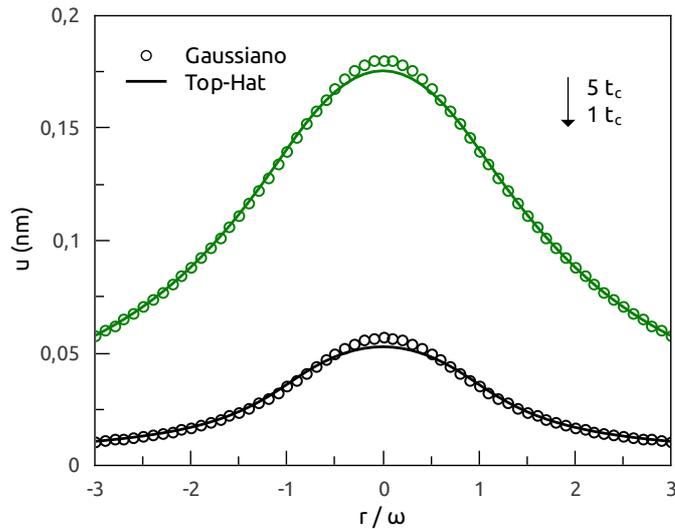


Fig. 3.3: Perfis de deslocamento superficial para amostra de LSCAS dopado com 0,5 % em massa de TiO_2 , com excitação tipo top-hat (linha contínua) e gaussiana (elipses). Simulação de $u_{LAM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1, a equação de u_{LAM} com excitação top-hat é a 3.46, e com excitação gaussiana é encontrada nas referências [1, 3, 4, 5].

Para o modelo completo (BLM), temos ilustrado na figura 3.4 o perfil de deslocamento em função da posição radial, e na figura 3.5 a evolução temporal de u_{BLM} , ambos para uma amostra de vidro LSCAS dopada com 3,5% de TiO_2 . Assim como no caso anterior, nota-se que o u evolui mais

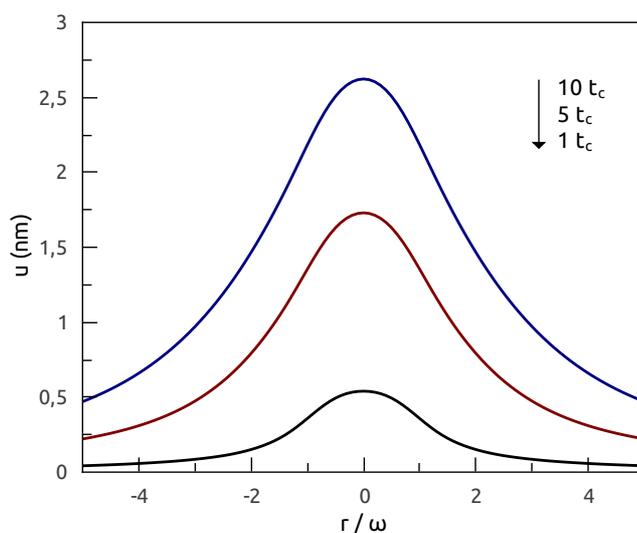


Fig. 3.4: Perfil de deslocamento superficial para amostra de LSCAS dopado com 3,5 % em massa de TiO_2 . Simulação de $u_{BLM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 3.41.

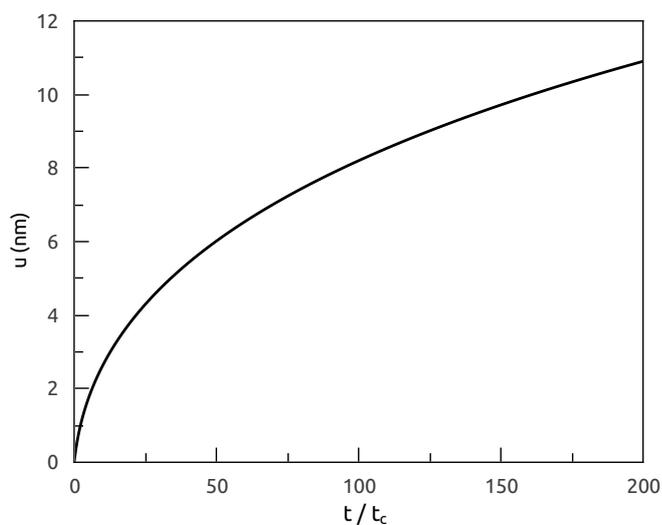


Fig. 3.5: Simulação de u_{BLM} , na superfície da amostra e no centro da excitação ($r = z = 0$), em função de t para a amostra de LSCAS dopado com 3,5 % de TiO_2 . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 3.41.

lentamente que T , e que o sistema leva um tempo relativamente longo para atingir o regime estacionário. Observa-se também neste caso, deslocamentos da ordem de 10 nm no centro da amostra, que são da ordem de 10 vezes maiores que na amostra anterior. No gráfico 3.6 temos o mesmo perfil de deslocamento para o caso de fonte top-hat e gaussiana. Nota-se que as curvas são praticamente

idênticas.

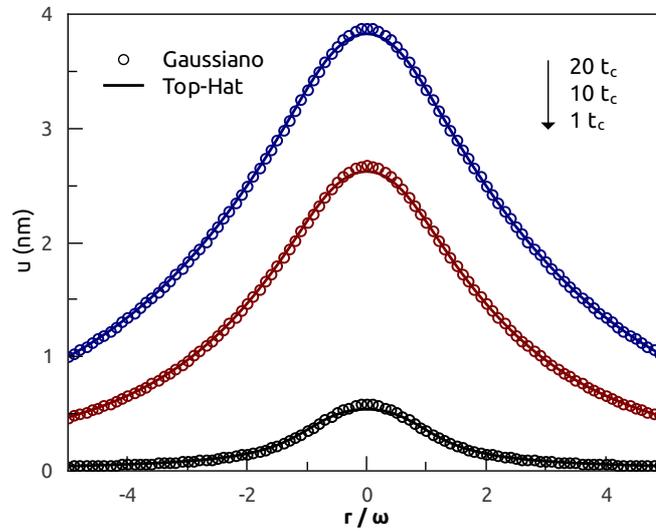


Fig. 3.6: Perfis de deslocamento superficial para amostra de LSCAS dopado com 3,5 % em massa de TiO_2 , com excitação tipo top-hat (linha contínua) e gaussiana (elipses). Simulação de $u_{BLM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1, a equação de u_{BLM} com excitação top-hat é a 3.41, e com excitação gaussiana é encontrada nas referências [1, 3, 4, 5].

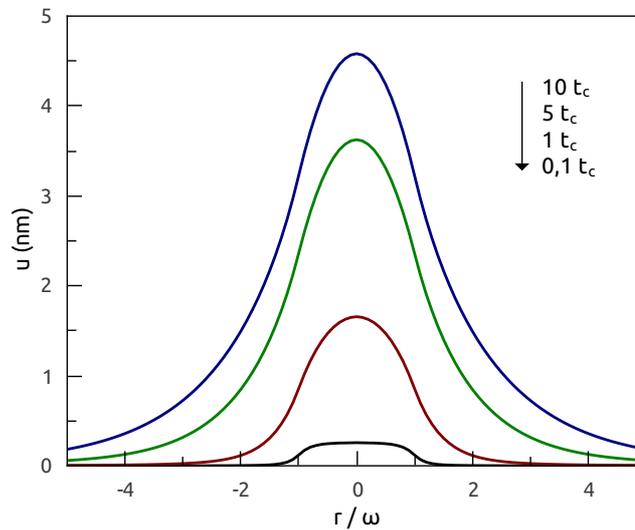


Fig. 3.7: Perfil de deslocamento superficial para amostra de Manganês metálico. Simulação de $u_{HAM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 3.51.

No gráfico da figura 3.7, temos o perfil de deslocamento da amostra de Manganês metálico, gerado com o modelo de alta absorção. É possível observar a forma “quadrada” do top-hat na curva referente

ao intervalo de tempo de $0, 1t_c$.

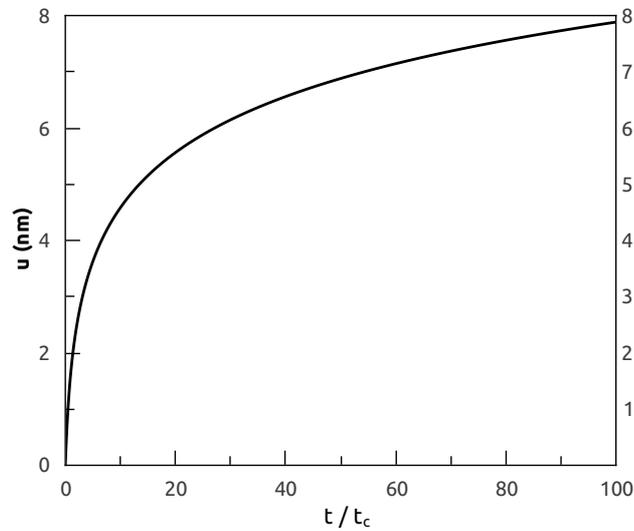


Fig. 3.8: Simulação de u_{HAM} , na superfície da amostra e no centro da excitação ($r = z = 0$), em função de t para a amostra de Manganês metálico. Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e a equação usada foi a 3.51.

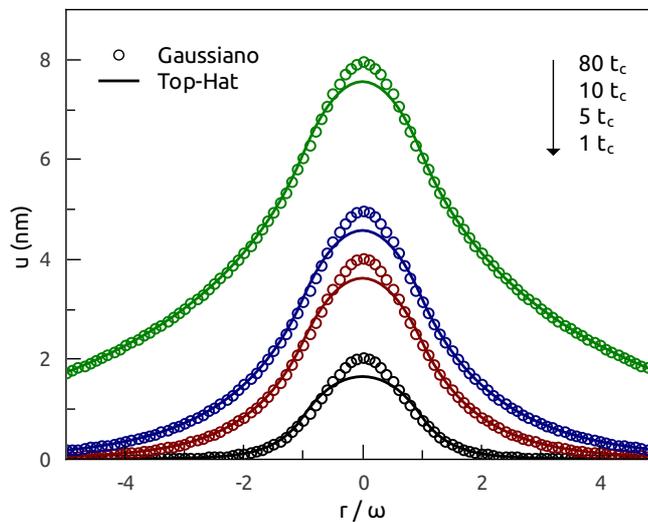


Fig. 3.9: Perfis de deslocamento superficial para amostra de Manganês metálico, com excitação tipo top-hat (linha contínua) e gaussiana (elipses). Simulação de $u_{HAM}(r, 0, t)$ em função de r variando o parâmetro t . Os dados utilizados estão na tabela 2.1, a equação de u_{HAM} com excitação top-hat é a 3.51, e com excitação gaussiana é encontrada nas referências [1, 3, 4, 5].

Na figura 3.8 temos a evolução temporal deste deslocamento no ponto central da amostra. Nota-se que este se dá de forma mais rápida que nos casos anteriores, o maior deslocamento ocorre num

período de aproximadamente $10t_c$. Verifica-se também que esta evolução é mais lenta que a evolução da temperatura. Em 3.9 temos o deslocamento para o top-hat e gaussiano. Neste caso, é notável uma pequena diferença entre os picos de deslocamento na região central da amostra.

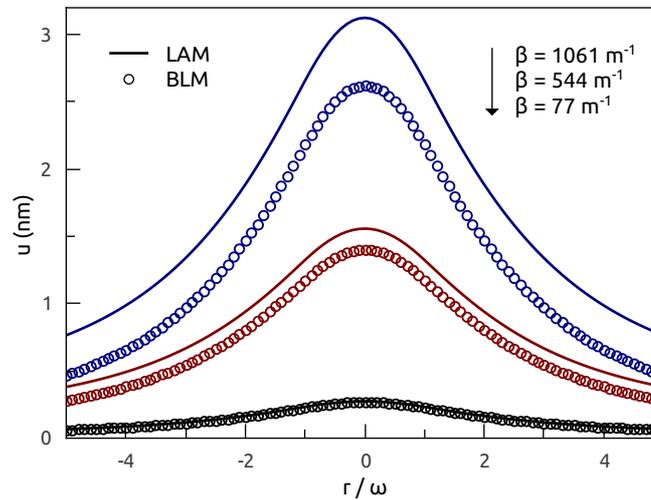


Fig. 3.10: Perfil de deslocamento para as três concentrações de vidro LSCAS - TiO_2 na superfície da amostra, nos modelos LAM e BLM. Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e as equações usadas foram a 3.46 e 3.41.

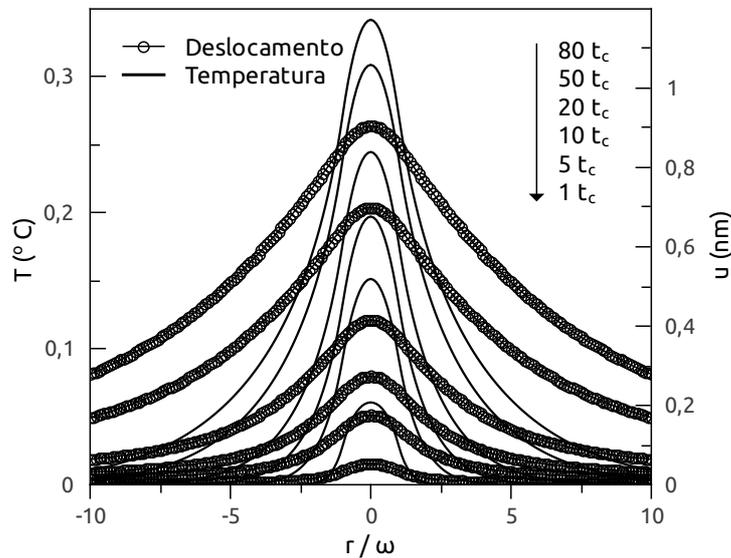


Fig. 3.11: Perfil de deslocamento e temperatura na superfície de uma amostra de vidro LSCAS dopado com TiO_2 0,5 % em massa. Os dados utilizados estão na tabela 2.1 e as equações usadas foram a 3.46 e 2.53, referentes a aproximação LAM.

Uma comparação entre o modelo geral e a aproximação LAM pode ser vista na figura 3.10. Assim como na temperatura, para a amostra de vidro LSCAS dopada com 0,5% de TiO_2 , cuja absorção óptica pode ser considerada baixa ($\beta = 77\text{m}^{-1}$), os modelos apresentam excelente concordância. Nas demais concentrações, a diferença é considerável e a aproximação não é válida.

Por fim, em 3.11 temos ilustrado, conjuntamente, o perfil de deslocamento e temperatura na amostra de vidro com 0,5% de dióxido de titânio. Foi utilizado o modelo LAM. Percebe-se que a deformação é mais suave que a variação de temperatura. Isto se deve a existência de tensões mecânicas no material. Um elemento de volume não desloca-se de forma independente.

Capítulo 4

Transientes

Neste capítulo será determinado o deslocamento de fase (ϕ) para as técnicas de LT e ET. Em seguida será apresentada a equação para o campo elétrico (U) no plano do fotodetector, com aproximação de campo distante. A intensidade (I) deste campo será, na maior parte dos casos, numericamente calculada. E por fim, gráficos dos transientes de Lente e Espelho Térmico (Ixt) serão apresentados e analisados.

4.1 Deslocamento de fase

Nas técnicas de Lente e Espelho Térmico, a variação no sinal do feixe de prova no fotodetector é interpretado como um acréscimo na fase da onda propagante. Este deslocamento de fase é definido de forma diferente para cada técnica. Em ambas as técnicas, ϕ é tratado como uma variação do caminho óptico percorrido pela luz. Porém, na LT este caminho é alterado devido à presença de um gradiente do índice de refração ao longo da amostra mais uma deformação superficial, e na ET o mesmo é alterado devido apenas ao deslocamento da superfície do material em estudo. As figuras 4.1 e 4.2 ilustram os efeitos de LT e ET e o que ocorre com o caminho óptico do laser de prova.

Vale ressaltar que o feixe de prova possui perfil de distribuição de intensidade gaussiano, diferentemente do laser de excitação que é top-hat. Um tratamento matemático da propagação no espaço de um feixe top-hat não é trivial, e o custo de um laser gaussiano de baixa potência não é elevado como seria um de alta, portanto, esta escolha é justificável.

4.1.1 Lente Térmica

Para a técnica de Lente Térmica, a fase¹ é definida por:

¹Por economia vamos usar a expressão fase para deslocamento de fase.

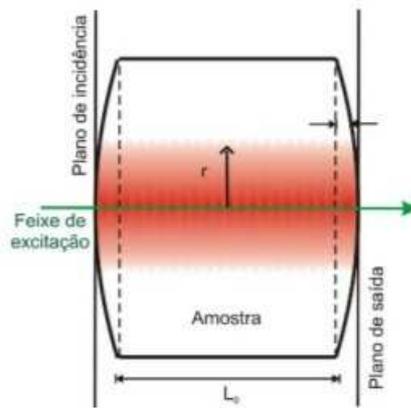


Fig. 4.1: Efeito de Lente Térmica em uma amostra sólida. Observa-se que a variação do índice de refração e da espessura contribuem para a variação do caminho óptico [3].

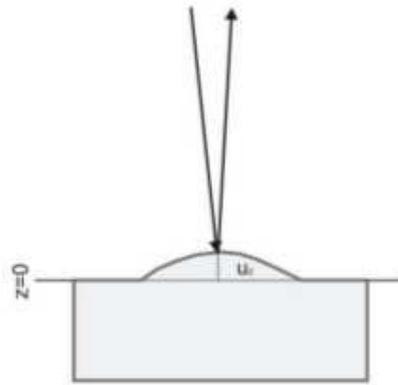


Fig. 4.2: Efeito de Espelho Térmico em uma amostra sólida. Observa-se que o caminho óptico do laser de prova diminui com a dilatação da amostra [3].

$$\phi_{LT}(r, t) = \frac{2\pi}{\lambda} \int_0^L \Delta s(r, z, t) dz \quad (4.1)$$

onde λ é o comprimento de onda do laser de prova, L é a espessura da amostra e Δs é a variação do caminho óptico. Podemos escrever esta variação como

$$\Delta s(r, z, t) = s(r, z, t) - s(r, z, 0) \quad (4.2)$$

e podemos expandir s em função da temperatura

$$s(r, z, t) = s(r, z, 0) + \frac{ds}{dT} \Delta T(r, z, t) \quad (4.3)$$

substituindo em 4.1 temos

$$\phi_{LT}(r, t) = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{ds}{dT} \int_0^L [T(r, z, t) - T(r, z, 0)] dz \quad (4.4)$$

onde $\frac{ds}{dT}$ é o coeficiente térmico de variação do caminho óptico, que consideraremos constante. A expressão acima determina a fase para a técnica de Lente Térmica. Para determiná-la devemos substituir as temperaturas obtidas no capítulo 2.

Definindo os parâmetros m , como sendo o quadrado da razão entre os raios dos feixes de prova (ω_p) e excitação na amostra, e g como o quadrado da razão entre a posição radial e o raio do feixe de prova, temos

$$m = \left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2 \quad (4.5)$$

e

$$g = \left(\frac{r}{\omega_p}\right)^2 \quad (4.6)$$

Para o caso de baixa absorção, verifica-se que a temperatura (equação 2.53) não depende explicitamente da coordenada z , logo a integral em z na fase será a própria espessura L da amostra. Substituindo T_{LAM} na equação 4.4 e escrevendo em termos de m e g , obtemos uma expressão semi-analítica para a fase

$$\phi_{LT-LAM}(g, t) = 2\theta_{LT-LAM} \int_0^\infty \frac{1 - \exp[\alpha^2 \omega^2 t / 4t_c]}{\omega^2 \alpha^2} J_1(\alpha \omega) [1 - J_0(\alpha \sqrt{mg}\omega)] d\alpha \quad (4.7)$$

onde

$$\theta_{LT-LAM} = -\frac{P_e \beta \phi L}{k\lambda} \frac{ds}{dT} \quad (4.8)$$

é um dos parâmetros de ajuste da LT. Esta solução é dita semi-analítica pois trata-se de uma expressão analítica em termos de uma integral numérica.

Para o modelo BLM, substituindo T_{BLM} da equação 2.50 em 4.4, e escrevendo em termos de m e g temos

$$\phi_{LT-BLM}(g, t) = \theta_{LT-BLM} \frac{\omega}{4t_c} \int_0^L \int_0^\infty f_{BLM}(\alpha, z, t) J_1(\alpha \omega) [1 - J_0(\alpha \sqrt{mg}\omega)] d\alpha dz \quad (4.9)$$

onde

$$\theta_{LT-BLM} = -\frac{P_e \beta \phi}{k\lambda} \frac{ds}{dT} \quad (4.10)$$

e a função $f_{BLM}(\alpha, z, t)$ é dada pela equação 2.51. Note que neste caso, a fase é escrita em termos de três integrais numéricos haja visto que f é também uma integração.

No modelo HAM, estamos no limite de alta absorção óptica onde as amostras são opacas ou absorvem e refletem quase toda a luz nela incidente. Logo, a técnica de LT não é factível neste caso.

4.1.2 Espelho Térmico

Para a técnica de Espelho Térmico a fase é definida por:

$$\phi_{ET}(r, t) = \frac{2\pi}{\lambda} 2u(r, 0, t) \quad (4.11)$$

onde u e o deslocamento superficial já determinado no capítulo 3. Substituindo u das equações 3.41, 3.46 e 3.51 na fase acima, e escrevendo em função dos parâmetros m e g , obtemos expressões semi-analíticas para as fases

$$\phi_{ET-BLM}(g, t) = \frac{\theta_{ET}}{\omega t_c} \int_0^\infty h_{BLM}(\alpha, z, t) J_1(\alpha\omega) J_0(\alpha\sqrt{mg}\omega) d\alpha \quad (4.12)$$

$$\phi_{ET-LAM}(g, t) = \theta_{ET} \beta \int_0^\infty h_{LAM}(\alpha, z, t) \alpha^2 J_0(\alpha\sqrt{mg}\omega) d\alpha \quad (4.13)$$

$$\phi_{ET-HAM}(g, t) = \frac{\theta_{ET}}{\omega t_c} \int_0^\infty h_{HAM}(\alpha, z, t) J_1(\alpha\omega) J_0(\alpha\sqrt{mg}\omega) d\alpha \quad (4.14)$$

onde

$$\theta_{ET} = -\frac{2P_e \alpha_T (1 + \nu) \phi}{k\lambda} \quad (4.15)$$

e as funções h_{BLM} , h_{LAM} e h_{HAM} são definidas nas equações 3.42, 3.47 e 3.52 respectivamente.

4.2 O campo U e a intensidade I

O campo elétrico do feixe de prova na região fotodetector é determinado resolvendo-se o integral de difração de Fresnel-Kirchoff. Tomando este em $r = 0$ e fazendo a aproximação de campo distante, U fica dado por

$$U(Z_1 + Z_2, t) = C \int_0^\infty \exp[-(iV + 1)g - i\phi(g, t)] dg \quad (4.16)$$

onde C é uma constante definida em termos dos parâmetros do laser de prova, $\phi(g, t)$ é a fase que foi determinada na seção anterior, Z_1 é a distância da cintura do feixe de prova até a amostra, Z_2 é a distância da amostra até o fotodetector e V é um parâmetro geométrico da montagem experimental. Na aproximação de campo distante onde $Z_2 \gg Z_1$, V fica dado por

$$V \approx \frac{Z_1 \lambda}{\pi \omega_p^2} \quad (4.17)$$

A intensidade do sinal é determinada fazendo o módulo ao quadrado do campo.

$$I(t) = |U(Z_1 + Z_2, t)|^2 \quad (4.18)$$

Podemos normalizá-la dividindo-a por $I(0)$, logo temos

$$I(t) = (1 + V^2)|U(Z_1 + Z_2, t)|^2 \quad (4.19)$$

A expressão acima determina a intensidade normalizada do feixe de prova no fotodetector resolvida no tempo. Para obter os transientes de Lente e Espelho Térmico, deve-se tomar a fase do modelo desejado, integrá-la numericamente, substituir na expressão do campo (4.16), fazer uma nova integração numérica e substituir na equação da intensidade acima. O processo demanda certo trabalho computacional, mas é possível fazê-lo.

4.3 Discussão

Nos gráficos a seguir, temos as curvas da intensidade normalizada em função do tempo para as técnicas de Lente e Espelho Térmico, para as amostras de LSCAS e Manganês. Os dados utilizados encontram-se na tabela 2.1 e para a LT foi considerado que $\frac{ds}{dT}$ das amostras de LSCAS são iguais à $11 \times 10^{-6} k^{-1}$.

No primeiro gráfico (figura 4.3) temos quatro transientes de Lente Térmica, dois para uma amostra de LSCAS dopada com 0,5 % em massa de TiO_2 e os outros dois para o mesmo vidro, porém dopado com 2,5 % de TiO_2 . Para cada amostra temos um transiente gerado com o modelo BLM e outro com o LAM. Os coeficientes de absorção óptica destas são 77 e 544 m^{-1} respectivamente, e os demais parâmetros em pouco diferem. Nota-se que para a amostra de absorção óptica mais baixa as duas curvas, gerados com o BLM e LAM, coincidem. Já para o vidro de maior β , as curvas divergem consideravelmente. Neste caso a aproximação de baixa absorção não é válida.

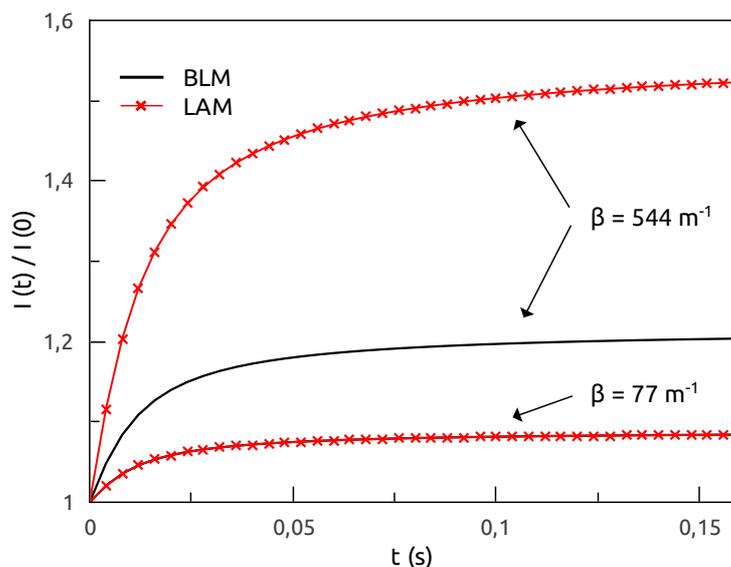


Fig. 4.3: Transientes de Lente Térmica para amostras de LSCAS dopadas com TiO_2 0,5 e 2,5 % em massa. A linha contínua de cor preta é o transiente gerado com o modelo BLM, enquanto a linha vermelha com pontos marcados em x é o transiente gerado com o LAM. Os parâmetros utilizados estão na tabela 2.1 e $\frac{ds}{dT}$ foi considerado igual à $11 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$.

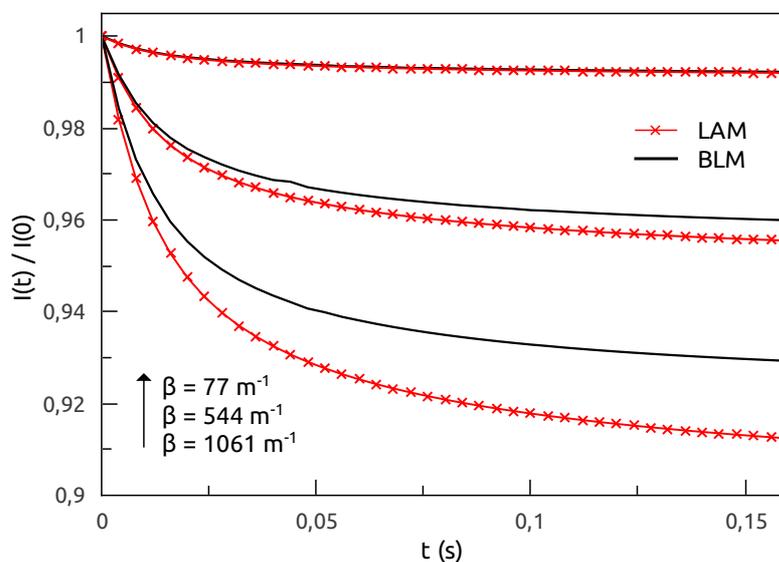


Fig. 4.4: Transientes de Espelho Térmico para amostras de LSCAS dopadas com TiO_2 0,5, 2,5 e 3,5 % em massa. A linha contínua de cor preta é o transiente gerado com o modelo BLM, enquanto a linha vermelha com pontos marcados em x é o transiente gerado com o LAM. Os parâmetros utilizados estão na tabela 2.1.

Na figura 4.4 temos seis transientes de Espelho Térmico, sendo três gerados com o modelo completo e outros três com a aproximação de baixa absorção. As amostras são de vidro LSCAS dopados

com TiO_2 0,5, 2,5 e 3,5 % em massa. Os coeficientes de absorção óptica são 77, 544 e 1061 m^{-1} respectivamente. Observa-se que para a primeira amostra, assim como na LT, as curvas de ambos os modelos coincidem. Já para as demais há certa divergência, que aumenta conforme maior for β . Com base nas simulações até aqui feitas e artigos na literatura, podemos afirmar que a aproximação LAM é válida para amostras com $\beta < 200 \text{ m}^{-1}$, como discutido no capítulo 2.

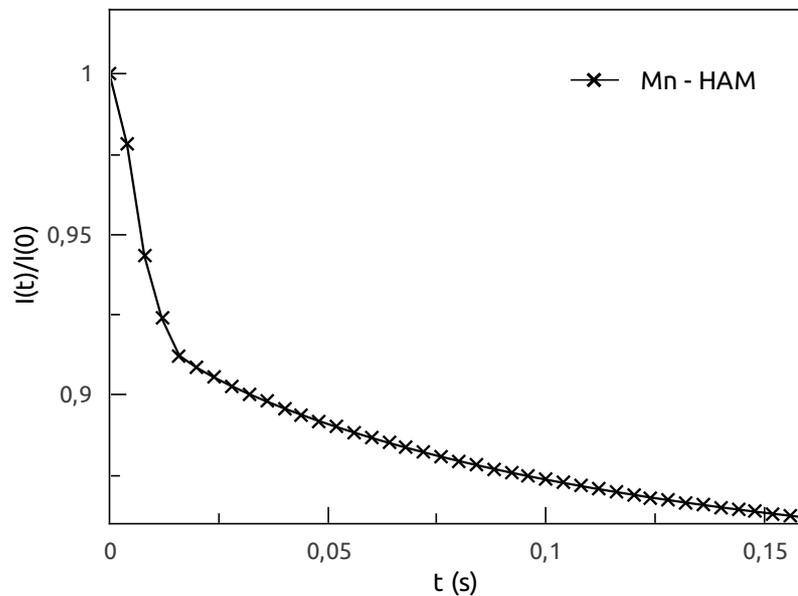


Fig. 4.5: Transientes de Espelho Térmico para amostras de Manganês metálico. O modelo utilizado foi o HAM e os parâmetros estão contidos na tabela 2.1.

Por fim temos no gráfico da figura 4.5 um transiente de ET para uma amostra de Manganês metálico. O modelo utilizado foi o HAM. Por ter um coeficiente de absorção óptica muito alto ($\beta = 8 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$) fica difícil gerar um transiente com o modelo completo, pois a fase deve possuir valores pequenos. Se β é muito grande, o integral em ϕ_{ET-BLM} deverá ser muito pequeno, próximo do erro do software Mathematica. Logo, o programa tem dificuldades em calcular este integral e temos valores não confiáveis. De qualquer forma, a aproximação de alta absorção é boa para amostras com $\beta > 10^5$ [15].

Capítulo 5

Conclusão

Neste trabalho foi resolvido e analisado os modelos teóricos das técnicas de Lente Térmica e Espelho Térmico com excitação via fonte top-hat. Expressões analíticas em termos de integrais numéricas foram obtidas para os perfis de temperatura, deslocamento superficial e para a intensidade do feixe de prova no centro do fotodetector.

Para ambas as técnicas obteve-se uma solução geral, considerando amostras cuja absorção óptica obedece a Lei de Beer, e aproximações para os limites de amostras com baixa e alta absorção. A solução BLM é válida para materiais com quaisquer valores de β , e as aproximações são consistentes dentro dos limites apropriados ($\beta < 200m^{-1}$ para LAM e $\beta > 10^5m^{-1}$ para HAM). Verificou-se que para as aproximações, a intensidade é dada em termo de dois integrais numéricos, enquanto o modelo completo tem-se quatro integrações. A simplicidade dos modelos LAM e HAM facilita o trabalho computacional, promovendo um ganho considerável de tempo de processamento para simulações e ajustes.

As simulações realizadas para os perfis de temperatura e deformação superficial em amostras sólidas de vidros LSCAS e Manganês metálico mostraram certa semelhança, para tempos longos, com os mesmos obtidos com excitação via laser gaussiano. É importante elucidar que para iguais potências estes perfis estão em mesma escala, como esperado. Estas simulações mostraram que as variações de temperatura vão de décimos à aproximadamente 5 graus célsius, e que a deformação superficial é da ordem de nanometros, mostrando a sensibilidade das técnicas.

Vale lembrar que os modelos aqui resolvidos consideraram amostras semi-infinitas e fluxo de calor para o meio como sendo nulo. Estas condições nem sempre são satisfeitas e portanto há trabalho ainda a ser feito em ambas as técnicas.

Referências Bibliográficas

- [1] Marcos Paulo Belaçon. Análise das técnicas de espelho térmico e lente térmica para o estudo de materiais semitransparentes e opacos. Dissertação de mestrado, Universidade Estadual de Maringá (UEM), Maringá, Junho 2009.
- [2] Jun Shen, Roger D. Lowe, and Richard D. Snook. A model for cw laser induced mode-mismatched dual-beam thermal lens spectroscopy. *Chemical Physics*, (165):385–396, Abril 1992.
- [3] Franciele Sato. *Desenvolvimento da Técnica de Espelho Térmico*. Tese de doutorado, Universidade Estadual de Maringá (UEM), Maringá, Abril 2009.
- [4] N. G. C. Astrath, L. C. Malacarne, P. R. B. Pedreira, A. C. Bento, M. L. Baesso, and J. Shen. Time-resolved thermal mirror for nanoscale surface displacement detection in low absorbing solids. *Applied Physics Letters*, 91:191908, November 2007.
- [5] F. Sato, L. C. Malacarne, P. R. B. Pedreira, M. P. Belaçon, R. S. Mendes, M. L. Baesso, N. C. G. Astrath, and J. Shen. Time-resolved thermal mirror method: A theoretical study. *Journal of Applied Physics*, 104:53520, September 2008.
- [6] Stephen E. Bialkowski. *Photothermal Spectroscopy Methods for Chemical Analysis*. Wiley, New York, 1996.
- [7] Paulo Roberto Borba Pedreira. *Desenvolvimento de um Protótipo de Lente Térmica Resolvida no Tempo para Estudo de Líquidos em Condições Transitórias em Tempo Real*. Tese de doutorado, Universidade Estadual de Maringá (UEM), Maringá, Agosto 2005.
- [8] <http://press.uchicago.edu/Misc/Chicago/284158townes.html> acessado em 12 de outubro de 2011.
- [9] J. P. Gordon, R. C. C. Leite, R. S. Moore, S. P. S. Porto, and J. R. Whinnery. Long-transient effects in lasers with liquid samples. *Journal of Applied Physics*, 36, January 1965.

- [10] Jun Shen, Mauro L. Baesso, and Richard D. Snook. Three-dimensional model for cw laser-induced mode-mismatched dual-beam thermal lens spectroscopy and time-resolved measurements of thin-film samples. *Journal of Applied Physics*, 75:3738–3748, April 1994.
- [11] M. L. Baesso, J. Shen, and R. D. Snook. Mode-mismatched thermal lens determination of temperature coefficient of optical path length in soda lime glass at different wavelengths. *Journal of Applied Physics*, 75:3732–3737, April 1994.
- [12] L. C. Malacarne, F. Sato, P. R. B. Pedreira, A. C. Bento, R. S. Mendes, M. L. Baesso, N. C. G. Astrath, and J. Shen. Nanoscale surface displacement detection in high absorbing solids by time-resolved thermal mirror. *Applied Physics Letters*, 92:131903, April 2008.
- [13] Nelson G. C. Astrath, Francine B. G. Astrath, Jun Shen, Jianqin Zhou, Paulo R. B. Pedreira, Luis C. Malacarne, Antonio C. Bento, , and Mauro L. Baesso. Top-hat cw-laser-induced time-resolved mode-mismatched thermal lens spectroscopy for quantitative analysis of low-absorption materials. *Optics Letters*, 33(13):1464–1466, July 2008.
- [14] Francine B. G. Astrath, Nelson G. C. Astrath, Jun Shen, Jianqin Zhou, Luis C. Malacarne, P. R. B. Pedreira, and Mauro L. Baesso. Time-resolved thermal mirror technique with top-hat cw laser excitation. *Optics Express*, 16(16):12214–12219, August 2008.
- [15] N. G. C. Astrath, F. B. G. Astrath, J. Shen, J. Zhou, C. E. Gu, L. C. Malacarne, P. R. B. Pedreira, A. C. Bento, and M. L. Baesso. Top-hat cw laser induced thermal mirror: a complete model for material characterization. *Applied Physics B*, 94:473–481, November 2008.
- [16] W. Nowacki. *Thermoelasticity*. Pergamon, Oxford, 1982.