Universidade Estadual de Maringá Pós Graduação em Física

Otávio Augusto Capeloto

Espectroscopia de Espelho Térmico com Excitação Pulsada: Caracterização de Materiais Opacos

Orientador: Prof. Dr. Nelson Guilherme Castelli Astrath Coorientador: Prof. Dr. Luis Carlos Malacarne

Maringá, Agosto de 2014

Universidade Estadual de Maringá Pós Graduação em Física

Otávio Augusto Capeloto

Espectroscopia de Espelho Térmico com Excitação Pulsada: Caracterização de Materiais Opacos

Dissertação de Mestrado apresentada ao Departamento de Física da Universidade Estadual de Maringá para a obtenção do título de Mestre em Física.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Nelson Guilherme Castelli Astrath - UEM (Orientador) Profa. Dra. Francielle Sato - UEM Prof. Dr. Eduardo do Carmo - UNILA Prof. Dr. Luis Carlos Malacarne - UEM (Coorientador)(Suplente) Prof. Dr. Roberto Rossato - UTFPR-Apucarana (Suplente)

Maringá, Agosto de 2014

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP) (Biblioteca Central - UEM, Maringá – PR., Brasil)

C238e

Capeloto, Otávio Augusto Espectroscopia de espelho térmico com excitação pulsada: caracterização de materiais opacos / Otávio Augusto Capeloto. -- Maringá, 2014. 76 f. : il., color., figs., tabs.

Orientador: Prof. Dr. Nelson Guilherme Castelli Astrath.

Coorientador: Prof. Dr. Luis Carlos Malacarne. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências Exatas, Departamento de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, 2014.

1. Difusão de calor. 2. Espectroscopia. 3. Fototérmico. 4. Espelho térmico. I. Astrath, Nelson Guilherme Castelli, orient. II. Malcarne, Luis Carlos, coorient. III. Universidade Estadual de Maringá. Centro de Ciências Exatas. Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física. IV. Título.

CDD 21.ed. 536.2014

AHS

Agradecimentos

Gostaria de agradecer a todas as pessoas que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho:

Ao meu pai Antonio Capeloto e a minha Mãe Elisa R. B. Capeloto pelo apoio em meus estudos e em todas a lições dadas em minha vida. Aos meus irmãos Débora C. Capeloto e Ulisses R. Capeloto pelo grande incentivo dado em todos os momentos.

A minha namorada, Marilaini Vizioli de Castro, pelo apoio, compreensão, paciência e incentivo.

A minha segunda família, Lucileni Vizioli, Cristiane Vizioli, Lidiane Vizioli e Eduardo Ghizoni, por todo o apoio e incentivo.

Ao professor Dr. Nelson Guilherme Castelli Astrath pela orientação e incentivo neste trabalho.

Ao professor Dr. Luis Carlos Malacarne pela ajuda e explicação em muitas dúvidas.

Aos integrantes do GEFF, em especial (ordem alfabética): Adriane Nascimento, Ana Claudia Nogueira, Aline Milan Farias, Denise Alanis, Elton de Lima Savi, Giselly dos Santos Bianchi, Gustavo V. B. Lukasievicz, Gutierrez R. de Morais, José Renato M. Viana, Leandro Herculano, Leandro Santana, Marcelo Sandrini, Nicolaz Bordan Aranda, Rafael da Silva, Robson F. Muniz, Rogério R. Pezarini, Taiana G. M. Bonadio, Thiago Petrucci, Thiago Moreno, Vanessa Martins, Vinicius G. Camargo, Vitor S. Zanuto, pelo incentivo, cooperação, compreensão nos trabalhos e pelas conversas nas horas vagas.

Aos amigos (ordem alfabética): Luiz Gustavo Andrade, Maike Antonio Faustino, Otávio A. Protzek, Renato Guimarães, Renato Ferreira, Roberta R. Ribeiro, Patrick Simonário, Renan Biagio, Veridiana Guimarães pelas conversas e discussões.

Aos professores, Dr. Antonio Medina Neto, Dra. Francielle Sato e Dr. Mauro Luciano Baesso.

Aos funcionários do Departamento de Física, em especial Akiko, Jurandir, Márcio, Marcos, Mônica e Sérgio.

As agências que financiaram este projeto, Capes, CNPq, Fundação Araucária.

Resumo

A técnica de Espelho Térmico resolvida no tempo é desenvolvida sobre a excitação de um laser pulsado para a medida de propriedades térmicas e mecânicas de materiais opacos. As equações de difusão de calor e termoelástica são resolvidas analiticamente para excitação pulsada assumindo absorção superficial e um pulso instantâneo. Resultados analíticos para a variação de temperatura são comparados com soluções inteiramente numéricas usando o método de elementos finitos levando em conta a largura do pulso do laser. Experimentos realizados validam o modelo teórico e ajustes por meio de regressão são realizados para a obtenção da difusividade térmica e do coeficiente de expansão térmica linear das amostras. Os valores obtidos para estas propriedades estão em acordo com os valores da literatura. A técnica se mostra útil para determinações quantitativas de propriedades físicas de metais com valores altos de coeficiente de difusão térmica.

Abstract

The time-resolved Thermal Mirror technique is developed under pulsed laser excitation for measuring thermal and mechanical properties of opaque materials. Heat diffusion and thermoelastic equations are solved analytically for pulsed excitation assuming surface absorption and an instantaneous pulse. Analytical results for the temperature change in the sample is compared to all-numerical solutions using finite element method analysis accounting for the laser pulse width . Experiments are performed which validate the theoretical model and regression fitting is performed to obtain the thermal diffusivity and the linear thermal expansion coefficient of the samples. The values obtained for these properties are in agreement with literature data. The technique is shown to be useful for quantitative determinations of the physics properties of metals with high thermal diffusivity.

Sumário

R	Resumo				
\mathbf{A}	bstra	let	iii		
1	Introdução		1		
	1.1	Fenômenos Fototérmicos	1		
	1.2	Breve Abordagem Histórica	3		
	1.3	Objetivos Gerais	6		
2	Esp	ectroscopia de Espelho Térmico	8		
3	Per	fil de Temperatura	10		
	3.1	Equação de Difusão de Calor	10		
	3.2	Perfil de Temperatura no Espaço das Transformadas Integrais	13		
	3.3	Perfil de Temperatura no Espaço $r\hbox{-} z\hbox{-} t$	14		
	3.4	Comparação entre Modelos Analítico e Numéricos	15		
4	Per	Perfil de Deslocamento 2			
	4.1	Solução Particular	23		
	4.2	Solução Homogênea	23		
	4.3	Deslocamento Superficial	24		
	4.4	Comparação entre Modelos Analítico e Numéricos	26		
5	Mu	dança de Fase e Sinal de Espelho Térmico	30		
6	Pro	Procedimentos Experimentais			
	6.1	Montagem	34		
	6.2	Determinação dos Parâmetros Geométricos da Montagem	36		
	6.3	Amostras	39		
7	Res	Resultados e Discussão 4			

8	Conclusão	50
A	Feixes Gaussianos	52
в	Intensidade do Feixe de Prova	57
\mathbf{C}	Espectroscopia UV-Vis: Reflexão com Esfera Integradora	61
	C.1 Esfera Integradora	61
	C.1.1 Teoria	61
	C.1.2 Reflectância e Transmitância	64
D	Procedimentos Utilizados nos Cálculos Numéricos	67
\mathbf{E}	Comandos de Ajuste	70

Capítulo

Introdução

1.1 Fenômenos Fototérmicos

Fenômenos fototérmicos são efeitos altamente relacionados ao nosso dia-a-dia. O simples fato de recebermos em nossa pele a incidência de raios solares já traduz o efeito fototérmico. Isso se deve ao fato da luz absorvida pela pele ser parcialmente convertida em calor devido aos vários processos de relaxação envolvidos.

O princípio básico do efeito fototérmico é a conversão de luz absorvida em calor dentro de um determinado material. A mudança de temperatura induzida remete a mudança de outros parâmetros termodinâmicos do material e no meio ao seu redor. Além da geração de energia térmica na amostra, parte da luz absorvida pode gerar outros efeitos não térmicos na amostra como luminescência [1, 2], reação fotoquímica [3], e efeito fotoelétrico [4] (Figura 1.1).

As técnicas fototérmicas são métodos que utilizam o processo de absorção de luz e conseqüentemente o aquecimento de uma amostra para o estudo de suas propriedades físicas. Técnicas espectroscópicas baseadas no efeito fototérmico podem ser classificadas como métodos indiretos; não são utilizadas para medir a luz que é diretamente incidida em um material, mas sim para estudar os efeitos gerados a partir da absorção de luz que induz aquecimento na amostra. Por esta característica, os métodos espectroscópicos baseados no efeito fototérmicos podem ser considerados mais sensíveis que os métodos espectroscópicos relacionados à transmissão de luz [5], por exemplo.

Dentre às técnicas fototérmicas empregadas para a obtenção de parâmetros físicos de amostras, podemos destacar a espectroscopia fotoacústica [6–8], deflexão fototérmica ou efeito miragem, deformação/deslocamento fototérmico e divergência fototérmica [9–24], interferometria fototérmica [25], radiometria fototérmica [26,27], espectroscopia de Lente Térmica (LT) [3,28–33] e espectroscopia de Espelho Térmico (ET) [34–55]. Cada uma destas técnicas está diretamente relacionada a algum processo de mudança de parâmetro termodinâmico no material. A Figura 1.1 mostra a relação entre os processos que podem ocorrer durante o processo de absorção de luz e as técnicas relacionadas a cada parâmetro termodinâmico alterado.



Figura 1.1: Esquema relacionando os processos ocorridos devido a absorção de luz por um material, as grandezas físicas afetadas e técnicas utilizadas para medir propriedades através das mudanças ocorridas no material.

Como visto na Figura 1.1, a luz absorvida aquece o material devido aos processos de relaxação térmica; este aquecimento provoca uma mudança nos parâmetros físicos da amostra como, por exemplo, a densidade, induzindo uma que expansão ou contração do material - se este for sólido - e consequentemente o índice de refração. A contração ou expansão gera uma variação de pressão no meio que está ao seu redor provocando ondas acústicas. Deste modo, a utilização das técnicas fototérmicas se mostra eficiente devido a grande possibilidade de escolha de qual o melhor método a ser utilizado para determinadas condições de amostras e equipamentos. Por exemplo, a utilização da espectroscopia fotoacústica está relacionada com a variação de pressão do fluido em que uma amostra está imersa. A variação de pressão pode ser captada por um pequeno microfone acoplado ao sistema; a utilização da espectroscopia de espelho térmico está relacionada ao deslocamento superficial do material. A deformação no material é induzida devido o aquecimento via laser. Um segundo laser incidido sobre a superfície é utilizado para provar o efeito.

1.2 Breve Abordagem Histórica

A espectroscopia de Espelho Térmico (ET) foi desenvolvida em meados de 2007 por pesquisadores do GEFF [34, 35, 39]. Na técnica são utilizados dois feixes laser, sendo um laser com maior intensidade utilizado para gerar o efeito (laser de excitação), e outro menos intenso é utilizado para monitorar o efeito (laser de prova). A técnica de ET é baseada no monitoramento da intensidade do feixe de prova que é refletido pela superfície da amostra até um detector. A deformação superficial age como um elemento óptico para o laser de prova, ou seja, se a amostra sofre uma expansão (contração) o laser de prova sofre uma divergência (convergência), analogamente quando refletido por um espelho convexo (concavo). O raio do feixe de prova na superfície da amostra usualmente é maior que o raio do laser de excitação no mesmo ponto.

No entanto, é valido ressaltar que técnicas semelhantes, utilizando o arranjo experimental de dois feixes laser e que como na ET são baseadas na deformação superficial da amostra, foram desenvolvidas anteriormente por outros pesquisadores. São exemplos, a Espectroscopia de Deslocamento Fototérmico e a Deformação Fototérmica [17, 18, 20]. Nestes casos, o feixe de prova possui um raio menor que o do feixe de excitação na amostra e fica deslocado do centro do feixe de excitação à uma distância que deve ser bem conhecida. O laser de prova é então defletido por um ângulo proporcional ao deslocamento da superfície. O feixe de prova pode ser monitorado por um sensor de posição. O sinal final obtido é proporcional ao deslocamento do feixe de prova em relação a sua posição inicial antes da amostra ser excitada. O alinhamento dos feixes nesta técnica se torna trabalhoso devido as posições relativas entre eles ser de grande importância na amplitude do sinal obtido.

Em 1990, Kuo e Munidasa [25] desenvolveram uma técnica em que o feixe de prova refletido pela superfície da amostra é maior que o diâmetro do efeito termicamente induzido. Deste modo o sinal obtido é proporcional a intensidade das sobreposições das frentes de onda gerando um padrão de anéis de Newton.

Em 1992, Saito e colaboradores [21] desenvolveram a técnica conhecida como Divergência Fototérmica. Nesta técnica o feixe de prova deveria ser maior que o feixe de excitação na superfície da amostra. A partir do princípio que os feixes laser utilizados são Gaussianos, a deformação induzida na amostra deveria seguir o perfil Gaussiano. O sinal é obtido a partir da subtração da intensidade do feixe refletido pela superfície antes e depois de ser deformada.

Wu e colaboradores [56] propuseram a denominada Lente Térmica de Superfície em 1996. O método é baseado na utilização de um feixe de prova de igual ou maior diâmetro do que o feixe de excitação na superfície da amostra. A técnica possui grande sensibilidade como a Espectroscopia de Deslocamento Fototérmico, porém com a vantagem de ter alinhamento mais preciso devido à dimensão do feixe de prova.

Com a utilização do feixe de prova com diâmetro maior que o diâmetro do feixe de excitação, a técnica de ET se torna uma técnica mais simples que as citadas acima. A técnica é remota, ou seja, não há contato direto entre a amostra e o sensor que detecta o efeito. É sensível e não destrutiva, baseada na análise temporal da deformação superficial de uma amostra, ocasionada pela absorção de luz pela amostra que é convertida em calor. A partir da deformação ocorrida, podemos obter propriedades físicas de materiais como, por exemplo, a difusividade térmica e coeficiente de expansão térmica linear.

Entre os trabalhos que foram importantes para o desenvolvimento da técnica de ET, foi o de Li [20] um dos que mais contribuíram. Neste trabalho foram obtidas soluções numéricas para as equações de difusão de calor e equação termoelástica. A partir das soluções, foi demonstrado que para deformações em curtos intervalos de tempo, o deslocamento superficial pode ser considerado como um processo quase-estático, desconsiderando a geração de ondas superficiais na amostra,. Esta aproximação simplifica a equação termoelástica; isso possibilita, com as condições de contorno apropriadas, a solução analítica do problema.

Vários trabalhos tem sido publicados utilizando a técnica de ET. O primeiro trabalho realizado sobre o assunto em 2007 por Astrath e colaboradores [34], mostrou o desenvolvimento de um modelo simplificado para a técnica de ET para amostras fracamente absorvedoras ou semitransparentes¹. A equação de difusão de calor foi resolvida para uma amostra excitada por um feixe de laser contínuo Gaussiano no modo TEM_{00}^2 . A equação termoelástica foi resolvida utilizando a aproximação de amostra semi-infinita e a intensidade do feixe de prova no campo distante foi obtida utilizando a teoria de Difração de Fresnel. Experimentos foram realizados e os autores concluíram que a técnica seria promissora para a obtenção de parâmetros termo-ópticos e mecânicos de amostras semitransparentes.

Em 2008, Malacarne e colaboradores [35] apresentaram a teoria e experimentos para a técnica de ET em amostras altamente absorvedoras³ utilizando como laser de excitação um laser contínuo Gaussiano no modo TEM_{00} . Neste trabalho, os autores obtiveram valores da eficiência quântica de fluorescência das amostras. Concluíram que a técnica teria boa funcionalidade para a medida de parâmetros termo-ópticos em amostras vítreas com alto coeficiente de absorção óptica.

Sato e colaboradores em 2008 [37] e Sato [39] em 2009 fizeram uma abordagem teórica e experimental geral sobre a técnica de ET em amostras com coeficientes de absorção

¹Consideraremos como fracamente absorvedores materiais com coeficiente de absorção óptica de até aproximadamente $1 \times 10^3 m^{-1}$ [37].

²Laser com perfil de intensidade radial puramente Gaussiano (Ver Apêndice A).

³Consideraremos como altamente absorvedores materiais com coeficiente de absorção óptica maiores que $1 \times 10^7 m^{-1}$ [37].

óptica diferentes, sendo elas desde semitransparentes até opacas, utilizando o mesmo tipo de excitação dos trabalhos anteriores. A influência dos parâmetros experimentais na sensibilidade da técnica foi discutida.

Utilizando como laser de excitação um feixe contínuo, porém com perfil radial tipo degrau ou "Top Hat", Astrath e colaboradores [36,38,41,47] mostraram que a técnica de ET pode também ser aplicada a outro tipo de perfil radial como excitação, para todos os intervalos de coeficientes de absorção óptica. Obtiveram, juntamente com a técnica de LT, parâmetros termo-ópticos, dentre eles a eficiência quântica de fluorescência de alguns vidros, e parâmetros mecânicos em bom acordo com a literatura.

Em 2009 Belançon [40] apresentou uma dissertação de mestrado onde realizou análises das técnicas de LT e ET para amostras desde fracamente absorvedoras até opacas sujeitas a excitação com laser contínuo Gaussiano no modo TEM_{00} . Propôs, juntamente com colaboradores [42], uma solução alternativa e mais simples da equação de difusão de calor para amostras que apresentam absorção que seguem a lei de Beer. Estudou os erros induzidos pela aproximação para amostras com diferentes coeficientes de absorção óptica e diferentes parâmetros geométricos. Ainda neste ano, Bianchi [45] apresentou uma dissertação de mestrado em que a técnica de ET foi utilizada para a aplicação no estudo de propriedades termo-ópticas e mecânicas de diferentes tipos de aço inox. A aplicação da técnica em uma liga metálica de NiTi (Nitinol), para a caracterização de transição de fase da amostra foi realizada por Pezarini em 2011 em sua dissertação de mestrado [48].

O estudo de polímeros sólidos foi realizado por Sierra [46], juntamente com as técnicas de LT, interferometria óptica, calorimetria de relaxação térmica, varredura calorimétrica diferencial⁴ e dilatometria, para a determinação de propriedades físicas em temperaturas até a região de transição vítrea. Parâmetros termo-ópticos e também a polarizabilidade eletrônica foram determinados.

Nos trabalhos referentes a técnica de ET descritos acima, foi considerada a aproximação semi-infinita para as amostras, ou seja, as dimensões azimutais das amostras são grandes comparadas aos efeitos de deformação superficial. No entanto, dependendo de como a amostra absorve a luz incidida sobre ela e quão espessa é, devem ser considerados os efeitos que acontecem na superfície oposta à superfície de incidência do laser. Neste sentido, Astrath e colaboradores [43, 51, 53] mostraram o efeito de amostra finita e resolveram as equações de condução de calor e termoelástica considerando excitação com um laser de perfil Gaussiano no modo TEM_{00} contínuo. Por meio de simulações e experimentos mostraram a aplicabilidade dos modelos, ou seja, determinaram parâmetros nos quais permitem verificar se os modelos semi-infinito ou finito devem ser usados.

Modelos considerando o acoplamento térmico entre a amostra e o fluido que a envolve foram desenvolvidos por Malacarne e colaboradores [44, 49] utilizando um laser contínuo Gaussiano no modo TEM_{00} . A proposta destes trabalhos é a possível utilização das téc-

⁴Traduzido do Inglês de "Differential Scanning Calorimetry"(DSC).

nicas de ET e LT para o estudo de parâmetros físicos de fluidos fracamente absorvedores. Experimentos realizados por Lukasievicz e colaboradores [50] confirmaram que a técnica possui grande potencial para a determinação de propriedades, tanto de amostras sólidas como de fluidos.

A utilização de um laser de perfil Gaussiano pulsado na técnica de ET em amostras de vidro também foi descrita por Lukasievicz e colaboradores [52]. O efeito do acoplamento térmico utilizando feixes contínuos e pulsados, em diferentes formas de pulso, foram tratados teoricamente por Lukasievicz em sua tese de doutorado em 2014 [55], para amostras fracamente absorvedoras e moderadamente absorvedoras⁵. Experimentos com excitação pulsada foram realizados apenas para amostras com baixa absorção óptica. A difusividade térmica e outros parâmetros termo-ópticos e mecânicos foram determinados com grande precisão comparados aos valores de referência daquele trabalho.

Por fim, Bianchi e colaboradores [54] utilizaram a técnica de ET com auxilio de outras técnicas para determinar quantitativamente a absorção de estado excitado e processos de relaxação em vidro aluminossilicato de cálcio dopado com Térbio trivalente. Um modelo descrevendo os processos de excitação e emissão "upconvesion" foi desenvolvido e utilizado para interpretar os resultados obtidos a partir da técnica de ET. A eficiência quântica de fluorescência também foi determinada através da técnica.

1.3 Objetivos Gerais

Apesar do grande número de trabalhos publicados com a técnica de ET, nenhum se refere a materiais com difusividade térmica da ordem de $10^{-5}m^2/s$ - valores comumentemente obtidos para metais. Materiais metálicos como o manganês e aço inox foram estudados utilizando a técnica, no entanto a difusividade térmica destes materiais é da ordem de $10^{-6}m^2/s$. No entanto, outras técnicas baseadas no deslocamento superficial [14,18,24], são utilizadas e garantem bom acordo em seus resultados com a literatura. Porém, estas técnicas não são capazes de determinar algumas propriedades dos materiais como a Razão de Poisson ou até mesmo o coeficiente de expansão térmica linear. A utilização de um laser pulsado na técnica de ET para a medida de materiais com difusividades térmicas da ordem de $10^{-5}m^2/s$ é proposta devido ao tempo de difusão térmica do material. Modulação mecânica por *chopper* ou *shutter* geralmente possuem tempos de abertura (tempo em que o feixe demora para ser totalmente incidido sobre a amostra) da ordem de microssegundos, podendo levar a grandes erros nos resultados finais.

Devido a grande aplicabilidade da técnica de ET, o presente trabalho visa dar continuidade ao trabalho iniciado por Lukasievicz [55] onde é estudado o perfil de temperatura gerado por um feixe laser pulsado Gaussiano no modo TEM_{00} em amostras opacas, para

⁵Consideraremos moderadamente absorvedores materiais que possuam coeficiente de absorção óptica maiores que $1 \times 10^3 m^{-1}$ e menores que $1 \times 10^{-7} m^{-1}$.

a obtenção de parâmetros termo-ópticos e mecânicos.

Neste trabalho, o modelo considerado completo, ou seja, o modelo que descreve o sistema físico com maior proximidade ao caso real, tem até agora apenas a possibilidade de solução numérica. Devido a isso, aproximações serão feitas com o propósito de obtermos equações simples que descrevem com boa aproximação o sistema físico estudado. O modelo aproximado será confrontado com as soluções numéricas a fim de verificarmos a validade e a aplicabilidade das aproximações assumidas.

Como modelo completo, assumiremos uma amostra finita que tem absorção óptica seguindo a lei de Beer⁶, sujeita a um feixe de excitação com perfil de intensidade Gaussiano no modo TEM_{00} e com dependência temporal Gaussiana [52]. O perfil de deformação neste caso deverá sofrer influências de ondas geradas na superfície devido ao pulso do laser. No entanto, as aproximações serão feitas assumindo uma amostra semi-infinita⁷, opaca, e que o pulso do laser pode ser assumido como uma Delta de Dirac no tempo. O deslocamento superficial da amostra é assumido não sofrer influência pelas ondas geradas pelo pulso do laser. Deste modo a obtenção de uma solução semi analítica (que será chamada durante todo o trabalho de analítica por simplicidade) se torna viável.

O desenvolvimento teórico do modelo de espelho térmico para amostras opacas será obtido encontrando a expressão para a variação da temperatura na amostra a partir da solução da equação de difusão de calor. Uma expressão para o deslocamento superficial será obtida por meio da solução da equação termoelástica. O sinal do feixe de prova no fotodetector em campo distante será obtido através da integral de difração de Fresnel.

Para os cálculos numéricos foi utilizado o método dos elementos finitos (MEF) utilizando o software *COMSOL Multiphysics*. Todas as soluções analíticas foram realizadas utilizando o software *Wolfram Mathematica*.

A verificação da validade do modelo teórico proposto será realizada a partir de ajustes utilizando regressão, com o auxilio do software *Wolfram Mathematica*, nos dados experimentais. Ainda a partir dos ajustes serão obtidos os valores da difusividade térmica e o coeficiente de expansão térmica linear de cada amostra. Os experimentos serão realizados em quatro diferentes amostras de metal. Pulsos na escala de nanosegundos, incididos com frequências de aproximadamente 2Hz até 5Hz, ou seja, 2 e 5 pulsos por segundo, serão utilizados como excitação.

⁶A Lei de Beer-Lambert considera que a intensidade de luz incidida em um determinado material decai exponencialmente com a espessura do material, ou seja exp $[-\beta z]$ em que β é o coeficiente de absorção óptica ou a concentração do material.

 $^{^7{\}rm O}$ efeito de deslocamento na superfície em que é incidido os las
ers não afeta a superfície oposta da amostra.

Capítulo

Espectroscopia de Espelho Térmico

Antes de qualquer procedimento experimental, o desenvolvimento teórico que está por trás da técnica experimental deve ser conhecido com o objetivo de sabermos a aplicabilidade e em quais condições devemos utilizar a técnica. Como mencionado anteriormente no Capítulo 1, na técnica de ET são utilizados dois feixes laser incididos sobre a amostra: um feixe, denominado laser de excitação, que possui um comprimento de onda que a amostra absorva a maior quantidade de energia depositada possível, é utilizado para gerar o efeito de ET. Parte ou toda esta energia absorvida é convertida em energia térmica, induzindo um gradiente de temperatura na amostra, ocasionando a expansão ou contração local da amostra. Um outro feixe, chamado de laser de prova, menos intenso que o feixe de excitação e em um comprimento de onda em que a amostra não seja tão absorvedora, é incidido na amostra e refletido em um fotodetector para provar o efeito. A Figura 2.1 mostra a disposição dos feixes na superfície da amostra.

A superfície da amostra é posicionada à uma distância Z_1 da cintura do feixe de prova (com raio ω_{0p}). Na posição da superfície da amostra o feixe de excitação possui um raio ω_{0e} e o feixe de prova possui um raio ω_{1p} . O fotodetector, que detecta a variação da intensidade do feixe de prova em função do tempo, fica localizado à uma distância Z_2 da superfície da amostra. É válido ressaltar que apesar da simplicidade da técnica, alguns cuidados devem ser tomados em relação à geometria da montagem e às dimensões da amostra [37,51]:

- A dimensão radial da amostra é muito maior que a região afetada pelo efeito;
- O deslocamento da superfície da amostra é muito menor que a sua espessura.
- A distância entre a superfície da amostra e o fotodetector que mede a intensidade do feixe de prova deve ser muito maior comparada com a distância confocal do feixe de prova¹.

¹Distância confocal é a distância em que o raio do feixe ao longo de sua propagação é aproximadamente igual ao raio da cintura (Ver Apêndice A, Equação (A.20)).



Figura 2.1: Representação da posição da amostra em relação aos feixes na técnica de ET. Z_1 é a distância entre o foco do feixe de prova (com raio ω_{0p}) e a superfície da amostra, ω_{0e} é o raio do feixe de excitação na superfície da amostra, ω_{1p} é o raio do feixe de prova na superfície da amostra e Z_2 é a distância entre a amostra e o fotodetector.

A variação de temperatura na amostra induzida pelo feixe laser deve ser obtida resolvendo a equação de difusão de calor, assumindo as condições de contorno e a condição inicial convenientes. O deslocamento superficial causado pela mudança não homogênea da temperatura é obtido a partir da solução da equação termoelástica. A intensidade do feixe de prova no fotodetector é obtida a partir da expressão para a variação da fase induzida em seu campo elétrico pelo efeito de ET, com o auxílio da integral de difração de Fresnel.

Capítulo

Perfil de Temperatura

A variação de temperatura em um dado material, assim como a concentração de um certo gás se difundindo em uma determinada região podem ser descritos pela equação de difusão. A equação que descreve a variação de temperatura no material é a equação de difusão de calor. Estudaremos materiais que obedecem a lei de Fourier para a variação de temperatura, ou seja, não há termos de onda na equação de difusão de calor.

3.1 Equação de Difusão de Calor

Quando incidimos um feixe laser em um material, parte da luz absorvida é convertida em calor. O calor se difunde pela amostra gerando um gradiente de temperatura. A variação de temperatura na amostra é dada pela solução da equação de difusão de calor, que é dada por [57]

$$\frac{\partial T(r,z,t)}{\partial t} - D_{th} \nabla^2 T(r,z,t) = Q(r,z,t), \qquad (3.1)$$

em que T(r, z, t) é expressão para a variação da temperatura na amostra, ∇^2 é o operador Laplaciano, D_{th} é a difusividade térmica do material definida por $D_{th} = k/(\rho c_p)$, sendo k a condutividade térmica, ρ a densidade e c_p o calor específico a pressão constante do material. O termo de fonte Q(r, z, t), pode ser escrito como [35,52]

$$Q(r, z, t) = Q(r)Q(z)Q(t), \qquad (3.2)$$

em que, para um feixe laser Gaussiano no modo TEM_{00} , o termo de fonte radial é [34,35,37]

$$Q(r) = Q_0 \exp\left[-2\frac{r^2}{\omega_{0e}^2}\right],\tag{3.3}$$

com,

$$Q_0 = \frac{2E_0(1-R)A_e\phi}{\pi\rho c_p\omega_{0e}^2},$$
(3.4)

em que ω_{0e} é o raio do feixe de excitação na superfície da amostra, E_0 a energia do pulso que chega na superfície da amostra, R a parcela de energia não absorvida pela amostra devido a reflexão especular e difusa, A_e o coeficiente de absorção óptica da amostra no comprimento de onda do feixe de excitação e ϕ a taxa de energia luminosa convertida em calor.

Para descrever o perfil temporal do termo de fonte, consideraremos um pulso Gaussiano no tempo, com uma largura característica τ e tempo de irradiância máxima ξ [52]

$$Q(t) = \frac{2 \exp\left[-\frac{(t-\xi)^2}{\tau^2}\right]}{\sqrt{\pi}\tau \left(\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{\tau}\right) + 1\right)},\tag{3.5}$$

sendo $\operatorname{erf}(x)$ a função erro. Neste caso, a Eq. (3.5) foi normalizada de 0 até ∞ devido a consideração de que o pulso começa em um tempo t = 0 [52].

Assumindo que a absorção da luz pela amostra segue a lei de Beer-Lambert, o termo de fonte axial é

$$Q(z) = \exp\left[-A_e z\right]. \tag{3.6}$$

Sendo assim, substituindo (3.2),(3.3),(3.5) e (3.6) em (3.1), a equação diferencial para o perfil de temperatura da amostra estudada se torna

$$\frac{\partial T(r,z,t)}{\partial t} - D_{th} \nabla^2 T(r,z,t) = Q_0 \exp\left[-2\frac{r^2}{\omega_{0e}^2}\right] \exp\left[-A_e z\right] \frac{2\exp\left[-\frac{(t-\xi)^2}{\tau^2}\right]}{\sqrt{\pi}\tau \left(\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{\tau}\right) + 1\right)}.$$
 (3.7)

A Eq. (3.7) pode ser considerada como a equação diferencial que melhor descreve a variação da temperatura em uma amostra no caso estudado. Este modelo, por simplicidade, será denominado com Modelo Completo ao longo deste trabalho. No entanto, este modelo não apresenta solução analítica. Deste modo, devemos fazer algumas considerações para conseguir tratar esta equação analiticamente:

• Quando a largura do pulso for muito pequena comparada ao tempo de relaxação térmica da amostra, ou seja, quando o tempo em que o calor leva para se difundir totalmente pela amostra, de modo que a amostra volte a sua temperatura inicial, for muito grande comparado a largura do pulso, o pulso poderá ser considerado como uma Delta de Dirac no tempo¹, de modo que o termo de fonte temporal se torna

$$Q(t) = \delta(t). \tag{3.8}$$

• Devido o alto coeficiente de absorção óptica para o comprimento de onda utilizado no feixe de excitação, consideraremos que a absorção da luz pela amostra acontece

¹Considerando a função Gaussiana como uma distribuição podemos escrever [58] $\delta(x) = \lim_{\sigma \to 0} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2} \right] \right]$, sendo σ o desvio padrão da variável x.

totalmente na superfície, de modo que² [37]

$$Q(z) = \frac{2}{A_e}\delta(z). \tag{3.9}$$

A partir das considerações feitas acima podemos reescrever a equação de difusão de calor para uma amostra opaca como

$$\frac{\partial T(r,z,t)}{\partial t} - D_{th} \nabla^2 T(r,z,t) = Q_0 \exp\left[-2\frac{r^2}{\omega_{0e}^2}\right] \frac{2}{A_e} \delta(z)\delta(t).$$
(3.10)

Considerando que a amostra é radialmente infinita, de modo que a variação da temperatura não seja afetada pela expansão, $T(r \to \infty, z, t) = 0$ [34]; que não há troca de calor entre a amostra e o fluido em seu redor, $(\partial T(r, z, t)/\partial z)|_{z=0} = 0^3$; e que antes da incidência do feixe laser na amostra não há variação na temperatura, T(r, z, 0) =0; podemos obter a solução da equação de difusão de calor através das transformadas integrais [59–61].

A escolha das transformadas integrais é feita de forma com que cada transformada seja satisfeita e conveniente pelas condições iniciais ou de contorno impostas pela variável a ser transformada. Deste modo, usaremos a transformada de Laplace⁴ na variável temporal devido o tempo ser uma variável de valor nulo ou positivo por definição, e também devido a condição inicial do nosso problema. A transformada de Fourier Cosseno⁵ será utilizada na variável azimutal devido a condição de amostra semi-infinita e a condição de que não há fluxo de calor com o meio em torno da amostra. A transformada de Hankel⁶ será utilizada na variável radial devido a condição de contorno de amostra radialmente infinita.

 $[\]overline{ ^{2}\text{Quando } A_{e} \to \infty, \text{ temos que } \lim_{A_{e} \to \infty} [A_{e} \exp \left[-A_{e} z\right]] = 2\delta(z). \text{ Deste modo podemos escrever,} \\ \exp \left[-A_{e} z\right] \to \frac{2\delta(z)}{A_{e}} \text{ [55].} \\ ^{3}\text{Esta aproximação pode ser usada para metais devido a condutividade térmica destes materiais ser$

maior que a condutividade térmica do ar, assim a contribuição de calor trocado entre a amostra e o fluido pode ser desprezada [44, 49, 55].

⁴A transformada de Laplace de uma função f(t) é definida como $\mathcal{L}{f(t)} = F(s) = \int_0^\infty f(t) \exp\left[-st\right] dt$, e sua inversa $\mathcal{L}^{-1}{F(s)} = f(t) = \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} F(s) \exp\left[-st\right] ds$, sendo c um número real positivo [60, 61].

⁵A transformada de Fourier-Cosseno de uma função f(z) é definida por $\mathcal{F}_c\{f(z)\} = F(\lambda) =$

 $[\]sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty f(z) \cos [\lambda z] dz \text{ e sua inversa } \mathcal{F}_c^{-1}\{F(\lambda)\} = f(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty F(\lambda) \cos [\lambda z] d\lambda \text{ [59-61].}$ ⁶A transformada de Hankel de uma função f(r) é definida como $\mathcal{H}\{f(r)\} = F(\alpha) = \int_0^\infty f(r) J_0(r\alpha) r dr$ e sua inversa $\mathcal{H}^{-1}\{F(\alpha)\} = f(r) = \int_0^\infty f(r) J_0(r\alpha) \alpha d\alpha$, em que J_n é a função de Bessel de primeira espécie [60].

3.2 Perfil de Temperatura no Espaço das Transformadas Integrais

Aplicando a Transformada de Laplace na variável temporal obtemos

$$\mathcal{L}\{T(r,z,t)\} = T(r,z,s), \qquad (3.11)$$

$$\mathcal{L}\left\{\frac{\partial T(r,z,t)}{\partial t}\right\} = sT(r,z,s) - T(r,z,0), \qquad (3.12)$$

$$\mathcal{L}\{\delta(t)\} = 1. \tag{3.13}$$

Lembrando que o segundo termo depois da igualdade da Eq. (3.12) é nulo devido à condição inicial. Substituindo (3.11), (3.12) e (3.13) em (3.10) obtemos

$$sT(r, z, s) - D_{th} \nabla^2 T(r, z, s) = Q_0 \exp\left[-2\frac{r^2}{\omega_{0e}^2}\right] \frac{2}{A_e} \delta(z).$$
(3.14)

Sabendo que o Laplaciano em coordenadas cilíndricas⁷, axialmente simétrico é dado por 2^{2} 1 2 (2) 2^{2}

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \qquad (3.15)$$

podemos escrever a Eq. (3.14) na forma

$$sT(r,z,s) - D_{th}\left(\nabla_r^2 T(r,z,s) + \frac{\partial^2 T(r,z,s)}{\partial z^2}\right) = Q_0 \exp\left[-2\frac{r^2}{\omega_{0e}^2}\right]\frac{2}{A_e}\delta(z).$$
(3.16)

Aplicando a transformada de Hankel na variável r, temos como resultado

$$\mathcal{H}\{T(r,z,s)\} = T(\alpha,z,s), \tag{3.17}$$

$$\mathcal{H}\{\nabla^2 T(r,z,s)\} = -\alpha^2 T(\alpha,z,s), \qquad (3.18)$$

$$\mathcal{H}\left\{Q_0 \exp\left[-2\frac{r^2}{\omega_{0e}^2}\right]\right\} = \frac{Q_0\omega_{0e}^2}{4} \exp\left[-\frac{1}{8}\alpha^2\omega_{0e}^2\right],\tag{3.19}$$

de modo que a equação de difusão de calor no espaço de Hankel-z-Laplace pode ser escrita como

$$sT(\alpha, z, s) - D_{th}\left(-\alpha^2 T(\alpha, z, s) + \frac{\partial^2 T(\alpha, z, s)}{\partial z^2}\right) = \frac{Q_0 \omega_{0e}^2}{4} \exp\left[-\frac{1}{8}\alpha^2 \omega_{0e}^2\right] \frac{2}{A_e}\delta(z). \quad (3.20)$$

A transformada Fourier-Cosseno na variável z, devido à condição de amostra semi-infinita

⁷A escolha do Laplaciano em coordenadas cilindricas é válida devido a simetria do problema.

e da condição de fluxo de calor nulo em z=0nos garante

$$\mathcal{F}_c\{T(\alpha, z, s)\} = T(\alpha, \lambda, s), \tag{3.21}$$

$$\mathcal{F}_c\left\{\frac{\partial^2 T(\alpha, z, s)}{\partial z^2}\right\} = -\lambda^2 T(\alpha, \lambda, z), \qquad (3.22)$$

$$\mathcal{F}_c\left\{\frac{2}{A_e}\delta(z)\right\} = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{1}{A_e}.$$
(3.23)

Assim, é possível escrever a variação de temperatura da amostra no espaço Hankel-Fourier Cosseno-Laplace como

$$T(\alpha, \lambda, s) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{A_e} \frac{Q_0}{(s + D_{th}(\alpha^2 + \lambda^2))} \frac{\omega_{0e}^2}{4} \exp\left[-\frac{1}{8}\alpha^2 \omega_{0e}^2\right].$$
 (3.24)

3.3 Perfil de Temperatura no Espaço r-z-t

A partir da solução para a variação da temperatura na amostra no espaço das transformadas integrais, podemos encontrar, fazendo as transformadas inversas, a variação da temperatura na amostra no espaço r, $z \in t$. Aplicando inicialmente a transformada inversa de Laplace na parte dependente da variável s obtemos

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{1}{\left(s+D_{th}(\alpha^2+\lambda^2)\right)}\right\} = \exp\left[-tD_{th}(\alpha^2+\lambda^2)\right],\tag{3.25}$$

permitindo escrever a variação de temperatura no espaço de Hankel-Fourier-Cosseno-t como

$$T(\alpha,\lambda,t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{Q_0}{A_e} \frac{\omega_{0e}^2}{4} \exp\left[-\alpha^2 \left(tD_{th} + \frac{\omega_{0e}^2}{8}\right)\right] \exp\left[-tD_{th}\lambda^2\right].$$
 (3.26)

Fazendo a transformada inversa de Fourier-Cosseno na parte dependente da variável $\lambda,$

$$\mathcal{F}_{c}^{-1}\left\{\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{1}{A_{e}}\exp\left[-tD_{th}\lambda^{2}\right]\right\} = \frac{\exp\left[-\frac{z^{2}}{4D_{th}t}\right]}{A_{e}\sqrt{\pi D_{th}t}},$$
(3.27)

a variação da temperatura no espaço de Hankel-z-t pode ser escrita como

 α

$$T(\alpha, z, t) = \frac{Q_0 \omega_{0e}^2}{4} \exp\left[-\alpha^2 \left(tD_{th} + \frac{\omega_{0e}^2}{8}\right)\right] \frac{\exp\left[-\frac{z^2}{4D_{th}t}\right]}{A_e \sqrt{\pi D_{th}t}}.$$
(3.28)

Por fim, fazendo a transformada inversa de Hankel na parte dependente da variável

$$\mathcal{H}^{-1}\left\{\frac{Q_0\omega_{0e}^2}{4}\exp\left[-\alpha^2\left(tD_{th}+\frac{\omega_{0e}^2}{8}\right)\right]\right\} = \frac{Q_0\omega_{0e}^2}{4}\frac{4\exp\left[-\frac{2r^2}{8D_{th}t+\omega_{0e}^2}\right]}{8D_{th}t+\omega_{0e}^2},\tag{3.29}$$

obtemos a variação de temperatura na amostra no espaço r-z-t escrita na forma

$$T(r, z, t) = \frac{Q_0 \omega_{0e}^2}{4A_e} \frac{4 \exp\left[-\frac{2r^2}{8D_{th}t + \omega_{0e}^2}\right]}{8D_{th}t + \omega_{0e}^2} \frac{\exp\left[-\frac{z^2}{4D_{th}t}\right]}{\sqrt{\pi D_{th}t}}.$$
(3.30)

ou

$$T(r, z, t) = \frac{2Q_0}{A_e \omega_{0e} \sqrt{\pi}} \frac{\exp\left[-\frac{2r^2/\omega_{0e}^2}{(1+2t/t_c)}\right]}{(1+2t/t_c)} \frac{\exp\left[-\frac{z^2/\omega_{0e}^2}{t/t_c}\right]}{\sqrt{t/t_c}},$$
(3.31)

 $\operatorname{com} t_c = \omega_{0e}^2 / 4D_{th}.$

Com os resultados obtidos, é necessário conhecer quais os parâmetros necessários, e em quais condições a Equação (3.31) é válida. Para isso, a Equação (3.31) foi comparada com cálculos realizados por meio de MEF utilizando o modelo completo sob diferentes condições.

3.4 Comparação entre Modelos Analítico e Numéricos

A fim de validar as considerações feitas na seção "Equação de Difusão de Calor" deste capítulo, a Equação (3.31) foi comparada com cálculos numéricos da variação de temperatura em uma amostra com propriedades físicas de uma liga de alumínio UNS A96351, determinadas na Tabela 3.1 para a Eq. (3.7), ou Modelo Completo. Para isso, foi admitido que a Equação (3.7) é a que melhor descreve o sistema físico real. Os cálculos numéricos realizados por meio de MEF levaram em conta diferentes coeficientes de absorção óptica e também absorção óptica superficial. Deste modo, a suposição de absorção óptica superficial para amostras opacas pode ser validada. Este resultado, além de demonstrar que a absorção de luz pela amostra é dado em sua maioria na superfície, nos ajuda a simplificar os procedimentos numéricos diminuindo a demanda computacional para a realização das simulações. Para os dois casos numéricos a amostra teste possui um raio de 10mm e espessura de 3mm. A influência da largura do pulso também foi verificada para os casos numéricos e comparada com a solução analítica.

Tabela 3.1: Tabela com os parâmetros físicos utilizados nos cálculos numéricos e analíticos para
a variação de temperatura.

Parâmetros	Unidades	Valores
k	$Wm^{-1}K^{-1}$	176
ho	kgm^{-3}	2710
c_p	$Jkg^{-1}K^{-1}$	890
ω_{0e}	$(\times 10^{-6})m$	123
E_0	$(\times 10^{-6})J$	30

A Tabela 3.2 faz uma comparação entre as condições impostas em cada cálculo para a variação de temperatura na amostra, tanto nos casos numéricos quanto no caso analítico.

Tabela 3.2: Condições impostas nos cálculos numéricos (MEF) e analítico para a variação de temperatura. Modelo Completo corresponde ao modelo assumindo a Equação (3.7). Modelo Comp. Superficial corresponde ao modelo numérico assumindo absorção superficial. Modelo Analítico corresponde à Equação (3.30).

Parâmetro	Modelo Completo	Mod. Comp. Superficial	Modelo Analítico
Termo de Fonte Radial	$\exp\left[-\frac{2r^2}{\omega_{0e}^2} ight]$	$\exp\left[-\frac{2r^2}{\omega_{0e}^2} ight]$	$\exp\left[-\frac{2r^2}{\omega_{0e}^2}\right]$
Termo de Fonte Azimutal	$\exp\left[-A_e z\right]$	Superficial	$\frac{2}{A_e}\delta(z)$
Termo de Fonte Temporal	$\frac{2\exp\left[-\frac{(t-\xi)^2}{\tau^2}\right]}{\sqrt{\pi}\tau\left(\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{\tau}\right)+1\right)}$	$\frac{2\exp\left[-\frac{(t-\xi)^2}{\tau^2}\right]}{\sqrt{\pi}\tau \left(\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{\tau}\right) + 1 \right)}$	$\delta(t)$
Raio da Amostra	10mm	10mm	∞
Espessura da Amostra	3mm	3mm	∞

A Figura 3.1 mostra a variação da temperatura superficial da amostra em r = 0. O Modelo Completo foi calculado por meio de MEF para diferentes coeficientes de absorção óptica. Ainda para o Modelo Completo, foi calculado por meio de MEF considerando absorção óptica superficial (Modelo Completo Superficial). O Modelo Analítico foi calculado utilizando comandos padrões do software *Wolfram Mathematica*. A energia de excitação E_0 foi mantida constante para todas as curvas. A largura do pulso τ também foi mantida constante para os cálculos numéricos.



Figura 3.1: Variação da temperatura superficial em r = 0 para diferentes coeficientes de absorção óptica(linhas sólidas)(MEF), absorção óptica superficial (Quadrados) (MEF) e Eq. (3.31) (Círculos).

Os resultados apresentados na Figura 3.1 mostram que para coeficiente de absorção óptica de aproximadamente $5, 0 \times 10^7 m^{-1}$ a consideração de que a absorção da luz pela amostra acontece na superfície é válida. Notamos também que para coeficientes de absorção óptica a partir de $2, 5 \times 10^6 m^{-1}$ obtemos uma diferença de aproximadamente 20% para o valor máximo de temperatura entre os modelos Completo e Completo Superficial.

Assim, exceto no pico de temperatura, a consideração de absorção superficial também pode ser considerada válida para coeficientes de absorção óptica a partir de $2, 5 \times 10^6 m^{-1}$. Comparando os modelos Completos com o Modelo Analítico proposto, observamos que a variação de temperatura no centro da amostra converge para tempos próximos a 350ns.

A partir do resultado obtido da Figura 3.1 foram realizados cálculos da variação de temperatura utilizando os Modelos Completo, Modelo Completo Superficial e Analítico (Equação (3.31)) ao longo do raio da amostra para diferentes tempos, durante e após o pulso. O pulso utilizado nos cálculos numéricos possui largura $\tau = 15ns$ e tempo de irradiância máxima $\xi = 45ns$. O Modelo Completo foi calculado utilizando um coeficiente de absorção óptica de 5, $0 \times 10^7 m^{-1}$. Os resultados são mostrados na Figura 3.2.



Figura 3.2: Variação de temperatura superficial em função de unidades de raio r/ω_{0e} calculados por meio de MEF para coeficiente de absorção óptica de $5, 0 \times 10^7 m^{-1}$ (Círculos) e absorção óptica superficial(Linhas Sólidas).

A Figura 3.2 mostra a comparação entre cálculos numéricos por meio de MEF utilizando os Modelos Completo e Completo Superficial. Podemos observar que a variação de temperatura descrita pelos dois modelos estão em bom acordo para todos os tempos calculados. A Figura 3.3 compara o cálculo numérico por MEF do Modelo Completo Superficial com a Equação (3.31). Verificamos novamente, como na Figura 3.1, que para tempos próximos a 350*ns*, as soluções convergem a um mesmo valor de temperatura, não só no centro da amostra, mas também em toda a extensão da amostra.



Figura 3.3: Variação de temperatura superficial em função de unidades de raio r/ω_{0e} calculados utilizando o Modelo Completo Superficial (MEF) (Linhas Sólidas) e Modelo Analítico (Círculos).

A Figura 3.4 mostra a variação da temperatura superficial em r = 0. Cálculos foram realizados utilizando MEF para gerar curvas com o Modelo Completo Superficial considerando diferentes larguras de pulso τ e tempo de irradiância máxima $\xi = 3\tau$. A Equação (3.31) calculada analiticamente foi confrontada com as curvas numéricas.



Figura 3.4: Variação da temperatura superficial em r = 0 para diferentes larguras de pulsos com absorção óptica superficial(linhas sólidas)(MEF), e Eq. (3.31) (Círculos).

Os resultados obtidos na Figura 3.4 mostram que o modelo analítico proposto se aproxima do Modelo Completo conforme a largura τ do pulso diminui. Isto indica que, ao assumirmos que a largura do pulso tende a zero, ou ainda, se o tempo de relaxação

térmica observado é muito maior que a largura do pulso, a aproximação por uma Delta de Dirac pode ser considerada como uma boa aproximação.

Como visto neste capítulo, as aproximações impostas de pulso com distribuição temporal Delta de Dirac, e absorção superficial pela amostra, resultaram em uma boa aproximação na expressão final para a variação de temperatura, que pode ser resolvida analiticamente. O próximo passo a ser dado é observar o comportamento do deslocamento superficial gerado na amostra induzido pela variação de temperatura, verificando a validade do modelo proposto para a deformação superficial da amostra.

Capítulo

Perfil de Deslocamento

Quando um material é sujeito a uma variação de temperatura não uniforme, como a induzida pela absorção de luz laser por exemplo, ele sofre uma tensão e deformação, tendo suas extensões deslocadas [62,63]. A teoria da elasticidade é então utilizada para descrever a deformação causada no material. A equação que descreve a deformação dependente do tempo em uma amostra, que não sofre qualquer outra força externa, induzida pela variação de temperatura não homogênea é [55,64]

$$(1-2\nu)\nabla^{2}\mathbf{u}(r,z,t) + \nabla\left(\nabla\cdot\mathbf{u}(r,z,t)\right) = \frac{2(1+\nu)(1-2\nu)\rho}{Y}\frac{\partial^{2}\mathbf{u}(r,z,t)}{\partial t^{2}} + 2(1+\nu)\alpha_{T}\nabla T(r,z,t),$$
(4.1)

em que $\mathbf{u}(r, z, t)$ é o vetor deslocamento, ν é a razão de Poisson, α_T é o coeficiente de expansão térmica linear e Y é o módulo de Young. O vetor deslocamento \mathbf{u} está representado na Figura 4.1. O termo correspondente à segunda derivada no tempo representa a dinâmica do sistema, conhecido como termo de inércia.





Quando a variação de temperatura no material é pequena para pequenos intervalos de tempo, podemos negligenciar o termo de inércia. Assim, o problema pode ser tratado como quase-estático, assumindo que o deslocamento da área afetada é instantâneo com a variação da temperatura, que é o único termo que depende explicitamente do tempo [55, 64]. A equação a ser resolvida então é

$$(1-2\nu)\nabla^2 \mathbf{u}(r,z,t) + \nabla \left[\nabla \cdot \mathbf{u}(r,z,t)\right] = \alpha_T \nabla T(r,z,t).$$
(4.2)

Devido as considerações de que a amostra é radialmente infinita comparada às dimensões radiais do efeito, semi-infinita ao longo do eixo axial, consideraremos que apenas a superfície da amostra é livre para expandir, ou seja, os componentes de stress¹² perpendiculares à superfície em z = 0 são nulos [34],

$$\sigma_{zz} \mid_{z=0} = 0 \ e \ \sigma_{rz} \mid_{z=0} = 0. \tag{4.3}$$

No entanto, os outros componentes não são nulos [49]. Figura 4.2 mostra a representação dos componentes de stress em coordenadas cilíndricas³.



Figura 4.2: Representação dos componentes de stress em coordenadas cilíndricas.

A solução da Eq. (4.2) pode ser obtida em coordenadas cilíndricas e, para isso, é

²Para materiais isotrópicos e homogêneos, as relações entre o tensor de stress σ_{ij} e de strain ϵ_{ij} , estabelecida pela lei de Hooke é $\sigma_{ij} = \frac{Y\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}\delta_{ij}\epsilon_{kk} + 2\frac{Y}{2(1-\nu)}\epsilon_{ij} - 2(1+\nu)\alpha_T\delta_{ij}T$ [65].

¹Podemos definir o componente σ_{ij} do tensor de stress como o i-ésimo componente de força na unidade de área perpendicular ao eixo x_i [62].

³Esta definição é usada para o caso estudado devido a simetria cilíndrica do feixe de excitação Gaussiano [34]

necessário obter as soluções particular e homogênea introduzindo o potencial de deslocamento escalar Ψ e a função de Love⁴ ψ [64]. O potencial de deslocamento escalar é a solução da equação de Poisson [64],

$$\nabla^2 \Psi(r, z, t) = \alpha_T \frac{1 + \nu}{1 - \nu} T(r, z, t), \qquad (4.4)$$

e a função de Love é a solução da equação Biharmônica [64],

$$\nabla^2 \nabla^2 \psi(r, z, t) = 0. \tag{4.5}$$

Assim, podemos escrever o vetor deslocamento como a soma das soluções obtidas,

$$\mathbf{u}(r,z,t) = \overline{\mathbf{u}}(r,z,t) + \overline{\overline{\mathbf{u}}}(r,z,t), \qquad (4.6)$$

sendo $\overline{\mathbf{u}}(r, z, t)$ relacionada com a solução particular e $\overline{\overline{\mathbf{u}}}(r, z, t)$ relacionada com a parte homogênea. A condição de contorno para a superfície livre (4.3) também deve ser reescrita como [37]

$$\sigma_{zz} \mid_{z=0} = \overline{\sigma}_{zz} \mid_{z=0} + \overline{\overline{\sigma}}_{zz} \mid_{z=0} = 0$$
(4.7)

е

$$\sigma_{rz} \mid_{z=0} = \overline{\sigma}_{rz} \mid_{z=0} + \overline{\overline{\sigma}}_{rz} \mid_{z=0} = 0.$$
(4.8)

As relações dos componentes do vetor deslocamento $\mathbf{u}(r, z, t)$ com o potencial escalar e a função de Love são [64]

$$\overline{u}_z(r, z, t) = \frac{\partial \Psi(r, z, t)}{\partial z}, \qquad (4.9)$$

$$\overline{u}_r(r,z,t) = \frac{\partial \Psi(r,z,t)}{\partial r},\tag{4.10}$$

$$\overline{\overline{u}}_{z}(r,z,t) = \frac{1}{1-2\nu} \left[2(1-\nu)\nabla^{2} - \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}} \right] \psi(r,z,t)$$
(4.11)

е

$$\overline{\overline{u}}_{z}(r,z,t) = \frac{1}{1-2\nu} \frac{\partial^{2}\psi(r,z,t)}{\partial z\partial r}.$$
(4.12)

As condições sobre os componentes de stress também são necessárias para a obtenção da solução completa e são dadas por [64]

$$\overline{\sigma}_{zz} = \frac{Y}{1+\nu} \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \nabla^2 \right] \Psi(r, z, t), \qquad (4.13)$$

$$\overline{\sigma}_{rz} = \frac{Y}{1+\nu} \frac{\partial^2 \Psi(r, z, t)}{\partial r \partial z}, \qquad (4.14)$$

⁴A função de Love é um caso particular da função de Garlekin devido a simetria axial do problema [64].

$$\overline{\overline{\sigma}}_{zz} = \frac{Y}{(1+\nu)(1-2\nu)} \frac{\partial}{\partial z} \left[(2-\nu)\nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi(r,z,t),$$
(4.15)

е

$$\overline{\overline{\sigma}}_{rz} = \frac{Y}{(1+\nu)(1-2\nu)} \frac{\partial}{\partial r} \left[(2-\nu)\nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi(r,z,t).$$
(4.16)

4.1 Solução Particular

A equação de Poisson (Equação (4.4)) pode ser resolvida como explicado em [64] nas páginas 12 e 13, no entanto, devido as condições de contorno do problema, podemos aplicar as transformadas integrais para obter a solução. Escrevendo (4.4) da forma

$$\left[\nabla_r^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\Psi = \alpha_T \frac{1+\nu}{1-\nu} T(r, z, t), \qquad (4.17)$$

e aplicando as transformadas de Hankel e Fourier Cosseno obtemos

$$\Psi(\alpha, \lambda, t) = -\alpha_T \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{T(\alpha, \lambda, t)}{(\alpha^2 + \lambda^2)}.$$
(4.18)

Aplicando as transformadas inversas obtemos a expressão para o potencial escalar de deslocamento

$$\Psi(r,z,t) = -\alpha_T \frac{1+\nu}{1-\nu} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{T(\alpha,\lambda,t)}{(\alpha^2+\lambda^2)} \cos\left(\lambda z\right) J_0(\alpha r) \alpha \mathrm{d}\alpha \mathrm{d}\lambda, \tag{4.19}$$

de modo que agora podemos calcular a partir de (4.9), (4.13) e (4.14) o componente do vetor deslocamento \overline{u}_z e os componentes de stress relacionados à solução particular obtendo

$$\overline{u}_{z}(r,z,t) = -\alpha_{T} \frac{1+\nu}{1-\nu} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \frac{T(\alpha,\lambda,t)}{(\alpha^{2}+\lambda^{2})} \lambda \sin(\lambda z) J_{0}(\alpha r) \alpha d\alpha d\lambda,$$
(4.20)

$$\overline{\sigma}_{zz} = -\alpha_T \frac{Y}{1-\nu} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{T(\alpha, \lambda, t)}{\alpha^2 + \lambda^2} \alpha^2 \cos\left(\lambda z\right) J_0(\alpha r) \alpha \mathrm{d}\alpha \mathrm{d}\lambda, \tag{4.21}$$

е

$$\overline{\sigma}_{rz} = -\alpha_T \frac{1+\nu}{1-\nu} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{T(\alpha,\lambda,t)}{(\alpha^2+\lambda^2)} \alpha \lambda \sin(\lambda z) J_1(\alpha r) \alpha d\alpha d\lambda.$$
(4.22)

4.2 Solução Homogênea

Os componentes do vetor deslocamento e stress relacionados à solução homogênea podem ser calculados a partir da solução da equação Biharmônica, que é função de Love, dada por [64]

$$\psi(r, z, t) = \int_0^\infty \left[(C + \alpha z D) \exp\left[-\alpha z\right] \right] J_0(\alpha r) \mathrm{d}\alpha, \qquad (4.23)$$

em que $C \in D$ são determinadas pelas condições de contorno nos componentes de stress.

A partir das equações (4.11), (4.15), (4.16) obtemos

$$\overline{\overline{u}}_z(r,z,t) = -\frac{1}{1-2\nu} \int_0^\infty \exp\left[-z\alpha\right] (C+D(2+z\alpha-4\nu)) J_0(\alpha r) \alpha^2 \mathrm{d}\alpha, \qquad (4.24)$$

$$\overline{\overline{\sigma}}_{zz} = \frac{Y}{(1+\nu)(1-2\nu)} \int_0^\infty (C+D+Dz\alpha-2D\nu) \exp\left[-z\alpha\right] \alpha^2 J_0(\alpha r) \alpha d\alpha, \qquad (4.25)$$

e

$$\overline{\overline{\sigma}}_{rz} = \frac{Y}{(1+\nu)(1-2\nu)} \int_0^\infty (C+Dz\alpha-2D\nu) \exp\left[-z\alpha\right] \alpha^2 J_1(\alpha r) \alpha \mathrm{d}\alpha.$$
(4.26)

4.3 Deslocamento Superficial

A partir dos resultados (4.20), (4.21), (4.22), (4.24), (4.25) e (4.26), podemos encontrar a expressão para o deslocamento superficial da amostra induzido pelo feixe laser. Para isso precisamos aplicar as condições de contorno (4.7) e (4.8).

Na superfície, os stresses correspondentes a solução particular são

$$\overline{\sigma}_{zz} \mid_{z=0} = -\alpha_T \frac{Y}{1-\nu} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{T(\alpha, \lambda, t)}{\alpha^2 + \lambda^2} \alpha^2 J_0(\alpha r) \alpha \mathrm{d}\alpha \mathrm{d}\lambda, \qquad (4.27)$$

е

$$\overline{\sigma}_{rz}\mid_{z=0}=0, \tag{4.28}$$

e os correspondentes à solução homogênea são

$$\overline{\overline{\sigma}}_{zz}|_{z=0} = \frac{Y}{(1+\nu)(1-2\nu)} \int_0^\infty (C+D-2D\nu)\alpha^2 J_0(\alpha r)\alpha d\alpha, \qquad (4.29)$$

е

$$\overline{\overline{\sigma}}_{rz}|_{z=0} = \frac{Y}{(1+\nu)(1-2\nu)} \int_0^\infty (C-2D\nu)\alpha^2 J_1(\alpha r)\alpha d\alpha.$$
(4.30)

Deste modo, utilizando as Equações (4.27), (4.29) e as Equações (4.28), (4.30) determinamos as constantes da função de Love de modo que

$$C = 2D\nu \tag{4.31}$$

е

$$D = \alpha_T (1 - 2\nu) \frac{1 + \nu}{1 - \nu} \alpha^2 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \frac{T(\alpha, \lambda, t)}{\alpha^2 + \lambda^2} d\lambda.$$
(4.32)

Substituindo em (4.24) obtemos

$$\overline{\overline{u}}_{z}(r,z,t) = -\alpha_{T} \frac{1+\nu}{1-\nu} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \frac{T(\alpha,\lambda,t)}{\alpha^{2}+\lambda^{2}} (\alpha z - 2\nu + 2) \exp\left[-\alpha z\right] \alpha^{2} J_{0}(\alpha r) \mathrm{d}\lambda \mathrm{d}\alpha,$$
(4.33)

e os deslocamentos na superfície,

$$\overline{u}_z(r,0,t) = 0, \tag{4.34}$$

е

$$\overline{\overline{u}}_{z}(r,0,t) = -2\alpha_{T}(1+\nu)\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_{0}^{\infty}\int_{0}^{\infty}\int_{0}^{\infty}\frac{T(\alpha,\lambda,t)}{\alpha^{2}+\lambda^{2}}\alpha^{2}J_{0}(\alpha r)\mathrm{d}\lambda\mathrm{d}\alpha, \qquad (4.35)$$

sendo que o deslocamento superficial total é

$$u_z(r,0,t) = -2\alpha_T(1+\nu)\sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{T(\alpha,\lambda,t)}{\alpha^2 + \lambda^2} \alpha^2 J_0(\alpha r) d\lambda d\alpha.$$
(4.36)

A partir da (4.36) podemos determinar o deslocamento superficial para uma amostra opaca sujeita a um feixe de laser pulsado. Lembrando que

$$T(\alpha,\lambda,t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{Q_0}{A_e} \frac{\omega_{0e}^2}{4} \exp\left[-\alpha^2 \left(tD_{th} + \frac{\omega_{0e}^2}{8}\right)\right] \exp\left[-tD_{th}\lambda^2\right],\tag{4.37}$$

e substituindo esta expressão em (4.36), obtemos

$$u_{z}(r,0,t) = -2\alpha_{T}(1+\nu)\sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{Q_{0}}{A_{e}} \frac{\omega_{0e}^{2}}{4} \exp\left[-\alpha^{2}\left(tD_{th} + \frac{\omega_{0e}^{2}}{8}\right)\right]$$
(4.38)

$$\times \exp\left[-tD_{th}\lambda^{2}\right](\alpha^{2} + \lambda^{2})^{-1}\alpha^{2}J_{0}(\alpha r)d\lambda d\alpha,$$

ou, simplificando

$$u_{z}(r,0,t) = -2\alpha_{T}(1+\nu)\frac{2}{\pi}\frac{Q_{0}}{A_{e}}\frac{\omega_{0e}^{2}}{4}\int_{0}^{\infty}\int_{0}^{\infty}\exp\left[-\alpha^{2}\left(tD_{th}+\frac{\omega_{0e}^{2}}{8}\right)\right] \times \exp\left[-tD_{th}\lambda^{2}\right](\alpha^{2}+\lambda^{2})^{-1}\alpha^{2}J_{0}(\alpha r)d\lambda d\alpha.$$
(4.39)

Resolvendo a integral em λ obtemos

$$u_{z}(r,0,t) = -2(1+\nu)\alpha_{T}\frac{Q_{0}}{A_{e}}\frac{\omega_{0e}^{2}}{4}\int_{0}^{\infty}\exp\left[-\frac{1}{8}\alpha^{2}\omega_{0e}^{2}\right]\operatorname{erf}\left[\alpha\sqrt{D_{th}t}\right]J_{0}(\alpha r)\alpha\mathrm{d}\alpha,\qquad(4.40)$$

ou em termos de t_c ,

$$u_{z}(r,0,t) = -2(1+\nu)\alpha_{T}\frac{Q_{0}}{A_{e}}\frac{\omega_{0e}^{2}}{4}\int_{0}^{\infty}\exp\left[-\frac{1}{8}\alpha^{2}\omega_{0e}^{2}\right]\operatorname{erf}\left[\frac{\alpha\omega_{0e}\sqrt{t/t_{c}}}{2}\right]J_{0}(\alpha r)\alpha\mathrm{d}\alpha, \quad (4.41)$$

que é a equação que descreve o deslocamento superficial na amostra.

4.4 Comparação entre Modelos Analítico e Numéricos

Para verificar o comportamento do perfil de deslocamento quando uma amostra é submetida a uma excitação pulsada por um laser Gaussiano no modo TEM₀₀, foi calculado o deslocamento superficial de uma amostra opaca por meio de MEF (Modelo Completo Superficial) e analiticamente (Modelo Analítico). Utilizando o MEF foram calculadas as situações quando consideramos o termo inercial da equação termoelástica (Equação (4.1)), e quando este termo é desprezado (Equação (4.2)). Como já visto no Capítulo "Perfil de Temperatura", quando realizados os cálculos numéricos, as dimensões da amostra são finitas, e assim a condição de contorno sobre os stresses é modificada em relação ao caso resolvido analiticamente. No caso numérico, a condição de amostra livre para se expandir em z = 0, ou seja, $\sigma_{ij} = 0$, também deve ser satisfeita para a outra face da amostra, em z = L. Assim teremos $\sigma_{ij}|_{z=0,L} = 0$. O modelo proposto foi confrontado com as duas soluções numéricas. Os parâmetros utilizados para os cálculos são de uma amostra de liga de alumínio UNS A96351 e estão descritos na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Tabela com os parâmetros físicos de uma liga de alumínio UNS A96351 utilizadospara os cálculos numéricos e analíticos do deslocamento superficial.

Parâmetros	Unidades	Valores
k	$Wm^{-1}K^{-1}$	176
ho	kgm^{-3}	2710
c_p	$Jkg^{-1}K^{-1}$	890
α_T	$(\times 10^{-6})m^{-1}$	$23,\!4$
u	1	0,33
Y	GPa	69
ω_{0e}	$(\times 10^{-6})m$	123
E_0	$(\times 10^{-6})J$	30

Com a condição de contorno imposta na superfície em z = L para os modelos numéricos, e a solução assumindo ou não o termo inercial na equação termoelástica, podemos agora reescrever a Tabela 3.2 na forma da Tabela 4.2. Deste modo devemos comparar as soluções analítica e numéricas para o deslocamento superficial com o intuito de validar o modelo analítico. Os modelos numéricos levam em conta como expressão para a variação de temperatura as soluções numéricas da Equação (3.1), considerando a largura do pulso $\tau = 15ns$, e tempo de irradiância máxima $\xi = 45ns$. Os modelos numéricos consideram também, apenas absorção óptica superficial. O modelo analítico tem como expressão para a variação de temperatura a Equação (4.37) e a Equação (4.41) para o deslocamento superficial. Tabela 4.2: Condições impostas nos cálculos numéricos (MEF) e analítico para o deslocamento superficial da amostra. Mod. Comp. Sup. Inercial corresponde ao Modelo Completo considerando absorção óptica superficial para a variação de temperatura, e considerando o termo inercial na equação termoelástica. Mod. Comp. Sup. corresponde ao Modelo Completo considerando absorção superficial para a variação de temperatura, e desconsiderando o termo inercial na equação termoelástica. Modelo Analítico corresponde ao Modelo Analítico proposto.

Parâmetro	Mod. Comp. Sup. 1	Inercial Mod. Comp. Sup.	Modelo Analítico
Termo de Fonte Radial	$\exp\left[-\frac{2r^2}{\omega_{0e}^2}\right]$	$\exp\left[-\frac{2r^2}{\omega_{0e}^2}\right]$	$\exp\left[-\frac{2r^2}{\omega_{0e}^2}\right]$
Termo de Fonte Azimutal	Superficial	Superficial	$\frac{2}{A_e}\delta(z)$
Termo de Fonte Temporal	$\frac{2\exp\left[-\frac{(t-\xi)^2}{\tau^2}\right]}{\sqrt{\pi}\tau\left(\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{\tau}\right)+1\right)}$	$\frac{2\exp\left[-\frac{(t-\xi)^2}{\tau^2}\right]}{\sqrt{\pi}\tau\left(\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{\tau}\right)+1\right)}$	$\delta(t)$
Raio da Amostra	10mm	10mm	∞
Espessura da Amostra	3mm	3mm	∞
$\sigma_{zz} \mid_{sup} = 0 \in \sigma_{rz} \mid_{sup} = 0$	sup = 0, L	sup = 0, L	sup = 0
Termo Inercial	Sim	Não	Não

A Figura 4.3 mostra o deslocamento superficial em função do tempo em r = 0, para uma amostra sujeita aos parâmetros descritos na Tabela 4.1. Podemos observar que o termo inercial apenas possui grande influência no deslocamento superficial, no centro da amostra para tempos menores que 200*ns*. Deste modo, as soluções em que o termo inercial é negligenciado podem ser consideradas como boas aproximações para o sistema físico real. Comparando a solução analítica com as soluções numéricas podemos observar que para tempos menores que 50*ns*, o deslocamento superficial descrito pela solução analítica diverge das soluções numéricas. No entanto, após esse tempo, todas as soluções convergem para o mesmo valor. Isso nos mostra que, apesar da discrepância entre as soluções analítica e numéricas em tempos curtos, devido a aproximação de pulso instantâneo no modelo analítico, para tempos maiores que 100*ns* o modelo analítico descreve com excelente aproximação o sistema físico estudado. Ainda, observando a boa descrição do sistema físico pelo modelo analítico, podemos afirmar que a aproximação de amostra semi-infinita é válida para amostras com dimensões iguais ou maiores que as dimensões utilizadas nos cálculos numéricos.

A Figura 4.4 mostra a deformação superficial ao longo do raio da amostra, comparando os modelos Completo Superficial com termos inerciais, Completo Superficial sem termos inerciais, calculados utilizando MEF, e o Modelo Analítico, calculado analiticamente, para diferentes tempos.



Figura 4.3: Deslocamento superficial em r = 0 em função do tempo para uma amostra opaca, sujeita a um feixe de laser pulsado Gaussiano no modo TEM₀₀. Círculos: Solução numérica utilizando MEF considerando termo de inércia na equação termoelástica (Eq(4.1)); Quadrados: Solução numérica utilizando MEF sem termo de inércia na equação termoelástica (Eq. (4.2)); Linha Sólida: Solução Analítica.



Figura 4.4: Deslocamento superficial em função de unidades de raio r/ω_{0e} para uma amostra opaca, sujeita a um feixe de laser pulsado Gaussiano no modo TEM₀₀ para diferentes tempos:(a) 100*ns*; (b) 200*ns*; (c) 500*ns*; (d) 1µs. Círculos: Solução numérica utilizando MEF considerando termo de inércia na equação termoelástica (Eq(4.1)); Quadrados: Solução numérica utilizando MEF sem termo de inércia na equação termoelástica (Eq. (4.2)); Linha Sólida: Solução Analítica.

Observamos que para tempos acima de 200ns todas as soluções entram em con-
cordância ao longo de todo o comprimento da amostra, garantindo assim que a solução analítica fornece resultados em concordância sobre o efeito de ET em amostras opacas sujeitas a excitação pulsada. Os termos inerciais não geram influência sobre o deslocamento superficial em um intervalo de duas unidades de raio para tempos maiores que 200*ns*.

A partir dos resultados observados nas Figuras 4.3 e 4.4 podemos calcular a expressão para a variação de fase induzida no feixe de prova devido ao deslocamento superficial e, por fim, encontrar a expressão final da intensidade do feixe de prova no fotodetector em campo distante.

Capítulo 5

Mudança de Fase e Sinal de Espelho Térmico

Como já discutido no capítulo anterior, o aquecimento na amostra induzido pelo laser de excitação gera um deslocamento na superfície. Deste modo, a superfície do material agirá como um elemento óptico para o laser de prova incidido na amostra [39]. O material pode se contrair ou expandir, dependendo do seu coeficiente de expansão térmica linear. Se o coeficiente de expansão térmica linear for positivo, a amostra terá uma expansão em sua superfície. Por outro lado, se o coeficiente de expansão térmica linear do material for negativo, a amostra sofrerá uma contração no local excitado pelo feixe laser. Assim, o laser de prova, ao ser refletido pela superfície da amostra deslocada, sofre uma diferença de fase em sua frente de onda.

A expressão para a mudança de fase da frente de onda do feixe prova pode ser escrito de duas maneiras [34, 35, 37],

$$\phi_{TM}(r,t) = \frac{2\pi}{\lambda_p} 2u_z(r,0,t) \tag{5.1}$$

ou

$$\phi_{TM}(r,t) = \frac{2\pi}{\lambda_p} 2 \left[u_z(r,0,t) - u_z(0,0,t) \right], \qquad (5.2)$$

em que λ_p é o comprimento de onda do feixe de prova, e u_z é o componente z do vetor deslocamento.

As duas formas de escrever a diferença de fase são iguais a menos de um fator de fase constante [37]. Este fator de fase não influência no resultado final para a variação da intensidade do feixe de prova no campo distante, isto devido à intensidade final ser o módulo quadrado do campo elétrico. A primeira forma nos dá a diferença de fase com relação a superfície da amostra antes do efeito, ou $u_z(0,0,0) = 0$. A segunda forma nos dá a diferença de fase com relação a $u_z(0,0,t)$ em um determinado tempo t [37].

Utilizando a Equação (5.2) obtemos

$$\phi_{TM}(r,t) = -2(1+\nu)\alpha_T \frac{2\pi}{\lambda_p} \frac{Q_0}{A_e} \frac{\omega_{0e}^2}{4} \int_0^\infty \exp\left[-\frac{1}{8}\alpha^2 \omega_{0e}^2\right] \times$$

$$\operatorname{Erfc}\left[\frac{\alpha\omega_{0e}\sqrt{t/t_c}}{2}\right] (J_0(\alpha r) - 1) \alpha d\alpha.$$
(5.3)

A variação na fase induzida pelo efeito de espelho térmico induz em uma variação na amplitude complexa do campo elétrico do feixe de prova. A amplitude complexa para o feixe Gaussiano no modo TEM_{00} sem sofrer o efeito de espelho térmico é dada por¹ [29,39]

$$U_p(r, Z_1) = \sqrt{\frac{2P_p}{\pi}} \frac{1}{\omega_{1p}} \exp\left[-i\frac{\pi}{\lambda_p} \left(2Z_1 + \frac{r^2}{R_{1p}}\right) - \frac{r^2}{\omega_{1p}^2}\right],$$
(5.4)

sendo P_p a potência do laser de prova², e R_{1p} o raio de curvatura do laser de prova na superfície da amostra. Após o feixe sentir o efeito de ET, a amplitude do seu campo elétrico se torna [29,37]

$$U_p(r, Z_1) = B \exp\left[-i\left(\frac{\pi}{\lambda_p} \frac{r^2}{R_{1p}} + \phi_{TM}\right) - \frac{r^2}{\omega_{1p}^2}\right],$$
(5.5)

em que

$$B = \sqrt{\frac{2P_p}{\pi}} \frac{1}{\omega_{1p}} \exp\left[\frac{-2i\pi Z_1}{\lambda_p}\right].$$
(5.6)

Utilizando a teoria de difração de Fresnel, podemos tratar o feixe refletido como uma difração, e considerando apenas o centro deste feixe podemos escrever a expressão final para o campo elétrico no fotodetector em uma posição Z_2 , que é a distância entre a superfície da amostra e o fotodetector [29,37],

$$U(Z_1 + Z_2, t) = C \int_0^\infty \exp\left[-g\left(1 + iV\right) - i\phi_{TM}(g, t)\right] \mathrm{d}g,$$
(5.7)

em que $V = (Z_1/Z_c) + (Z_c/Z_2) [1 + (Z_1/Z_c)^2]$ é um parâmetro geométrico que depende apenas dos parâmetros da montagem experimental, sendo Z_c a distância confocal do feixe de prova, $g = (r/\omega_{1p}^2)$. $\phi_{TM}(g,t)$ é a expressão (5.3) escrita em termos da substituição de

 $^{^1 \}mathrm{Os}$ cálculos referentes às expressões para a propagação do feixe de prova estão detalhados no Apêndice B.

 $^{^{2}}$ É assumido que a potência do laser de prova é pequena o bastante para que não induza efeitos térmicos na amostra. Geralmente nos experimentos utilizamos um comprimento de onda em que o coeficiente de absorção óptica da amostra seja pequeno.

variável g que se torna

$$\phi_{TM}(g,t) = -\theta_{TM} \frac{\omega_{0e}^2}{t_c} \int_0^\infty \exp\left[-\frac{1}{8}\omega_{0e}^2\alpha^2\right]$$

$$\times \operatorname{erfc}\left[\frac{\alpha\omega_{0e}\sqrt{t/t_c}}{2}\right] \left(J_0\left(\alpha\omega_{0e}\sqrt{mg}\right) - 1\right)\alpha \mathrm{d}\alpha,$$
(5.8)

sendo $m = (\omega_{1p}/\omega_{0e})^2$, que é também um parâmetro geométrico que relaciona as dimensões radiais entre os feixes de excitação e de prova na superfície da amostra. O parâmetro $\theta_{TM} = E_0(1-R)(1+\nu)\alpha_T \phi/(\lambda_p k)$, correlaciona as propriedades térmicas, ópticas e mecânicas do material. A partir destes resultados podemos encontrar a expressão final para a variação da intensidade do feixe de prova no fotodetector, que é o módulo quadrado do campo elétrico, escrita como

$$I(t) = \left| C \int_0^\infty \exp\left[-g \left(1 + iV \right) - i\phi_{TM}(g, t) \right] \mathrm{d}g \right|^2.$$
 (5.9)

Utilizando a Equação (5.9), podemos obter os parâmetros físicos de amostras estudadas através de ajustes a partir dos dados obtidos experimentalmente. Os parâmetros possíveis de obtermos são a difusividade térmica, D_{th} , e o parâmetro θ_{TM} , deixando-os como parâmetros de ajuste com o modelo teórico.

Foram realizados cálculos numéricos para o sinal de ET utilizando o Modelo Completo para diferentes coeficientes de absorção óptica mantendo o parâmetro θ_{TM} e a difusividade térmica fixos. Utilizando as curvas geradas numericamente, foram realizados ajustes por meio do comando padrão "*NonLinearModelFit*" do software *Wolfram Mathematica 7.0* com a Equação (5.9), correspondente ao Modelo Analítico, a fim de obter os parâmetros θ_{TM} e D_{th} do ajuste numérico. O limite de valores de coeficiente de absorção óptica em que os ajustes se tornam confiáveis para os parâmetros geométricos utilizados nos cálculos foram analisados. Foi então calculado o desvio percentual dos parâmetros obtidos por meio dos ajustes comparados aos valores utilizados na simulação numérica, utilizando a equação

$$\Lambda_j = \frac{|j_{caculado} - j_{obtido}|}{j_{calculado}} \times 100\%, \tag{5.10}$$

sendo Λ o desvio percentual e j o parâmetro de ajuste θ_{TM} ou D_{th} . Os parâmetros físicos utilizados para realizar os cálculos numéricos estão dispostos na Tabela 5.1 e são referentes a uma liga de alumínio UNS A96351.

Os valores obtidos para os desvios são mostrados na Figura 5.1 juntamente com um sinal de ET simulado para o Modelo Completo utilizando MEF, para um coeficiente de absorção de $1, 0 \times 10^{-8} m^{-1}$. No mesmo gráfico está o ajuste com o modelo Analítico. Os dois sinais são normalizados pelos seus respectivos valores mínimos.

Parâmetros	Unidades	Valores
k	$Wm^{-1}K^{-1}$	176
ho	kgm^{-3}	2710
c_p	$Jkg^{-1}K^{-1}$	890
D_{th}	$(\times 10^{-5})m^2/s$	7,3
$lpha_T$	$(\times 10^{-6})m^{-1}$	$23,\!4$
u	1	0,33
$ heta_{TM}$	$(\times 10^{-6})s$	$1,\!20$
ω_{0e}	$(\times 10^{-6})m$	123
E_0	$(\times 10^{-6})J$	30
m	1	142.2
V	1	30.93

 Tabela 5.1: Tabela com os parâmetros físicos fixos utilizados para os cálculos da intensidade do sinal utilizando MEF e para o ajuste analítico.



Figura 5.1: Desvio obtido para os parâmetros θ_{TM} e D_{th} por meio dos ajustes dos sinais gerados com o Modelo Completo (solução numérica) em função do coeficiente de absorção. As linhas são apenas guias visuais. No gráfico em "inset" temos um exemplo de um sinal gerado numericamente com o Modelo Completo (círculos) e seu respectivo ajuste com o modelo analítico (linha sólida).

A Figura 5.1 mostra que para coeficientes de absorção de aproximadamente $1, 0 \times 10^6 m^{-1}$ o valor do desvio percentual se torna muito pequeno e se mantém aproximadamente constante em aproximadamente 3%.

Com a expressão final para a variação da intensidade do sinal do feixe de prova no fotodetector podemos agora, experimentalmente verificar se o Modelo Analítico proposto tem a validade indicada pelos resultados teóricos.

Capítulo 6

Procedimentos Experimentais

6.1 Montagem

Em um arranjo experimental da técnica de ET são utilizados dois feixes laser quase colineares¹ como mostrado na Figura 6.1. Um feixe é utilizado para gerar o efeito (laser de excitação), e outro é utilizado para provar o efeito (laser de prova). A intensidade do laser de prova deve ser menor que a intensidade do feixe de excitação de forma que não induza aquecimento na amostra.

O feixe de prova é alinhado por espelhos de reflexão de primeira superfície E_1 , E_2 e E_3 , de modo que o centro do feixe esteja corretamente posicionado no detector, que está acoplado com um pinhole. Uma lente biconvexa é usada no feixe de prova para obtermos o efeito de divergência do feixe após o foco. O feixe de excitação normalmente é alinhado com espelhos dielétricos² [51], no entanto, neste trabalho o laser de excitação foi apenas alinhado com um Beam Sampler (ThorLabs, Modelo BSF05-A)³. Uma lente biconvexa de quartzo é usada para focar o feixe na amostra. Parte do feixe de excitação é utilizado em outro detector acoplado ao osciloscópio para iniciar a medida, outra parte do feixe é utilizada como referência para a medida da energia do pulso. As medidas transientes são armazenadas em uma mídia removível por meio do software do próprio osciloscópio e são utilizadas para obter, utilizando o ajuste com o modelo teórico, os parâmetros físicos dos materiais estudados.

Neste trabalho, foi utilizado como laser de excitação um Laser Pulsado Nd:YAG (Quantel, Brilliant B), acoplado a um gerador de segundo harmônico com comprimento de onda de 532nm e largura de pulso de 15ns. Parte do feixe é refletido por um beam sampler (ThorLabs, Modelo BSF05-A) e então focado na amostra por uma lente de quartzo biconvexa de distância focal de 75cm. O restante do feixe que é transmitido é utilizado como referência para a medida do valor de energia do pulso por meio de um sensor de

 $^{^1 {\}rm \hat{A}}$ ngulos menores que 1° entre o las
er de excitação e las
er de prova.

²Espelhos que refletem uma curta e específica faixa de comprimentos de onda.

³Espelho que reflete uma pequena porcentagem de luz e transmite o restante.



Figura 6.1: Esquema da montagem experimental utilizada nos experimentos de ET. L1 é a lente do feixe de excitação com distância focal de 75cm, L2 é a lente do feixe de prova com distância focal de 20cm. E1, E2, E3 são os espelhos para alinhar o feixe de prova até a amostra e alinhar a reflexão do feixe de prova até a fotomultiplicadora F2. Um filtro acoplado à fotomultiplicadora garante que apenas o feixe de prova seja detectado. Um pinhole é acoplado à fotomultiplicadora garantindo que apenas o centro do feixe de prova seja detectado. F1 é o gatilho (trigger) para ativar a aquisição de dados no osciloscópio.

energia piroelétrico (ThorLabs, Modelo ES120C) ligado em um medidor de energia digital (ThorLabs, Modelo PM100D). O laser de prova utilizado foi um laser Gaussiano contínuo no modo TEM₀₀ com comprimento de onda em 632, 8nm (Newport, Modelo R-32734) alinhado com um ângulo de aproximadamente 0, 9° em relação ao feixe de excitação. Uma lente biconvexa de quartzo de distância focal de 20cm foi utilizada para garantir a divergência do feixe após a amostra. Após o feixe de prova ser refletido pela amostra, foi propagado até uma fotomultiplicadora (Hamamatsu, Modelo R928), que estava acoplada a um pinhole e um filtro de linha (ThorLabs, Modelo FL632.8-10). A fotomultiplicadora foi ligada a uma fonte de alta tensão (Newport, Modelo 70706). Somente a porção central do feixe de prova é detectado pela fotomultiplicadora e então gravado por um osciloscópio digital (Tektronix, Modelo DPO 4102B). O osciloscópio era ativado por um fotodiodo (Newport, Modelo 818BB-22). Todo o arranjo experimental foi montado em uma mesa óptica pneumática ativa (TMC, dimensões: 2,0x1,0m).

6.2 Determinação dos Parâmetros Geométricos da Montagem

O alinhamento dos feixes e da amostra em suas respectivas posições é um fator muito importante para o procedimento experimental da técnica de ET. Não menos importante, são as medidas de todos os parâmetros geométricos relacionados ao procedimento experimental: raio do feixe de excitação na amostra (ω_{0e}); raio do feixe de prova na amostra (ω_{1p}); distância confocal do feixe de prova (Z_c); distância entre a amostra e o foco do feixe de prova (Z_1); distância da amostra e a fotomultiplicadora (Z_2). A partir destes parâmetros, é possível determinar os parâmetros geométricos, $m \in V$, definidos no Capítulo "Mudança de Fase e Sinal de Espelho Térmico".

Para determinar a posição do foco do feixe de prova foi utilizado um método direto realizando a medida do raio com um medidor de perfil (ThorLabs Beam Profiler, Modelo BP104-UV). O raio do feixe de prova foi determinado em várias posições ao longo da linha de propagação do feixe, após a lente biconvexa de quartzo de 20*cm*. A Figura 6.3 mostra um esboço do esquema utilizado para a medida.



Figura 6.2: Representação do esquema experimental utilizado para a medida do raio do feixe de prova em função da distância da lente.

Após as medidas do raio do feixe em função da distância, foi realizado um ajuste dos dados obtidos utilizando a equação⁴

$$\omega(z) = \sqrt{M}\omega_0 \sqrt{1 + \left(\frac{(z - z_0\lambda_f)}{\omega_0^2 \pi}\right)^2},\tag{6.1}$$

que é a representação da propagação do feixe Gaussiano após a lente [51]. O raio do feixe na posição z é representado por $\omega(z)$, ω_0 é o raio do foco do feixe, z_0 é a posição em que está o foco do feixe, λ_f é o comprimento de onda e M é um fator indicativo de quão próximo a uma Gaussiana está o feixe. A partir deste ajuste foi determinado a distância entre a cintura do feixe de prova e a amostra. O valor da distância confocal do feixe de

⁴Para a obtenção da Equação (6.1), ver Apêndice A.

prova também foi determinado. Os valores obtidos foram: $Z_1 = 41, 1cm$ e $Z_c = 1, 47cm$. A Figura 6.3 mostra os dados experimentais e o ajuste teórico para a propagação do feixe de prova após a lente.



Figura 6.3: Gráfico obtido utilizando os dados experimentais da medida do raio do feixe de prova em função da posição no eixo axial. O erro experimental na determinação do raio do feixe em função da distância da lente é menor que 0, 2%. Círculos: Dados Experimentais; Linha Sólida: Ajuste utilizando a Eq. (6.1).

A medida do raio dos feixes na posição da superfície da amostra foi efetuada utilizando uma câmera medidora de perfil (Coherent, LaserCam-HR), ligada a um computador. Os valores medidos foram $\omega_{0e} = 123 \mu m$ para o feixe de excitação e $\omega_{1p} = 1467 \mu m$ para o feixe de prova. As Figuras 6.4 e 6.5 mostram a característica dos feixes laser na posição da superfície da amostra. As linhas roxas no lado inferior e no lado esquerdo da imagem são o perfil real do feixe. As linhas azuis sobrepostas são ajustes Gaussianos das curvas reais.

A Figura 6.4 mostra o perfil do feixe de excitação ampliado na posição da superfície da amostra. Apesar de não ser completamente simétrico, o ajuste Gaussiano do perfil indica que o perfil de intensidade está de acordo com o modelo teórico.



Figura 6.4: Imagem frontal do feixe de excitação obtida utilizando a câmera medidora de perfil em seu próprio software fornecido pelo fabricante. As linhas em cor lilás representam o perfil real nos eixos perpendiculares ao eixo de propagação do feixe e as linhas em cor azul representam o ajuste Gaussiano. A escala de cores indica a intensidade, sendo a cor preta a cor de menor intensidade e a cor branca de maior intensidade.

A Figura 6.5 mostra o perfil do feixe de prova na posição da superfície da amostra. Apesar de ruídos (figuras de difração causadas por micropartículas de poeira no filtro da câmera) o perfil Gaussiano é obtido perfeitamente pelo ajuste.



Figura 6.5: Imagem frontal do feixe de prova obtida utilizando a câmera medidora de perfil em seu próprio software fornecido pelo fabricante. As linhas em cor lilás representam o perfil real nos eixos perpendiculares ao eixo de propagação do feixe e as linhas em cor azul representam o ajuste Gaussiano. A escala de cores indica a intensidade, sendo a cor preta a cor de menor intensidade e a cor branca de maior intensidade.

A partir dos resultados acima, e com o valor da distância entre a amostra e o fotodetector, $Z_2 = 387, 1cm$, os valores de $m \in V$ foram determinados, sendo m = 142, 2 e V = 30, 9.

6.3 Amostras

A fim de validar o modelo proposto, foram realizadas medidas em quatro amostras de ligas metálicas comerciais, sendo três ligas de cobre: UNS C10100/C10200 (Cobre), UNS C90300 (Bronze) e UNS C36000 (Latão) [66]; e uma liga de Alumínio: UNS A96351 (Alumínio) [66,67]. As dimensões de todas amostras foram de aproximadamente 15mm de espessura e 12,7mm de raio. Essas ligas metálicas possuem em sua composição outros tipos de metais. A Tabela 6.1 mostra a quantidade de cada material contido nas ligas.

Elemento	Liga A96351	Liga C90300	Liga C10100/10200	Liga C36000
Al	Restante*	0,005	-	-
Cu	$0,10 \max$	86-89	99,95-99,99	60-63
Fe	$0,50 \max$	$0,15 \max$	-	$0,35 \max$
Mg	0,40-0,8	-	-	-
Mn	0,40-0,8	-	-	-
Ni	-	$1,0 \max$	-	-
Р	-	$0,05 \max$	-	-
Pb	-	$0,30 \max$	-	2,5-3,7
\mathbf{S}	-	$0,05 \max$	-	-
Sb	-	$0,2 \max$	-	-
Si	0,7-1,3	$0,005 \max$	-	-
Sn	-	7,5-9,0	-	-
Ti	$0,\!20$	-	-	-
Zn	$0,20 \max$	3,0-5,0	-	-
Outros	$0,15 \max$	-	Restante*	$0,5 \max$

Tabela 6.1: Composição (porcentagem em massa) das amostras utilizadas para as medidas de ET [66].

*Quantidade necessária para completar 100% da liga total.

A técnica de ET é baseada na medida da variação da intensidade do centro do feixe de prova refletido pela superfície da amostra. O efeito acontece devido o aquecimento gerado por outro feixe laser. Assim, é de grande importância o preparo correto da superfície do material estudado, pois o aumento de temperatura da amostra é relacionado com a quantidade de energia refletida, que está altamente relacionado com a rugosidade da superfície [68]. Além disso, o polimento também influenciará na qualidade do sinal captado pelo fotodetector, isto pelo fato de que o feixe refletido não pode ter seu perfil alterado por difrações, devido ranhuras ou irregularidades profundas no material.

A reflexão total que a superfície de um material produz é a soma da luz refletida especularmente e difusamente. Para garantir que a reflexão da superfície seja o mais próxima possível de uma reflexão totalmente especular, a amostra deve possuir um polimento de modo que a superfície fique plana e principalmente sem riscos. O polimento das amostras foi realizado manualmente com lixas, com granulações desde $76\mu m$ até $6, 6\mu m$, em uma politriz metalográfica manual (Panambra, Modelo DPU-10). Para cada granulosidade diferente de lixa a amostra era girada de 90° em relação a um ponto de referência na amostra. Isto é feito para garantir que todos os riscos causados pela lixa anterior serão eliminados. A Figura 6.6 mostra um esquema de como é feito um polimento metalográfico.



Figura 6.6: Esquema do procedimento utilizado para lixar as amostras. A amostra deve ser girada de 90° quando trocada a granulosidade da lixa de modo que os riscos feitos pela lixa anterior desapareçam.

As lixas utilizadas para cada amostra deve ser de uso individual para evitar que partículas de uma determinada amostra risque profundamente a superfície de uma outra. Para acabamento, foram utilizadas pastas diamantadas com granulação de $3\mu m$ e $1\mu m$, respectivamente, em panos de polimento girando as amostras no sentido contrário ao sentido de rotação do pano, evitando gerar direção preferencial dos riscos no polimento final. A Figura 6.7 mostra as amostras utilizadas neste trabalho.



Figura 6.7: Amostras utilizadas nas medidas de ET.

. Capítulo

Resultados e Discussão

Com o intuito de validar o modelo teórico proposto, experimentos com a técnica de ET foram realizados nas amostras citadas no capítulo anterior. As medidas de ET foram realizadas para diferentes energias de excitação em cada amostra. Os transientes foram obtidos utilizando a função "média"do osciloscópio, com aproximadamente 300 médias para cada energia de excitação. A partir dos transientes obtidos, foram realizados ajustes utilizando o software Wolfram Mathematica 7.0 utilizando o comando padrão do programa "NonLinearModelFit". Devido à grande quantidade de pontos obtidos nas curvas experimentais e ruídos devido a baixa intensidade do sinal, a função padrão "BezierFunction" do software Wolfram Mathematica 7.0 foi utilizada para obter os melhores pontos que representam a curva experimental. Os ajustes foram realizados com aproximadamente 30 pontos de cada transiente, a fim de diminuir o tempo necessário para cada ajuste. Em trabalhos anteriores [52] foram realizados testes ajustando todos os pontos de transientes experimentais, e também um menor número de pontos. Os resultados nos dois métodos divergem nos valores finais dos parâmetros obtidos pelos ajustes em menos de 0.2%. A partir dos ajustes, os parâmetros θ_{TM} e D_{th} foram obtidos para cada transiente. O erro obtido nos parâmetros $D_{th} \in \theta_{TM}$ pelo ajuste é menor que 2%. Cada transiente experimental e os ajustes teóricos foram normalizados pelo seus respectivos pontos de mínimo. Esta forma de normalização foi escolhida para uma melhor visualização dos dados.

Como técnica complementar foram realizadas medidas de reflectância da superfície das amostras para o comprimento de onda de 532nm. As medidas de reflectância foram realizadas logo após as medidas de ET, com o intuito de que a superfície não fosse afetada por oxidações devido o tempo. Isso garante as mesmas condições da superfície para as medidas de ET e reflectância. As medidas foram realizadas em um espectrofotômetro (Perkin Elmer, Modelo Lambda 1050) equipado com uma esfera integradora (Labsphere, Modelo #150MM RSA ASSY). Os valores obtidos são mostrados na Tabela 7.1.

A Figura 7.1 mostra os sinais de ET normalizados, da amostra de Liga de Alumínio UNS A96351 para diferentes energias de excitação, ajustados com o modelo proposto. A

Tabela 7.1: Valores das reflectância medidos por meio de Espectroscopia UV-Vis com Esfera Integradora para o comprimento de onda $\lambda = 532nm$. Os valores da reflectância são adimensionais.

Amostra	$R, \lambda = 532nm$ (Medida)
UNS A96351	$0,857 \pm 0,005$
UNS $C10100/10200$	$0,619 \pm 0,006$
UNS C90300	$0,719 \pm 0,003$
UNS C36000	$0,810\pm0,002$

taxa de repetição dos pulsos do feixe de excitação foi de 2Hz, garantindo total relaxação térmica do material durante o intervalo entre os pulsos. Podemos observar que o sinal de ET inicialmente decai rapidamente no instante do pulso e, logo em seguida, volta ao estado inicial. Para tempos maiores que 1, 0ms os transientes já se encontram próximos ao estado estacionário, com valores próximos ao valor inicial de intensidade. Isto indica que a superfície da amostra sofre uma expansão quando aquecida pelo laser, divergindo o feixe de prova. Quando o calor começa a se difundir pela amostra, devido a relaxação térmica, a superfície tende a retornar ao seu estado inicial, de modo que o o feixe de prova volte também a seu estado inicial.



Figura 7.1: Transientes de ET normalizados (Símbolos) para a amostra UNS A96351 excitada com diferentes energias, com seus respectivos ajustes teóricos (Linhas Sólidas), utilizando o modelo proposto.

O valor experimental obtido para a difusividade térmica da liga UNS A96351 foi de $D_{th} = (7, 8 \pm 0, 3) \times 10^{-5} m^2/s$ enquanto que valores calculados utilizando valores da condutividade térmica, calor específico e densidade obtidos na literatura [66, 67] é de $7, 3 \times 10^{-5} m^2/s$, indicando que o resultado experimental está em bom acordo com a literatura. O valor obtido experimentalmente é a média de todos os ajustes, para todas as energias de excitação. O parâmetro θ_{TM} , obtido por meio do ajuste teórico, quando analisado em função da energia de excitação, nos permite obter parâmetros físicos da amostra estudada. Para isso, adicionando o ponto (0,0) no gráfico, ou seja, quando não há excitação não há efeito nenhum na amostra, podemos observar um comportamento linear. A partir do coeficiente angular do ajuste linear obtemos θ_{TM}/E_0 . Para a amostra de liga de alumínio UNS A96351 (Figura 7.2) o valor obtido foi de $\theta_{TM}/E_0 = (0,047 \pm 0,003)W^{-1}$.



Figura 7.2: Parâmetro θ_{TM} obtido por meio de ajustes dos dados experimentais para a amostra UNS A96351 em função da energia de excitação E_0 . Círculos: Dados; Linha Sólida: Ajuste Linear.

A Figura 7.3 mostra os sinais de ET da amostra de Liga de Cobre UNS C10100/10200 normalizados e ajustados com os mesmos procedimentos utilizados para a amostra UNS A96351. A taxa de repetição de excitação para esta amostra foi de 5Hz, visto que a difusividade térmica deste material possui maior valor comparado às outras amostras. O comportamento do transiente é o mesmo que o da amostra UNS A96351, no entanto, o estado estacionário para a amostra UNS C10100/10200 acontece para tempos próximos a 0, 5ms, isto devido a difusividade térmica da liga UNS C10100/10200 ser maior que a difusividade térmica da liga UNS A96351.



Figura 7.3: Transientes de ET normalizados (Símbolos) para a amostra UNS C10100/10200 excitada com diferentes energias com seus respectivos ajustes teóricos (Linhas Sólidas) utilizando o modelo proposto.

O valor experimental encontrado para a difusividade térmica para a liga UNS C10100/10200 foi $D_{th} = (12, 6 \pm 0, 3) \times 10^{-5} m^2/s$, que está em boa concordância com o valor obtido da literatura [66], $D_{th} = 11, 4 \times 10^{-5} m^2/s$. O valor obtido por meio do ajuste linear do parâmetro θ_{TM} em função da energia de excitação E_0 (Figura 7.4) foi de $\theta_{TM}/E_0 = (0, 290 \pm 0, 002)W^{-1}$.



Figura 7.4: Parâmetro θ_{TM} obtido por meio de ajustes dos dados experimentais para a amostra UNS C10100/10200 em função da energia de excitação E_0 . Círculos: Dados; Linhas Sólidas: Ajuste Linear.

Para a amostra de liga de cobre UNS C90300 e para a amostra de liga de cobre UNS C36000 a taxa de repetição do feixe de excitação foi de 2Hz. O comportamento

dos transientes para as duas amostras são semelhantes ao comportamento das amostras citadas anteriormente. O estado estacionário para estas amostras é observado para tempos maiores que 2, 0ms. A Figura 7.5 mostra os transientes normalizados e os seus respectivos ajustes com o modelo proposto, para a amostra de liga de cobre UNS C90300.



Figura 7.5: Transientes de ET normalizados (Símbolos) para a amostra UNS C90300 excitada com diferentes energias com seus respectivos ajustes teóricos (Linhas Sólidas) utilizando o modelo proposto.

O valor experimental obtido para a difusividade térmica foi de $D_{th} = (2, 4 \pm 0, 1) \times 10^{-5} m^2/s$ enquanto que o valor obtido da literatura é de $D_{th} = 2, 2 \times 10^{-5} m^2/s$. A Figura 7.6 mostra o gráfico do parâmetro θ_{TM} em função da energia de excitação E_0 , o ajuste linear, que tem como coeficiente angular $\theta_{TM}/E_0 = (0, 142 \pm 0, 001)W^{-1}$.



Figura 7.6: Parâmetro θ_{TM} obtido por meio de ajustes dos dados experimentais para a amostra UNS C90300 em função da energia de excitação E_0 . Círculos: Dados; Linha Sólida: Ajuste Linear.

A Figura 7.7 mostra os sinais normalizados e ajustados para a amostra de liga de cobre UNS C36000. O valor experimental obtido para a difusidade térmica foi de $D_{th} = (3, 4 \times 10^{-5} \pm 0, 2)m^2/s$ que está em boa concordância com o valor obtido da literatura, que é $D_{th} = 3, 6 \times 10^{-5}m^2/s$ [66]. A figura 7.8 mostra o parâmetro θ_{TM} obtido por meio dos ajustes em função da energia de excitação E_0 . O coeficiente angular do ajuste linear para esta amostra foi de $\theta_{TM}/E_0 = (0,077 \pm 0,002)W^{-1}$.



Figura 7.7: Transientes de ET normalizados (Símbolos) para a amostra UNS C36000 excitada com diferentes energias com seus respectivos ajustes teóricos (Linhas Sólidas) utilizando o modelo proposto.



Figura 7.8: Parâmetro θ_{TM} obtido por meio de ajustes dos dados experimentais para a amostra UNS C36000 em função da energia de excitação E_0 . Círculos: Dados; Linha Sólida: Ajuste Linear.

A Figura 7.9 mostra os sinais de ET para as quatro amostras com diferentes energias de excitação. Podemos notar a diferença na amplitude e no tempo de relaxação característico de cada amostra. Observamos que enquanto as amostras de liga de alumínio UNS A96351 e liga de cobre UNS C10100/10200 já estão em estado estacionário, as amostras de liga de cobre UNS C90300 e UNS C36000 ainda estão relaxando termicamente.



Figura 7.9: Comparação entre os sinais normalizados das quatro amostras utilizadas no trabalho para diferentes energias de excitação.

A Figura 7.10 mostra curvas do parâmetro θ_{TM} em função da energia de excitação para todas as amostras. Notamos que apesar de três amostras possuírem o cobre como principal componente de liga, a inclinação da curva é notavelmente diferente para todas.



Figura 7.10: Parâmetro θ_{TM} obtido por meio de ajustes dos dados experimentais para as amostras utilizadas em função da energia de excitação E_0 . Símbolos: Dados; Linha Sólida: Ajuste Linear.

A Tabela 7.2 mostra os parâmetros físicos obtidos por meio dos ajustes, e valores obtidos a partir da literatura para todas as amostras [66,67].

Tabela 7.2: Tabela comparativa com propriedades térmicas, ópticas e mecânicas obtidas a partir dos experimentos de ET e dados da literatura [66, 67].

	ρc_p	D_{th}	D_{th}	θ_{TM}/E_0	α_T	α_T
Amostra	(Literatura)	(Literatura)	(Medido)	(Medido)	(Literatura)	(Calculado)
	$(\times 10^6) Jm^{-3} K^{-1}$	$(\times 10^{-5})m^2/s$	$(\times 10^{-5})m^2/s$	W^{-1}	$(\times 10^{-6})K^{-1}$	$(\times 10^{-6})K^{-1}$
UNS A96351	2,4119	7, 3	$7,8 \pm 0,3$	$0,047\pm0,003$	23, 4	$27,0 \pm 2,0$
UNS C10100/10200	3,4419	11, 4	$12,6\pm0,8$	$0,029\pm0,002$	17, 0	$14, 0 \pm 1, 0$
UNS C90300	3,3088	2, 2	$2,4 \pm 0,1$	$0,142\pm0,001$	18,0	$17,7 \pm 0,3$
UNS C36000	3,2300	3, 6	$3,4\pm0,2$	$0,077\pm0,002$	20, 5	$22,5\pm0,7$

Como visto na Tabela 7.2, os valores obtidos para a difusividade térmica estão em bom acordo com valores obtidos na literatura.

Os valores de θ_{TM}/E_0 nos dá informações mecânicas e termo-ópticas da amostra. Como o exemplo da tabela, a partir dos valores obtidos dos ajustes lineares de θ_{TM}/E_0 acima, foram calculados os valores do coeficiente de expansão térmica linear de cada material, utilizando valores conhecidos dos outros parâmetros pela literatura [66,67], como a razão de Poisson ν e a condutividade térmica k; do comprimento de onda do feixe de prova λ_p , e da reflectância de cada material como mostrado na Tabela 7.1.

Os desvios percentuais para o coeficiente de expansão térmica obtidos experimentalmente variaram de aproximadamente 2% até aproximadamente 18%, comparados aos valores de referência da literatura. Esta grande variação dos valores do parâmetro θ_{TM}

aparentemente é devido a alguns fatores que ocorrem experimentalmente, dentre eles, a grande variação de energia entre um pulso e outro. A variação de energia é de aproximadamente 15% do valor médio. Outro fator relevante a ser considerado é a aproximação de absorção superficial (termo de fonte utilizando delta de Dirac na variável azimutal) que o modelo proposto leva em conta. Como já visto no capítulo "Mudança de Fase e Sinal de Espelho Térmico", os ajustes de transientes numéricos, utilizando o modelo analítico proposto, resulta em um erro de aproximadamente 3% nos parâmetros θ_{TM} e $D_{\rm th}$ obtidos, para transientes calculados numericamente utilizando coeficientes de absorção óptica acima de $10^6 m^{-1}$. O polimento da superfície também deve ser levado em conta, desde que, o polimento e a rugosidade de uma superfície influenciam de forma significativa na absorção óptica do material [68]. A variação na composição de cada material deve também ser levada em conta, visto que na Figura 7.10, cada material possui uma inclinação característica. De fato, variações em elementos da composição podem afetar parâmetros físicos das amostras estudadas [69,70]. Erros experimentais como variação de temperatura no ambiente do experimento, alinhamentos e ruídos externos também devem ser levados em conta nos resultados. No entanto, mesmo com os desvios percentuais chegando a 18% podemos considerar que o modelo proposto é uma aproximação válida e útil para descrever as propriedades termo-ópticas e mecânicas de materiais opacos.

Capítulo

Conclusão

Neste trabalho foi apresentado um modelo simplificado para a técnica de ET, considerando amostras opacas sujeitas a excitação pulsada por um feixe laser Gaussiano no modo TEM_{00} . A expressão para a variação de temperatura na amostra foi resolvida assumindo aproximações no termo de fonte temporal e no termo de fonte azimutal. A equação termoelástica foi resolvida a partir da solução da equação de difusão de calor, nos permitindo descrever o deslocamento superficial da amostra. Uma expressão semi-analítica para a variação da intensidade do feixe de prova no fotodetector em campo distante foi obtida. Experimentos foram realizados para a verificação da validade do modelo teórico em amostras metálicas.

A expressão analítica para a variação de temperatura foi obtida assumindo que a absorção de luz do feixe de excitação pela amostra acontece na superfície da amostra, ou seja, $Q(z) = \delta(z)$. O pulso do feixe foi considerado uma Delta de Dirac no tempo, $Q(t) = \delta(t)$. O resultado obtido foi comparado com soluções numéricas utilizando o método de elementos finitos. Neste método foi considerada uma amostra com dimensões finitas, assumindo absorção seguindo a lei de Beer para diferentes coeficientes de absorção óptica, e também absorção óptica superficial. O pulso do feixe de excitação Gaussiano no tempo foi considerado no Modelo Completo, com diferentes larguras de pulso, ou seja, uma situação mais próxima da realidade. Os resultados mostram que, a partir de coeficientes de absorção óptica com ordem de grandeza acima de $10^{-6}m^{-1}$, podemos considerar absorção óptica superficial, o que simplifica e diminui o tempo das simulações numéricas. A expressão analítica para a variação da temperatura é uma boa aproximação para o caso numérico, mostrando que os valores de todas as soluções convergem para tempos próximos a 350ns para pulsos de até aproximadamente 45ns de largura.

A partir da variação de temperatura foi obtida uma expressão para o deslocamento superficial da amostra, assumindo a equação termoelástica na aproximação quase-estática para amostras semi-infinitas. O resultado obtido foi comparado com soluções numéricas da equação termoelástica, assumindo dimensões finitas para a amostra, com absorção superficial e pulso com largura temporal $\tau = 15ns$, e tempo de irradiância máxima $\xi = 45ns$. A aproximação quase-estática foi confrontada com o caso em que o termo inercial da equação termoelástica é assumido. Os resultados mostram que o termo inercial tem influência na deformação superficial em tempos muito curtos (aproximadamente 200ns), indicando que a aproximação quase-estática é uma ótima aproximação para descrever o efeito estudado neste trabalho. A solução obtida pelo modelo proposto entra em bom acordo com os resultados numéricos para tempos próximos a 200ns.

A variação da intensidade no fotodetector assumindo a aproximação de campo distante, utilizando a integral de difração e Fresnel, foi obtida a partir da variação de fase induzida pelo efeito de ET no feixe de prova. Os cálculos analíticos foram confrontados com resultados numéricos. Foram geradas curvas para o sinal de ET por meio de MEF para diferentes coeficientes de absorção óptica, com os parâmetros θ_{TM} e D_{th} fixos. As curvas teóricas foram ajustadas com o modelo proposto neste trabalho a fim de obter estes mesmos parâmetros. Os resultados mostram que os ajustes entram em bom acordo com os cálculos numéricos a partir de coeficientes de absorção óptica de 1, $0 \times 10^{-6} m^{-1}$.

Os resultados obtidos por meio de ajustes de transientes experimentais para quatro amostras metálicas, excitadas com um laser pulsado, com pulsos na escala de nanosegundos, mostram que o modelo proposto possui um grande potencial para a obtenção da difusividade térmica e outros parâmetros termo-ópticos e mecânicos de amostras opacas. A aplicação da técnica na medida da difusividade térmica em metais é útil e de grande interesse, devido o alto valor de difusividade térmica desses materiais.

Apêndice

Feixes Gaussianos

Feixes Gaussianos são a solução paraxial da equação escalar de Helmholtz e são geralmente escolhidas para descrever a propagação de lasers coerentes [71]. Esta solução é possível se considerarmos que os elementos ópticos (lentes, janelas ópticas), por qual o feixe de laser passa antes de se propagar livremente, possuem dimensões muito maiores que o próprio feixe [71,72].

Os feixes laser se comportam, em muitos aspectos como ondas planas, no entanto, a sua distribuição de intensidade não é uniforme em todo diâmetro, sendo mais intenso próximo ao eixo de propagação e variando lentamente ao se distanciar do mesmo eixo. Sua frente de onda é levemente curva [71,72].

O potencial (ou amplitude escalar complexa) u(x, y, z) do feixe de laser deve satisfazer a equação escalar de Helmholtz, e pode ser escrito como o produto de uma função complexa $\psi(x, y, z)$, que varia lentamente somente na direção do eixo z, e a amplitude complexa de uma onda plana propagando na direção do eixo z, $\exp[i\kappa z]$,

$$u(x, y, z) = \psi(x, y, z) \exp[i\kappa z], \tag{A.1}$$

com $\kappa = 2\pi n/\lambda_f$, sendo *n* o índice de refração do meio e λ_f o comprimento de onda do feixe laser no vácuo. A equação escalar de Helmholtz é escrita como

$$\left(\nabla^2 + \kappa^2\right) u(x, y, z) = 0, \qquad (A.2)$$

ou utilizando (A.1)

$$\left(\nabla^2 + \kappa^2\right)\psi(x, y, z)\exp[i\kappa z] = 0, \qquad (A.3)$$

que ainda pode ser escrita na forma

$$\exp[i\kappa z] \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \psi(x, y, z) + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z) \exp[i\kappa z]}{\partial z^2} + \kappa^2 (\psi(x, y, z) \exp[i\kappa z]) = 0.$$
(A.4)

Calculando todas as derivadas, podemos negligenciar a segunda derivada na coordenada z da função $\psi(x, y, z)$, isso devido esta função variar lentamente ao longo do eixo z. Assim, obtemos

$$\frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial y^2} + 2i\kappa \frac{\partial \psi(x, y, z)}{\partial z} = 0.$$
(A.5)

A equação (A.5) tem como solução

$$\psi(x, y, z) = \psi_0 \exp\left[i\left(P(z) + \frac{\kappa}{2q(z)}(x^2 + y^2)\right)\right],\tag{A.6}$$

em que ψ_0 é uma constante. O parâmetro P(z) representa uma mudança de fase complexa que está associada à propagação do feixe, e q(z) é um parâmetro complexo que descreve a variação Gaussiana na intensidade do feixe com a distância $\sqrt{x^2 + y^2}$ do eixo óptico, assim como a curvatura da frente de onda que é esférica próxima ao eixo. Esta solução é a solução para o modo fundamental. Para determinar estes parâmetros basta inserirmos (A.6) em (A.5) de modo que obtemos

$$\frac{2i\kappa}{q} - \frac{\kappa^2(x^2 + y^2)}{q^2} - 2\kappa \frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}z} + \frac{\kappa^2(x^2 + y^2)}{q^2} \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}z} = 0, \tag{A.7}$$

que pode ser escrito como um sistema de duas equações,

$$-2\kappa \frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}z} + \frac{2i\kappa}{q} = 0,$$

$$\frac{\kappa^2}{q^2} \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}z} - \frac{\kappa^2}{q^2} = 0.$$
(A.8)

Resolvendo o sistema (A.8) obtemos

$$q(z) = q(0) + z \tag{A.9}$$

е

$$P(z) = i \ln \left[1 + \frac{z}{q(0)} \right] + P(0),$$
 (A.10)

ou ainda,

$$P(z) = i \ln \left[1 + \frac{z}{q(0)} \right], \tag{A.11}$$

em que P(0) pode ser negligenciado devido ele somente adicionar um fator de fase constante em $\psi(x, y, z)$.

Devido a solução (A.6) ser uma onda parabólica, ou seja, tem uma forma semelhante a uma onda esférica paraxial, podemos supor que o parâmetro q é um raio de curvatura complexo. Podemos então escrever a razão 1/q em termos de um raio de curvatura real R(z) e uma parte imaginária,

$$\frac{1}{q(z)} = \frac{1}{R(z)} + i \frac{\lambda_f}{\pi n \omega^2(z)}.$$
(A.12)

Introduzindo a Equação (A.12) na Equação (A.6) obtemos

$$\psi(x, y, z) = \psi_0 \exp\left[i\left(P(z) + \frac{\kappa(x^2 + y^2)}{2}\frac{1}{R(z)} + i\kappa(x^2 + y^2)\frac{\lambda_f}{\pi n\omega^2(z)}\right)\right]$$
(A.13)

ou

$$\psi(x, y, z) = \psi_0 \exp\left[i\left(P(z) + \frac{\kappa(x^2 + y^2)}{2}\frac{1}{R(z)} + 2i\frac{(x^2 + y^2)}{\omega^2(z)}\right)\right]$$
(A.14)

de modo que podemos ver que R(z) é o raio de curvatura da frente de onda que intercepta o eixo z, e $\omega(z)$ é a distância $\sqrt{x^2 + y^2}$ do eixo z em que a amplitude diminui por um fator de exp [-1] do valor máximo. O parâmetro ω é definido como o raio do feixe.

Escolhendo q(0) como um número imaginário, podemos fazer uma simplificação e considerar que

$$q(0) = -i\frac{n\pi\omega^2(0)}{\lambda_f} = -i\frac{n\pi\omega_0^2}{\lambda_f}.$$
(A.15)

A constante ω_0 é chamada de cintura do feixe e corresponde à curvatura $1/R_0 = 0$. Desta forma, podemos reescrever a função ψ em termos dos resultados (A.11), (A.14) e (A.15)

$$\psi(x, y, z) = \psi_0 \frac{1}{1 + i\frac{\lambda_f z}{\pi n \omega_0^2}} \exp\left[-\frac{x^2 + y^2}{\omega^2(z)}\right] \exp\left[i\frac{k(x^2 + y^2)}{2R(z)}\right].$$
 (A.16)

Os parâmetros R(z) e $\omega(z)$ não são constantes ao longo da propagação do feixe ao longo do eixo z. Combinando as Equações (A.9), (A.12) e (A.15) obtemos as expressões para estas duas variáveis em função de z

$$\frac{1}{R(z)} + i\frac{\lambda_f}{n\pi\omega^2(z)} = \frac{z}{z^2 + \left(\frac{n\pi\omega_0^2}{\lambda_f}\right)^2} + i\frac{\frac{n\pi\omega_0^2}{\lambda_f}}{z^2 + \left(\frac{n\pi\omega_0^2}{\lambda_f}\right)^2}.$$
(A.17)

A parte real da Equação (A.17) está relacionada ao raio de curvatura da onda, ou seja,

$$R(z) = \frac{z^2 + \left(\frac{n\pi\omega_0^2}{\lambda_f}\right)^2}{z},\tag{A.18}$$

e a parte imaginária está relacionada com o raio do feixe

$$\omega(z) = \sqrt{\omega_0^2 + \left(\frac{\lambda_f z}{n\pi\omega_0}\right)^2}.$$
(A.19)

A partir destas duas equações podemos verificar que o raio do feixe é mínimo quando z = 0 (ω_0). O raio de curvatura, R(0), tende ao infinito. Por simplicidade, podemos introduzir a constante

$$Z_c = \frac{n\pi\omega_0^2}{\lambda_f},\tag{A.20}$$

que é a distância confocal do feixe, ou seja, é a distância no eixo z em que o raio do feixe se mantêm constante e igual ao raio mínimo. É também comumente chamado de comprimento de Rayleigh. Deste modo as equações para $R(z) \in \omega(z)$ se tornam

$$R(z) = \frac{z^2 + Z_c^2}{z}$$
(A.21)

е

$$\omega(z) = \sqrt{\frac{\lambda_f}{n\pi} \frac{z^2 + Z_c^2}{Z_c}}.$$
(A.22)

Para o caso de $z \to \pm \infty$ obtemos

$$R(z) = z \tag{A.23}$$

е

$$\omega(z) = \frac{\lambda_f |z|}{n\pi\omega_0}.\tag{A.24}$$

Uma outra forma de escrever ψ é utilizando a notação exponencial para números complexos, em que podemos fazer a substituição

$$\frac{1}{1+i\frac{\lambda_f z}{n\pi\omega_0^2}} = \frac{\omega_0}{\omega(z)} \exp\left[i\Phi(z)\right],\tag{A.25}$$

 sendo

$$\Phi(z) = \arctan\left[-\frac{\lambda_f z}{n\pi\omega_0^2}\right],\tag{A.26}$$

de modo que a amplitude complexa u para um feixe Gaussiano se torna

$$u(x,y,z) = \psi_0 \frac{\omega_0}{\omega(z)} \exp\left[-\frac{x^2 + y^2}{\omega^2(z)}\right] \exp\left[i\Phi(z)\right] \exp\left[i\frac{\kappa(x^2 + y^2)}{2R(z)}\right] \exp\left[i\kappa z\right].$$
(A.27)

A notação em coordenadas cilíndricas é muito útil para os trabalhos referentes a LT e ET [29,34], assim, podemos fazer a mudança de variáveis de modo que

$$x = r \cos [\varphi];$$

$$y = r \sin [\varphi];$$

$$z = z,$$

(A.28)

e a Equação (A.27) pode ser escrita como

$$u(r,z) = \psi_0 \frac{\omega_0}{\omega(z)} \exp\left[-\frac{r^2}{\omega^2(z)}\right] \exp\left[i\Phi(z)\right] \exp\left[i\frac{\kappa r^2}{2R(z)}\right] \exp\left[i\kappa z\right].$$
(A.29)

Sabendo que a intensidade de um campo elétrico é igual ao módulo quadrado do campo, podemos calcular a intensidade do feixe Gaussiano, que é dada por

$$I(r,z) = |\psi|^2 \frac{\omega_0^2}{\omega^2(z)} \exp\left[-\frac{2r^2}{\omega^2(z)}\right].$$
 (A.30)

A potência do feixe ao longo do eixo z é

$$P_T(z) = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty I(r, z) r \mathrm{d}r \mathrm{d}\varphi = |\psi_0|^2 \frac{\pi \omega_0^2}{2} = P = \text{constante}, \qquad (A.31)$$

ou seja, a potência é conservada ao longo de sua propagação no eixo z. A partir do resultado acima podemos determinar a constante ψ_0 que é

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{2P}{\omega_0^2}}.\tag{A.32}$$

A expressão final para a intensidade de um feixe Gaussiano no modo fundamental ou ${\rm TEM}_{00}$ é

$$I(r,z) = \frac{2P}{\omega^2(z)} \exp\left[-\frac{2r^2}{\omega^2(z)}\right].$$
(A.33)

O que devemos deixar claro é que se, na Equação (A.1) tivéssemos utilizado a notação exp $[-i\kappa z]$ no lugar da exponencial com argumento positivo, o método para a solução de todo o problema será o mesmo. Obteríamos no lugar da expressão (A.29) a equação

$$u(r,z) = \psi_0 \frac{\omega_0}{\omega(z)} \exp\left[-\frac{r^2}{\omega^2(z)}\right] \exp\left[i\Phi(z)\right] \exp\left[-i\frac{\kappa r^2}{2R(z)}\right] \exp\left[-i\kappa z\right],$$
(A.34)

que é mais convencionalmente utilizada nos trabalhos anteriores sobre ET e LT.

Apêndice

Intensidade do Feixe de Prova

A partir do momento em que o feixe do laser de prova é refletido pela amostra estudada, devemos considerar sua propagação pelo caminho até o plano do fotodetector (Figura B.1), para obter a expressão final para a variação da intensidade.



Figura B.1: Representação geométrica do caminho do feixe de laser até o fotodetector [40].

Podemos escrever matematicamente a expressão para a amplitude do campo elétrico do feixe de prova utilizando o princípio de Huygens. Este princípio diz que a amplitude complexa de uma onda em um um ponto no plano de saída (PS), é o resultado da superposição das ondas esféricas que surgem de todos os pontos do plano de entrada (PE) [39,73]. Considerando juntamente com o principio de Huygens a aproximação de Fresnel, temos

$$U_{PS}(Z_2,t) = \frac{i}{\lambda_p} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} U_{PE}(r,t) \left(\frac{1+\cos 2\alpha}{2}\right) \frac{1}{\left|\vec{Z}_2 - \vec{r}\right|} \exp\left[-i\frac{2\pi}{\lambda_p} \left|\vec{Z}_2 - \vec{r}\right|\right] r \mathrm{d}r \mathrm{d}\theta,\tag{B.1}$$

sendo U_{PS} a amplitude do campo elétrico do feixe de prova no plano de saída que está localizado a uma distância Z_2 do plano de entrada. U_{PE} é a amplitude do campo elétrico do feixe de prova no plano de entrada. λ_p é o comprimento de onda do campo elétrico. A integral está representada em coordenadas cilíndricas devido a simetria do feixe de prova.

Assumindo que a distância entre o plano de entrada e o plano de saída é muito maior

que o raio do feixe, ou seja, $Z_2 \gg r$ podemos obter as seguintes simplificações

$$\begin{aligned} \left| \vec{Z}_2 - \vec{r} \right| &\approx \vec{Z}_2, \\ \frac{2\pi}{\lambda_p} \left| \vec{Z}_2 - \vec{r} \right| &\approx \frac{2\pi}{\lambda_p} \left(Z_2 + \frac{r^2}{2Z_2} \right), \\ \frac{1 + \cos 2\alpha}{2} &\approx 1, \end{aligned}$$
(B.2)

de modo que a Equação (B.1) fica

$$U_{PS}(Z_2, t) = \frac{i}{Z_2 \lambda_p} \exp\left[-i\frac{2\pi Z_2}{\lambda_p}\right] \int_0^\infty \int_0^{2\pi} U_{PE}(r, z, t) \exp\left[-i\frac{\pi r^2}{Z_2 \lambda_p}\right] r dr d\theta, \quad (B.3)$$

que depende da expressão para a amplitude do campo elétrico no plano de entrada.

Neste trabalho foi utilizado como laser de prova um laser Gaussiano no modo TEM_{00} . Como visto no Apêndice A, a Equação (A.34), é a amplitude do campo elétrico de um feixe Gaussiano no modo fundamental. Podemos então, utilizá-la desconsiderando o termo de fase e assumindo que n = 1, o que não afeta de modo geral nos cálculos. Assim, teremos que o campo elétrico do feixe de prova na posição da superfície da amostra é

$$U_{PE}(r, Z_1) = \sqrt{\frac{2P_p}{\pi\omega_{1p}^2}} \exp\left[-\frac{r^2}{\omega_{1p}^2}\right] \exp\left[-\frac{i\pi}{\lambda_p}\left(2Z_1 + \frac{r^2}{R_{1p}}\right)\right],\tag{B.4}$$

em que P_p é a potência do feixe de prova, ω_{1p} é o raio do feixe de prova na superfície da amostra, e R_{1p} é o raio de curvatura do feixe de prova na superfície da amostra. No entanto, estamos interessados em saber como é a intensidade do feixe de prova no fotodetector quando acontece o efeito de ET. O efeito de ET induz uma variação na fase do feixe de prova, que pode ter o seu campo elétrico reescrito como

$$U_{PE}(r, Z_1, t) = \sqrt{\frac{2P_p}{\pi\omega_{1p}^2}} \exp\left[-\frac{r^2}{\omega_{1p}^2}\right] \exp\left[-\frac{i\pi}{\lambda_p}\left(2Z_1 + \frac{r^2}{R_{1p}}\right) - i\phi_{TM}(r, t)\right], \quad (B.5)$$

em que ϕ_{TM} é a variação da fase induzida pelo efeito de espelho térmico.

O cálculo da expressão do campo elétrico no plano de saída pode agora ter continuidade substituindo a Equação (B.5) na Equação (B.3) de modo que

$$U_{PS}(Z_1 + Z_2, t) = \frac{i}{Z_2 \lambda_p} \exp\left[-i\frac{2\pi Z_2}{\lambda_p}\right] \times \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \sqrt{\frac{2P_p}{\pi\omega_{1p}^2}} \exp\left[-\frac{r^2}{\omega_{1p}^2}\right] \exp\left[-\frac{i\pi}{\lambda_p} \left(2Z_1 + \frac{r^2}{R_{1p}}\right) - i\phi_{TM}(r, t)\right] \times$$
(B.6)
$$\exp\left[-i\frac{\pi r^2}{Z_2 \lambda_p}\right] r dr d\theta.$$

Resolvendo a integral em θ e fazendo a mudança de variável $g=r^2/\omega_{1p}^2$ temos

$$U_{PS}(Z_1 + Z_2, t) = \sqrt{\frac{2P_p}{\pi\omega_{1p}^2}} \exp\left[-i\frac{2\pi Z_1}{\lambda_p}\right] \times \frac{i\pi\omega_{1p}^2}{\lambda_p Z_2} \exp\left[-i\frac{2\pi Z_2}{\lambda_p}\right] \times$$
(B.7)
$$\int_0^\infty \exp\left[-g\right] \exp\left[-\frac{i\pi g}{\lambda_p} \left(\frac{\omega_{1p}^2}{R_{1p}} + \frac{\omega_{1p}^2}{Z_2}\right) - i\phi_{TM}(g, t)\right].$$

Definindo

$$B = \sqrt{\frac{2P_p}{\pi\omega_{1p}^2}} \exp\left[-i\frac{2\pi Z_1}{\lambda_p}\right]$$

$$e \qquad (B.8)$$

$$C = B\frac{i\pi\omega_{1p}^2}{\lambda_p Z_2} \exp\left[-i\frac{2\pi Z_2}{\lambda_p}\right],$$

obtemos

$$U_{PS}(Z_1 + Z_2, t) = C \int_0^\infty \exp\left[-g\left(1 + i\frac{\pi}{\lambda_p}\left(\frac{\omega_{1p}^2}{R_{1p}} + \frac{\omega_{1p}^2}{Z_2}\right)\right)\right] \exp\left[-i\phi_{TM}(g, t)\right].$$
 (B.9)

Partindo do principio que o feixe de prova é Gaussiano, podemos obter a partir das Equações (A.18), (A.19) e (A.20) que

$$Z_{cp} = \frac{\pi \omega_{0p}^2}{\lambda_p},\tag{B.10}$$

em que Z_{cp} é a distância confocal do feixe de prova e ω_{0p} é o raio da cintura do feixe de prova,

$$\omega_{1p}^2 = \omega_{0p}^2 \left(1 + \frac{Z_1^2}{Z_{cp}^2} \right) \tag{B.11}$$

е

$$R_{1p} = \frac{Z_1^2 + Z_{cp}^2}{Z_1},\tag{B.12}$$

de modo que podemos substituir estes resultados na Equação $({\rm B.9})$ obtendo

$$U_{PS}(Z_{1} + Z_{2}, t) = C \int_{0}^{\infty} \exp\left[-g\right] \times \\ \exp\left[-ig\frac{\pi}{\lambda_{p}} \left(\frac{\frac{\lambda_{p}Z_{cp}}{\pi} \left(1 + \frac{Z_{1}^{2}}{Z_{cp}^{2}}\right) Z_{1}}{Z_{1}^{2} + Z_{cp}^{2}} + \frac{\frac{\lambda_{p}Z_{cp}}{\pi} \left(1 + \frac{Z_{1}^{2}}{Z_{cp}^{2}}\right)}{Z_{2}}\right)\right] \times \\ \exp\left[-i\phi_{TM}(g, t)\right] \mathrm{d}g, \tag{B.13}$$

$$U_{PS}(Z_1 + Z_2, t) = C \int_0^\infty \exp\left[-g\left(1 + i\left(\frac{Z_1}{Z_{cp}} + \frac{Z_{cp}}{Z_2}\left(1 + \frac{Z_1^2}{Z_{cp}^2}\right)\right)\right)\right] \times \exp\left[-i\phi_{TM}(g, t)\right] \mathrm{d}g.$$
(B.14)

Inserindo o parâmetro

$$V = \frac{Z_1}{Z_{cp}} + \frac{Z_{cp}}{Z_2} \left(1 + \frac{Z_1^2}{Z_{cp}^2} \right)$$
(B.15)

na Equação (B.14) finalmente obtemos

$$U_{PS}(Z_1 + Z_2, t) = C \int_0^\infty \exp\left[-g\left(1 + iV\right) - i\phi_{TM}(g, t)\right] \mathrm{d}g,\tag{B.16}$$

que é a expressão final dependente do tempo para o campo elétrico no fotodetector. A intensidade do feixe de prova em função do tempo pode ser escrita como o módulo quadrado do campo elétrico

$$I(t) = \left| C \int_0^\infty \exp\left[-g \left(1 + iV \right) - i\phi_{TM}(g, t) \right] \mathrm{d}g \right|^2,$$
(B.17)

que é a expressão utilizada para analisar os dados experimentais e tratá-los teoricamente.

ou

Apêndice

Espectroscopia UV-Vis: Reflexão com Esfera Integradora

A Espectroscopia UV-Vis (ou Ultra Violeta - Visível) é uma técnica baseada na transmissão, reflexão e absorção de luz por um determinado material e, é amplamente utilizada como técnica complementar para outras técnicas. Nesta técnica, geralmente realizada em aparelhos comerciais, ou seja, aparelhos que possuem uma linha de montagem e são vendidos comercialmente por empresas, são verificados parâmetros físicos de uma determinada amostra em função do comprimento de onda emitido pelo aparelho. Normalmente em materiais semitransparentes podemos obter, por exemplo, a porcentagem de absorção de luz de um material (absorbância), e juntamente, a porcentagem de luz transmitida (transmitância). O coeficiente de absorção óptica do material também pode ser determinado. Para materiais opacos geralmente podemos obter a porcentagem de luz refletida da superfície (reflectância), e também a quantidade de luz absorvida pelo material.

Neste trabalho foram realizadas medidas complementares utilizando espectroscopia UV-Vis, juntamente com uma esfera integradora para obtermos a reflectância das amostras utilizadas. Uma breve abordagem sobre esferas integradoras será discutida nas sessões seguintes.

C.1 Esfera Integradora

C.1.1 Teoria

A teoria que está por trás do funcionamento de uma esfera integradora, apesar de simples, é pouco conhecida ou até mesmo mal conhecida. A função básica de uma esfera integradora é integrar sobre todo o espaço o fluxo radiante de luz. A troca de radiação em uma superfície difusa fechada é a base de toda a teoria de como funciona uma esfera integradora [74].

Podemos considerar a troca de radiação entre dois elementos infinitesimais de superfícies difusas, $dA_1 e dA_2$, como mostrado na Figura C.1.



Figura C.1: Representação de duas superfícies infinitesimais difusas separadas por uma distância S.

A parte da energia que dA_2 recebe de dA_1 é conhecida como Fator de Troca dF_{1-2} , dado por

$$\mathrm{d}F_{1-2} = \frac{\cos\theta_1\cos\theta_2}{\pi S^2} \mathrm{d}A_2,\tag{C.1}$$

em que S é a distância entre os dois elementos infinitesimais.

Considerando os dois elementos diferenciais dentro de uma superfície esférica, como representado na Figura C.2, vemos facilmente que $S = 2R \cos \theta_1 = 2R \cos \theta_2$ e assim a Equação (C.1) se torna

$$dF_{1-2} = \frac{dA_2}{4\pi R^2}.$$
 (C.2)



Figura C.2: Representação de uma reflexão e troca de radiação entre duas superfícies infinitesimais em uma esfera integradora.

Podemos observar que este resultado é muito importante pois ele não depende do ângulo entre o feixe e a superfície; e a distância entre as áreas infinitesimais, de forma que a fração de fluxo recebido por dA_2 é o mesmo para qualquer ponto da superfície esférica. Deste modo, é válido somar todas as áreas infinitesimais que trocam radiação,

$$F_{1-2} = \frac{1}{4\pi R^2} \int_{A_2} dA_2 = \frac{A_2}{4\pi R^2} = \frac{A_2}{A_E},$$
 (C.3)

sendo A_E a área total da esfera e A_2 a área em que o fluxo de luz é recebido.

A radiância, que é a densidade de fluxo por unidade de ângulo sólido descreve a quantidade de luz que flui da superfície. Essa luz flui devido, quando é incidido uma luz sobre uma superfície difusa, esta superfície se torna uma fonte virtual de luz por reflexão. Assim, a radiância de uma superfície de área A, com uma superfície difusa de reflectância η , sujeita a um fluxo incidente Φ_i é

$$L = \frac{\Phi_i \eta}{\pi A} (W/m^2/sr). \tag{C.4}$$

Para uma esfera integradora, devemos considerar todas as múltiplas reflexões superficiais e as perdas pelas aberturas que são necessárias para admitir o fluxo Φ_i , e também para obtermos o resultado final da radiância. Assim, se considerarmos uma esfera integradora de área A_E com N aberturas, e assumirmos que o fluxo é perfeitamente difundido pela primeira reflexão, a quantidade de fluxo incidente na superfície inteira da esfera é

$$Fluxo = \Phi_i \eta \left(\frac{A_E - \sum_{n=1}^N A_n}{A_E} \right), \tag{C.5}$$

sendo a parte entre parenteses a quantidade de fluxo recebido pela superfície da esfera que não é perdido pelas aberturas. A soma sobre todas as portas é a fração de portas, que pode ser escrito mais convenientemente como

$$\frac{\sum_{n=1}^{N} A_n}{A_E} = f, \tag{C.6}$$

de modo que a Eq. (C.5) fica

$$=\Phi_{i}\eta\left(1-f\right).\tag{C.7}$$

Pelos mesmos motivos, a quantidade de fluxo na esfera após duas reflexões será

$$= \Phi_i \eta^2 (1-f)^2,$$
 (C.8)

de modo que após K reflexões a quantidade de fluxo total na esfera é

$$= \Phi_i \sum_{n=1}^{K} \eta^n \left(1 - f\right)^n,$$
 (C.9)

ou ainda

$$= \Phi_i \eta \left(1 - f\right) \sum_{n=1}^K \eta^{n-1} \left(1 - f\right)^{n-1}, \qquad (C.10)$$

de modo que se assumirmos um número infinito de reflexões podemos escrever a série como

$$\sum_{n=1}^{K} \eta^{n-1} \left(1-f\right)^{n-1} = \frac{1}{1-\eta \left(1-f\right)},\tag{C.11}$$

nos permitindo escrever a equação para a radiância de uma esfera com N aberturas

$$L = \frac{\Phi_i \eta}{\pi A_E (1-f)} \frac{(1-f)}{[1-\eta (1-f)]} = \frac{\Phi_i \eta}{\pi A_E} \frac{1}{[1-\eta (1-f)]}.$$
 (C.12)

Se dividirmos a Eq. (C.12) em duas partes podemos observar que o primeiro quociente é a radiância para uma superfície qualquer, já o segundo quociente,

$$M = \frac{1}{[1 - \eta (1 - f)]},$$
 (C.13)

é o que podemos chamar de fator multiplicativo da esfera integradora, que leva em conta o aumento da radiância devido as múltiplas reflexões ocorridas dentro da superfície esférica.

Se, ao invés de considerarmos que somente há perdas pelas aberturas, considerarmos que cada abertura possui um valor definido de reflectância, a Eq. (C.13) pode ser escrita de um modo mais geral como

$$M = \frac{1}{1 - \eta_p \left(1 - \sum_{i=0}^N f_i\right) - \sum_{i=0}^N \eta_i f_i},$$
 (C.14)

sendo η_p a reflectância da parede da esfera, η_i a reflectância da i-ésima abertura e f_i a fração de área da i-ésima abertura. Por simplicidade, podemos considerar o termo $\eta_p \left(\sum_{i=0}^N f_i\right) - \sum_{i=0}^N \eta_i f_i$ como a reflectância média da parede da esfera $\bar{\eta}$, de modo que a equação para a radiância pode ser escrita como

$$L = \frac{\Phi_i \eta_0}{\pi A_E} \frac{1}{1 - \bar{\eta}},\tag{C.15}$$

sendo η_0 a reflectância inicial para o fluxo incidente.

C.1.2 Reflectância e Transmitância

A maior aplicação para uma esfera integradora é na medida de transmitância e reflectância de materiais. Para isso, a esfera integradora deve ser acoplada a um espectrofotômetro.

Nas medidas de transmitância a amostra a ser estudada deve ser colocada na frente
da abertura de entrada do fluxo luminoso da esfera integradora. Por outro lado, nas medidas de reflectância a amostra é colocada em uma abertura do lado oposto ao de entrada do fluxo luminoso. A reflectância hemisférica total, e as reflexões difusas e especulares são coletadas pela esfera integradora. Para as medidas de reflectância, o ângulo de incidência do feixe luminoso pode variar entre 0° até 10°.

Um dos principais erros recorrentes nas medidas de reflectância e transmitância é o fato de que, quando inserimos uma amostra com refletividade diferente àquela da parede da esfera, a refletividade média da esfera é alterada. Deste modo existem dois métodos para diminuir estes erros:

 O método da substituição, representado na Figura C.3 é um método em que, inicialmente é medida a radiância da esfera integradora utilizando um material padrão (ou material de referência), depois é feita uma comparação com a radiância obtida para outros materiais colocados no lugar do material padrão. Como a reflectância média da esfera integradora sofre uma mudança, a reflectância do material estudado pode ser obtida através da expressão

$$\frac{L_A}{L_R} = \frac{\eta_A (1 - \bar{\eta}_R)}{\eta_R (1 - \bar{\eta}_A)},$$
(C.16)

em que L_A , η_A são a radiância e a reflectância da amostra respectivamente, $\bar{\eta}_A$ a reflectância média da parede da esfera integradora com a amostra, L_R , η_R a radiância e a reflectância do material de referência e $\bar{\eta}_R$ a reflectância média da parede da esfera com o material de referência.



Figura C.3: Esquema de medida de reflectância utilizando uma esfera integradora pelo método da substituição: a) Medida da radiância de um material de referência; b) Medida da radiância de uma amostra qualquer.

Usando este método, a reflectância média da esfera com o material estudado $\bar{\eta}_A$ não pode ser facilmente determinada, pois ela também depende de η_A .

• Um outro método mais simples pode ser realizado mantendo a reflectância média da esfera constante, o método da comparação, representado na Figura C.4.



Figura C.4: Esquema de medida de reflectância utilizando uma esfera integradora pelo método da comparação utilizando dois feixes incidentes simultâneos, um feixe está sendo incidido sobre o material de referência e outro feixe é incidido sobre a amostra.

No método da comparação, o material de referência é colocado simultaneamente em outra abertura com a amostra a ser medida. Quando é utilizado apenas um feixe, a esfera integradora é girada, incidindo o feixe alternadamente em cada material. Quando existe a disponibilidade do uso de dois feixes, uma linha de base é realizada colocando uma outra amostra de referência na abertura da amostra, para determinar a taxa do fluxo incidente em cada feixe. Utilizando o método da comparação, podemos utilizar a equação

$$\frac{L_A}{L_R} = \frac{\eta_A}{\eta_R},\tag{C.17}$$

que nos dá diretamente a reflectância do material estudado.

Apêndice

Procedimentos Utilizados nos Cálculos Numéricos

O Método dos Elementos Finitos (MEF), é um método numérico normalmente utilizado para resolver problemas de física matemática e engenharia. Problemas típicos que são resolvidos utilizando MEF, são de análise estrutural, transferência de calor, fluxo de fluidos, transporte de massa e potencial eletromagnético [75].

Soluções matemáticas analíticas nem sempre são obtidas para problemas com geometrias, cargas, e propriedades de materiais complicadas. Podemos definir como solução analítica uma expressão matemática que nos dá valores desejados de uma determinada incógnita, em qualquer ponto de um corpo, e é válida para um infinito número de pontos neste mesmo corpo. As soluções analíticas são normalmente procuradas como soluções de equações diferenciais ordinárias, ou equações diferenciais parciais que descrevem algum problema físico [75]. No entanto, muitas vezes, somente recorrendo a métodos numéricos que são obtidas soluções para tais equações.

A formulação de elementos finitos em um determinado problema resulta em um sistema de equações algébricas simultâneas para a sua solução, o que substitui a solução da equação diferencial. Estes métodos numéricos dão valores aproximados para as incógnitas em um número discreto de pontos. O processo de modelar um corpo dividindo-o em um sistema equivalente de corpos menores (elementos finitos) interligados em dois ou mais elementos por pontos (pontos nodais) e/ou linhas de contorno e/ou superfícies é chamada de discretização [75]. Sendo assim, a base da solução de um problema por elementos finitos é a formulação de equações para cada elemento finito do corpo e combinar todos, a fim de obter a solução para o todo o corpo [75].

O método dos elementos finitos teve um importante papel para o desenvolvimento deste trabalho. O software "COMSOL MultiPhysics" foi utilizado para a obtenção de todas as soluções numéricas apresentadas neste trabalho. A partir das soluções numéricas obtivemos resultados da variação da temperatura na amostra, em função do tempo e

para diferentes posições da amostra. Do mesmo modo, obtivemos também resultados em função do tempo e em várias posições da amostra para o deslocamento induzido pelo efeito de ET.

Os passos seguidos para resolver os problemas por método dos elementos finitos neste trabalho foram:

- Determinar o tipo de problema a ser tratado, ou seja, determinar as equações diferenciais que serão resolvidas;
- Especificar a geometria e a simetria do problema;
- Definir os parâmetros e propriedades da amostra estudada;
- Determinar o termo de fonte para as equações de difusão de calor;
- Determinar as condições de contorno e iniciais do problema;
- Determinar a malha ("mesh") de elementos finitos no objeto.

Deste modo a solução do problema pode ser obtida e comparada com as soluções analíticas obtidas através das aproximações citadas durante todo o texto. A Figura D.1 mostra um exemplo da geometria e da malha utilizada para as simulações feitas neste trabalho. O problema foi considerado com simetria axial, devido a simetria dos feixes Gaussianos (Ver Apêndice A).



Figura D.1: Geometria e malha utilizada para as simulações numéricas efetuadas neste trabalho. O retângulo é uma representação bidimensional da amostra. O problema possui simetria axial.

A geometria da malha¹ e a quantidade de elementos finitos em um determinado objeto dependem do problema que será estudado. A malha ideal para um determinado problema, pode ser definida inicialmente resolvendo o problema com poucos elementos

 $^{^{1}}$ por exemplo um elemento de linha para um caso unidimensional, um elemento triangular ou quadrilátero para casos bidimensionais ou até tetraedros ou hexaedros para casos tridimensionais.

finitos, refinando-a até que o resultado obtido seja independente do tamanho dos elementos nela contido [55]. Por exemplo, como notado na Figura D.1, apesar da geometria dos elementos finitos ser a mesma em todo objeto (malha triangular), o número e o tamanho dos elementos finitos é diferente para diferentes áreas do objeto.

Os resultados obtidos a partir das soluções numéricas podem ser observados em gráficos bidimensionais e também em representações geométricas tridimensionais.



Figura D.2: Representação tridimensional do gradiente de temperatura na amostra utilizada como teste para o trabalho. A barra de cores é a escala de temperatura. A menor temperatura é representada pela cor azul escuro e a maior temperatura é representada pela cor vermelho escuro.

A Figura D.2 mostra uma imagem tridimensional do gradiente de temperatura e o deslocamento u_z na geometria utilizada obtidos a partir das soluções numéricas, para um tempo fixo de 170*ns*. O modelo utilizado para a simulação representada na figura foi o Modelo Completo Superficial com a influência de termos inerciais.

Apêndice

Comandos de Ajuste

Para o ajuste dos transientes, simulados utilizando o Modelo Completo por meio de MEF e também experimentais, foi utilizado o software *"Wolfram Mathematica"*. A Figura E.1 mostra os comandos básicos utilizados para o ajuste não linear.

```
(*Espelho Térmico - Alta Absorção Óptica - Excitação Pulsada*)
  \phiHAM[t_, g_, \thetaTM_, d_, m_, \omega0e_] :=
   -4 d OTM
     NIntegrate \left[\alpha e^{-\frac{1}{8}\omega \theta e^2 \alpha^2} \operatorname{Erfc}\left[\sqrt{dt} \alpha\right] \left(\operatorname{BesselJ}\left[0, \alpha \sqrt{mg} \omega \theta e\right] - 1\right),\right]
       \{\alpha, 0, 50000\}
 UHAM[t_, \Theta TM, d_, m_, V_, \omega 0e] :=
   NIntegrate [Exp[-(1 + i V) g - i \phiHAM[t, g, \thetaTM, d, m, \omega0e]],
     \{g, 0, 16\}, AccuracyGoal \rightarrow 7\}
 IntHAM[t_, \partial TM_, d_, m_, \nabla_, \omega \partial e_] := \frac{Abs[UHAM[t, \partial TM, d, m, \nabla, \omega \partial e_]]^2}{Abs[-\frac{i}{4\pi^2}]^2}
 AjusteHAM[data_, ∂TM0_, d0_, m_, V_, ω0e_] :=
   NonlinearModelFit \begin{bmatrix} data, \\ data \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \text{IntHAM}[t, \theta \text{TM}, d, m, \nabla, \omega 0e] \\ \text{IntHAM}[0, \theta \text{TM}, d, m, \nabla, \omega 0e] \end{bmatrix}
       \{\{\Theta TM, \Theta TM0\}, \{d, d0\}\}, t, AccuracyGoal \rightarrow 5 ["BestFitParameters"]
\phiHAM - Diferença de fase gerada na frente de onda do feixe de prova, Equação (5.8)
escrita em termos da difusividade térmica d;
        θTM - Correlação entre as propriedades térmicas, ópticas e mecânicas;
        m - Parâmetro geométrico do arranjo experimental \left| m = \left( \frac{\omega 1 p}{\omega 0 e} \right)^2 \right|;
        ω1p - Raio do feixe de prova na amostra;
        ω0e - Raio do feixe de excitação na amostra;
UHAM - Amplitude complexa do campo elétrico do feixe de prova incidente no fotodetector
no campo distânte, Equação (5.7);
        V - Parâmetro geométrico do arranjo experimental, Equação (B.15);
IntHAM - Intensidade do centro do feixe de prova no fotodetector;
AjusteHAM - Comandos de entrada para o ajuste não linear dos dados, fornecendo θTM e d.
```

Figura E.1: Comandos básicos utilizados para o ajuste não linear dos dados.

Referências Bibliográficas

- A. C. P. Rocha, L. H. C. Andrade, S. M. Lima, A. M. Farias, A. C. Bento, M. L. Baesso, Y. Guyot, and G. Boulon, *Opt. Express.* 20, 10034-10041 (2012).
- [2] S. M. Lima, L. H. C. Andrade, A. C. P. Rocha, J. R. Silva, A. M. Farias, A. N. Medina, M. L. Baesso, L. A. O. Nunes, Y. Guyot, G. Boulon, *J. Lumin.* 143, 600-604 (2013).
- [3] L. S. Herculano, L. C. Malacarne, V. S. Zanuto, G. V. B. Lukasievicz, O. A. Capeloto, and N. G. C. Astrath, J. Phys. Chem. B. 117, 1932-1937 (2013).
- [4] A. Einstein, Ann. Phys. 17, 132 (1905) Translation into English American Journal of Physics. 33, (1965).
- S. E. Bialkowski, Photothermal Spectroscopy Methods for Chemical Analysis (Wiley, New York, 1996).
- [6] Allan Rosencwaig and Allen Gersho, J. Appl. Phys. 47, 64-69 (1976).
- [7] F. Alan McDonald and Grover C. Wetsel, Jr., J. Appl. Phys. 49, 2313-2322 (1978).
- [8] M. V. Marquezini, N. Cella, A. M. Mansanares, H. Vargas and L. C. M. Miranda, *Meas. Sci. Technol.* 2, 396-401 (1991).
- [9] A. C. Boccara, D. Fournier, and J. Badoz, Appl. Phys. Lett. 36, 130-132 (1980).
- [10] Adreas Mandelis, J. Appl. Phys. 54, 3404-3409 (1983).
- [11] Jon Opsal, Allan Rosencwaig, and David L. Willenborg, *Appl. Opt.* 22, 3169-3176 (1983).
- [12] A. Rose, Reeta Vyas, and R. Gupta, Appl. Opt. 25, 4626-4643 (1986).
- [13] Jian-chun Cheng and Shu-yi Zhang, J. Appl. Phys. 70, 7007-7013 (1991).

- [14] G. L. Bennis, R. Vyas, R. Gupta, S. Ang, and W. D. Brown, J. Appl. Phys. 84, 3602-3610 (1998).
- [15] N. G. C. Astrath, L. C. Malacarne, G. V. B. Lukasievicz, H. S. Bernabe, J. H. Rohling, M. L. Baesso, J. Shen, and S. E. Bialkowski, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 091908 (2012).
- [16] N. G. C. Astrath, L. C. Malacarne, H. S. Bernabe, M. L. Baesso, and C. Jacinto, J. Appl. Phys. 111, 093502 (2012).
- [17] M. A. Olmstead, N. M. Amer, S. Kohn, D. Fournier and A. C. Boccara, Appl. Phys. A. 32, 141-154 (1983).
- [18] C. Karner, A. Mandel, and F. Träger, *Appl. Phys. A.* **38**, 19-21 (1985).
- [19] B. C. Li, J. Appl. Phys. 68, 482-487 (1990).
- [20] Bingcheng Li, Zhaoxin Zhen and Shunhua He, J. Phys. D: Appl. Phys. 24, 2196-2201 (1991)
- [21] H. Saito, M. Irikura, M. Haraguchi, and M. Fukui, Appl. Opt. 31, 2047-2054 (1992).
- [22] Jianchun Cheng, Lei Wu, and Shuyi Zhang, J. Appl. Phys. 76, 716-722 (1994).
- [23] Shaochen Chen, Costas P. Grigoropoulos, Hee K. Park, Pieter Kerstens, and Andrew C. Tam, Appl. Phys. Lett. 73, 2093-2095 (1998).
- [24] P. S. Jeon, J. H. Kim, H. J. Kim, J. Yoo, Thermochim. Acta. 494, 65-70 (2009).
- [25] Pao-Kuang Kuo and Mahendra Munidasa, Appl. Opt. 29, 5326-5331 (1990).
- [26] Roderick D. Tom, Ellen P. O'Hara and David Benin, J. Appl. Phys. 53, 5392-5400 (1982).
- [27] Thomas Guillemet, Andrzej Kusiak, Lisha Fan, Jean-Marc Heintz, Namas Chandra, Yunshen Zhou, Jean-François Sivain, Yongfeng Lu, and Jean-Luc Battaglia, Appl. Mater. Interfaces. 6, 2095-2102 (2014).
- [28] J. P. Gordon, R. C. C. Leite, R. S. Moore, S. P. S. Porto and J. R. Whinnery, J. Appl. Phys. 36, 3-8 (1965).
- [29] J. Shen, R. D. Lowe and R. D. Snook, *Chem. Phys.* **165**, 385-396 (1992).
- [30] M. L. Baesso, J. Shen and R. D. Snook, Chem. Phys. Lett. 197, 255-258 (1992).
- [31] M. L. Baesso, J. Shen, and R. D. Snook. J. Appl. Phys. 75, 3732-3737 (1994).

- [32] P. R. B. Pedreira, Desenvolvimento de um protótipo de lente térmica desenvolvida no tempo para estudo de líquidos em condições transitórias em tempo real, (Tese de Doutorado apresentada ao Departamento de Física, UEM, 2005).
- [33] Nelson G. C. Astrath, Luis C. Malacarne, Gustavo V. B. Lukasievicz, Marcos P. Belancon, Mauro L. Baesso, Prakash R. Joshi, and Stephen E. Bialkowski. J. Appl. Phys. 107, 083512 (2010).
- [34] N. G. C. Astrath, L. C. Malacarne, P. R. Pedreira, A. C. Bento, M. L. Baesso, and J. Shen, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 191908 (2007).
- [35] L. C. Malacarne, F. Sato, P. R. B. Pedreira, A. C. Bento, R. S. Mendes, M. L. Baesso, N. G. C. Astrath, and J. Shen, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 131903 (2008).
- [36] 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. *Appl. Phys. B.* 94, 473-481 (2008).
- [37] F. Sato, L. C. Malacarne, P. R. B. Pedreira, M. P. Belancon, R. S. Mendes, M. L. Baesso, N. G. C. Astrath and J.Shen, *J. Appl. Phys.* **104**, 053520 (2008).
- [38] Francine B. G. Astrath, Nelson G. C. Astrath, Jun Shen, Jianqin Zhou, Luis C. Malacarne, P. R. B. Pedreira, and Mauro L. Baesso. Opt. Express. 16, 12214-12219 (2008).
- [39] F. Sato, Desenvolvimento da Técnica de Espelho Térmico, (Tese de Doutorado apresentada ao Departamento de Física, UEM, 2009).
- [40] M. P. Belancon, Análise das técnicas de espelho térmico e de lente térmica para o estudo de materiais semistransparentes e opacos, (Dissertação de Mestrado apresentada ao Departamento de Física, UEM, 2009).
- [41] N. G. C. Astrath, J. Shen, M. L. Baesso, F. B. G. Astrath, L. C. Malacarne, P. R. B. Pedreira, A. C. Bento, and J. Zhou, J. Phys.: Conference Series. 214, 012014 (2010).
- [42] M. P. Belancon, L. C. Malacarne, P. R. B. Pedreira, A. N. Medina, M. L. Baesso, A. M. Farias, M. J. Barbosa, N. G. C. Astrath, J. Shen, J. Phys.: Conference Series. 214, 012016 (2010).
- [43] N. G. C. Astrath, L. C. Malacarne, V. S. Zanuto, M. P. Belancon, R. S. Mendes, M. L. Baesso, and C. Jacinto. J. Opt. Soc. Am. B: Opt. Phys. 28, 1735-1739 (2011).
- [44] Luis C. Malacarne, Nelson G. C. Astrath, Gustavo V. B. Lukasievicz, Ervin K. Lenzi, Mauro L. Baesso, and Stephen E. Bialkowski. *Appl. Spectrosc.* 65, 99-104 (2011).

- [45] G. S. Bianchi, Aplicação da técnica de espelho térmico na análise do aço inoxidável, (Dissertação de Mestrado apresentada ao Departamento de Física, UEM, 2011).
- [46] O. A. Sierra, Caracterização termo-óptica de polímeros em função da temperatura via espectroscopia de lente térmica e espelho térmico, (Dissertação de Mestrado apresentada ao Departamento de Física, 2011).
- [47] F. B. G. Astrath, Excitação óptica tipo degrau nas técnicas fototérmicas: estudo de vidros ópticos e de materiais para produção de energia, (Tese de Doutorado apresentada ao Departamento de Física, UEM, 2011).
- [48] R. R. Pezarini, Aplicação de técnicas fototérmicas para o estudo da transição de fase de primeira ordem na liga NiTi, (Dissertação de Mestrado apresentada ao Departamento de Física, UEM, 2011).
- [49] G. V. B. Lukasievicz, Modelo teórico das técnicas de lente térmica e espelho térmico com acoplamento térmico Amostra-Fluido, (Dissertação de Mestrado apresentada ao Departamento de Física, UEM, 2011).
- [50] Gustavo V. B. Lukasievicz, Luis C. Malacarne, Nelson G. C. Astrath, Vitor S. Zanuto, Leandro S. Herculano, Stephen E. Bialkowski. *Appl. Spectrosc.* 66, 1461-1467 (2012).
- [51] V. S. Zanuto, Efeito de amostra finita na espectroscopia de espelho térmico, (Dissertação de Mestrado apresentada ao Departamento de Física, UEM, 2012).
- [52] Gustavo V. B. Lukasievicz, Nelson G. C. Astrath, Luis C. Malacarne, Leandro S. Herculano, Vitor S. Zanuto, Mauro L. Baesso, Stephen E. Bialkowski, *Appl. Spectrosc.* 67, 1111-1116 (2013).
- [53] V. S. Zanuto, L. S. Herculano, M. L. Baesso, G. V. B. Lukasievicz, C. Jacinto, L. C. Malacarne, N. G. C. Astrath, *Opt. Mater.* 35, 1129-1133 (2013).
- [54] G. S. Bianchi, V. S. Zanuto, F. B. G. Astrath, L. C. Malacarne, I. A. A. Terra, T. Catunda, L. A. O. Nunes, C. Jacinto, L. H. C. Andrade, S. M. Lima, M. L. Baesso, and N. G. C. Astrath, *Opt. Lett.* 38, 4667-4670 (2013).
- [55] G. V. B. Lukasievicz, Efeitos de acoplamento térmico nas técnicas de lente térmica e espelho térmico, (Tese de Doutorado apresentada ao Departamento de Física, UEM, 2014).
- [56] Z. L. Wu, P. K. Kuo, Y. S. Lu, S. T. Gu, R. Krupka, *Thin Solid Films.* 290-291, 271-277 (1996).
- [57] H. S. Carslaw and J. C. Jaeger, Conduction of Heat in Solids, (Clarendon, Oxford, 1959).

- [58] http://hitoshi.berkeley.edu/221a/delta.pdf, acessado no dia 09 de Maio de 2014.
- [59] Arfken, George B., Física Matemática: Métodos Matemáticos Para Engenharia e Física 6^a Edição, Tradução de Arlete Simille Marques, (Elsevier, Rio de Janeiro, 2007).
- [60] L. Debnath and D. Bhatta, Integral Transforms and Their Applications 2nd Edition, (Chapman & Hall/ CRC, 2006).
- [61] Butkov, Eugene, *Mathematical Physics*, (Addison-Wesley Publishing Company, 1968).
- [62] L.D. Landau and E. M. Lifshitz, Theory of Elasticity, Volume 7 of Course of Theoretical Physics, 2nd English Edition, (Pergamon Press, 1970)
- [63] S. Timoshenko and J. N. Goodier, *Theory of Elasticity*, (McGraw-Hill Book Company, Inc., 1951).
- [64] W. Nowacki, *Thermoelasticity*, (Pergamon, Oxford, 1982).
- [65] L. S. Herculano, Teoria unificada para a variação do caminho óptico em sólidos isotrópicos: Aplicação na espectroscopia de lente térmica, (Tese de Doutorado apresentada ao Departamento de Física, UEM, 2013).
- [66] Metals Handbook, Vol. 2 Properties and Selection: Nonferrous Alloys and Special-Purpose Materials, 10th Edition, (ASM International, 1990).
- [67] MatWeb Material Property Data, "Aluminum 6351-T54", disponível no site http://www.matweb.com/search/SpecificMaterial.asp?bassnum=NLN201.
- [68] M. Auinger, P. Ebbinghaus, A. Blümich, A. Erbe, J. Europ. Opt. Soc. Rap. Public. 9, 14004 (2014).
- [69] H. Kaufmann, W. Fragner, and P. J. Uggowitzer, Int. J. Cast. Metal. Res. 18, 273-278 (2005).
- [70] G. Mrówka-Nowotnik, Archives of Materials Science and Engineering. 46, 98-107 (2010).
- [71] Frank Träger (Editor), Springer Handbook of Lasers and Optics, (Springer, 2007).
- [72] H. Kogelnik and T. Li, Appl. Opt. 5, 1550-1567 (1966).
- [73] S. J. Sheldon, L. V. Knight, and J. M. Thorne, *Appl. Opt.* **21**, 1663-1669 (1982).
- [74] http://www.labsphere.com/uploads/technical-guides/a-guide-to-integrating-spheretheory-and-applications.pdf, Acessado no dia 13 de Maio de 2014.

[75] Daryl L. Logan, A First Course in the Finite Element Method, Fifth Edition, (Cengage Learning, 2012).