

Métodos Matemáticos Aplicados ao Estudo da Interação Luz-Matéria.

Eduardo Victor Bergmann (PIBIC/CNPq/FA/Uem), Luis Carlos Malacarne (Orientador), e-mail: eduardobergmann1@hotmail.com.

Universidade Estadual de Maringá / Centro de Ciências Exatas e da Terra/Maringá, PR.

Ciências exatas e da terra: Física

Palavras-chave: Interação Luz-Matéria, Efeitos Fototérmicos, Equações Diferenciais

Resumo:

No presente projeto houve o estudo de métodos matemáticos aplicados a tópicos relacionados com a interação luz-matéria, especialmente os efeitos de lente térmica e espelho térmico induzidos via excitação laser. As soluções analíticas obtidas foram comparadas com soluções numéricas com o objetivo de checar os limites de validade. Estes modelos teóricos são importantes para discussão de parâmetros que influenciam no sinal da técnica de lente térmica. Esta técnica é baseada na geração de um gradiente de temperatura devido à absorção da energia da luz laser de um feixe de excitação. O perfil de temperatura localizado induz a variação do caminho ótico do laser de prova, funcionando como uma lente. Um fotodetector mede a intensidade do laser de prova em função do tempo de excitação e relaxamento da amostra.

Introdução

Fenômenos relacionados com transformações de energia fazem parte do dia a dia do homem. Um exemplo prático disso são os efeitos fototérmicos, que consiste em uma onda eletromagnética transportando energia e ao interagir com matéria converte-la em calor. A partir deste princípio foram desenvolvidos estudos para o conhecimento de tal efeito. Com o advento do laser na década de 60 e o desenvolvimento de modelos teóricos foi possível o desenvolvimento de técnicas para caracterização de propriedades físicas e químicas de materiais baseadas nos efeitos de interação da luz com a matéria. Dentre várias técnicas, a lente térmica (LT) e espelho térmico (ET) consistem em detectar os efeitos termoelásticos que se propagam em uma amostra devido ao calor gerado pela absorção da radiação. Neste processo, tanto as propriedades de difusão de calor, que determinam a carga térmica induzida no material, quanto o comportamento óptico e mecânico do mesmo, podem ser avaliados simultaneamente fornecendo informações que são decisivas em termos da aplicação e caracterização de materiais. As duas

técnicas fototérmicas se distinguem pelo tipo de detecção empregada. A LT é amplamente utilizada no estudo de materiais sólidos e líquidos transparentes, principalmente por sua alta sensibilidade e por ser uma técnica remota, o que permite o controle da temperatura durante a realização dos experimentos. Com características similares às da LT, a técnica de ET foi recentemente desenvolvida para a caracterização óptica, térmica e mecânica de materiais opticamente transparentes e opacos.

Materiais e Métodos

Para o estudos dos efeitos termoelásticos aplicados às técnicas de LT e ET foram efetuados cálculos analíticos e numéricos utilizando-se o software *Mathematica* (Licença L3206-5660) em adição a textos bibliográficos.

Resultados e Discussão

A descrição teórica do modelo de LT consiste de três passos básicos: O primeiro a é a solução da equação de difusão térmica

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

na qual $Q(r,z)$ é o termo de fonte que depende das propriedades do feixe laser e do coeficiente de absorção do material. O segundo passo é a determinação da diferença fase induzida no feixe de prova, cuja dependência com o perfil da temperatura é descrito pela relação

$$\Phi(r, z, t) = \frac{2\pi l}{\lambda} \left(\frac{dn}{dT} \right) [T(r, t) - T(0, t)]$$

O terceiro passo é o cálculo da intensidade do laser de prova no detector, a qual é dada pela relação

$$I(t) = \frac{\left| \int_0^\infty e^{-(1+iV)g} e^{-i\Phi(g,t)} dg \right|^2}{\left| \int_0^\infty e^{-(1+iV)g} dg \right|^2} ,$$

Na relação acima, g é a variável radial escalonada em relação ao diâmetro do feixe de prova e V é um parâmetro que depende da geometria do setup experimental.

Para a solução da equação diferencial foi utilizado o método das transformadas integrais de Fourier, Laplace e Hanckel. Para o modelo aplicado na LT foi utilizado a aproximação de baixa absorção óptica (LAM), pois esta técnica é especialmente útil na caracterização de materiais altamente transparentes . A solução da equação de difusão térmica para este caso no conduz ao perfil de temperatura descrito pela relação

$$T(r,t) = Q \int_0^t \frac{e^{-\left(\frac{2r^2/\omega}{1+2\frac{t}{t_r}}\right)}}{1+2\frac{t}{t_r}} dt (1 - UnitStep[t - \varepsilon]) + Q_0 \int_{t-\varepsilon}^t \frac{e^{-\left(\frac{2r^2/\omega}{1+2\frac{t}{t_r}}\right)}}{1+2\frac{t}{t_r}} dt (UnitStep[t - \varepsilon])$$

Na equação acima a função *UnitStep* é utilizada para definir o período em que o laser de excitação está ligado e desligado durante o processo de monitoramento. No gráfico abaixo mostramos um exemplo da dinâmica da temperatura na posição $r = 0$, em uma amostra padrão.

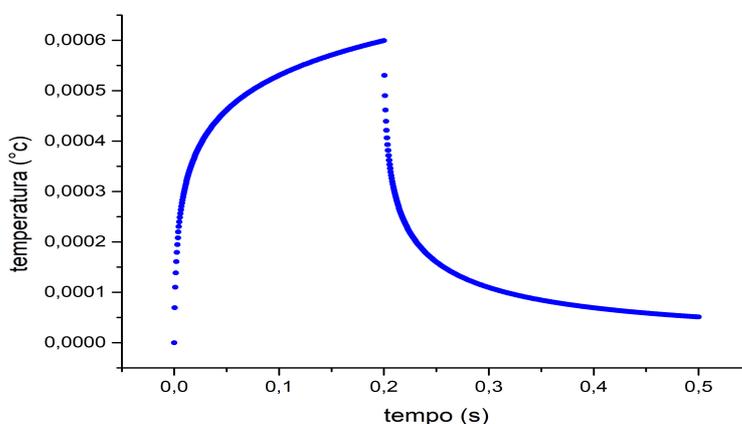


Figura 1 – Perfil de temperatura para parâmetros característicos de uma amostra vítrea (Alumino-Silicato de Cálcio dopados com Érbio).

O perfil de temperatura gerado na amostra resulta em um sinal de LT medido no detector como demonstrado na figura abaixo. A primeira parte (tempo até 0.2 segundos) está relacionado ao processo de geração de LT, no qual o laser de excitação está ligado. A segunda parte ($t > 0.2$) é relativa ao processo de relaxação térmica após os laser de excitação ser desligado.

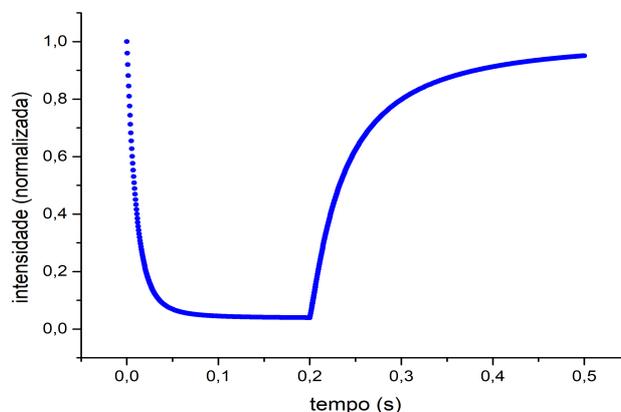


Figura 2 – Sinal de LT para parâmetros característicos de uma amostra vítrea (Alumino-Silicato de Cálcio dopados com Érbio).

Apesar do sinal de LT acima ser gerado numericamente, no caso do processo inverso, no qual o sinal é obtido experimentalmente, temos que o ajuste do dado experimental com o modelo citado permite a determinação de propriedades térmicas e ópticas do material estudado. Um processo similar acontece na técnica de ET, no qual em vez do monitoramento do feixe de prova que passa pela amostra, monitoramos o feixe de prova refletido pela superfície da amostra. Neste caso, a diferença de fase é induzida pela deformação superficial devido ao aquecimento localizado gerado pela absorção da luz laser. Para a descrição deste efeito, em adição a equação de difusão térmica, necessitamos resolver a equação termoelástica para descrever o perfil da deformação induzida. A técnica de ET, além de propriedades térmicas também permite a determinação de propriedades elásticas da matéria.

Conclusões

As soluções da equação de difusão térmica e a equação termoelástica aliadas ao modelo de propagação do feixe de prova utilizado nas técnicas de LT e ET permitem a determinação de propriedade térmicas, ópticas e mecânicas de materiais.

Agradecimentos

Agradeço ao CNPq pelo apoio financeiro.

Referências

[1] Pedreira, P. R. B, **Desenvolvimento de um protótipo de lente térmica resolvida no tempo para estudos de líquidos em condições transitórias em tempo real.** (Tese de doutorado, Universidade Estadual de Maringá. 2005)

[2] Malacarne, L.C, et al. **Role of Photophysics Processes in Thermal Lens Spectroscopy of Fluids: A Theoretical Study.** *J. Phys. Chem. A*, 118, 5983-5998, 2014.