

Universidade Federal Fluminense

RODOLFO DA SILVA MACHADO DE FREITAS

Modelagem Computacional da Condução de Calor
Aplicada à Nanotecnologia

Volta Redonda

2016

RODOLFO DA SILVA MACHADO DE FREITAS

Modelagem Computacional da Condução de Calor Aplicada à Nanotecnologia

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia. Área de Concentração: Modelagem Computacional.

Orientador:

Prof. Cleyton Senior Stampa, D.Sc.

Coorientador:

Prof. Diomar Cesar Lobão, Ph.D.
Prof. Gustavo Benitez Alvarez, D.Sc.

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

Volta Redonda

2016

F862 Freitas, Rodolfo da Silva Machado de.

Modelagem computacional da condução de calor aplicada a nanotecnologia / Rodolfo da Silva Machado de Freitas – Volta Redonda, 2016.

84 f. il.

Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) – Universidade Federal Fluminense.

Orientador: Cleyton Senior Stampa.

Coorientadores: Diomar Cesar Lobão; Gustavo Benitez Alvarez.


1. Condução de calor hiperbólica em nanomateriais.
2. Condução de calor de não-Fourier. 3. Teoria da termomassa.
4. Método da Variação Total Decrescente (TVD). 5. Transferência de calor computacional. 6. Relação massa-energia de Einstein.
I. Stampa, Cleyton Senior. II. Lobão, Diomar Cesar. III. Alvarez, Gustavo Benitez. IV. Título.

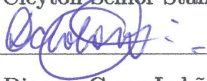
Modelagem Computacional da Condução de Calor Aplicada à Nanotecnologia

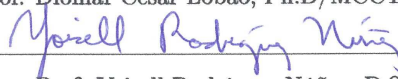
Rodolfo da Silva Machado de Freitas

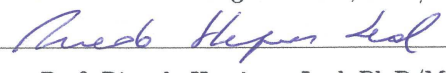
Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia. Área de Concentração: Modelagem Computacional.

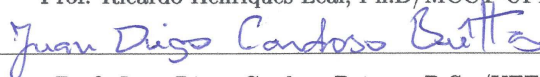
Banca Examinadora:

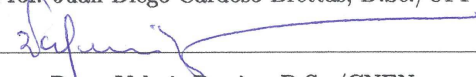

Prof. Cleyton Senior Stampa, D.Sc./MCCT-UFF (Orientador)

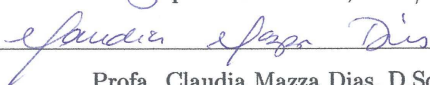

Prof. Diomar Cesar Lobão, Ph.D/MCCT-UFF (Coorientador)


Prof. Yoisell Rodríguez Núñez, D.Sc./MCCT-UFF


Prof. Ricardo Henriques Leal, Ph.D/MCCT-UFF


Prof. Juan Diego Cardoso Brêttas, D.Sc./UFF


Pesq. Valmir Pereira, D.Sc./CNEN


Profa. Claudia Mazza Dias, D.Sc./UFRRJ

Volta Redonda, 4 de março de 2016.

Dedicatória. Aos meus pais e família

Agradecimentos

Para Deus, pela saúde e pela ajuda que mais ninguém pode dar.

Aos meus pais e toda a minha família pelo apoio e incentivo.

Ao meu orientador Prof. Cleyton, e Co-orientadores Prof. Lobão e Prof. Gustavo pela dedicação e profissionalismo na condução deste trabalho. Tem sido uma grande honra ser orientado por estes três grandes professores nos últimos anos. Eles vêm me ensinando como pensar e trabalhar como um ótimo pesquisador. Eu agradeço todas as suas idéias e comentários construtivos que me ajudaram a realizar esta dissertação de Mestrado.

Aos meus amigos de república e do MCCT que sempre me apoiaram e ajudaram.

A EEIMVR-UFF e a todos os seus funcionários.

Por fim, a CAPES pelo suporte financeiro através da bolsa de Mestrado.

Resumo

A teoria da Termomassa é baseada na relação massa-energia de Einstein, ou seja, o calor possui a dualidade massa-energia, comportando-se como energia em processos onde ocorre sua conversão em outra forma de energia, e se comportando como massa em processos de transferência de calor. O modelo matemático estabelecido pela teoria da Termomassa recai dentro da classe de problemas denominados de condução de calor de não-Fourier.

No presente trabalho toma-se como objetivo aplicar a teoria da Termomassa no campo da nanotecnologia, desenvolvendo-se um código computacional que, uma vez capacitado a reproduzir resultados já encontrados na literatura, permita o estudo do assunto a partir do seu estado da arte.

O método explícito de MacCormack foi utilizado como um tratamento numérico inicial para o ganho de experiência na área de modelagem computacional, visto que este método é amplamente empregado para a resolução numérica de problemas hiperbólicos. Porém, quando a escala do problema recai na nanoescala gera-se a necessidade de um esquema numérico mais robusto. Portanto, aplicou-se no presente trabalho o esquema da Variação Total Decrescente (TVD) de alta ordem para a resolução numérica das equações que governam a condução de calor em nanomateriais.

Através da presente metodologia, foram analisadas as respostas térmicas fornecidas pela teoria da Termomassa de diferentes materiais que são amplamente aplicados na manufatura de nanofilmes. Desta forma, pôde-se avaliar o processo de condução de calor de não-Fourier em nanofilmes devido à presença de fluxos de calor de alta intensidade causados por pulsos de Laser.

Abstract

The Thermomass theory is based on the relationship mass-energy of Einstein, i.e., the heat has mass-energy duality, behaving as energy in processes where its conversion occurs in another form of energy, and behaving as mass in heat transfer processes. The mathematical model established by the Thermomass model falls within the class of problems called models non-Fourier heat conduction.

The present work aims to apply the Thermomass theory in the nanotechnology field, developing a computational code which, once capable to reproduce results already found in the literature, allow the study of the subject in the state of art.

The MacCormack explicit method was used as initial numerical treatment to get experience in computer modeling area, since this method is widely employee for numerical solution of hyperbolic problems. However, when the scale of the problem falls in the nanoscale is generated the necessity for a more robust numerical scheme. Therefore, it was applied in the present work a high order Total Variation Diminishing (TVD) scheme for the numerical resolution of the governing equations the heat conduction in nanomaterials.

From the present methodology, it was analyzed the thermal responses provided by Thermomass theory of different materials that are widely applied in manufacturing of nanofilms. Thus, it was possible to evaluate the non-Fourier heat conduction process in nanofilms due the presence of high intensity heat fluxes caused by Laser pulses.

Palavras-chave

1. Condução de Calor Hiperbólica em Nanomateriais
2. Condução de Calor de não-Fourier
3. Teoria da Termomassa
4. Método da Variação Total Decrescente (TVD)
5. Transferência de Calor Computacional
6. Relação massa-energia de Einstein

Glossário

- CV : modelo Cattaneo-Vernotte
- HTS : modelo Hiperbólico de Duas-Etapas
- DPL : modelo Duas-Fases de Retardo
- TVD : método da Variação Total Decrescente
- CFL : número de Courant-Friedrichs-Lewy

Sumário

Lista de Símbolos	x
1 Introdução	13
1.1 Objetivo Geral	17
1.2 Objetivos Específicos	17
1.3 Estrutura da Dissertação	18
2 Desenvolvimento Teórico	19
2.1 Modelos matemáticos de condução de calor de não-Fourier	19
2.2 Modelos físicos de condução de calor de não-Fourier	22
2.2.1 Modelo da Hidrodinâmica dos Fônons	23
2.2.2 Modelo da Termomassa	24
2.2.2.1 Modelo Matemático da Teoria da Termomassa	25
3 Resolução Numérica das Equações Governantes	30
3.1 Diferenças Finitas	30
3.2 Adimensionalização das Equações Governantes	32
3.3 Forma Conservativa vetorial das Equações Governantes	33
3.4 Método Explícito de MacCormack	34
3.5 Validação do Método de MacCormack	35
3.6 Método da Variação Total Decrescente (TVD)	40
3.7 Validação do Método da Variação Total Decrescente (TVD)	42

4	Resultados e Discussões	48
4.1	Aplicação de Pulsos de Laser em Nanofilmes	50
4.1.1	Resultados para o nanofilme de Alumínio	52
4.1.2	Resultados para o nanofilme de Silício	55
4.1.3	Resultados para o nanofilme de Ouro	59
4.2	Influência da Intensidade do Pulso de Laser na Propagação de Calor	62
4.2.1	Resultados para o nanofilme de Alumínio	63
4.2.2	Resultados para o nanofilme de Ouro	70
5	Conclusões e Trabalhos Futuros	76
5.1	Conclusões	76
5.2	Trabalhos Futuros	77
	Apêndice	78
I	Compatibilidade da teoria da Termomassa com as leis da Termodinâmica	78
I.1	Lei Zero da Termodinâmica	78
I.2	Primeira Lei da Termodinâmica	78
I.3	Segunda Lei da Termodinâmica	79
I.4	Terceira Lei da Termodinâmica	80
	Referências	81

Lista de Símbolos

A_{\perp} área da seção transversal perpendicular a direção de propagação

c velocidade da luz no vácuo

c_p calor específico

C capacidade térmica volumétrica

f função contínua

f_{Th} força de resistência ao escoamento de Termomassa

G fator de acoplamento elétron-fônon

H comprimento do nanofilme

k condutividade térmica

L largura do nanofilme

O erro de truncamento

m_e massa dos elétrons livres

\dot{m}_T taxa de vazão mássica do gás de Termomassa

n_e número de elétrons livres por unidade de volume

p pressão

q fluxo de calor

s velocidade de transporte da perturbação térmica

t tempo

T temperatura

u_T velocidade de escoamento do gás de Termomassa

v_c velocidade de propagação de calor no meio

v_s velocidade do som no meio

x, y coordenadas cartesianas

α difusividade térmica

γ constante de Grüneisen

κ razão de calor específico

ξ efeitos de interação entre os thermons

ρ densidade do meio

σ constante de Boltzmann

τ tempo característico

φ parâmetro proporcional

Δ diferença ou intervalo

Δt passo de tempo

∇ gradiente de um campo escalar

subscritos e superescritos:

$\mathbf{0}$ condição inicial

$*$ variável adimensional

\cdot derivada temporal

Co função de pulso Cosseinodal

CV modelo Cattaneo-Vernotte

d tempo de duração do pulso de laser

e elétrons

G função de pulso Gaussiana

i índice da malha

l sistema de fônons

n passo de tempo

Th gás de Termomassa

Capítulo 1

Introdução

A Nanotecnologia é o estudo e desenvolvimento de novos materiais e dispositivos onde os comprimentos característicos destes está no intervalo de 1 a 100 nm [1]. Na nanoescala as propriedades físicas dos materiais diferem significativamente das propriedades na escala macroscópica, onde nesta escala os dispositivos apresentam dimensões maiores do que $10^{-3}m$. Assim, o estudo de como ocorrem os fenômenos físicos na nanoescala é de grande interesse para que se obtenham avanços na nanotecnologia.

A nanotecnologia é considerada uma tecnologia emergente devido à possibilidade de estabelecer avanços em produtos existentes e a criação de novos produtos com características totalmente novas e funções com um enorme potencial em uma ampla gama de aplicações. Além de várias utilidades industriais, grandes inovações estão previstas para a tecnologia da informação e comunicação, na biotecnologia, na medicina, e ainda a abertura de possibilidades para observação de novos fenômenos físicos [2].

O estudo do processo de transferência de calor, por condução, em nanomateriais pode ser caracterizado pela presença de fluxos de calor de grande intensidade decorrentes de elevadíssimos gradientes de temperatura e/ou pela extremamente diminuta área das seções transversais. Além de existirem modelos na mecânica quântica, também existem modelos físicos dentro da teoria do contínuo, mesmo sendo a dimensão característica associada à nanoescala. Tais fenômenos são de grande interesse devido às potenciais aplicações técnicas e de engenharia. Exemplos destes são os nanofilmes, nanotubos, nanofios, etc. Outras aplicações importantes referem-se ao processamento de materiais baseados em aquecimento por Laser e à criogenia [3].

Os primeiros estudos sobre condução de calor foram realizados por J. Fourier em 1822 [4]. Nestes, Fourier caracterizou a transferência de calor por condução em sistemas

macroscópicos submetidos a gradientes de temperatura moderados, como um transporte de calor por difusão molecular. Através de resultados experimentais Fourier formulou uma equação constitutiva, a qual recebeu o nome de lei de Fourier para condução de calor. A Figura 1.1 ilustra um diagrama esquemático do experimento realizado por Fourier.

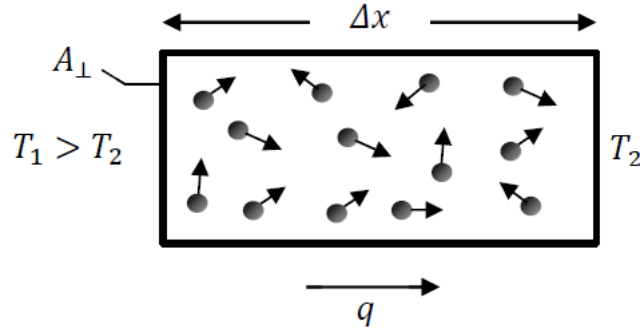


Figura 1.1: Diagrama esquemático do experimento realizado por Fourier.

A lei de Fourier estabelece que a taxa de calor transferido por condução, q , é diretamente proporcional à área da seção transversal, perpendicular a sua direção de propagação, A_{\perp} , à diferença entre a maior e a menor temperaturas envolvidas, $T_1 - T_2$, e é inversamente proporcional à distância entre estas temperaturas, Δx [4],

$$q = kA_{\perp} \frac{T_1 - T_2}{\Delta x}. \quad (1.1)$$

A forma diferencial da lei de Fourier da condução de calor é dada por

$$q = -k\nabla T, \quad (1.2)$$

onde k é a condutividade térmica do material. Ao introduzir a forma diferencial da lei Fourier na equação de conservação de energia

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot q = 0, \quad (1.3)$$

obtém-se a equação parabólica da condução de calor

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T, \quad (1.4)$$

onde ρ , c_p e α são a densidade, o calor específico e a difusividade térmica do meio, respectivamente.

A lei de Fourier é simples no âmbito da matemática e tem sido amplamente utilizada,

embora seja apenas uma relação empírica. Sendo esta uma equação diferencial parcial do tipo parabólica, uma perturbação térmica em um ponto no interior do domínio de solução, para um instante de tempo maior que zero $t > 0$, influenciará apenas eventos em instantes de tempos posteriores. As soluções avançam no tempo e se propagam no espaço a partir do ponto do domínio cuja perturbação térmica foi imposta. A ocorrência de efeitos dissipativos assegura que as soluções sejam sempre suaves no interior do domínio para qualquer $t > 0$, mesmo se as condições iniciais contenham descontinuidades.

Para o processo de condução de calor transiente em um meio contínuo a lei de Fourier retorna uma velocidade de propagação do calor infinita [5, 6, 7, 8]. A velocidade infinita de propagação de calor no meio é fisicamente irreal. Porém, verifica-se que esta lei retorna respostas precisas da condução de calor na maioria das aplicações de engenharia. Isto ocorre, pois a distribuição de temperatura no meio é representada em relação à função erro de Gauss, *erf*, onde esta se aproxima assintoticamente da unidade à medida que o comprimento característico do meio se torna infinito. Portanto, a perturbação térmica é sentida apenas por pontos próximos à mesma [5, 6]. Por exemplo, para um meio semi-infinito $0 \leq x < \infty$, inicialmente a uma temperatura uniforme T_0 , onde subitamente seja imposta uma Temperatura $T_s > T_0$ em $x = 0$. A distribuição de temperatura neste meio é definida conforme a Eq. 1.5 [5].

$$T(x, t) = T_s + (T_0 - T_s) \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha t}} \right) \quad (1.5)$$

A partir da Eq. 1.5, verifica-se que para qualquer valor de $x < \infty$, não importando a distância da perturbação térmica, e para qualquer $t > 0$, tem-se que $T(x, t) > T_0$. Assim, o calor se propaga a partir de $x = 0$ para o interior do domínio de solução instantaneamente. Portanto, a velocidade de propagação do calor é infinita.

Já para os casos bi e tridimensionais, soluções analíticas são encontradas. No entanto, em muitos casos, a geometria e as condições de contorno são complexas impedindo a utilização de técnicas analíticas, e deve recorrer-se a métodos numéricos.

A limitação imposta pela lei de Fourier não é importante exceto em escalas de tempo e comprimento extremamente pequenas [9]. Recentemente, Escobar et al. [10] delinearam os regimes da condução de calor em função das escalas de tempo e comprimento. Em seu trabalho, Escobar verificou que a lei de Fourier é válida apenas quando o comprimento característico do meio é muito maior do que o caminho livre médio dos portadores de calor. Em geral, o comprimento característico deve ser maior do que dez vezes o caminho

livre médio. Também é válida quando a escala de tempo do processo é muito maior do que o tempo requerido para obter o equilíbrio termodinâmico no meio, após este sofrer uma perturbação térmica.

Com o advento da nanotecnologia e conseqüentemente de tecnologias de processamento e manufatura de elementos baseados em aquecimento por laser, gera-se à necessidade de investigar o processo de condução de calor em nanoescala. A partir de resultados teóricos e experimentais, produzidos por Yang et al. [11] e Chang et al. [12] respectivamente, verifica-se que a lei de Fourier quando aplicada à nanoescala, obtém resultados insatisfatórios. Assim, esta se torna inválida para a análise da transferência de calor por condução em nanomateriais.

Com o objetivo de superar a contradição imposta pela lei de Fourier, várias teorias têm sido desenvolvidas para descrever o processo de transferência de calor por condução. Seus modelos matemáticos são frequentemente denominados modelos de condução de calor de não-Fourier.

Um dos primeiros modelos da condução de calor de não-Fourier foi desenvolvido por Carlo Cattaneo [13] e Pierre Vernotte [14], que desenvolveram o modelo CV. Este consistiu em modificar a lei de Fourier através da introdução de um tempo de relaxação do fluxo de calor. No entanto, o modelo CV apresenta duas inconveniências. A primeira é que este é um modelo baseado do ponto de vista matemático na tentativa de determinar uma velocidade finita de propagação de calor, e não um modelo baseado nas leis físicas que governam o processo de transferência de calor por condução. A segunda inconveniência é que em certas situações este modelo viola a segunda lei da termodinâmica [15]. Considerando-se um estado de não equilíbrio termodinâmico foi desenvolvido o modelo Hiperbólico de Duas-Etapas (Hyperbolic Two-Step) [16], e para um processo de aquecimento muito rápido foi desenvolvido o modelo Duas-Fases de Retardo (Dual-Phase-Lag) [17]. Estes dois modelos podem ser vistos como extensões do modelo CV, os quais são descritos a seguir.

O modelo Hiperbólico de Duas-Etapas foi desenvolvido por Qiu e Tien [16]. Este modelo tem como objetivo investigar o processo de condução de calor em filmes metálicos aquecidos por um pulso de Laser. Neste modelo, assume-se que os elétrons e a estrutura cristalina do metal não estão em equilíbrio térmico durante o processo de aquecimento. Este processo de aquecimento pode ser modelado em dois passos. Primeiramente, os elétrons absorvem energia dos fótons e a temperatura destes aumenta rapidamente. Após isto, os elétrons transportam sua energia para a estrutura cristalina do metal através

de colisões elétron-fônon. A temperatura da estrutura cristalina aumenta enquanto a temperatura dos elétrons diminui.

Já o modelo Duas-Fases de Retardo foi desenvolvido por Tzou [17]. Este modelo tem como objetivo investigar o processo de aquecimento muito rápido, considerando tempos de relaxação diferentes para temperatura e para o fluxo de calor.

Para descrever a propagação da onda térmica em dielétricos, foi desenvolvido o modelo da hidrodinâmica dos fônons [18], onde o mesmo é baseado na equação de transporte de Boltzmann. Recentemente, Guo [19] desenvolveu a teoria da Termomassa, a qual propõe que o calor possua inércia. Assim, fazendo-se o uso dessa teoria, a qual está baseada na relação massa-energia de Einstein [20], a condução de calor é entendida como escoamento de Termomassa e, portanto, os fundamentos físicos Newtonianos podem ser utilizados para analisar o seu movimento. Uma descrição mais detalhada desta teoria será realizada no capítulo seguinte.

1.1 Objetivo Geral

No presente trabalho, toma-se como objetivo aplicar a teoria da Termomassa no campo da nanotecnologia, desenvolvendo-se um código computacional que, uma vez capacitado a reproduzir resultados já encontrados na literatura, permita o estudo do assunto a partir do seu estado da arte.

1.2 Objetivos Específicos

Para o alcance do objeto geral, propõem-se os seguintes objetivos específicos:

1. Apresentar uma descrição física da teoria da Termomassa e desenvolver uma equação geral para condução de calor, para o caso unidimensional, em nanomateriais baseado na teoria da Termomassa.
2. Aplicar o método de MacCormack como um tratamento numérico inicial para o ganho de experiência na área de modelagem computacional.
3. Aplicar o método da Variação Total Decrescente (Total Variation Diminishing-TVD) para a resolução numérica das equações que governam a condução de calor em nanomateriais.

4. Validar os códigos computacionais desenvolvidos para os métodos numéricos aplicados no presente trabalho através de um caso teste oriundo da literatura.
5. Analisar as respostas térmicas fornecidas pela teoria da Termomassa de diferentes materiais que são amplamente aplicados na manufatura de nanofilmes.

1.3 Estrutura da Dissertação

No Capítulo 2, é descrito os principais modelos desenvolvidos para suprir a contradição imposta pela lei de Fourier. Em seguida, será apresentada uma descrição física da teoria da Termomassa. Por fim, desenvolve-se um modelo matemático para a determinação das equações que governam o transporte do gás de Termomassa em um meio material, em escala nanométrica.

O Capítulo 3 é destinado à descrição detalhada dos tratamentos numéricos tomados com o objetivo da resolução numérica das equações que governam a condução de calor em nanomateriais. Neste Capítulo são descritos os métodos numéricos utilizados no presente trabalho, ou seja, o método de MacCormack [21] e o método da Variação Total Decrescente (Total Variation Diminishing - TVD) [22, 23, 24]. Finalmente, utiliza-se um problema disponível na literatura para a validação dos algoritmos computacionais desenvolvidos para os métodos numéricos empregados.

No Capítulo 4, simulações numéricas serão realizadas para analisar as respostas térmicas fornecidas pela teoria da Termomassa de diferentes materiais que são amplamente aplicados na manufatura de nanofilmes.

Por fim, no Capítulo 5 são apresentadas as conclusões dos resultados obtidos a partir do presente trabalho. Assim como, são apresentadas algumas propostas de trabalhos futuros.

Capítulo 2

Desenvolvimento Teórico

Neste capítulo, primeiramente, será apresentada uma breve descrição dos principais modelos desenvolvidos para suprir a contradição imposta pela lei de Fourier, conforme descrito no capítulo anterior. Em seguida, será apresentada uma descrição física da teoria a ser utilizada no presente trabalho, ou seja, a teoria da Termomassa. A premissa básica desta teoria é a da relação massa-energia de Einstein. Por fim, desenvolve-se um modelo matemático para a determinação das equações que governam o transporte do gás de Termomassa em um meio material, em escala nanométrica.

2.1 Modelos matemáticos de condução de calor de não-Fourier

Nesta seção serão descritos os principais modelos matemáticos inicialmente desenvolvidos para a condução de calor, cujo objetivo era de corrigir a contradição física de velocidade infinita da propagação de calor imposta pela lei de Fourier. Os modelos são descritos para o caso unidimensional e sem fontes interna de geração de energia, cuja direção característica a ser considerada, por simplicidade, será a direção coordenada x .

Em 1958, Carlo Cattaneo [13] e Pierre Vernotte [14] desenvolveram um modelo de condução de calor, no qual este consistiu em modificar a lei de Fourier de uma equação parabólica para uma equação hiperbólica, através da introdução de uma derivada temporal para o fluxo de calor, q . Para o caso unidimensional este modelo é dado como

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \quad (2.1)$$

$$q + \tau_{CV} \frac{\partial q}{\partial t} = -k \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (2.2)$$

onde T , ρ , k e c_p são a temperatura, densidade, a condutividade térmica e o calor específico do meio, respectivamente. A variável t representa o tempo, já o termo τ_{CV} representa o tempo de relaxação. Fisicamente, o tempo de relaxação representa o tempo necessário para que ocorra a propagação do calor após a imposição de um gradiente de temperatura no meio. O tempo de relaxação é definido por

$$\tau_{CV} = \frac{\alpha}{s^2}, \quad (2.3)$$

onde α e s são a difusividade térmica e a velocidade de propagação do calor no meio, respectivamente. Sendo o fluxo de calor, q , uma função de classe C^2 , ou seja, todas as suas derivadas parciais de ordem até 2 são funções contínuas. Ao combinar às Eqs. 2.1 e 2.2 para eliminar os termos relacionados ao fluxo de calor, obtém-se a equação hiperbólica do calor

$$\tau_{CV} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}. \quad (2.4)$$

Em 1992, Qiu e Tien [16] desenvolveram o modelo Hiperbólico de Duas-Etapas para investigar a condução de calor em metais aquecidos por um pulso de Laser. Este modelo descreve a condução de calor em duas etapas. Primeiramente, os elétrons absorvem energia dos fótons e após isto, a transportam para os fônons através de colisões elétron-fônon.

Em materiais dielétricos, a condução de calor ocorre devido à vibração dos átomos. Estes estão conectados através de forças interatômicas de interação, onde o mínimo potencial interatômico definem as posições de equilíbrio de cada átomo.

O movimento de cada átomo é restringido pelos átomos vizinhos devido ao potencial interatômico. Uma visão simplificada das interações interatômicas em um sólido cristalino pode ser representada pelo sistema massa-mola. Neste sistema, a vibração de qualquer átomo se propaga e ocasiona a vibração de todo o sistema, assim, criando ondas elásticas no meio sólido. Se um lado de um sólido está aquecido, os átomos próximos a este possuem maiores amplitudes de vibração, que será sentida pelos átomos do lado oposto do meio devido à propagação e interação das ondas elásticas.

A mínima energia de uma onda elástica quantizada é chamada de fônon [1]. Um fônon com uma frequência e um comprimento de onda específico é uma onda que se estende ao longo de todo o sólido cristalino. A superposição de fônons possuindo múltiplas frequências de vibração em um sólido formam pacotes de ondas, onde estes pacotes podem ser considerados como partículas ao longo que são muito menores do que o tamanho do cristal. Portanto, calor em um dielétrico é conduzido por um gás de fônons de forma

similar a um gás ideal.

Quanto aos metais, os principais portadores de energia são os elétrons. Portanto, a energia transportada pelos fônons pode ser desprezada. Para o caso unidimensional o presente modelo é dado por

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = -G(T_e - T_l) \quad (2.5)$$

$$C_l \frac{\partial T_l}{\partial t} = G(T_e - T_l) \quad (2.6)$$

$$q + \tau_H \frac{\partial q}{\partial t} = -k \frac{\partial T_e}{\partial x}, \quad (2.7)$$

onde T_e , C_e , T_l , C_l e q são a temperatura e a capacidade térmica volumétrica do sistema de elétrons, a temperatura e a capacidade térmica volumétrica do sistema de fônons e o fluxo de calor, respectivamente. Quanto ao parâmetro G , este representa o fator de acoplamento elétron-fônon.

O parâmetro G é responsável por controlar a taxa de relaxamento térmico elétron-fônon. Este fator pode ser calculado utilizando-se a teoria do elétron livre [25] e pode ser expresso em função da condutividade térmica do meio, k , como

$$G = \frac{\pi^4 (n_e v_s \sigma)^2}{k}, \quad (2.8)$$

onde n_e é o número de elétrons livres por unidade de volume, σ é a constante de Boltzmann e v_s é a velocidade do som no meio.

Por fim, o termo τ_H representa o tempo de relaxação dos elétrons, ou seja, o tempo médio entre colisões elétron-elétron. Este é definido como

$$\tau_H = \frac{3m_e k}{\pi^2 n_e \sigma^2 T_e}, \quad (2.9)$$

onde m_e é a massa dos elétrons livres.

As Eqs. 2.5 a 2.7 constituem o conjunto completo das equações governantes do processo de condução de calor para o modelo Hiperbólico de Duas-Etapas. Este sistema de equações é acoplado e deve ser resolvido de maneira simultânea para se determinar a distribuição de temperatura do meio.

Em 1995, Tzou [17] desenvolveu o modelo Duas-Fases de Retardo considerando tempos de relaxação diferentes para o gradiente de temperatura e para o fluxo de calor. Para o

caso unidimensional o modelo matemático é dado por

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \quad (2.10)$$

$$q(t + \tau_q) = -k \frac{\partial T(t + \tau_T)}{\partial x}, \quad (2.11)$$

onde T , ρ , k e c_p são a temperatura, densidade, a condutividade térmica e o calor específico do meio, respectivamente. A variável t é o tempo, já os termos τ_q e τ_T são os tempos de relaxação para o fluxo de calor e para a temperatura, respectivamente.

Os parâmetros τ_q e τ_T são propriedades intrínsecas do material como a condutividade térmica e a difusividade térmica. Tzou [17] determinou valores destes parâmetros para alguns materiais a partir de resultados experimentais.

Segundo Tzou [17], para o caso em que $\tau_T > \tau_q$, inicialmente o fluxo de calor escoava através do meio, e num tempo subsequente estabelece-se um gradiente de temperatura devido à imposição do fluxo de calor. Já para o caso em que $\tau_q > \tau_T$, o fluxo de calor é estabelecido devido à imposição de um gradiente de temperatura no meio em um tempo anterior.

Fazendo-se uma expansão de Taylor na Eq. 2.11 com respeito a t e desprezando-se os termos de segunda ordem, combina-se o resultado com a Eq. 2.10 para obter a equação governante para o cálculo da distribuição de temperatura do meio, dada por

$$\tau_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \tau_T \alpha \frac{\partial^3 T}{\partial x^2 \partial t}, \quad (2.12)$$

onde α é a difusividade térmica do meio.

2.2 Modelos físicos de condução de calor de não-Fourier

Os modelos descritos no item 2.1 vêm sendo aplicados com sucesso, gerando bons resultados nas demandas na qual a lei de Fourier é aplicada. Porém, estes modelos já apresentam consistência física, por considerar a velocidade de propagação de calor como finita.

Com o surgimento de tecnologias de processamento de materiais baseados em aquecimento por Laser e à criogenia e o desenvolvimento da nanotecnologia, gerou-se a necessidade de investigar o processo de condução de calor em nanoescala.

O estudo do processo de transferência de calor por condução em nanomateriais pode

ser caracterizado pela presença de fluxos de calor de grande intensidade decorrentes de elevadíssimos gradientes de temperatura ou pela extremamente diminuta área das seções transversais. Entretanto, verificou-se que os modelos descritos no item 2.1, quando aplicados sobre estas condições, violam a segunda lei da termodinâmica, resultando respostas fisicamente irrealistas [26, 27, 28].

Para suprir a necessidade de investigar o processo de condução de calor em nanoescala, modelos físicos passaram a ser desenvolvidos. Dentre estes, destacam-se os modelos da hidrodinâmica dos fônons [18] e da Termomassa [19], onde estes são governados por leis de conservação hiperbólicas.

2.2.1 Modelo da Hidrodinâmica dos Fônons

Com base na equação de transporte de Boltzmann, Guyer e Krumhansl [18] desenvolveram o modelo da hidrodinâmica dos fônons para descrever a propagação de calor em dielétricos. Neste modelo, um conjunto de equações macroscópicas é desenvolvido para descrever o escoamento de Poiseuille de um gás de fônons. Entretanto, neste escoamento são considerados dois processos de espalhamento dos fônons, o processo normal e o processo *umklapp*. O processo normal considera que a quantidade de movimento no sistema de fônons é conservada. Já o processo *umklapp* considera que a quantidade de movimento do sistema de fônons não é conservada [29]. O presente modelo é definido como

$$C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot q = 0 \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{v^2 C_p}{3} \nabla T + \frac{q}{\tau_R} = \frac{\tau_N v^2}{5} [\nabla^2 q + 2\nabla(\nabla \cdot q)], \quad (2.14)$$

onde v , T , q e C_p são a velocidade média dos fônons, a temperatura, o fluxo de calor e capacidade térmica volumétrica, respectivamente. A variável t é o tempo, τ_R é o tempo de relaxação do processo *umklapp* e τ_N é o tempo de relaxação do processo normal. Substituindo a Eq. 2.13 na Eq. 2.14, obtém-se a equação governante da distribuição de temperatura para o presente modelo. Para o caso unidimensional este modelo pode ser simplificado como

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{9\tau_N}{5} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) = \frac{3}{\tau_R v^2} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{3}{v^2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}. \quad (2.15)$$

2.2.2 Modelo da Termomassa

Na última década, Guo [19] desenvolveu o modelo da Termomassa para analisar a condução de calor em nanomateriais, utilizando os princípios da mecânica Newtoniana. Este será o modelo utilizado na presente tese para investigar o processo de condução de calor em nanoescala. Portanto, uma descrição mais detalhada será feita para o mesmo como segue.

De acordo com Mendoza [30], a teoria do calórico de Lavoisier trata o processo de transferência de calor como um processo de transferência de energia, em vez de um processo de transporte. Esta teoria utiliza o conceito de um fluido imaginário e sem massa, chamado calórico, que possui a capacidade de penetrar em todas as substâncias.

Diversos fenômenos térmicos podem ser descritos pela teoria do calórico. No entanto, certos fenômenos térmicos não podem ser explicados por esta teoria. Com o advento da teoria cinética [31], os fenômenos que não podiam ser resolvidos pela teoria do calórico foram solucionados. Esta teoria explica o calor como um movimento aleatório das partículas materiais que constituem o meio. Tais partículas materiais podem ser átomos, elétrons e moléculas.

No início do século 20 diversos trabalhos demonstraram que calor possui inércia [32, 33]. Em 1930, Tolman [34] demonstrou que o calor possui massa a partir da teoria da relatividade de Einstein.

A teoria da Termomassa toma como base a relação massa-energia de Einstein, ou seja, o calor possui a dualidade massa-energia, comportando-se como energia em processos onde ocorre a sua conversão em outra forma de energia, e comportando-se como massa em processos de transferência de calor. Diferentemente da teoria do calórico, a Termomassa trata o calor como o escoamento de uma substância que possui massa.

Na maioria dos casos da termofísica a Termomassa é geralmente muito pequena, cerca de 10^{-16} por J de calor, e os efeitos inerciais podem ser desprezados [35]. Assim, a condução de calor pode ser tratada como um processo de difusão. No entanto, os efeitos inerciais não devem ser desprezados para o processo de aquecimento muito rápido ou para um processo que possui uma elevada taxa de transferência de calor, o que leva a uma condução de calor denominada condução de não-Fourier.

A teoria da Termomassa considera que o calor é transportado por thermons. O thermon é definido como a unidade de uma quase-partícula portando energia térmica [35]. Considerando-se que, os thermons sejam muito menores do que as partículas materiais

que constituem o meio e que contenham thermons suficientes em um volume material tal que, se possam obter os principais parâmetros que descrevem adequadamente o meio. Assume-se que, uma coleção de thermons forma um gás de Termomassa, onde este é considerado como um meio contínuo [28].

Assim, o processo de condução de calor em um sólido impulsionado por um gradiente de temperatura pode ser entendido como o escoamento do gás de Termomassa através das moléculas, átomos, ou retículos do meio, assim como um gás fluindo através de um meio poroso. Portanto, este processo de transporte pode ser descrito pela mecânica Newtoniana.

2.2.2.1 Modelo Matemático da Teoria da Termomassa

Nesta seção apresentam-se as principais características da modelagem matemática da teoria da Termomassa. Esta visa gerar as equações governantes do transporte do gás de Termomassa, assim como, uma equação geral para condução de calor em nanomateriais baseado na teoria da Termomassa.

A fim de analisar o movimento do gás de Termomassa é necessário, inicialmente, obter-se a equação de estado que governa o meio. Uma forma geral da equação de estado de um gás de Termomassa pode ser escrita como

$$F(p_{Th}, \rho_{Th}, T, \xi) = 0, \quad (2.16)$$

onde p_{Th} é a pressão do gás de Termomassa, ρ_{Th} é a densidade do gás de Termomassa, T é a temperatura local e ξ representa os efeitos de interação entre os thermons.

Para o caso onde os efeitos de interação entre os thermons são desprezados, a equação de estado pode ser obtida de forma explícita. A equação de estado para o gás de Termomassa em um gás ideal é dada por [19]

$$p_{Th} = \kappa \rho_{Th} c_p T, \quad (2.17)$$

onde κ é a razão de calor específico do gás ideal e c_p é o calor específico do meio.

Para o caso dos sólidos dielétricos, Guo et. al [35, 36] desenvolveram uma equação de estado de um gás de fônons. O escoamento do gás de fônons gera um fluxo de calor. Assim, os fônons podem ser considerados como thermons para os dielétricos. A equação

de estado para o gás de fônons baseada na equação de estado de Debye [28] é dada por

$$p_{Th} = \gamma \rho_{Th} c_p T, \quad (2.18)$$

onde γ é a constante Grüneisen [37].

Verifica-se que a equação de estado para o gás de fônons é muito parecida com a equação de estado para o gás ideal, com exceção dos parâmetros proporcionais, κ e γ . Portanto, pode-se estabelecer uma equação de estado geral para o gás de Termomassa como

$$p_{Th} = \varphi \rho_{Th} c_p T, \quad (2.19)$$

onde φ é um parâmetro proporcional, cujo valor difere para diferentes estados do meio. Para os metais, quando o efeito de interação da eletricidade estática entre os elétrons livres é negligenciado para o transporte de termomassas, a Eq. 2.19 pode ser utilizada para se obter a equação de estado dos metais.

Quanto à determinação da densidade do gás de Termomassa, esta pode ser obtida em função da densidade do meio. Na teoria da Termomassa, a massa equivalente da energia térmica por unidade de volume pode ser definida a partir da relação massa-energia de Einstein

$$E_{Th} = \rho_{Th} c^2, \quad (2.20)$$

onde c é a velocidade da luz no vácuo. Já a energia térmica por unidade de volume do meio é dada por

$$E_{Th} = \rho c_p T, \quad (2.21)$$

onde ρ é a densidade do meio. Substituindo-se a Eq. 2.20 na Eq. 2.21, a densidade do gás de Termomassa pode ser definida como

$$\rho_{Th} = \frac{\rho c_p T}{c^2}. \quad (2.22)$$

Para obter as equações governantes do escoamento do gás de Termomassa precisa-se, inicialmente, definir a velocidade de escoamento do gás de Termomassa. Quando existe um gradiente de temperatura num meio, calor escoar a partir da região de alta para região de baixa temperatura. Isto indica que, o gás de Termomassa escoar com uma determinada velocidade. Baseado no conceito de Termomassa, o fluxo de massa do gás de Termomassa pode ser calculado como

$$\dot{m}_{Th} = \rho_{Th} u_{Th}, \quad (2.23)$$

onde u_{Th} é a velocidade de escoamento do gás de Termomassa. A partir da relação massa-

energia de Einstein $\dot{m}_{Th} = q/c^2$, onde q é o fluxo de calor. Assim, tem-se que a velocidade de escoamento do gás de Termomassa é dada por

$$u_{Th} = \frac{q}{\rho c_p T}. \quad (2.24)$$

A Equação 2.24 indica que a velocidade de escoamento do gás de Termomassa é equivalente à velocidade de transporte do escoamento de calor, que é calculada através da divisão do fluxo de calor pela energia térmica por unidade de volume. Portanto, com a obtenção da velocidade de escoamento se pode investigar o processo de condução de calor utilizando as equações governantes para o movimento do gás de Termomassa, assim como é realizado na dinâmica dos fluidos.

Considerando-se o escoamento do gás de Termomassa como o escoamento de um fluido compressível em um meio poroso, onde este meio é considerado homogêneo e isotrópico, com propriedades físicas constantes, assume-se que o escoamento do gás de Termomassa é impulsionado por um gradiente de temperatura em um meio sem fontes interna de geração calor. Assim, aplicando-se a mecânica Newtoniana com intuito de analisar o transporte do gás de Termomassa tem-se que, as equações que governam o transporte do gás de Termomassa são dadas por

$$\frac{\partial \rho_{Th}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{Th} u_{Th}) = 0 \quad (2.25)$$

$$\rho_{Th} \frac{D u_{Th}}{D t} + \nabla p_{Th} + f_{Th} = 0, \quad (2.26)$$

onde D/Dt representa a derivada total e f_{Th} é à força de resistência ao escoamento de Termomassa por unidade de volume.

As Eqs. 2.25 e 2.26 descrevem o transporte do gás de Termomassa em um meio material contínuo. A introdução do termo relacionado à força de resistência, ao invés de utilizarem-se os termos relacionados à viscosidade na equação de conservação de momentum, é devido à dificuldade de determinar a viscosidade do gás de Termomassa para determinados materiais. Uma segunda dificuldade está relacionada em descrever como ocorre a interação entre o gás de Termomassa e as partículas materiais do meio.

Com base na teoria da Termomassa pode-se estabelecer um conjunto de equações que governam a condução de calor no meio. Introduzindo-se as Eqs. 2.19, 2.22 e 2.24 nas Eqs. 2.25 e 2.26 obtêm-se as equações governantes da condução de calor no meio. Para o caso unidimensional, as Eqs. 2.25 e 2.26 podem ser simplificadas como

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} - \frac{q}{T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{q}{\rho c_p T} \frac{\partial q}{\partial x} - \frac{q^2}{\rho c_p T^2} \frac{\partial T}{\partial x} + 2\varphi \rho c_p^2 T \frac{\partial T}{\partial x} + f_{Th} c^2 = 0, \quad (2.28)$$

onde os quatro primeiro termos da Eq. 2.28 estão relacionados com a derivada total da velocidade do gás de Termomassa. Os mesmos referem-se aos efeitos inerciais. Já o quinto termo desta equação está relacionado com o efeito de pressão do gás de termomassa. Por fim, o sexto termo representa os efeitos de resistência ao escoamento do gás de Termomassa.

Quando a velocidade de escoamento do gás de Termomassa é muito pequena a força de resistência é proporcional à velocidade de escoamento [35], sendo esta dada por

$$f_{Th} = \beta u_{Th}, \quad (2.29)$$

onde β é um parâmetro a ser determinado. Substituindo a Eq. 2.29 na Eq. 2.28, e assumindo que ao se desprezar os termos inercias da Eq. 2.28, esta seja consistente com a lei de Fourier, Eq. 1.2, pode-se determinar o valor do parâmetro β como

$$\beta = \frac{2\varphi \rho^2 c_p^3 T^2}{c^2 k}, \quad (2.30)$$

onde k é a condutividade térmica do meio.

Assim a equação geral da condução de calor unidimensional, Eq. 2.28, considerando uma força de resistência linear, Eq. 2.29, é dada por

$$\tau_{Th} \left(\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{q}{\rho c_p T} \frac{\partial q}{\partial x} \right) - \tau_{Th} \frac{q}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{q}{\rho c_p T} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + k \frac{\partial T}{\partial x} + q = 0, \quad (2.31)$$

onde τ_{Th} é o tempo característico. O mesmo representa uma resposta de atraso, no tempo, do fluxo de calor (escoamento do gás de Termomassa) e o gradiente de temperatura (força indutora). O tempo característico é determinado por

$$\tau_{Th} = \frac{\alpha}{2\varphi c_p T}, \quad (2.32)$$

onde α é a difusividade térmica do meio.

A velocidade de transporte da perturbação térmica para o modelo da Termomassa é definida como

$$s_{Th} = u_{Th} \pm v_{Th}, \quad (2.33)$$

onde v_{Th} é a velocidade da onda térmica, definida como $v_{Th} = \sqrt{\alpha/\tau_{Th}}$.

Considerando o caso $u_{Th} \ll v_{Th}$, a velocidade de transporte da perturbação térmica é

dominada principalmente por v_{Th} , no qual indica que a perturbação térmica propaga-se mais rápido quando a temperatura é alta, similarmente reportado por [36, 38].

Ao introduzir a Eq. 2.27 na Eq. 2.31, obtém-se a forma final das equações governantes da condução de calor no meio para o caso unidimensional

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{\rho c_p} \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + 2 \frac{q}{\rho c_p T} \frac{\partial q}{\partial x} - \frac{1}{\rho c_p} \left(\frac{q}{T} \right)^2 \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{k}{\tau_{Th}} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{q}{\tau_{Th}} = 0. \quad (2.35)$$

As Eqs. 2.34 e 2.35 representam o modelo matemático a ser utilizado no presente trabalho. Este sistema de equações é acoplado e deve ser resolvido simultaneamente com a aplicação de um método numérico apropriado.

Capítulo 3

Resolução Numérica das Equações Governantes

Neste capítulo é feita uma descrição detalhada dos tratamentos numéricos tomados com o objetivo da resolução numérica das equações que governam a condução de calor em nanomateriais.

Inicialmente, será realizada uma breve introdução do método de diferenças finitas, pois os métodos utilizados no presente trabalho são baseados neste método. O primeiro método numérico utilizado é o de MacCormack [21]. Este método foi utilizado como um tratamento numérico inicial para o ganho de experiência na área de modelagem computacional, visto que este método é amplamente empregado para a resolução numérica de problemas hiperbólicos. Porém, quando a escala do problema recai na nanoescala gera-se a necessidade de um esquema numérico mais robusto. Portanto, aplica-se no presente trabalho o método da Variação Total Decrescente (Total Variation Diminishing- TVD) [22, 23, 24] para a resolução numérica das equações que governam a condução de calor em nanomateriais.

Para a validação dos algoritmos computacionais desenvolvidos para os métodos numéricos empregados no presente trabalho, será adotado um problema disponível na literatura. Ambos os métodos serão desenvolvidos na sua forma explícita.

3.1 Diferenças Finitas

O método de diferenças finitas é um método de resolução de equações diferenciais no qual consiste em discretizar o domínio de cálculo e substituir as derivadas por aproximações e assim representando equações diferenciais por equações algébricas.

De acordo com Anderson et al. [39], o conceito principal do método de diferenças finitas é substituir as derivadas pela razão incremental que converge para o valor da derivada quando o incremento tende a zero, ou seja,

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}, \quad (3.1)$$

onde $f(x)$ é uma função contínua.

Para estabelecer o método de diferenças finitas, inicialmente, deve-se construir uma malha, que consiste num conjunto discreto de pontos pertencentes ao domínio. A Figura 3.1 representa uma malha unidimensional, cujo valor de incremento é Δx . Os valores de $f(x)$ e suas derivadas devem ser calculados em cada ponto desta malha.

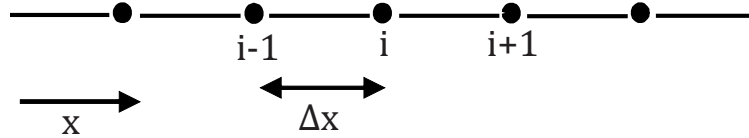


Figura 3.1: Malha unidimensional.

Segundo [39], uma maneira de se obter as aproximações para as derivadas é através da expansão da série de Taylor. Se $f(x)$ possui derivadas até a ordem n em x , pode-se realizar a expansão da série de Taylor como

$$f(x + \Delta x) \approx f(x) + \frac{\partial f}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \frac{(\Delta x)^2}{2!} + \dots + \frac{\partial^{n-1} f}{\partial x^{n-1}} \frac{(\Delta x)^{n-1}}{(n-1)!} + \frac{\partial^n f}{\partial x^n} \frac{(\Delta x)^n}{n!}, \quad (3.2)$$

onde o último termo da Eq. 3.2 representa o erro da aproximação de $f(x + \Delta x)$ pelo polinômio de grau $(n - 1)$.

A partir da Eq. 3.2, pode-se representar a primeira derivada de $f(x)$ por uma diferença avante como

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} + O(\Delta x), \quad (3.3)$$

onde esta é conhecida como diferença progressiva (avante) da primeira derivada. O termo $O(\Delta x)$ é o erro de truncamento, que representa o erro devido a aproximar a primeira derivada por diferenças finitas.

De maneira similar, pode-se obter uma aproximação para $f(x - \Delta x)$ através da expansão da série de Taylor e obter a diferença regressiva (a ré) para a primeira derivada,

dada por

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x), \quad (3.4)$$

onde $O(\Delta x)$ é o erro de truncamento.

Outra forma de representar a primeira derivada por diferenças finitas é combinando as aproximações de $f(x + \Delta x)$ e $f(x - \Delta x)$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x)^2, \quad (3.5)$$

onde a Eq. 3.5 é conhecida como diferença centrada para a primeira derivada. O termo $O(\Delta x)^2$ é o erro de truncamento para aproximação da primeira derivada por diferença centrada.

Para a obtenção das aproximações por diferenças finitas para as derivadas de ordem superior e para as derivadas mistas, deve-se seguir o mesmo procedimento. Algumas aproximações de ordem superior e mistas podem ser encontradas em [39].

3.2 Adimensionalização das Equações Governantes

Ao adimensionalizar as equações governantes do transporte do gás de Termomassa, obtêm-se os principais parâmetros característicos que governam este fenômeno físico. Os parâmetros característicos permitem a utilização de resultados obtidos numa determinada geometria sobre certas condições, em geometrias similares submetidas a condições diferentes, ou seja, os parâmetros característicos podem variar independentemente.

Outra vantagem de adimensionalizar as equações governantes é eliminar os problemas de ordem de escala. Ao adimensionaliza-las, restringem-se os valores nos quais as variáveis que governam o fenômeno físico possam variar.

As variáveis adimensionais serão denotas por um asterisco e são dadas por [40]

$$t^* = \frac{t}{(L^2/\alpha)} \quad x^* = \frac{x}{L} \quad T^* = \frac{T}{T_0} \quad q^* = \frac{q}{\frac{\rho c_p \alpha T_0}{L}}, \quad (3.6)$$

onde L e T_0 são o comprimento característico para a geometria de interesse e a temperatura inicial do meio, respectivamente.

Dessa forma, as Eqs. 2.34 e 2.35 podem ser escritas, respectivamente, conforme segue

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \frac{\partial q^*}{\partial x^*} = 0 \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial q^*}{\partial t^*} + 2\frac{q^*}{T^*} \frac{\partial q^*}{\partial x^*} - \left(\frac{q^*}{T^*}\right)^2 \frac{\partial T^*}{\partial x^*} + \frac{1}{Z_T} \frac{\partial T^*}{\partial x^*} + \frac{1}{Z_T} q^* = 0, \quad (3.8)$$

onde T^* e q^* são a temperatura adimensional e o fluxo de calor adimensional, respectivamente. Já Z_{Th} é o tempo característico adimensional, sendo expresso por

$$Z_{Th} = \frac{\alpha \tau_{Th}}{L^2}. \quad (3.9)$$

Com a intenção de simplificar a escrita das equações, será eliminado o símbolo de asterisco utilizado para representar as variáveis adimensionais, pois as equações governantes são invariantes a esta transformação, ou seja, exceto pelo asterisco as equações governantes escritas na forma adimensional são idênticas as equações governantes escritas na forma dimensional.

3.3 Forma Conservativa vetorial das Equações Governantes

As Eqs. 3.7 e 3.8 podem ser escritas na forma conservativa vetorial. Ao escrever as equações que governam a condução de calor nesta forma, torna-se mais fácil à aplicação do esquema numérico desejado. Portanto, as Eqs. 3.7 e 3.8 escritas nesta forma podem ser escritas como

$$\frac{\partial E}{\partial t} + B \frac{\partial F}{\partial x} + H = \vec{0}, \quad (3.10)$$

onde E , F e H são vetores e B é uma matriz dados por

$$\begin{aligned} E &= \begin{bmatrix} T \\ q \end{bmatrix}; \\ F &= \begin{bmatrix} q \\ T \end{bmatrix}; \\ B &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2\frac{q}{T} & \left(\frac{1}{Z_{Th}} - \left(\frac{q}{T}\right)^2\right) \end{bmatrix}; \\ H &= \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{q}{Z_{Th}} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

A primeira linha do vetor da Eq. 3.10 corresponde à equação de conservação de energia, dado pela Eq. 3.7. Já a segunda linha, corresponde à equação geral do calor, dado pela Eq. 3.8.

3.4 Método Explícito de MacCormack

Segundo [39], o esquema numérico de diferenças finitas de MacCormack [21], trata-se de uma variação do esquema de dois passos de Lax-Wendroff [41]. Este método tem sido utilizado para a resolução numérica de equações diferenciais parciais hiperbólicas. A aplicação do método de MacCormack explícito na Eq. 3.10 ocorre em dois passos:

- **Preditor:** Obtenção de um valor temporário de E no passo de tempo $(n + 1)$ para o ponto nodal i do domínio espacial, onde este é denotado por $\overline{E}_i^{(n+1)}$

$$\overline{E}_i^{(n+1)} = E_i^n - B_i^n \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1}^n - F_i^n) - \Delta t H_i^n \quad (3.12)$$

- **Corretor:** Obtenção do valor final de E no passo de tempo $(n + 1)$ para o ponto nodal i do domínio espacial, onde este é denotado por $E_i^{(n+1)}$.

$$E_i^{(n+1)} = \frac{1}{2} \left[E_i^n + \overline{E}_i^{n+1} - \overline{B}_i^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta x} (\overline{F}_i^{n+1} - \overline{F}_{i-1}^{n+1}) - \Delta t \overline{H}_i^{n+1} \right] \quad (3.13)$$

Verifica-se que no passo do Preditor, utiliza-se diferença progressiva para o cálculo da derivada espacial. Já para o passo do Corretor, utiliza-se diferença regressiva. Esta diferenciação pode ser alterada em alguns problemas. De acordo com Anderson et al. [39], a melhor a ser adotada ocorre quando, escolhe-se a diferenciação do Preditor tal que esta ocorra na direção de propagação da descontinuidade. Este esquema apresenta acurácia de segunda ordem com erro de truncamento de $O[(\Delta x)^2, (\Delta t)^2]$ e é estável sempre que $(\Delta t/\Delta x) \leq 1$ [21].

No presente trabalho, adotar-se-á o cálculo do resíduo dos pontos internos do domínio discretizado para a análise da estabilidade e convergência do método de MacCormack, onde este é definido por

$$residuo = \log_{10} \sqrt{\frac{\sum_{i=2}^{N-1} (E_i^n - E_i^{n+1})^2}{N-2}}, \quad (3.14)$$

onde será utilizada a temperatura, T , como variável para a determinação do resíduo.

3.5 Validação do Método de MacCormack

Para a validação do algoritmo computacional criado para a resolução numérica das equações governantes da condução de calor através do método de MacCormack é utilizado o resultado encontrado por Wang et al. [35] para a condução de calor unidimensional num nanofilme de Silício.

Neste trabalho, investiga-se a condução de calor em um nanofilme de Silício utilizando a teoria da Termomassa. Wang et al. [35] obtiveram resultados das repostas térmicas de um nanofilme de silício, de comprimento de $0,2 \mu m$, aquecido por um pulso de Laser, onde assumiu-se que o pulso de Laser foi aplicado uniformemente ao longo de toda a fronteira esquerda do nanofilme. Assim, o problema foi considerado unidimensional, na direção x . Já a fronteira direita, esta foi assumida sendo termicamente isolada. Inicialmente, o nanofilme de silício encontra-se na temperatura ambiente, sendo considerada igual a 300 K.

Quanto ao pulso de calor na fronteira esquerda, este é assumido como uma função Cossenoidal, dado por

$$q(0, t) = \begin{cases} q_A \cdot \frac{1}{2} \left(1 - \cos \left(\frac{2\pi t}{t_d} \right) \right), & t < t_d \\ 0, & t \geq t_d \end{cases}, \quad (3.15)$$

onde $q_A = 5 \cdot 10^{11} \text{ W/m}^2$ e $t_d = 20 \text{ ps}$. A Figura 3.2 representa um diagrama esquemático deste processo de aquecimento.

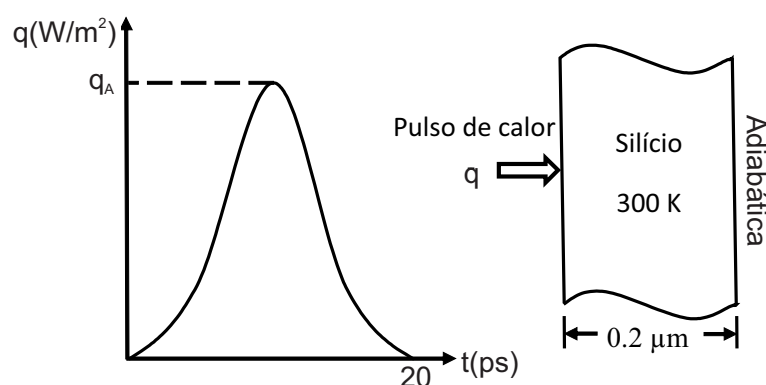


Figura 3.2: Diagrama esquemático do processo de aquecimento.

As propriedades do Silício na temperatura ambiente podem ser encontradas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Propriedades físicas do Silício a temperatura ambiente [35].

ρ (kg/m^3)	k ($W/m \cdot K$)	c_p ($J/kg \cdot K$)	φ	v_s (m/s)
2,33	163	657	1,96	8433

A Figura 3.3 ilustra o fluxograma do código computacional desenvolvido para a aplicação do método de MacCormack.

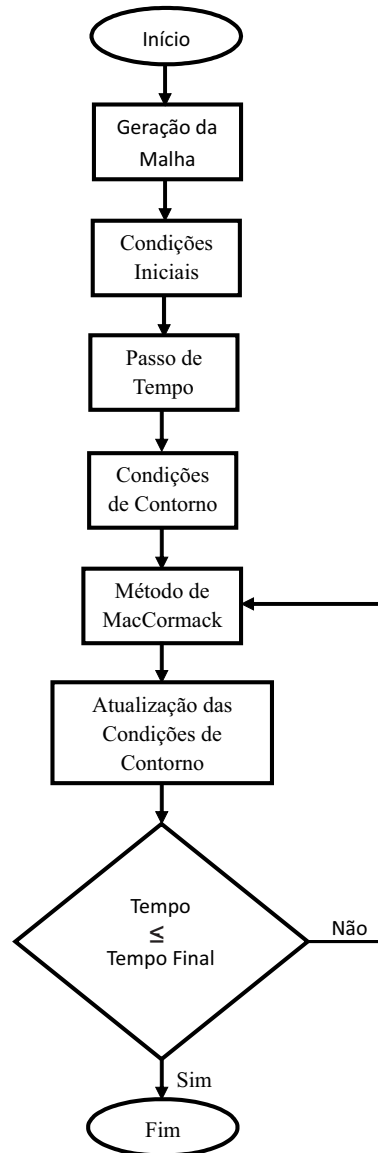


Figura 3.3: Fluxograma do código computacional para o método de MacCormack.

Após testes com diferentes malhas e passos de tempo, adotou-se uma malha fixa e regular de 1000 pontos nodais no domínio físico, com um passo de tempo adimensional de 10^{-4} . A estabilidade do método de MacCormack foi avaliada através do cálculo do resíduo, de acordo com a Eq. 3.14.

Inicialmente os resultados são obtidos em sua forma adimensional e, posteriormente,

aplica-se uma transformação inversa, ou seja, a partir dos resultados das variáveis adimensionais obtêm-se os resultados das variáveis de interesse na forma dimensional. Esta transformação é realizada de acordo com a Eq. 3.6.

As Figuras 3.4 até 3.8 mostram os resultados obtidos utilizando o método de MacCormack para a distribuição de temperatura e para o fluxo de calor para os tempos de 20 ps, 40 ps, 60 ps, 80 ps e 100 ps, respectivamente. Já a Figura 3.9 representa o resíduo em função do número de iterações.

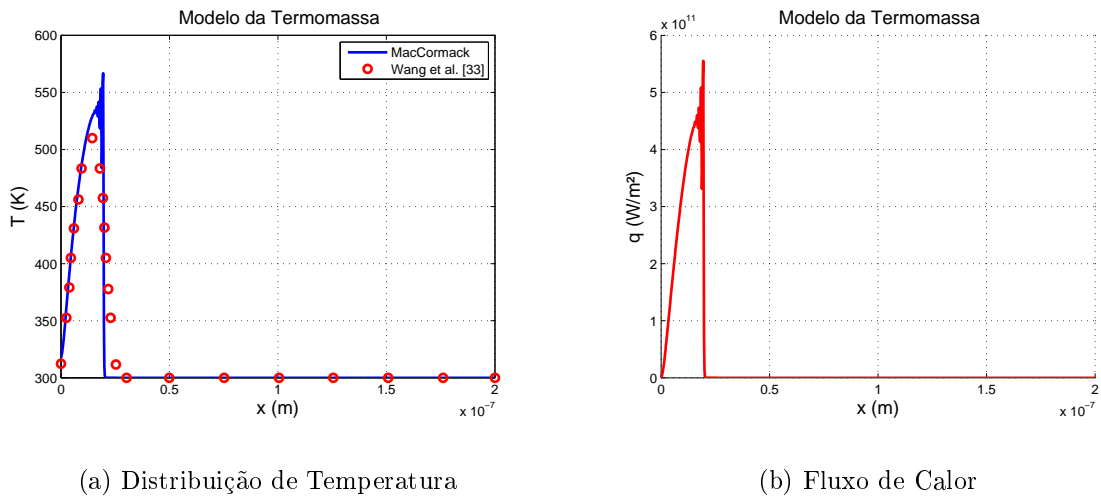


Figura 3.4: Resposta térmica prevista pelo modelo da Termomassa em um nanofilme de Silício para o tempo de 20 ps : (a) Distribuição de temperatura; (b) Fluxo de calor.

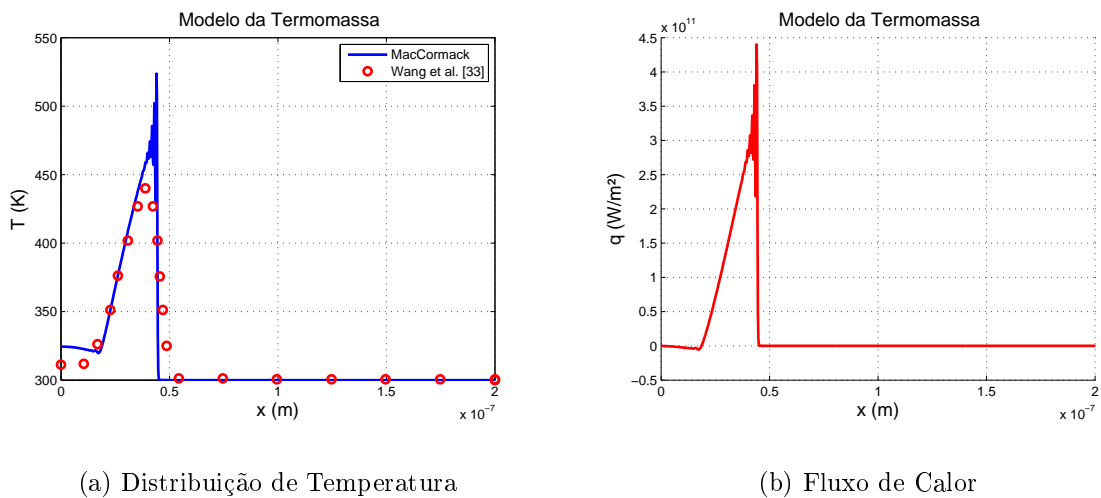


Figura 3.5: Resposta térmica prevista pelo modelo da Termomassa em um nanofilme de Silício para o tempo de 40 ps : (a) Distribuição de temperatura; (b) Fluxo de calor.

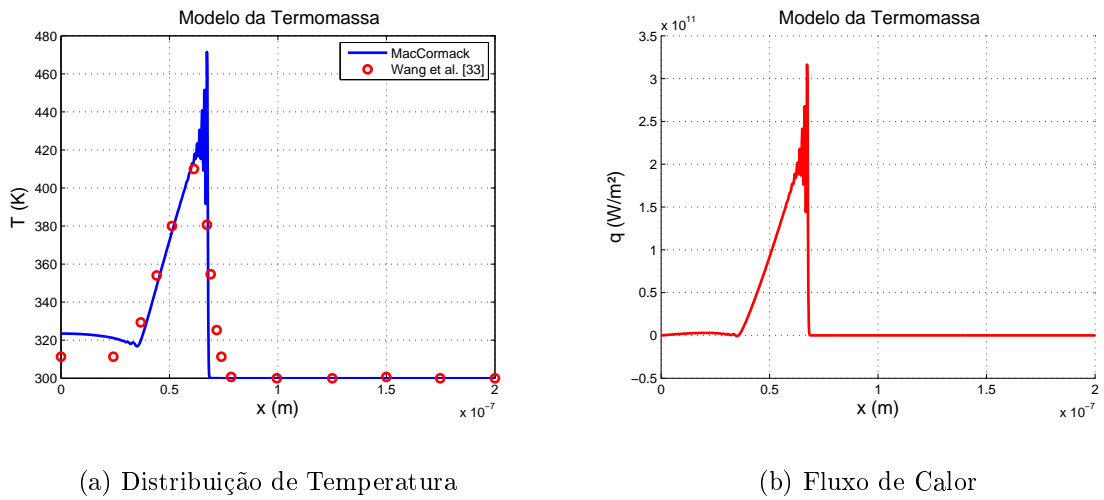


Figura 3.6: Resposta térmica prevista pelo modelo da Termomassa em um nanofilme de Silício para o tempo de 60 ps : (a) Distribuição de temperatura; (b) Fluxo de calor.

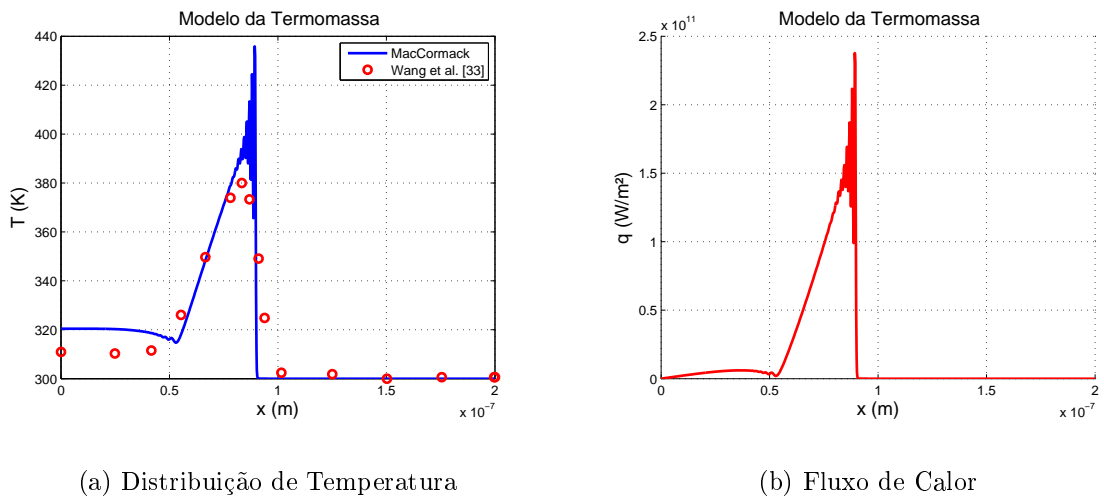


Figura 3.7: Resposta térmica prevista pelo modelo da Termomassa em um nanofilme de Silício para o tempo de 80 ps : (a) Distribuição de temperatura; (b) Fluxo de calor.

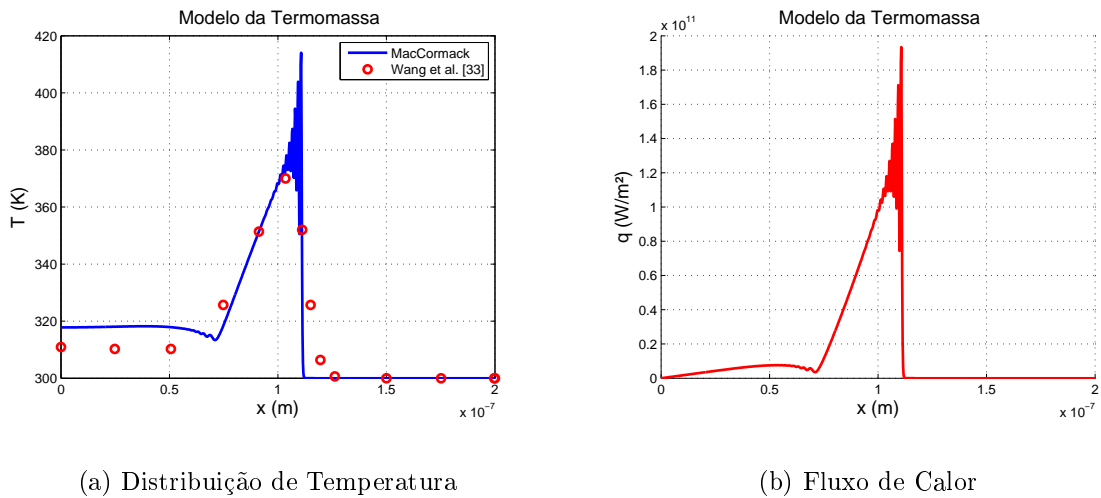


Figura 3.8: Resposta térmica prevista pelo modelo da Termomassa em um nanofilme de Silício para o tempo de 100 ps : (a) Distribuição de temperatura; (b) Fluxo de calor.

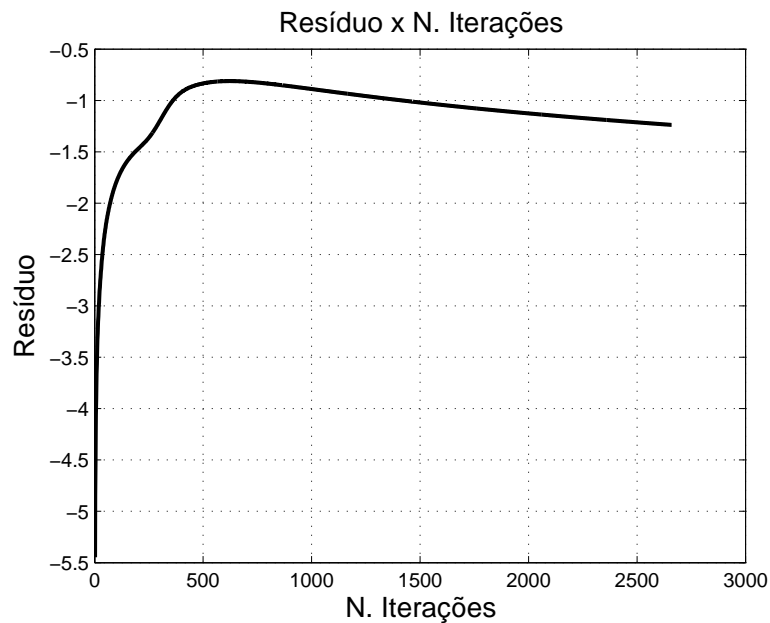


Figura 3.9: Gráfico do resíduo para o tempo de 100 ps.

Verifica-se através das Figuras 3.4 a 3.8 que, os resultados da distribuição de temperatura obtidos pelo método de MacCormack estão de acordo com os resultados obtidos por [35]. No entanto, nota-se que o método de MacCormack não obtém sucesso em propagar a descontinuidade na solução da distribuição de temperatura, gerando oscilações espúrias. Deste modo, os resultados podem ser considerados como pouco satisfatórios.

Para os resultados encontrados para a distribuição do fluxo de calor no nanofilme de silício não serão feitas comparações, pois os mesmos não estão disponíveis no trabalho realizado por Wang et al. [35].

Quanto ao gráfico do resíduo, Fig. 3.9, verifica-se que inicialmente o resíduo cresce. Porém, com o aumento do número de iterações o mesmo decresce. Portanto, considere-se que o método de MacCormack convergiu para a solução numérica da distribuição de temperatura.

3.6 Método da Variação Total Decrescente (TVD)

O esquema numérico TVD, trata-se de um esquema com precisão de primeira ordem no tempo e de segunda ordem no espaço em regiões suaves. Este esquema possui comprovada habilidade para a captura e propagação de descontinuidades abruptas [42, 23, 24].

A ideia básica do método TVD é combinar o esquema de diferenças finitas de baixa e alta ordem. Assim, garantindo precisão de segunda ordem nas regiões suaves da solução, onde a variação numérica da solução é gradativa. Já para o caso onde descontinuidades abruptas estão envolvidas, ocorre uma mudança automática para um esquema de primeira ordem. Com isso, evitando oscilações numéricas espúrias.

O pressuposto que a Eq. 3.10 é hiperbólica implica que a matriz Jacobiana, $J(E) = \frac{\partial F(E)}{\partial E}$, possui autovalores reais $j^l(E)$ e um conjunto completo de autovetores direitos $R^l(E)$, $l = 1, \dots, m$. Sabendo-se que a matriz de autovetores, $R(E)$, é invertível. As linhas de $R(E)^{-1}$ formam um conjunto ortonormal de autovetores esquerdos de $J(E)$. Com isso, tem-se que

$$R^{-1}JR = \text{diag}\{j^l\}, \quad (3.16)$$

onde $\text{diag}\{j^l\}$ representa uma matriz diagonal, onde os elementos da diagonal são os autovalores da matriz Jacobiana. Já o vetor das variáveis características W com respeito ao vetor de estado E é definido por

$$W = R^{-1}E. \quad (3.17)$$

Com isso, a Eq. 3.10 pode ser decomposta em m equações escalares para as variáveis características

$$\frac{\partial w^l}{\partial t} + j^l \frac{\partial w^l}{\partial x} + h^l = 0 \quad j^l = \text{constante}, \quad (3.18)$$

onde $h^l = R^{-1}H$.

Portanto, de acordo com Yee et al. [42] pode-se estender um esquema escalar para um sistema de leis de conservação, aplicando este esquema para cada uma das m equações características escalares da Eq. 3.18, onde m é a dimensão do sistema.

Considere $E_{i+1/2}$ como a média simétrica entre E_i e E_{i+1} dada por

$$E_{i+1/2} = \frac{1}{2} (E_{i+1} + E_i). \quad (3.19)$$

Logo $j_{i+1/2}^l$, $R_{i+1/2}$ e $R_{i+1/2}^{-1}$ denotam as grandezas j^l , R e R^{-1} avaliadas em $E_{i+1/2}$. Sendo w^l o vetor de elementos de W , e definindo $\alpha_{i+1/2}^l = w_{i+1}^l - w_i^l$ como sendo a componente de $\Delta E_{i+1/2} = E_{i+1} - E_i$ na l -ésima direção característica. Portanto, podem-se definir as seguintes relações

$$\Delta E_{i+1/2} = R_{i+1/2} \alpha_{i+1/2} \quad e \quad \alpha_{i+1/2} = R_{i+1/2}^{-1} \Delta E_{i+1/2}. \quad (3.20)$$

A partir das notações descritas pela Eq. 3.20, pode-se aplicar o esquema TVD para cada variável característica definida localmente da Eq. 3.10. Aplicando este esquema numérico na Eq. 3.10 tem-se que

$$\bar{E}_i^{n+1} = E_i^n - B_i^n \frac{\Delta t}{\Delta x} (\bar{F}_{i+1/2}^n - \bar{F}_{i-1/2}^n) - \Delta t H_i^n, \quad (3.21)$$

onde o fluxo numérico $\bar{F}_{i+1/2}^n$ pode ser expresso como

$$\bar{F}_{i+1/2}^n = \frac{1}{2} (F_i^n + F_{i+1}^n - \Phi_{i+1/2}^l R_{i+1/2}^l). \quad (3.22)$$

Os elementos de $\Phi_{i+1/2}^l$ são denotados por $\phi_{i+1/2}^l$, $l = 1, \dots, m$. Para um esquema TVD simétrico Yee [22] definiu a função $\phi_{i+1/2}^l$ como

$$\phi_{i+1/2}^l = \psi(j_{i+1/2}^l) (1 - Q_{i+1/2}^l) \alpha_{i+1/2}^l, \quad (3.23)$$

onde ψ é uma função de $j_{i+1/2}^l$. Segundo Yee [22], esta pode ser definida como

$$\psi(z) = \begin{cases} |z|, & |z| \geq \varepsilon \\ (z^2 + \varepsilon^2)/2\varepsilon, & |z| < \varepsilon \end{cases}, \quad (3.24)$$

onde ε é um número positivo cujo valor é pequeno. Para o caso unidimensional ε pode ser considerado constante e seu valor encontra-se no intervalo de 0,05 até 0,125 [42]. Já o parâmetro $Q_{i+1/2}^l$ é a função limitadora de fluxo. Esta evita as oscilações espúrias que podem ocorrer em esquemas numéricos com alta ordem de discretização espacial devido a choques, descontinuidades e mudanças bruscas no domínio de solução. Alguns exemplos podem ser encontrados em [43, 44, 45].

No presente trabalho será adotado como função limitadora de fluxo o *minimum mo-*

dulus ou função *minmod* [45, 24]. Esta é definida como

$$Q(r) = \begin{cases} 1 & r \geq 1 \\ r & 0 \leq r < 1 \\ 0 & r < 0 \end{cases}, \quad (3.25)$$

onde r é conhecido como parâmetro de suavidade. Este representa a razão entre gradientes sucessivos no domínio de solução,

$$r = \frac{\Delta E_{i-1/2}}{\Delta E_{i+1/2}}. \quad (3.26)$$

O fluxo numérico $\bar{F}_{i-1/2}^n$ é obtido de maneira similar.

De acordo com Yee [22], o esquema numérico Eq. 3.21 é dito ser TVD se a solução produzida por este esquema satisfaz a seguinte condição

$$TV(E^{n+1}) \leq TV(E^n), \quad (3.27)$$

onde a *variação total* de E^n é definida como

$$TV(E) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} |E_{i+1} - E_i|. \quad (3.28)$$

Segundo Harten [46], o esquema Eq. 3.21 é TVD sob a seguinte condição

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \max |j_{i+1/2}| \leq CFL, \quad (3.29)$$

onde CFL é o numero de Courant-Friedrichs-Lewy. Para o esquema explícito TVD, Eq. 3.21, o valor de CFL deve ser menor ou igual a 1 [42].

Por fim, para análise da estabilidade e convergência do método de Variação Total Decrescente será adotado o mesmo critério do método de MacCormack, ou seja, o cálculo do resíduo dos pontos internos do domínio discretizado, Eq. 3.14.

3.7 Validação do Método da Variação Total Decrescente (TVD)

Para a validação do algoritmo computacional criado para a resolução numérica das equações governantes da condução de calor através do método da Variação Total Decrescente (TVD), utiliza-se o caso teste proposto na seção 3.5.

A Figura 3.10 ilustra o fluxograma do código computacional desenvolvido para a aplicação do método TVD.

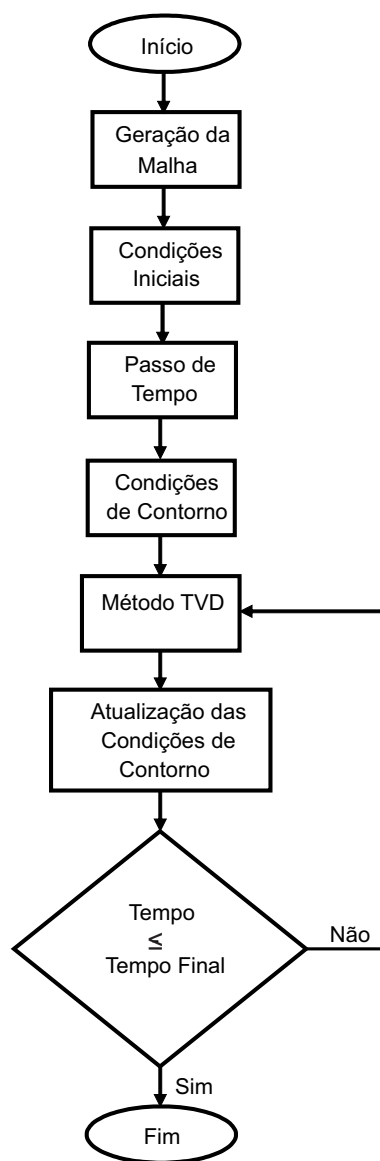


Figura 3.10: Fluxograma do código computacional para o método TVD.

Assim como na seção 3.5, foram realizados testes com diferentes malhas e passos de tempo. A partir destes, adotou-se uma malha fixa e regular com 1000 pontos nodais e com um passo de tempo de 10^{-4} .

As Figuras 3.11 a 3.15 ilustram os resultados obtidos utilizando o método da Variação Total Decrescente para a destruição de temperatura e para o fluxo de calor para os tempos de 20 ps, 40 ps, 60 ps, 80 ps e 100 ps, respectivamente. Já a Figura 3.16 representa o resíduo em função do número de iterações.

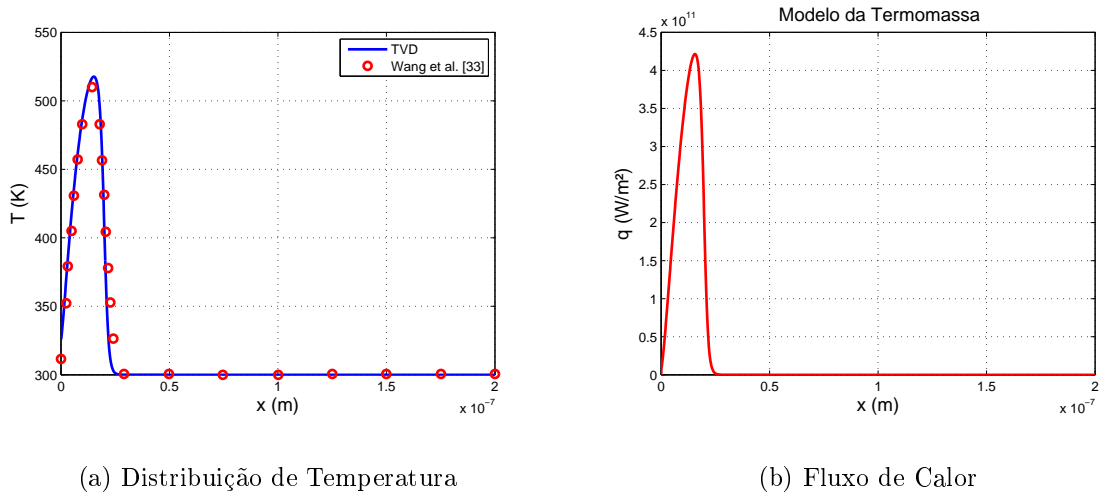


Figura 3.11: Resposta térmica prevista pelo modelo da Termomassa em um nanofilme de Silício para o tempo de 20 ps : (a) Distribuição de temperatura; (b) Fluxo de calor.

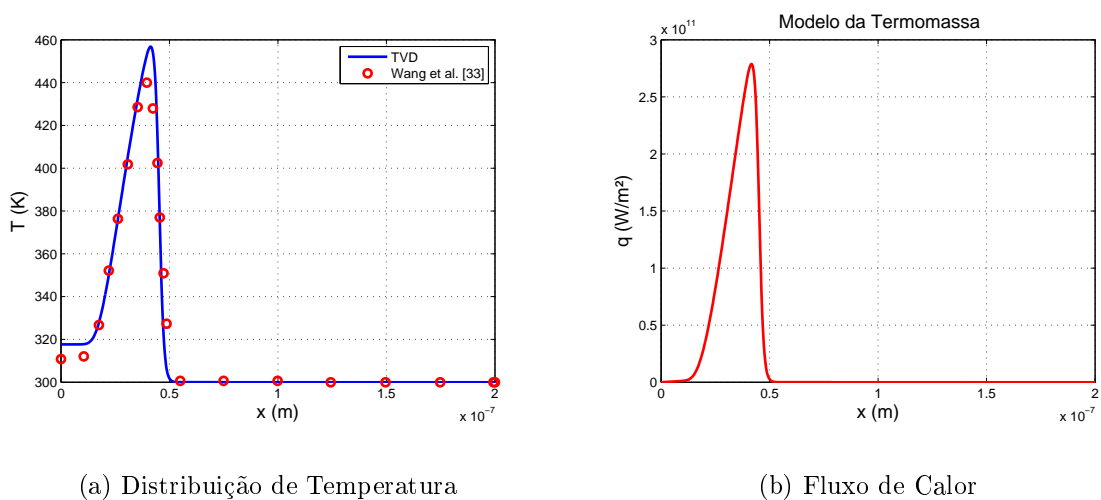


Figura 3.12: Resposta térmica prevista pelo modelo da Termomassa em um nanofilme de Silício para o tempo de 40 ps : (a) Distribuição de temperatura; (b) Fluxo de calor.

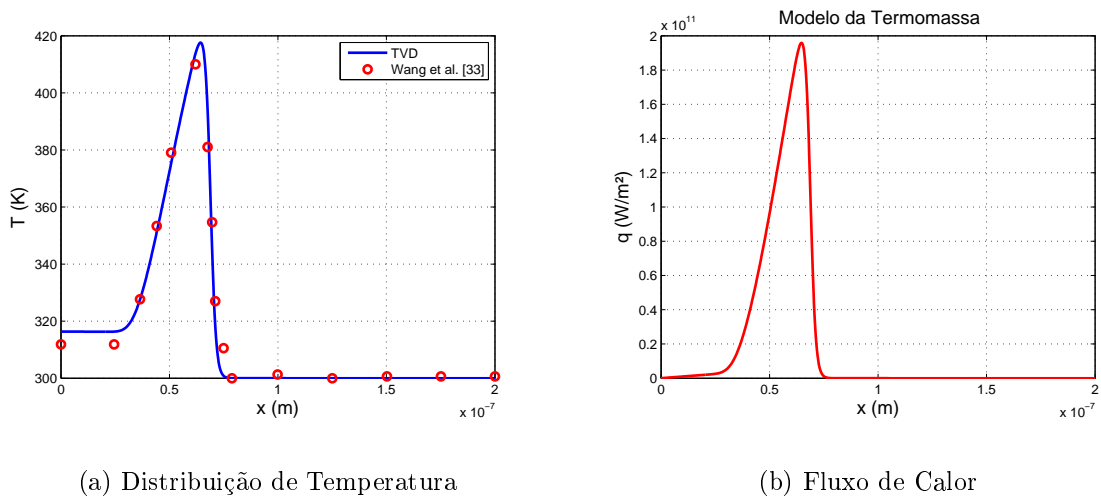


Figura 3.13: Resposta térmica prevista pelo modelo da Termomassa em um nanofilme de Silício para o tempo de 60 ps : (a) Distribuição de temperatura; (b) Fluxo de calor.

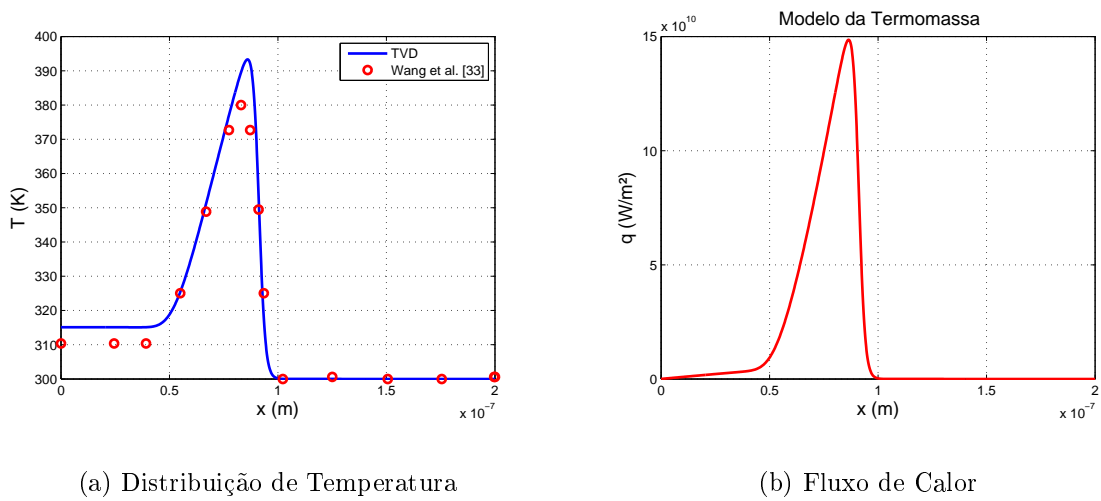


Figura 3.14: Resposta térmica prevista pelo modelo da Termomassa em um nanofilme de Silício para o tempo de 80 ps : (a) Distribuição de temperatura; (b) Fluxo de calor.

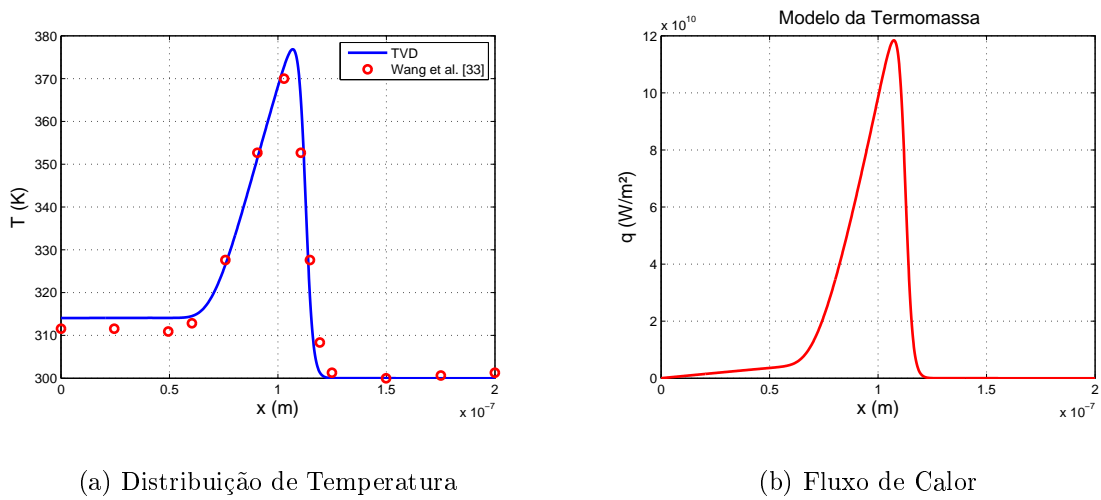


Figura 3.15: Resposta térmica prevista pelo modelo da Termomassa em um nanofilme de Silício para o tempo de 100 ps : (a) Distribuição de temperatura; (b) Fluxo de calor.

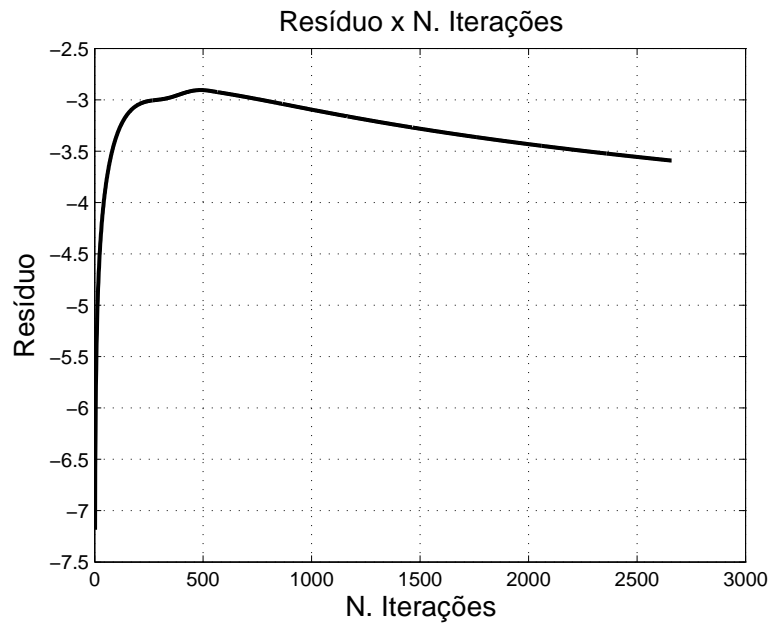


Figura 3.16: Gráfico do resíduo para o tempo de 100 ps.

Verifica-se através das Figuras 3.11 a 3.15 que, os resultados da distribuição de temperatura obtidos pelo método da Variação Total Decrescente estão de acordo com os resultados obtidos por Wang et al. [35]. Além disso, nota-se que o método TVD obtém as distribuições de temperatura sem gerar oscilações espúrias na propagação da descontinuidade. Portanto, verifica-se que o método TVD é mais robusto que o método de MacCormack.

Assim como descrito na seção 3.5, não foram feitas comparações com os resultados encontrados para a distribuição do fluxo de calor no nanofilme de silício, pois os mesmos não estão disponíveis no trabalho realizado por Wang et al. [35].

Para o gráfico do resíduo, Fig. 3.16, verifica-se um crescimento inicial do resíduo. No entanto, com o aumento do número de iterações o mesmo decresce. Assim, considera-se que o método da Variação Total Decrescente convergiu para a solução numérica.

Assim, após a validação do código computacional através do caso teste proposto, verifica-se a credibilidade e a confiabilidade do esquema TVD na resolução numérica das equações governantes da condução de calor do modelo da Termomassa. Portanto, os resultados numéricos a serem apresentados nas seções posteriores serão obtidos, unicamente, pelo método TVD.

Capítulo 4

Resultados e Discussões

Pulsos de Laser com duração da ordem de femto/picosegundos têm sido amplamente estudados nas últimas décadas. O aquecimento por um pulso de Laser tornou-se uma importante ferramenta para o estudo das propriedades térmicas de nanofilmes [47, 48]. Além disso, novas tecnologias baseadas em aquecimento por Laser estão sendo desenvolvidas rapidamente devido à disponibilidade de Lasers de alta potência. Portanto, o estudo dos mecanismos de transporte de energia sobre estas condições vem se tornando de grande importância para a avaliação de desempenho e melhoramento destas tecnologias.

No presente capítulo, simulações numéricas serão realizadas para analisar as respostas térmicas fornecidas pela teoria da Termomassa de diferentes materiais que são amplamente aplicados na manufatura de nanofilmes. Estas simulações irão prever o processo de condução de calor de não-Fourier em nanofilmes devido à presença de fluxos de calor de alta intensidade causados por pulsos de Laser de alta intensidade e pela extremamente diminuta área das seções transversais.

A Figura 4.1 ilustra uma seção longitudinal real do nanofilme de tamanho L , onde a seção transversal do mesmo é considerado muito maior do que sua seção longitudinal. Assume-se que, o pulso de calor é aplicado uniformemente ao longo de toda a fronteira esquerda e a fronteira direita é fixada num meio cuja condutividade térmica seja muito menor do que a do nanofilme. Portanto, a fronteira direita é considerada termicamente isolada.

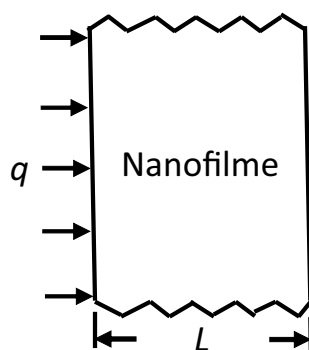


Figura 4.1: Seção longitudinal real do nanofilme.

O modelo físico do nanofilme a ser considerado para analisar a condução de calor de não-Fourier pela teoria da Termomassa é o de uma placa retangular, conforme mostra a Fig. 4.2. A seção transversal H do nanofilme no modelo físico é uma dimensão fictícia, uma vez que o pulso de calor é aplicado uniformemente na fronteira esquerda. Assim, o calor se propaga exclusivamente da fronteira esquerda para a fronteira direita, ou seja, na direção x .

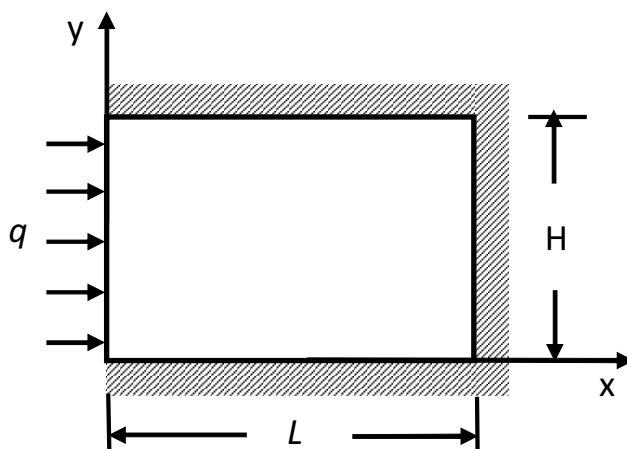


Figura 4.2: Modelo físico do nanofilme.

O método utilizado para avaliar a resposta térmica transiente em nanofilmes é através da aplicação de dois pulsos de Laser diferentes na fronteira esquerda, no qual resultam em dois fluxos de calor específicos variantes no tempo. Estes fluxos de calor possuem intensidade máxima e tempos de aplicação iguais. No entanto, as variações temporais das intensidades são diferentes.

Por fim, serão analisados os efeitos da variação da intensidade do Laser na propagação da onda térmica através da aplicação de uma baixa e uma alta intensidade do pulso de fluxo de calor, onde se considera uma alta intensidade aquele que gera picos de

temperatura próximos a temperatura de fusão do material.

Para a resolução numérica das equações governantes, será utilizado o método explícito TVD. Após testes com diferentes malhas e passos de tempo, adotou-se uma malha fixa e regular de 1000 pontos nodais no domínio físico, com um passo de tempo adimensional de 10^{-4} . O monitoramento da estabilidade e convergência do algoritmo computacional para o método TVD foi analisado através do cálculo do resíduo, Eq. 3.14.

Assim como foi realizado no Cap. 3, os resultados são obtidos em sua forma adimensional e, posteriormente, aplica-se uma transformação inversa, ou seja, a partir dos resultados das variáveis adimensionais obtêm-se os resultados das variáveis de interesse na forma dimensional. Esta transformação é realizada de acordo com a Eq. 3.6.

4.1 Aplicação de Pulsos de Laser em Nanofilmes

Na presente seção, simulações numéricas serão conduzidas para analisar as respostas térmicas de três materiais diferentes que têm sido amplamente empregados na manufatura de nanofilmes. Os materiais estudados serão o Alumínio, Silício e Ouro. Estes materiais apresentam difusividade térmica diferentes, sendo o Ouro com a maior e o Alumínio com a menor. Considera-se nanofilmes de $0.2 \mu\text{m}$ de largura e que as temperaturas iniciais dos nanofilmes são de 300 K . A Tabela 4.1 mostra as propriedades físicas dos materiais utilizadas nas simulações.

Tabela 4.1: Propriedades físicas dos materiais a 300 K . [5, 36, 49]

Material	$\rho \text{ (kg/m}^3\text{)}$	$k \text{ (W/m} \cdot \text{K)}$	$c_p \text{ (J/kg} \cdot \text{K)}$	$\alpha \cdot 10^{-6} \text{ (m}^2\text{/s)}$	φ	$\tau_{Th} \cdot 10^{-10} \text{ (s)}$
Al	2702	237	903	97,1	2,17	0,83
Si	2330	163	657	106,4	1,96	1,38
Au	19300	317	129	127	3,03	5,43

Com relação aos dois diferentes pulsos de Laser aplicados na fronteira esquerda. Primeiramente, assume-se uma distribuição Gaussiana para o pulso de Laser [16, 17, 50, 51, 52], definida pela Eq. 4.1 e, em seguida, adota-se uma distribuição Cossenoidal para o pulso de Laser [35, 36], expresso pela Eq. 4.2.

$$q_G(0, t) = \begin{cases} q_A \cdot \exp\left(-4\ln 2 \left(\frac{t}{t_d}\right)^2\right) & t < t_d \\ 0 & t \geq t_d \end{cases} \quad (4.1)$$

$$q_{Cos}(0, t) = \begin{cases} q_A \cdot \frac{1}{2} \left(1 - \cos \left(\frac{2\pi t}{t_d} \right) \right) & t < t_d \\ 0 & t \geq t_d \end{cases} \quad (4.2)$$

onde q_A é a intensidade do Laser e t_d é o tempo de aplicação do pulso de Laser, cujo os valores são assumidos como $5 \cdot 10^{11} \text{ W/m}^2$ e 10 ps, respectivamente.

A Figura 4.3 mostra um diagrama esquemático das duas diferentes funções de pulso de Laser. Apesar do fato que estas duas funções apresentarem intensidades máximas iguais e o mesmo tempo de aplicação, a quantidade total de energia fornecida pelas funções de pulso de Laser são ligeiramente diferentes, sendo $q_{Cos} = 0.957175 \cdot q_G$.

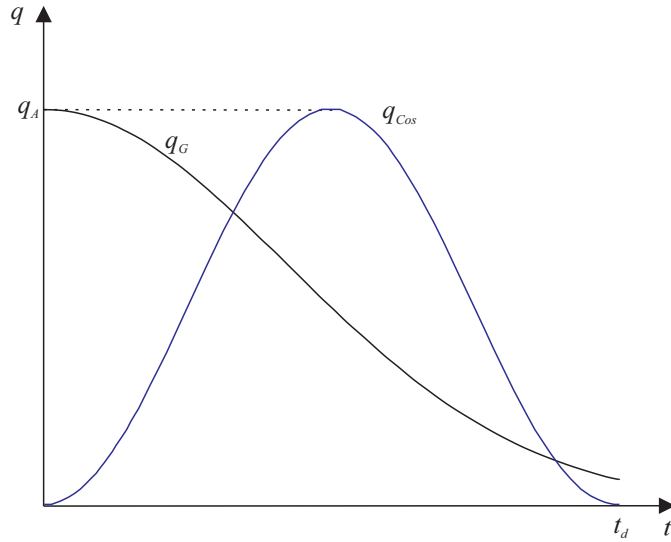


Figura 4.3: Diagrama esquemático das duas diferentes funções de pulso de laser.

De acordo com o modelo físico, Fig. 4.2, assumem-se as seguintes condições iniciais e de contorno:

$$0 \leq x^* \leq 1 \quad e \quad t^* = 0: \quad T^* = 1$$

$$x^* = 0 \quad e \quad t^* > 0: \quad q^* = q^*(x^*, t^*) \quad (4.3)$$

$$x^* = 1 \quad e \quad t^* > 0: \quad \frac{\partial T^*}{\partial x^*} = 0.$$

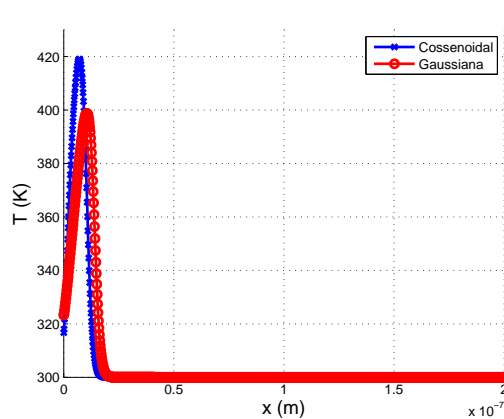
O tempo total de simulação para cada material foi considerado aquele até que a fron-

teira direita sofra uma perturbação térmica, explicitada pela variação de sua temperatura inicial. Como serão realizadas simulações para três materiais diferentes, são esperados tempos de simulação diferentes para cada caso (cada material) e para cada função de pulso de Laser.

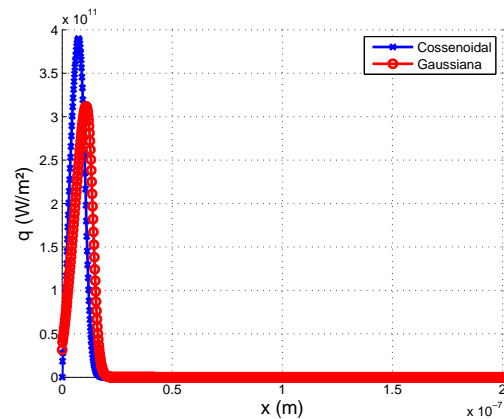
Os resultados previstos pelo modelo da Termomassa serão apresentados na forma dimensional para permitir a avaliação das respostas térmicas provocadas pelos dois diferentes pulsos de Laser nos materiais. Os mesmos serão apresentados separadamente para cada caso (cada material) para diferentes períodos de tempo.

4.1.1 Resultados para o nanofilme de Alumínio

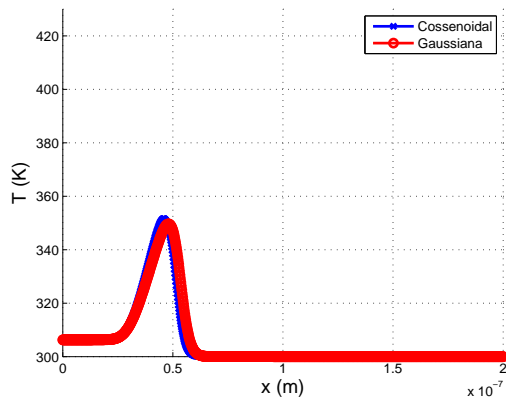
A Figura 4.4 mostra as respostas térmicas para diferentes períodos de tempo para o nanofilme de Alumínio. Nesta figura, serão apresentadas as respostas da distribuição de temperatura e do fluxo de calor no nanofilme para os dois diferentes pulsos de Laser.



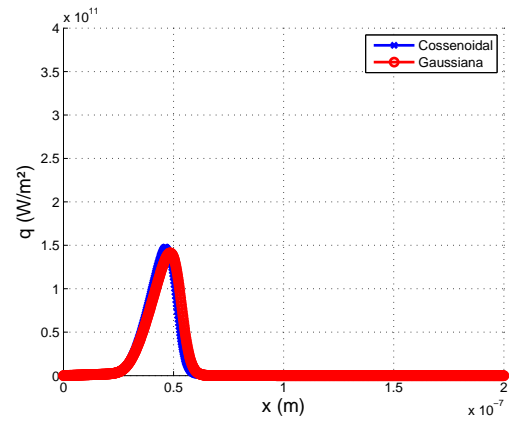
(a) Distribuição de temperatura em 10 ps



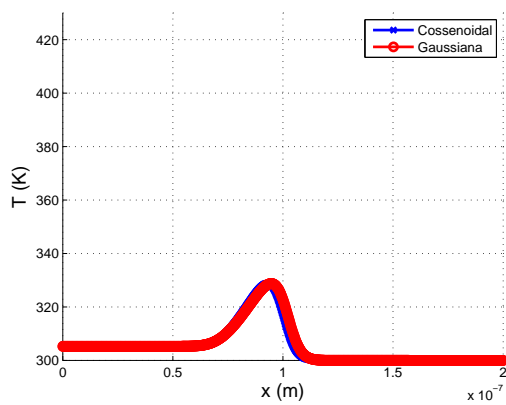
(b) Fluxo de calor em 10 ps



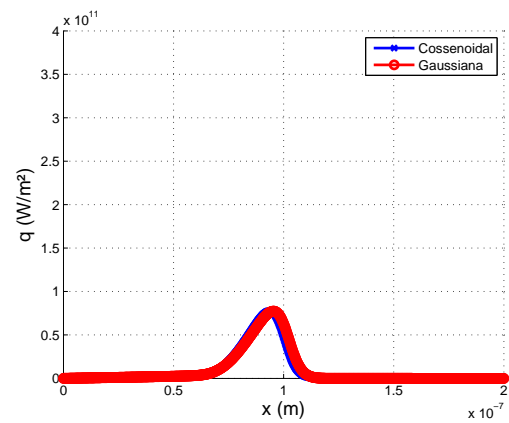
(c) Distribuição de temperatura em 40 ps



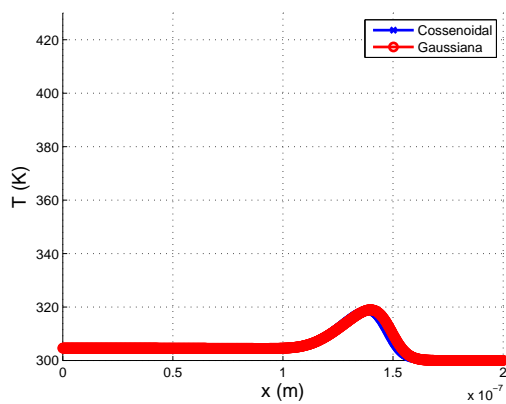
(d) Fluxo de calor em 40 ps



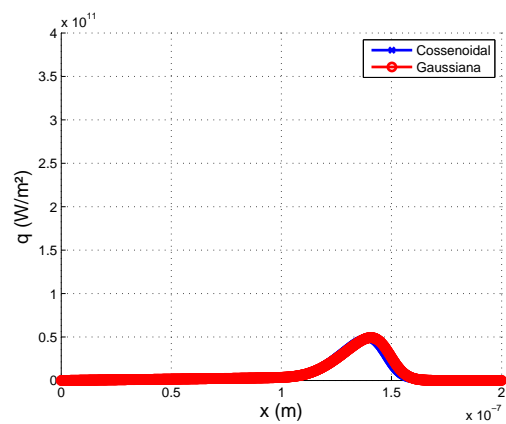
(e) Distribuição de temperatura em 80 ps



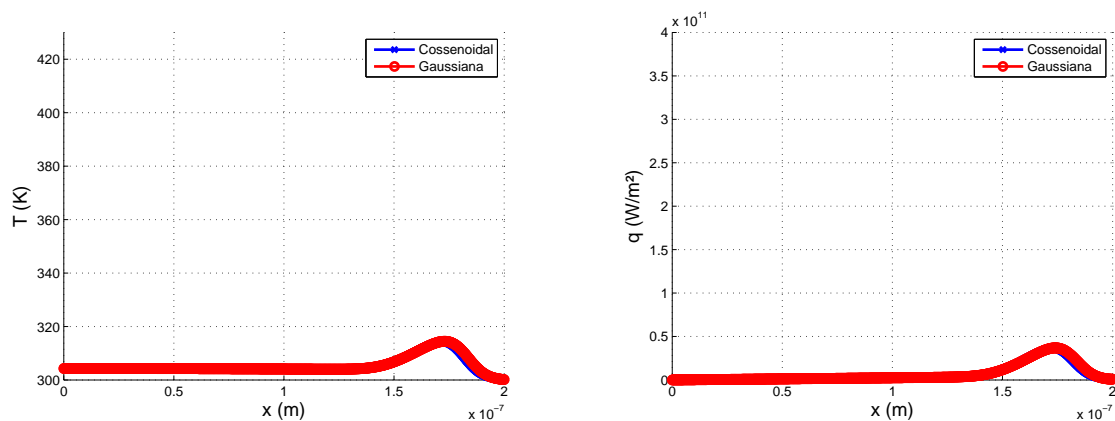
(f) Fluxo de calor em 80 ps



(g) Distribuição de temperatura em 120 ps



(h) Fluxo de calor em 120 ps



(i) Distribuição de temperatura em 150 ps

(j) Fluxo de calor em 150 ps

Figura 4.4: Resposta térmica para o nanofilme de Alumínio prevista pelo modelo da Termomassa.

A Figura 4.4 mostra que durante a aplicação dos pulsos de Laser, 10 ps, apenas pontos próximos a fronteira esquerda do nanofilme são afetadas pela perturbação térmica. Verifica-se também que para o mesmo tempo a função Cossenoidal apresenta um pico de temperatura maior do que a função Gaussiana. No entanto, pontos mais afastados da fronteira esquerda são afetados pela função Gaussiana. Nota-se que para tempos posteriores os picos de temperatura para as duas funções de pulso de Laser tendem a ser iguais. Isto ocorre devido à tendência natural que o meio tem de atenuar o transporte de calor. A Tabela 4.2 mostra os tempos totais de simulação para as duas diferentes funções de pulso de Laser para o Alumínio.

Tabela 4.2: Tempo total de simulação para o Alumínio.

Pulso de laser	Tempo total de simulação(ps)
Gaussiana	146.05
Cossenoidal	148.07

Verifica-se que para os dois diferentes pulsos de Laser, a diferença entre os tempos totais de simulação é muito pequena, menor do que 2 %. Esta diferença é considerada inexpressiva. Devido à diferença entre os tempos totais de simulação para as duas funções de pulso de Laser, a Fig. 4.4 (i) e (j) foram obtidas para um período de tempo ligeiramente superior ao maior valor, ou seja, 150 ps.

Na Figura 4.5 é analisado o gráfico do resíduo em função do número de iterações para as duas funções de pulso de Laser para o tempo de 150 ps. O cálculo do resíduo é realizado de acordo com a Eq. 3.14, onde a variável temperatura, T , é utilizada para a

determinação do mesmo.

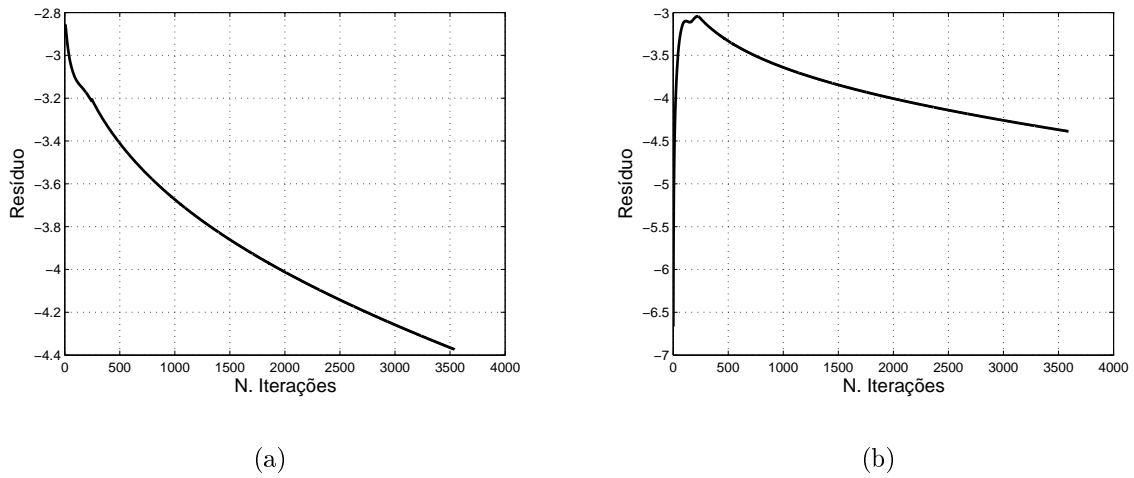
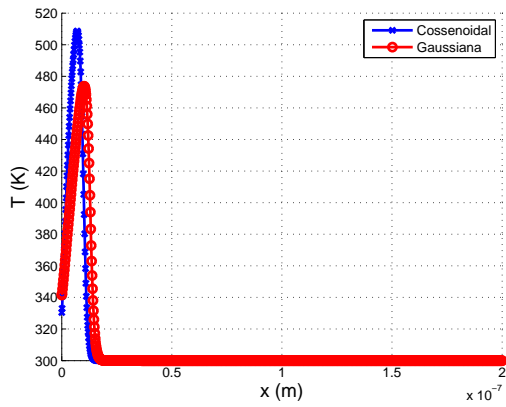


Figura 4.5: Gráfico do resíduo para o tempo de 150 ps: (a) função Gaussiana; (b) função Cosseínodal.

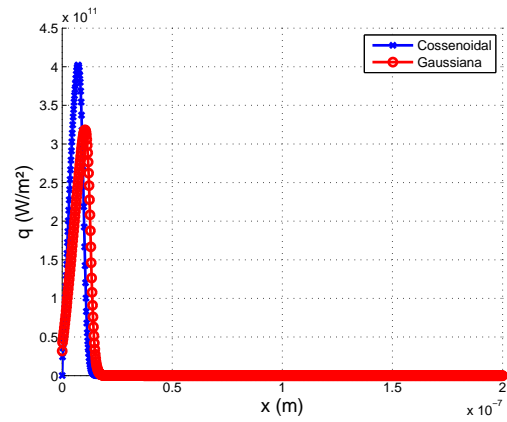
De acordo com a Fig. 4.5, verifica-se que para as duas funções o resíduo decresce com o aumento do número de iterações. Assim, conclui-se que a solução numérica obtida pelo método TVD convergiu. Embora o comportamento do erro seja muito distinto de uma função para outra.

4.1.2 Resultados para o nanofilme de Silício

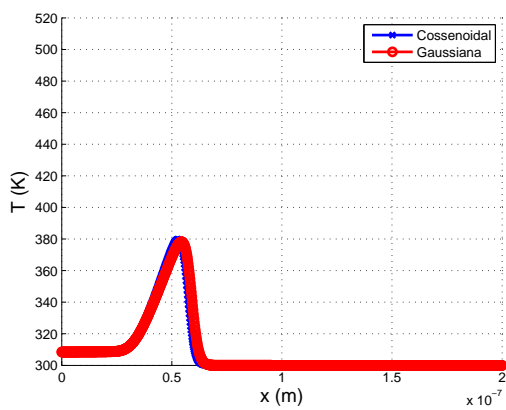
A Figura 4.6 mostra as respostas térmicas para diferentes períodos de tempo para o nanofilme de Silício. Na mesma, serão apresentadas as respostas da distribuição de temperatura e do fluxo de calor no nanofilme de Silício para os dois diferentes pulsos de Laser.



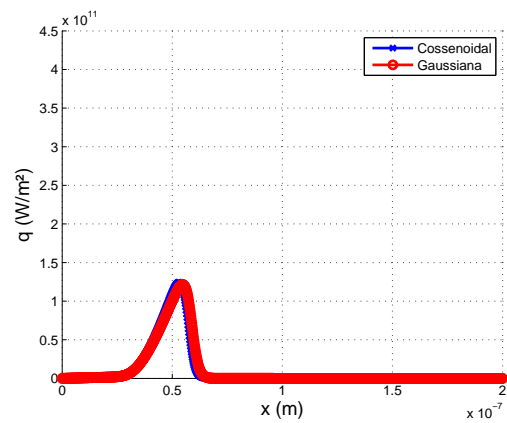
(a) Distribuição de temperatura em 10 ps



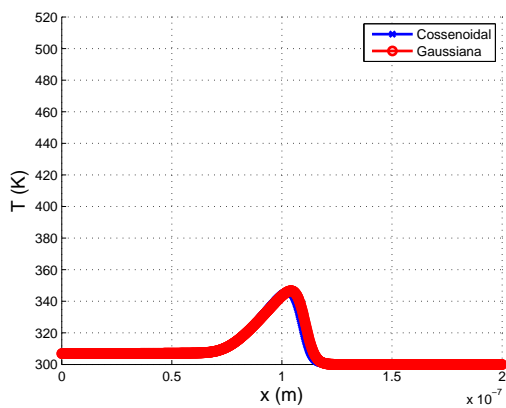
(b) Fluxo de calor em 10 ps



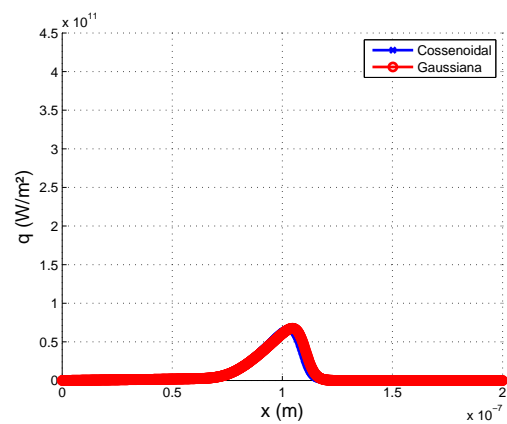
(c) Distribuição de temperatura em 50 ps



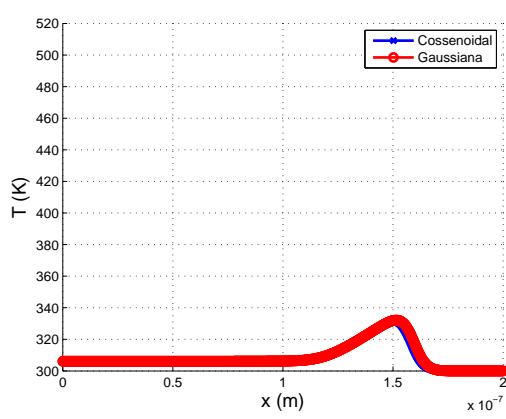
(d) Fluxo de calor em 50 ps



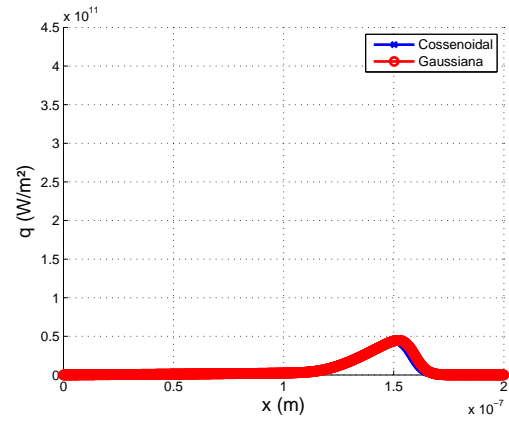
(e) Distribuição de temperatura em 100 ps



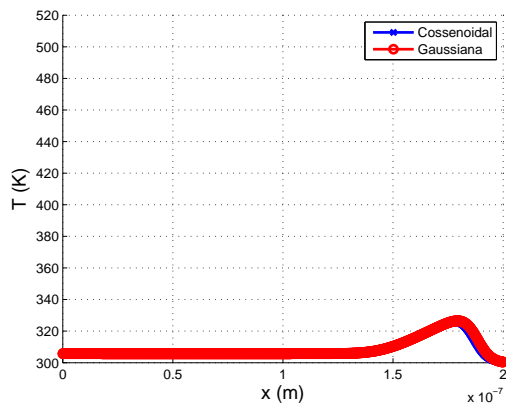
(f) Fluxo de calor em 100 ps



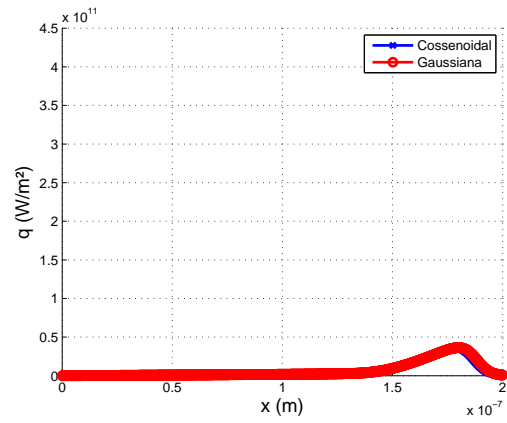
(g) Distribuição de temperatura em 150 ps



(h) Fluxo de calor em 150 ps



(i) Distribuição de temperatura em 180 ps



(j) Fluxo de calor em 180 ps

Figura 4.6: Resposta térmica para o nanofilme de Silício prevista pelo modelo da Termomassa

A Figura 4.6 mostra que a propagação de calor no nanofilme de Silício apresenta as mesmas características observadas no nanofilme de Alumínio. Entretanto, durante o tempo de aplicação do pulso de Laser o Silício apresentou um pico de temperatura maior do que o Alumínio. De acordo com a teoria da Termomassa, o parâmetro tempo característico é o tempo necessário para estabelecer um fluxo de calor (escoamento de gás de Termomassa) imediatamente após um gradiente de Temperatura (força indutora) ser aplicado ao meio. Este é diretamente proporcional à difusividade térmica do meio, conforme expresso pela Eq. 2.32. Como pode ser notado na Tab. 4.1, a difusividade térmica do Silício é maior do que a do Alumínio. Portanto, se estes dois materiais são submetidos ao mesmo processo de aquecimento, espera-se que o Silício possua um tempo característico maior do que o Alumínio, ou seja, é esperado um maior tempo de simulação no Silício. Como o Silício possui um tempo característico maior do que o Alumínio, a energia absorvida pelo Silício também é maior. Assim, espera-se que para o tempo de duração do pulso de Laser o Silício apresente um pico de temperatura maior do que o Alumínio. A Tabela 4.3 mostra os tempos totais de simulação para as duas diferentes funções de pulso de Laser para o Silício.

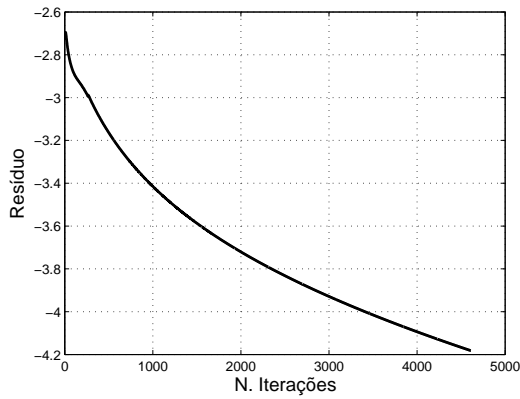
Tabela 4.3: Tempo total de simulação para o Silício.

Pulso de laser	Tempo total de simulação(ps)
Gaussiana	173.43
Cossenoidal	175.38

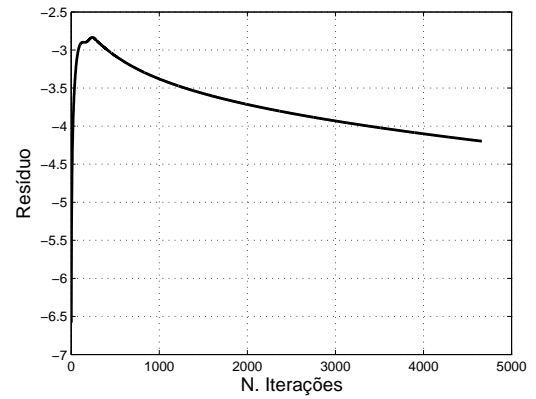
Como no Alumínio, verificou-se que para o nanofilme de Silício a diferença entre os tempos de simulação para os dois diferentes pulsos de Laser é muito pequena, menor do que 2%. Esta diferença também é considerada inexpressiva. Devido a tempos de simulação diferentes, a Fig. 4.6 (i) e (j) foram obtidas para um período de tempo ligeiramente superior ao maior valor, ou seja, 180 ps.

A Figura 4.7 mostra o gráfico de convergência para as duas funções de pulso de Laser para o tempo de 180 ps. Assim como nos resultados obtidos para o Alumínio, o resíduo foi calculado utilizando a variável temperatura, conforme a Eq. 3.14.

Conforme a Fig. 4.7, nota-se que para as duas funções o resíduo decresce com o aumento do número de iterações. Portanto, conclui-se que a solução convergiu.



(a)

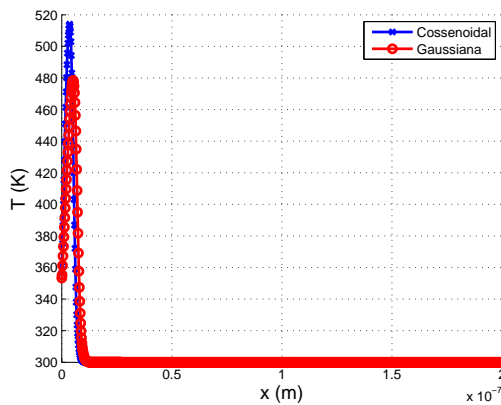


(b)

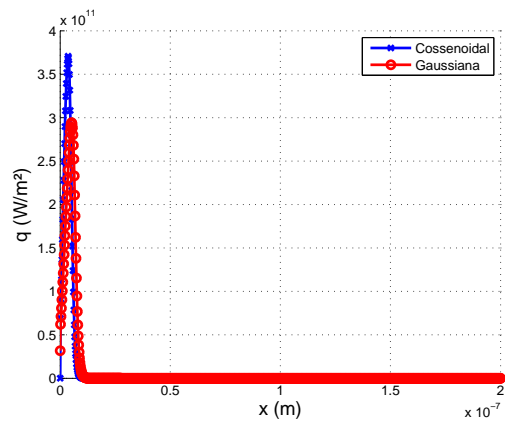
Figura 4.7: Gráfico do resíduo para o tempo de 180 ps: (a) função Gaussiana; (b) função Cossenoidal.

4.1.3 Resultados para o nanofilme de Ouro

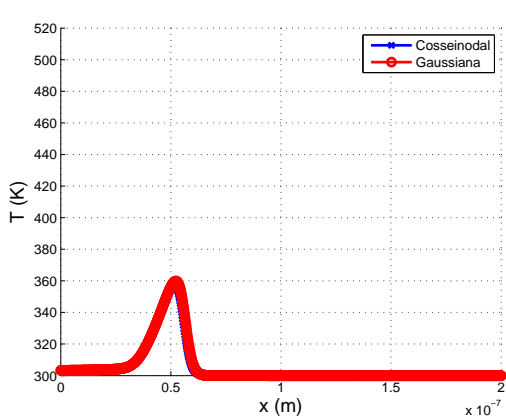
A Figura 4.8 mostra as respostas térmicas para diferentes períodos de tempo para o nanofilme de Ouro. Nesta, serão apresentadas as respostas da distribuição de temperatura e do fluxo de calor prevista pelo modelo da Termomassa para os dois diferentes pulsos de calor.



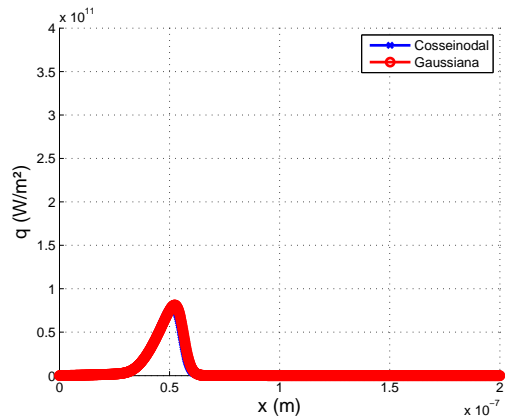
(a) Distribuição de temperatura em 10 ps



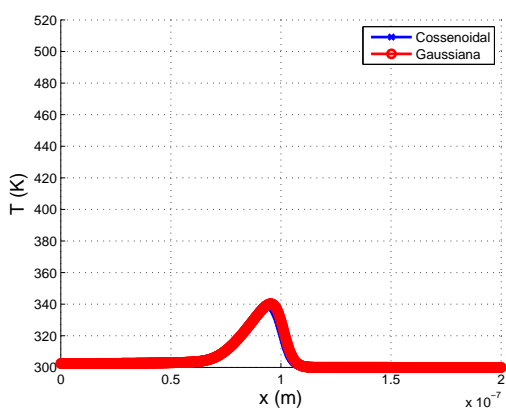
(b) Fluxo de calor em 10 ps



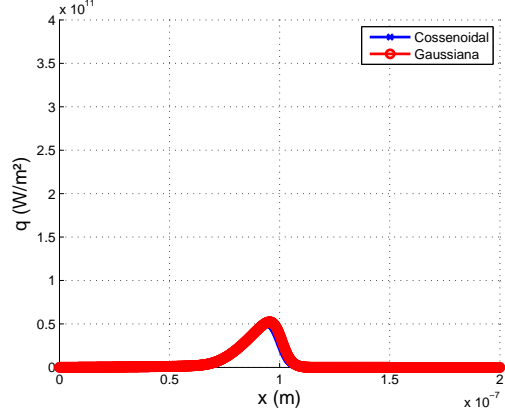
(c) Distribuição de temperatura em 90 ps



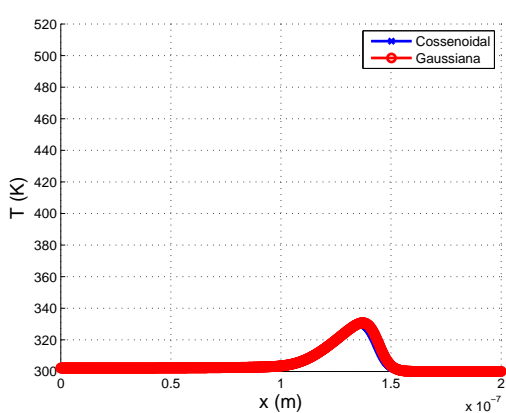
(d) Fluxo de calor em 90 ps



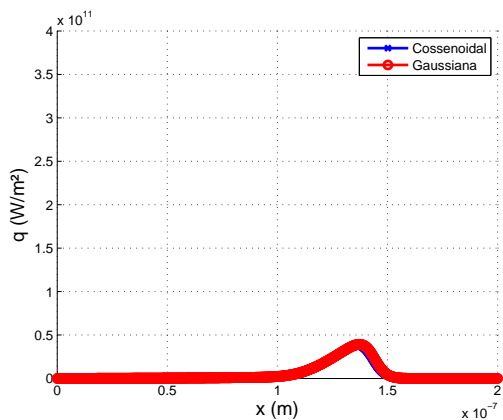
(e) Distribuição de temperatura em 170 ps



(f) Fluxo de calor em 170 ps



(g) Distribuição de temperatura em 250 ps



(h) Fluxo de calor em 250 ps

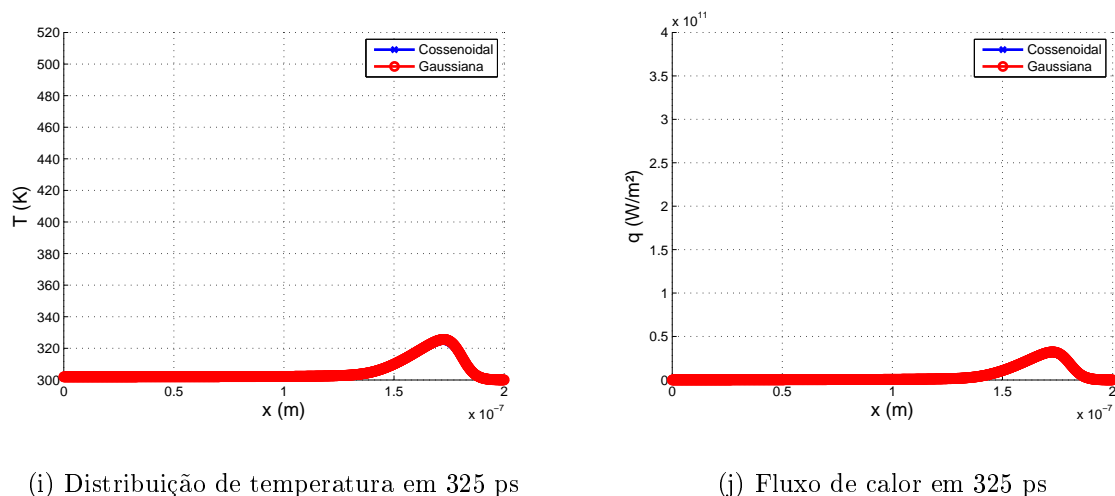


Figura 4.8: Resposta térmica para o nanofilme de Ouro prevista pelo modelo da Termomassa.

A partir da Fig. 4.8 verifica-se que como no Silício, a propagação de calor no Ouro apresentou as mesmas características do Alumínio. Verificou-se que o Ouro é o material com o maior pico de temperatura durante a aplicação dos dois pulsos de Laser, 10 ps. No presente trabalho o Ouro é o material com a maior difusividade térmica, conforme a Tab. 4.1. Portanto, espera-se que este material possua o maior pico de temperatura para o tempo de duração do pulso de Laser e também apresente o maior tempo característico, ou seja, maior tempo de simulação. A Tabela 4.4 mostra o tempo de total de simulação para o Ouro.

Tabela 4.4: Tempo total de simulação para o Ouro.

Pulso de laser	Tempo total de simulação(ps)
Gaussiana	318.81
Cossenoidal	321.20

Como nos outros materiais, verificou-se que no Ouro a diferença entre os tempos de simulação para os dois diferentes pulsos de Laser é muito pequena, menor do que 2 %. Esta diferença foi considerada inexpressiva. Assim como nos outros materiais, devido à diferença entre os tempos totais de simulação para os dois pulsos de Laser a Fig. 4.8 (i) e (j) foram obtidas para um período de tempo ligeiramente superior ao maior valor, ou seja, 325 ps.

A Figura 4.9 mostra o gráfico de convergência para as duas funções de pulso de Laser para o tempo 325 ps. Assim como nos resultados obtidos para os outros materiais, o resíduo foi calculado utilizando a variável temperatura.

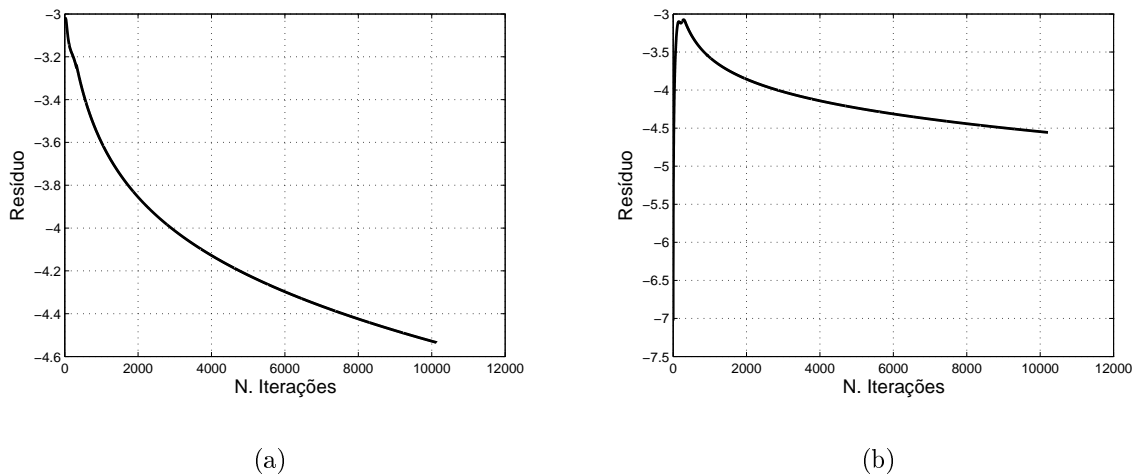


Figura 4.9: Gráfico do resíduo para o tempo de 325 ps: (a) função Gaussiana; (b) função Cosseinodal.

A partir da Fig. 4.9, verifica-se que o resíduo decresce com o aumento do número de iterações. Portanto, conclui-se que a solução numérica obtida pelo método TVD convergiu.

Verifica-se a partir das Figs. 4.4, 4.6 e 4.8 que, no tempo de duração dos pulsos de Laser os materiais que possuem as maiores difusividades térmicas apresentaram os maiores picos de temperatura. No entanto, estes materiais apresentaram tempos de simulação maiores. A Tabela 4.5 mostra o tempo total de simulação para todos os materiais.

Tabela 4.5: Tempo total de simulação para todos os materiais.

Material	Tempo total de simulação(ps)
Al	150
Si	180
Au	325

A partir da Tab. 4.5, verifica-se que os materiais que possuem as maiores difusividades térmicas apresentam os maiores tempos totais de simulação. Como as duas funções apresentam tempos totais de simulação diferentes, a Tab. 4.5 mostra o tempo de total de simulação para cada material ligeiramente superior ao maior valor.

4.2 Influência da Intensidade do Pulso de Laser na Propagação de Calor

Em ordem de analisar a influência da intensidade do pulso de Laser na propagação de calor prevista pelo modelo da Termomassa, simulações numéricas para obter as respostas

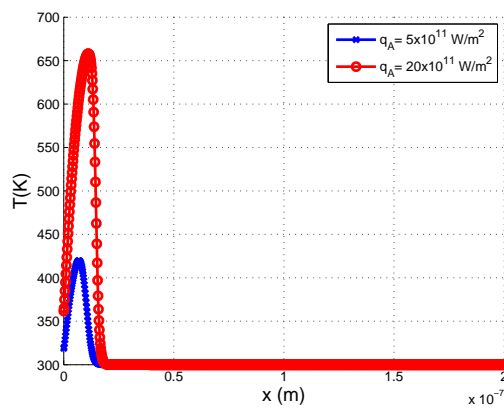
da velocidade da onda térmica, tempo característico e temperatura são realizadas para um nanofilme. Os materiais estudados serão Alumínio e Ouro. Estes materiais apresentam diferentes difusividades térmicas, sendo o Ouro com a maior e o Alumínio com a menor, de acordo com a Tab. 4.1. Assumem-se nanofilmes de $0,2 \mu\text{m}$ de largura e que as temperaturas iniciais dos nanofilmes são de 300 K .

Com relação ao pulso de Laser aplicado na fronteira esquerda, uma função de pulso Cossenoidal é assumida, definida de acordo com a Eq. 4.2. Já em relação à intensidade do Laser, q_A , uma alta e uma baixa intensidade são consideradas, cujos valores são assumidos como $20 \cdot 10^{11} \text{ W/m}^2$ e $5 \cdot 10^{11} \text{ W/m}^2$, respectivamente. O tempo de duração do pulso de Laser é assumido como sendo 10 ps .

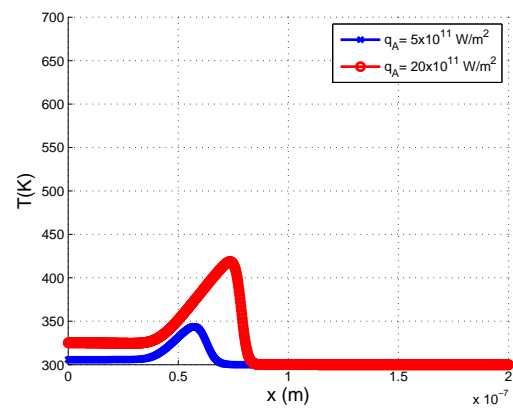
Serão adotadas as mesmas condições iniciais-contorno assumidas na seção 4.1, expresso pela Eq. 4.3. Quanto ao tempo total de simulação para cada material, foi considerado o mesmo critério adotado na seção 4.1. No entanto, como serão utilizadas duas diferentes intensidades de Laser, adotar-se-á o tempo total de simulação para a intensidade de Laser que em menor tempo faça com que a fronteira direita do nanofilme sofra uma perturbação térmica, explicitada pela variação de sua temperatura inicial. Os resultados são apresentados separadamente para cada material contendo as respostas das ondas térmicas previstas pelo modelo da Termomassa para as duas diferentes intensidades do Laser.

4.2.1 Resultados para o nanofilme de Alumínio

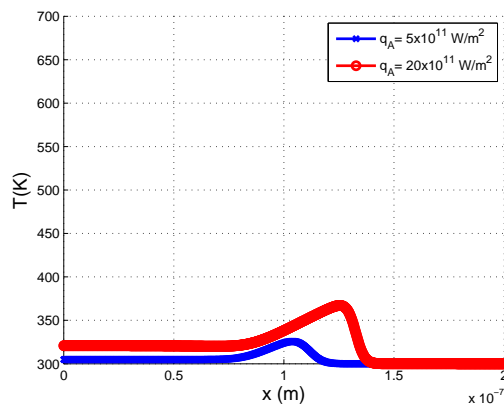
As Figuras 4.10, 4.11 e 4.12 mostram as repostas da distribuição de temperatura, tempo característico e velocidade da onda térmica em diferentes períodos de tempo para o nanofilme de Alumino, respectivamente.



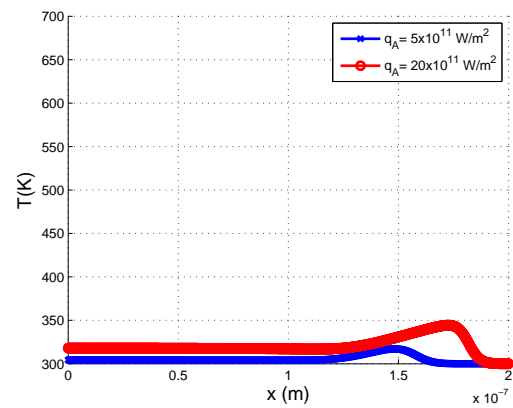
(a) Distribuição de temperatura em 10 ps



(b) Distribuição de temperatura em 50 ps

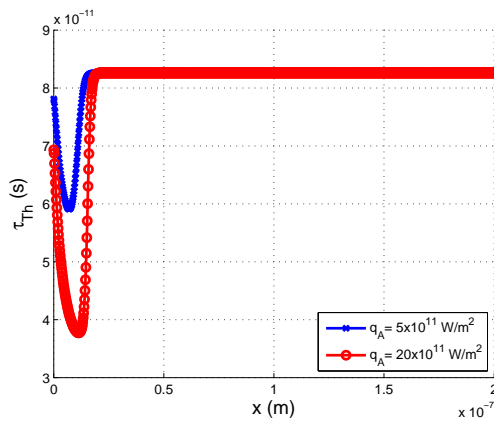


(c) Distribuição de temperatura em 90 ps

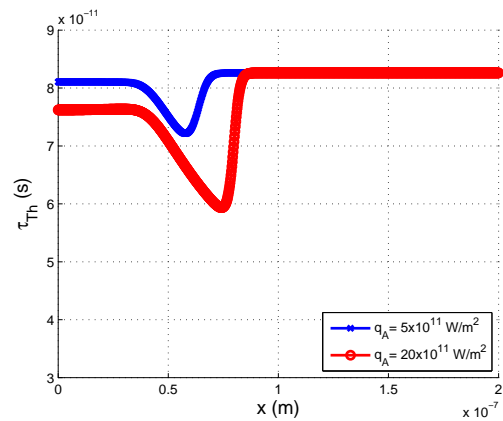


(d) Distribuição de temperatura em 130 ps

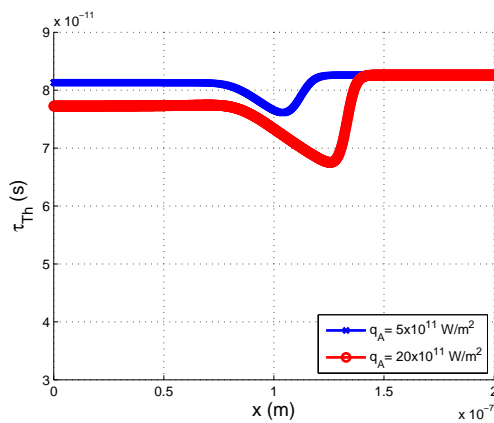
Figura 4.10: Distribuição de Temperatura no nanofilme de Alumínio prevista pelo modelo da Termomassa.



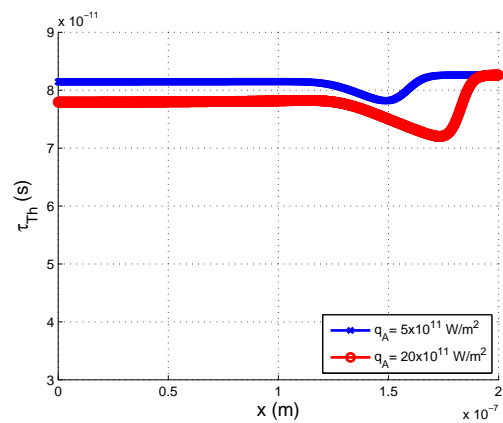
(a) Distribuição espacial do tempo característico em 10 ps



(b) Distribuição espacial do tempo característico em 50 ps

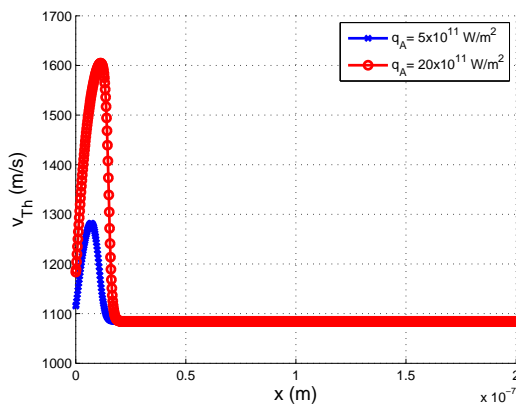


(c) Distribuição espacial do tempo característico em 90 ps

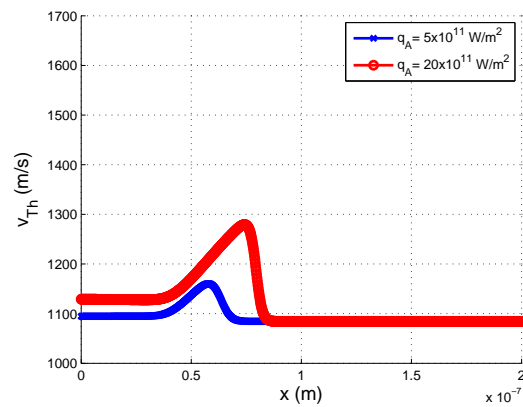


(d) Distribuição espacial do tempo característico em 130 ps

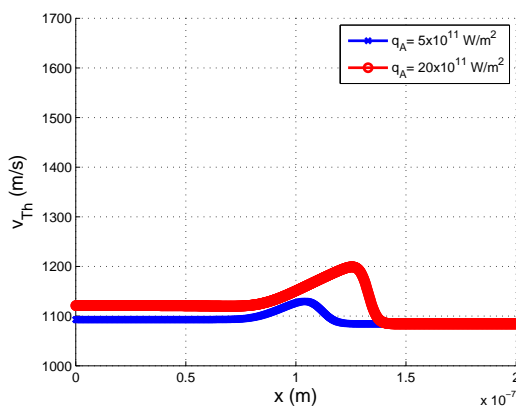
Figura 4.11: Distribuição espacial do tempo característico no nanofilme de Alumínio.



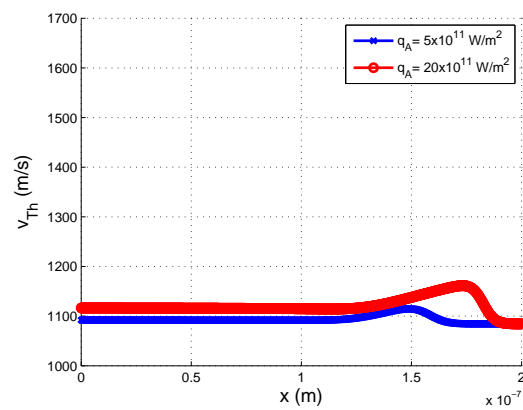
(a) Distribuição espacial da velocidade da onda térmica em 10 ps



(b) Distribuição espacial da velocidade da onda térmica em 50 ps



(c) Distribuição espacial da velocidade da onda térmica em 90 ps



(d) Distribuição espacial da velocidade da onda térmica em 130 ps

Figura 4.12: Distribuição espacial da velocidade da onda térmica no nanofilme de Alumínio.

A Figura 4.10 mostra os efeitos da intensidade do Laser do pulso de fluxo de calor sobre a resposta da distribuição de temperatura prevista pelo modelo da Termomassa. Como mostrado na Fig. 4.10, os picos de temperatura aumentam significativamente devido ao aumento da intensidade do Laser do pulso de fluxo de calor. Observou-se que para tempos posteriores os picos de temperatura tendem a diminuir. Isto ocorre devido à tendência natural que o meio tem de atenuar o transporte de calor. A Figura 4.11 mostra a distribuição espacial do tempo característico no nanofilme de Alumínio para as duas diferentes intensidades do Laser do pulso de fluxo de calor. De acordo com a teoria da Termomassa, o parâmetro tempo característico é o tempo necessário para estabelecer um fluxo de calor (escoamento de gás de Termomassa) imediatamente após um gradiente de Temperatura (força indutora) ser aplicado ao meio. Este parâmetro é diretamente proporcional à difusividade térmica e inversamente proporcional a temperatura do meio, como expresso pela Eq. 2.32. Portanto, o tempo característico é menor quando submetido a uma maior intensidade de Laser do pulso de fluxo de calor.

A Figura 4.12 mostra a distribuição espacial da velocidade da onda térmica no nanofilme de Alumínio para as duas diferentes intensidades do Laser do pulso de fluxo de calor. Verificou-se que a velocidade da onda térmica é maior para uma alta intensidade de Laser do que para uma baixa intensidade de Laser, uma vez que, os picos de temperatura no nanofilme são maiores quando submetidos a uma alta intensidade do Laser do pulso de fluxo de calor. Assim, a perturbação térmica viaja mais rapidamente sob alta intensidade do Laser. Como os picos de temperatura tendem a diminuir com a propagação da onda térmica no nanofilme, a velocidade da onda térmica também tendem a diminuir, conforme mostra na Fig. 4.12.

As Tabelas 4.6 e 4.7 mostram os picos de temperatura, assim como os tempos característicos e as velocidades da onda térmica, relacionados às máximas temperaturas, no nanofilme de Alumínio para a baixa e a alta intensidade do pulso de Laser, respectivamente.

Tabela 4.6: Picos de temperatura, tempos característicos e velocidades da onda térmica para a baixa intensidade do pulso de Laser.

$Tempo$ (ps)	T_{max} (K)	$\tau_{ThT_{max}} \cdot 10^{-10}$ (s)	$v_{ThT_{max}}$ (m/s)
10	419,62	0,59	1281,8
50	343,79	0,72	1160,2
90	325,64	0,76	1129,6
130	317,10	0,78	1114,6

Tabela 4.7: Picos de temperatura, tempos característicos e velocidades da onda térmica para a alta intensidade do pulso de Laser.

$T_{\text{tempo}} (ps)$	$T_{\text{max}} (K)$	$\tau_{ThT_{\text{max}}} \cdot 10^{-10} (s)$	$v_{ThT_{\text{max}}} (m/s)$
10	657,98	0,38	1604,5
50	418,66	0,59	1279,3
90	367,09	0,67	1199,3
130	317,10	0,72	1161,3

As Figuras 4.13 e 4.14 mostram a variação temporal dos picos do tempo característico e da velocidade da onda térmica no nanofilme de Alumínio, respectivamente. A Fig. 4.13 mostra que com a propagação da onda térmica no nanofilme, o tempo característico aumenta devido a diminuição dos picos de temperatura. A Figura 4.14 mostra que a velocidade da onda térmica diminui devido à diminuição dos picos de temperatura. Como já foram observados anteriormente os picos de temperatura são maiores quando submetido a uma alta intensidade de Laser. Portanto, a onda térmica viaja mais rapidamente sob alta intensidade de Laser do fluxo de calor. No entanto, para tempos posteriores as velocidades da onda térmica tendem ser iguais. Isso ocorre devido a tendência natural que o meio possui de atenuar o transporte de calor.

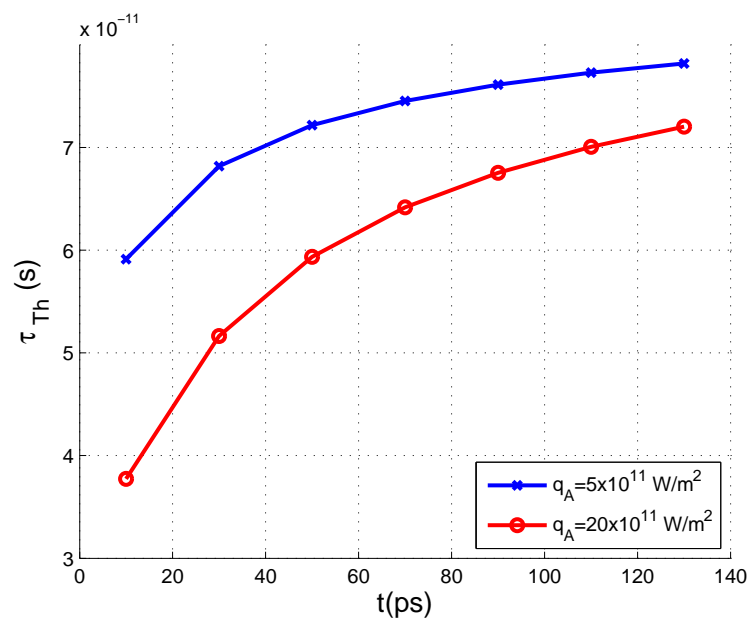


Figura 4.13: Variação temporal dos picos do tempo característico no nanofilme de Alumínio.

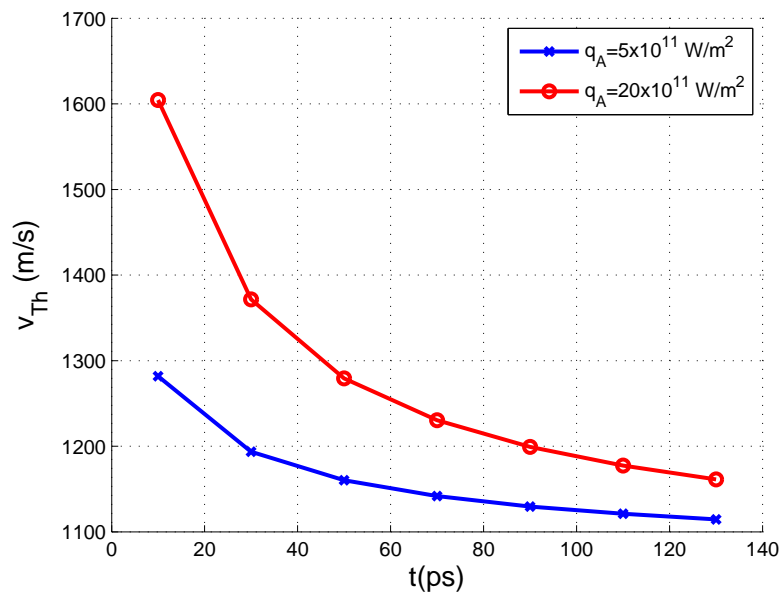
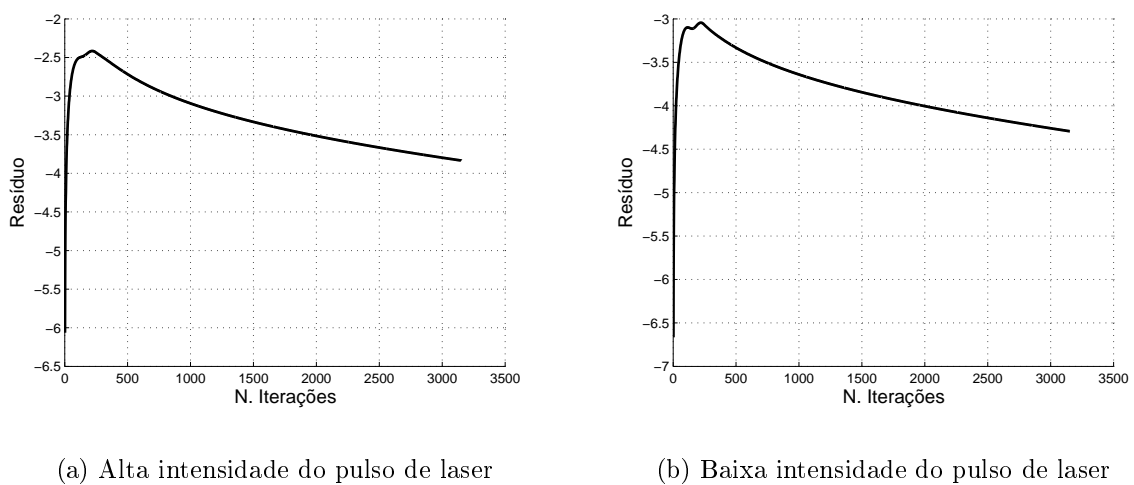


Figura 4.14: Variação temporal dos picos da velocidade da onda térmica no nanofilme de Alumínio.

Na Figura 4.15 é analisada o gráfico do resíduo em função do número de iterações para as duas diferentes intensidades de pulso de Laser para o tempo de 130 ps. O cálculo do resíduo é realizado de acordo com a Eq. 3.14, onde a variável temperatura, T , é utilizada para a determinação do mesmo. De acordo com a Fig. 4.15, verifica-se que para as duas diferentes intensidades de pulso de fluxo de calor o resíduo decresce com o aumento do número de iterações. Portanto, conclui-se que a solução numérica obtida pelo método TVD convergiu.



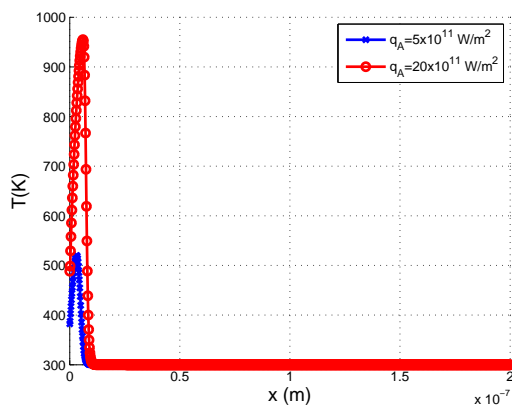
(a) Alta intensidade do pulso de laser

(b) Baixa intensidade do pulso de laser

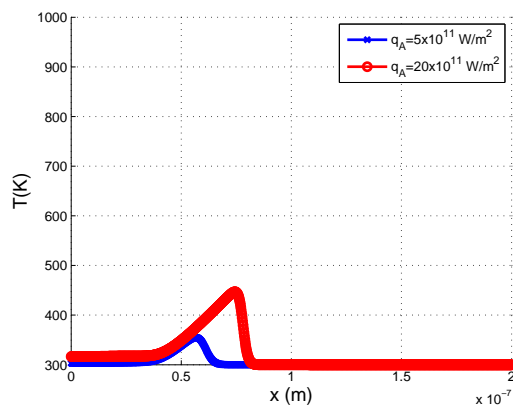
Figura 4.15: Gráfico do resíduo para o tempo de 130 ps.

4.2.2 Resultados para o nanofilme de Ouro

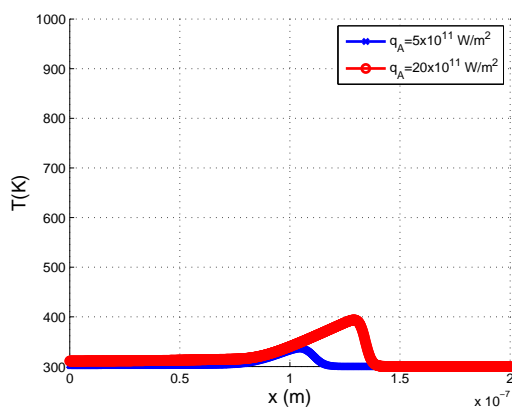
As Figuras 4.16, 4.17 e 4.18 mostram as repostas da distribuição de temperatura, tempo característico e velocidade da onda térmica em diferentes períodos de tempo para o nanofilme de Ouro, respectivamente.



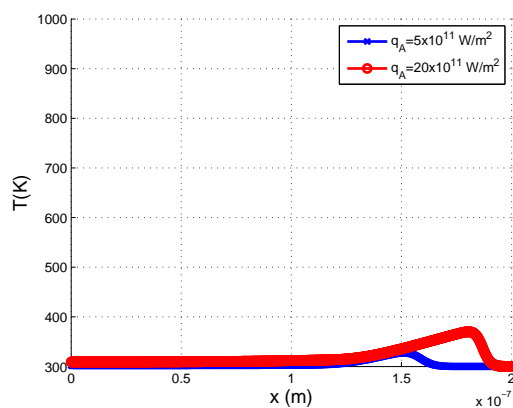
(a) Distribuição de temperatura em 10 ps



(b) Distribuição de temperatura em 100 ps

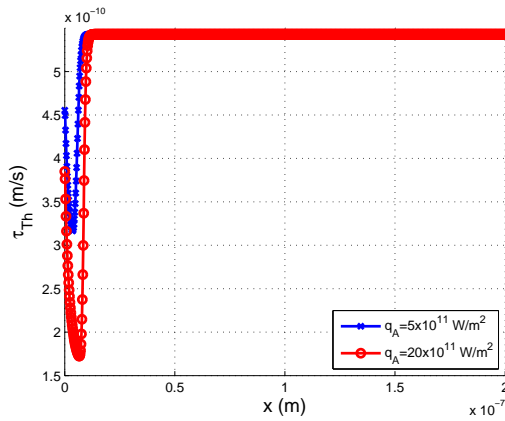


(c) Distribuição de temperatura em 190 ps

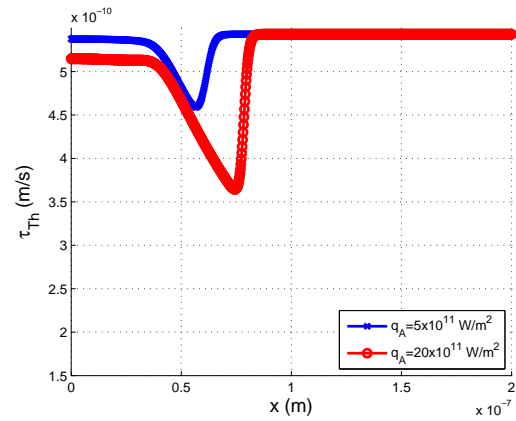


(d) Distribuição de temperatura em 280 ps

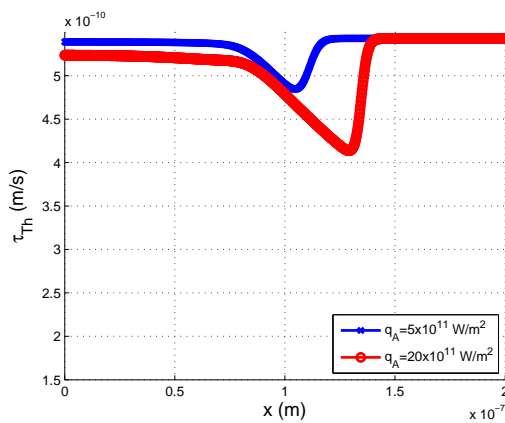
Figura 4.16: Distribuição de Temperatura no nanofilme de ouro prevista pelo modelo da Termomassa.



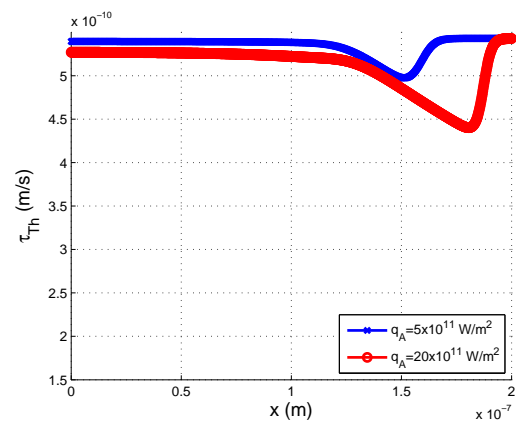
(a) Distribuição espacial do tempo característico em 10 ps



(b) Distribuição espacial do tempo característico em 100 ps

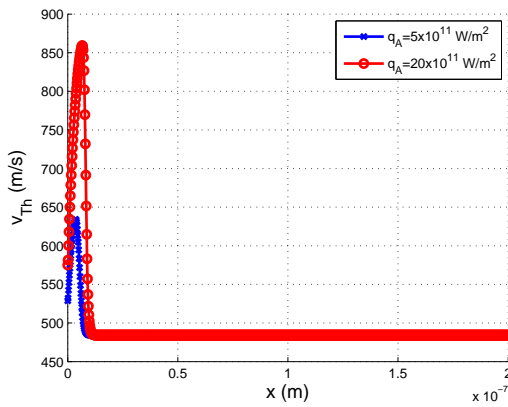


(c) Distribuição espacial do tempo característico em 190 ps

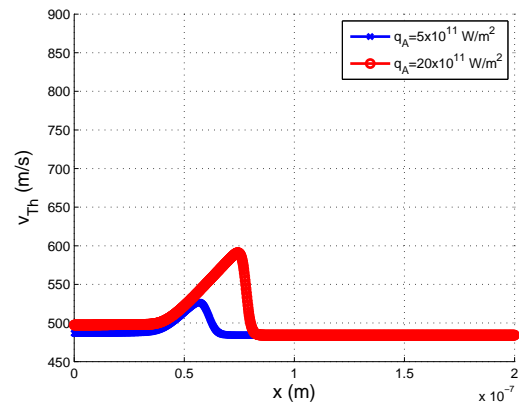


(d) Distribuição espacial do tempo característico em 280 ps

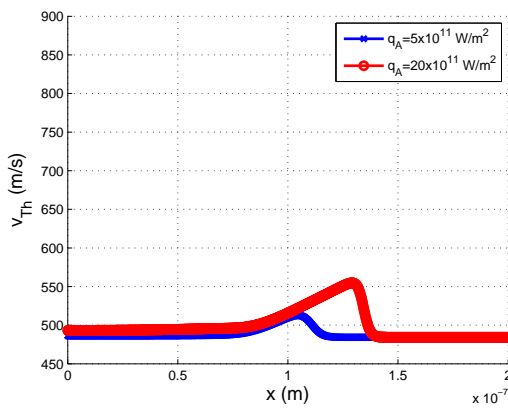
Figura 4.17: Distribuição espacial do tempo característico no nanofilme de Ouro.



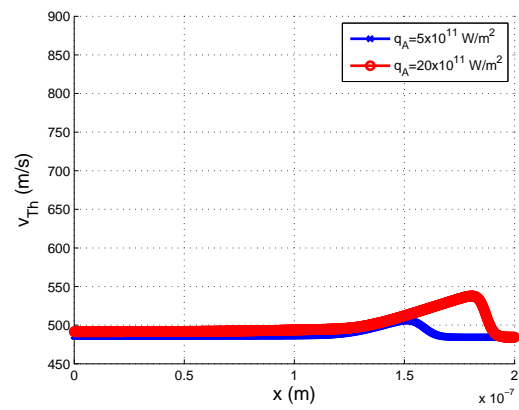
(a) Distribuição espacial da velocidade da onda térmica em 10 ps



(b) Distribuição espacial da velocidade da onda térmica em 100 ps



(c) Distribuição espacial da velocidade da onda térmica em 190 ps



(d) Distribuição espacial da velocidade da onda térmica em 280 ps

Figura 4.18: Distribuição espacial da velocidade da onda térmica no nanofilme de Ouro.

A Figura 4.16 mostra que a propagação de calor no nanofilme de Ouro apresenta as mesmas características observadas no nanofilme de Alumínio. No entanto, durante o tempo de aplicação do pulso de Laser o Ouro apresentou um pico de temperatura maior do que o Alumínio. Já a Figura 4.17 mostra a distribuição espacial do tempo característico no nanofilme de Ouro para as duas diferentes intensidades de Laser. De acordo com a Eq. 2.32, o tempo característico também depende das propriedades físicas do meio. Embora o Ouro apresente um pico de temperatura maior do que o Alumínio durante o tempo de aplicação do pulso de Laser, o Ouro pode apresentar um tempo característico maior do que o Alumínio. Como pode ser verificado na Tab. 4.1, o Ouro possui uma difusividade térmica maior do que o Alumínio. Portanto, se estes dois materiais são submetidos ao mesmo processo de aquecimento, espera-se que o Ouro possua um tempo característico maior do que o Alumínio. Verifica-se também que no nanofilme de Ouro o tempo característico é menor sob uma alta intensidade do pulso de fluxo de calor.

A Figura 4.18 mostra a distribuição espacial da velocidade da onda térmica no nanofilme de Ouro para as duas diferentes intensidades de Laser do pulso de Laser. Observou-se que como o Ouro apresenta um tempo característico maior do que o Alumínio, conseqüentemente espera-se que Ouro apresente uma velocidade de onda térmica menor do que o Alumínio, ou seja, o tempo necessário para uma perturbação térmica se propagar no Ouro é maior. Como no Alumínio, verifica-se que no Ouro a perturbação térmica viaja mais rapidamente sob uma alta intensidade de Laser.

As Tabelas 4.8 e 4.9 mostram os picos de temperatura, assim como os tempos característicos e as velocidades da onda térmica, relacionados às máximas temperaturas, no nanofilme de Ouro para a baixa e a alta intensidade do pulso de Laser, respectivamente.

Tabela 4.8: Picos de temperatura, tempos característicos e velocidades da onda térmica para a baixa intensidade do pulso de Laser.

$Tempo (ps)$	$T_{max}(K)$	$\tau_{ThT_{max}} \cdot 10^{-10}(s)$	$v_{ThT_{max}}(m/s)$
10	520,02	3,17	634,07
100	354,73	4,59	526,61
190	336,10	4,84	512,58
280	327,34	4,97	505,85

Tabela 4.9: Picos de temperatura, tempos característicos e velocidades da onda térmica para a alta intensidade do pulso de Laser.

$Tempo (ps)$	$T_{max}(K)$	$\tau_{ThT_{max}} \cdot 10^{-10}(s)$	$v_{ThT_{max}}(m/s)$
10	954,85	1,72	859,37
100	446,83	3,64	591,05
190	393,72	4,13	554,78
280	369,96	4,40	537,77

As Figuras 4.19 e 4.20 mostram a variação temporal dos picos do tempo característico e da velocidade da onda térmica no nanofilme de Ouro. Observa-se que o tempo característico aumenta devido à diminuição dos picos de temperatura. Como os picos de temperatura são maiores sob uma alta intensidade de Laser do pulso de fluxo de calor, o tempo característico tende a ser menor para alta intensidade de Laser, como ilustrado na Fig. 4.19. A Figura 4.20 mostra que a velocidade da onda térmica diminui devido à diminuição dos picos de temperatura. Observa-se que a onda térmica viaja mais rapidamente quando se aplica uma alta intensidade de Laser do pulso de fluxo de calor. No entanto, para tempos posteriores as velocidades da onda térmica tendem a ser iguais. Isto ocorre devido à tendência natural que o meio possui de atenuar o transporte de calor.

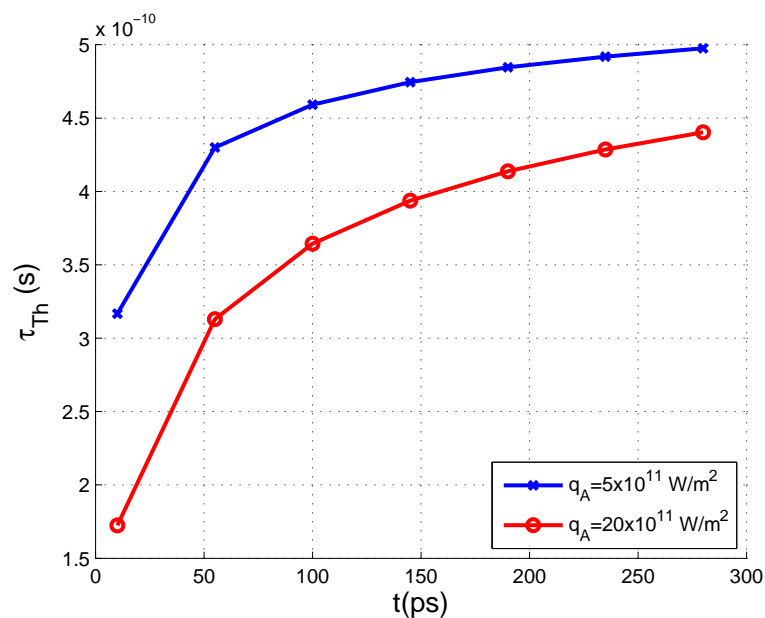


Figura 4.19: Variação temporal dos picos do tempo característico no nanofilme de Ouro.

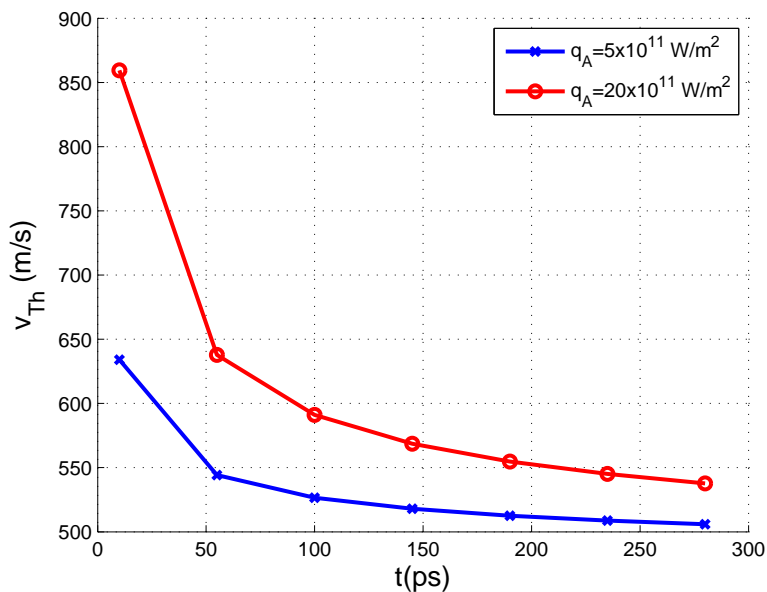
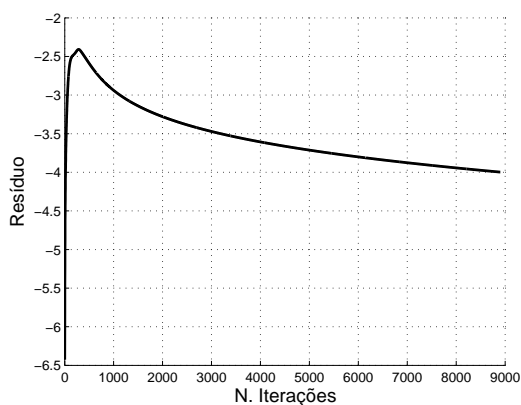
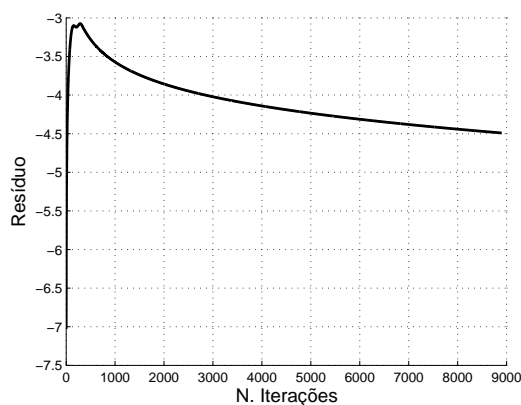


Figura 4.20: Variação temporal dos picos da velocidade da onda térmica no nanofilme de Ouro.

A Figura 4.21 mostra o gráfico de convergência para as duas diferentes intensidades de pulso de Laser para o tempo 280 ps. Assim como nos resultados obtidos para o Alumínio, o resíduo foi calculado utilizando a variável temperatura, T . A partir da Fig. 4.21, verifica-se que o resíduo decresce com o aumento do número de iterações. Assim, considera-se que a solução numérica obtida pelo método TVD convergiu.



(a) Alta intensidade do pulso de laser



(b) Baixa intensidade do pulso de laser

Figura 4.21: Gráfico do resíduo para o tempo de 280 ps.

Capítulo 5

Conclusões e Trabalhos Futuros

Neste capítulo são apresentadas as conclusões dos resultados obtidos a partir do presente estudo. Por fim, serão apresentadas algumas possíveis propostas de trabalhos futuros que podem ser realizados como consequência do presente trabalho.

5.1 Conclusões

No presente trabalho, um estudo numérico é realizado para avaliar as respostas térmicas do processo de transferência de calor transiente em nanofilmes baseado na teoria da Termomassa. O Processo de calor foi assumido unidimensional uma vez que o pulso de laser foi aplicado uniformemente em toda a fronteira esquerda. Para a resolução numérica das equações governantes, utilizou-se o método explícito TVD.

Os resultados foram apresentados na forma dimensional para permitir a avaliação das respostas térmicas causadas em diferentes materiais pelo pulso de laser. A teoria da Termomassa previu uma distribuição de temperatura heterogênea com picos de temperatura elevados.

Para o caso em que foi aplicado dois diferentes pulsos de laser na fronteira esquerda, verificou-se que durante a aplicação dos pulsos de laser apenas pontos próximos à perturbação térmica são afetados. Notou-se que ao final da aplicação dos pulsos de laser a função Cossenoidal proporcionou nos materiais estudados um pico de temperatura maior do que a função Gaussiana. No entanto, para o mesmo tempo pontos mais afastados da perturbação térmica são afetados pela função Gaussiana. Para tempos posteriores, os picos de temperatura tendem a ser praticamente iguais. Isto é devido à tendência natural que o meio possui de atenuar o transporte de calor. Observou-se também a variação

temporal da intensidade dos dois pulsos de calor utilizados no presente trabalho não influencia no modo de propagação de calor ao longo do nanofilme, independente do material considerado.

Já para o caso em que se analisaram os efeitos da variação da intensidade do Laser através da aplicação de uma alta e uma baixa intensidade, verificou-se que os picos de temperatura aumentam significativamente com o aumento da intensidade do Laser do pulso de fluxo de calor. Observou-se também que o tempo característico é menor quando uma alta intensidade de Laser é aplicada, independente do material considerado. No entanto, se diferentes materiais são submetidos ao mesmo processo de aquecimento, espera-se que o material com maior difusividade térmica apresente um tempo característico maior. Por fim, verificou-se que a perturbação térmica se propaga mais rapidamente quando se aplica uma alta intensidade de Laser.

A compreensão de como ocorre o processo de condução de calor em nanoescala é de grande importância para a melhoria e desenvolvimento da nanotecnologia. Portanto, a teoria da Termomassa é um novo conceito para investigar o processo de condução de calor em nanoescala, e as respostas térmicas obtidas a partir deste modelo podem prevenir o dano térmico causado por tecnologias de processamento e manufatura de elementos baseados em aplicações de pulsos de Laser de alta intensidade.

5.2 Trabalhos Futuros

Segue abaixo uma lista de algumas possíveis propostas de trabalhos futuros:

- Analisar as respostas térmicas fornecidas pela teoria da Termomassa para uma gama maior de materiais, ou seja, além de analisar materiais condutores estender a análise para materiais dielétricos.
- Estender a análise da transferência de calor com base na teoria da Termomassa para geometria mais complexas, ou seja, bi e tridimensionais.
- Do ponto de vista numérico, implementar o método implícito TVD. Este não possui restrições ao critério de estabilidade [42].
- Realizar um estudo comparativo entre o modelo da Termomassa com os modelos que utilizam a mecânica quântica como base nas suas formulações.

Apêndice

I - Compatibilidade da teoria da Termomassa com as leis da Termodinâmica

O modelo da Termomassa deve ser compatível com as leis da termodinâmica. Na presente seção será demonstrado que este novo modelo de condução de calor de não-Fourier é compatível com as quatro leis da Termodinâmica.

I.1 - Lei Zero da Termodinâmica

A lei zero da termodinâmica afirma que, se três sistemas termodinâmicos apresentarem-se isolados de qualquer outro universo externo, e, dois sistemas termodinâmicos consecutivos estiverem em equilíbrio térmico com o terceiro, então os dois sistemas termodinâmicos consecutivos estarão em equilíbrio térmico entre si [28]. No modelo da Termomassa, o escoamento do gás de Termomassa é induzido pela pressão da Termomassa, conforme a Eq. 2.19. Verifica-se que a pressão da Termomassa é diretamente proporcional ao quadrado da temperatura. Baseado nos conceitos da dinâmica dos fluidos, se dois gases estão estaticamente em equilíbrio com um terceiro, suas pressões devem estar em equilíbrio. Portanto, as temperaturas dos gases de Termomassa devem ser iguais.

I.2 - Primeira Lei da Termodinâmica

A primeira lei da Termodinâmica afirma que, a energia pode ser transferida para ou a partir de um sistema termodinâmico, mas não pode ser criada nem destruída [3]. A primeira lei da termodinâmica nada mais é que o princípio da conservação de energia, podendo ser escrita como

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0.$$

(A.1)

Nota-se que esta é exatamente consistente com a equação da continuidade do gás de Termomassa se cada termo for dividido por c^2 .

I.3 - Segunda Lei da Termodinâmica

Uma definição alternativa da segunda lei da termodinâmica consiste na definição de entropia. A entropia é uma propriedade aditiva de cada sistema em qualquer estado. A segunda lei da termodinâmica afirma que, num sistema isolado, a entropia não pode ser destruída, mas pode ser criada (num processo irreversível) ou permanecer inalterada (num processo reversível) [3]. Portanto, para um sistema isolado, a variação da entropia não deve ser negativa. A equação de equilíbrio de entropia pode ser escrita como [53]

$$\nabla \cdot \left(\frac{\vec{q}}{T} \right) + \rho \frac{\partial S}{\partial t} = \sigma, \quad (\text{A.2})$$

onde S é a entropia específica e σ é a taxa de produção de entropia por unidade de volume. Sabendo-se que a temperatura local é definida por

$$T = \frac{\partial U}{\partial S}, \quad (\text{A.3})$$

onde U é a energia interna do sistema. Assim, de forma alternativa, a Eq. (A.2) pode ser escrita como [53]

$$\sigma = -\frac{1}{T^2} \vec{q} \cdot \nabla T. \quad (\text{A.4})$$

De acordo com a segunda lei da Termodinâmica deve ser provado que para um sistema isolado a taxa de produção de entropia deve ser sempre positiva. De acordo com [28], para o modelo da Termomassa a Eq.(A.4) pode ser escrita como,

$$\sigma = \frac{c^4}{2\alpha\rho c_p^2 T^3} (\rho_{Th} \vec{u}_{Th}) \cdot (-\nabla p_{Th}). \quad (\text{A.5})$$

Para o caso de um sistema isolado, o escoamento do gás de Termomassa é induzido por um gradiente de pressão. Portanto, o momentum e o gradiente de pressão do escoamento estão sempre em direções opostas. Com isso, a taxa de produção de entropia no

escoamento do gás de Termomassa é sempre positiva, o que é consistente com a segunda lei da termodinâmica.

I.4 - Terceira Lei da Termodinâmica

A terceira lei da termodinâmica foi desenvolvida por Walther Nernst, e seu enunciado diz que, quando um sistema se aproxima da temperatura do zero absoluto, cessam todos os processos, e a entropia assume um valor mínimo, ou seja, a entropia de uma substância pura se aproxima de zero quando a temperatura se aproxima do zero absoluto, e é zero na temperatura de zero absoluto [3]. Portanto, esta lei fornece um ponto de referência para a determinação do valor da entropia. A equação proposta por Nernst é definida como

$$\lim_{T \rightarrow 0} \Delta S = 0, \tag{A.6}$$

onde ΔS é a variação da entropia e T é a temperatura. Em seu trabalho, Nernst concluiu também que é impossível atingir o zero absoluto através de um número finito de passos.

Utilizando-se a teoria da relatividade espacial de Einstein [20], a velocidade da luz nunca pode ser atingida, ou seja,

$$u_{Th} < c, \tag{A.7}$$

onde c é a velocidade da luz. Substituindo a Eq. 2.24 na Eq. (A.7), tem-se que

$$T > \frac{|\vec{q}|}{\rho c_p c} \geq 0, \tag{A.8}$$

onde se verifica que o modelo da Termomassa é compatível com a terceira lei da termodinâmica.

Referências

- [1] Chen G. *Nanoscale energy transport and conversion: a parallel treatment of electrons, molecules, phonons and photons*. Oxford University Press, New York, 2005.
- [2] Logothetidis S. *Nanostructured Materials and Their Applications*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2012.
- [3] Zhang Z. M. *Nano/Microscale Heat Transfer*. McGraw-Hill, 2007.
- [4] Fourier J. B. J. *The Analytical Theory of Heat, Translated, with Notes by Alexander Freeman, M. A.* Cambridge: At the University Press, 1878.
- [5] Bergman T. L., Lavine A. S., Incropera F. P., and DeWitt D. P. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. Wiley, New York, 6th edition edition, 2007.
- [6] Carslaw H. S. and Jaeger J. C. *Conduction of Heat in Solids*. Oxford University Press, 1959.
- [7] Marín E. Does fourier's law of heat conduction contradict the theory of relativity? *Lat. Am. J. Phys. Educ.*, 5(2), 2011.
- [8] Denicol G. S., Kodama T., Koide T., and Mota Ph. Causal theory of relativistic dissipative hydrodynamics. *Brazilian Journal of Physics*, 37, 2007.
- [9] Chen G. Particularities of heat conduction in nanostructures. *J. Nanoparticle Res.* 2, pages 199–204, 2000.
- [10] Escobar R. A., Ghai S. S., Jhon M. S., and Amon C. H. Multi-length and time scale thermal transport using the lattice boltzmann method with application to electronics cooling. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 49:97–107, 2006.
- [11] Yang N., Zhang G., and Li B. Violation of fourier's law and anomalous heat diffusion in silicon nanowires. *Nano Today*, 5:85–90, 2010.
- [12] Chang C. W., Okawa D., Garcia H., Majumdar A., and Zettl A. Breakdown of fourier's law in nanotube thermal conductors. *Physical Review Letters*, 101, 2008.
- [13] Cattaneo C. Sur une forme de l'équation de la chaleur eliminant le paradox d'une propagation instantanee. *Comptes Rendus Hebd. Seances Acad. Sci.*, 247:431–433, 1958.
- [14] Vernotte P. Paradoxes in the continuous theory of the heat equation. *C. R. Acad. Sci.*, 246:3154—3155, 1958.
- [15] Rubin M. B. Hyperbolic heat conduction and the second law. *Int. J. Engng Sci.*, 30: 1665–1676, 1992.

-
- [16] Qiu T. Q. and Tien C. L. Short-pulse laser heating on metals. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 35:719–726, 1992.
- [17] Tzou D. Y. The generalized lagging response in small-scale and high-rate heating. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 38:3231–3240, 1995.
- [18] Guyer R. A. and Krumhansl J. A. Solution of the linearized phonon boltzmann equation. *Phys. Rev.*, 148:766–778, 1966.
- [19] Guo Z.Y. Movement and transport of thermomass-thermomass and thermon gas. *J. Eng. Thermophys.*, 27:631–634, 2006.
- [20] Einstein A., Lorentz H. A., Minkowski H., and Weyl H. The principle of relativity. *Dover Publications, New York*, 1952.
- [21] MacCormack R. W. The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering. *AIAA Paper 69-354*, 1969.
- [22] Yee H.C. Construction of explicit and implicit symmetric tvd schemes and their applications. *Journal of Computational Physics*, 68:151–179, 1987.
- [23] Lobão D. C. *High Resolution Schemes Applied to the Euler Equations*. PhD thesis, University of Bristol, 1992.
- [24] Lobão D. C. Microsatellite thermal effect by hyperbolic heat conduction. *International Symposium on Space Technology*, 2002. Matsue-Japan.
- [25] Kaganov M. I., Lifshitz I. M., and Tanatarov L. V. Relaxation between electrons and crystalline lattice. *Sov. Phys. JETP*4, pages 173–178, 1957.
- [26] Bai C. and Lavine A. S. On hyperbolic heat-conduction and the second law of thermodynamics. *Journal of Heat Transfer- Transactions of the ASME*, 117(2):256–263, 1995.
- [27] Körner C. and Bergmann H. W. The physical defects of the hyperbolic heat conduction equation. *Appl. Phys.*, 67:397–401, 1998.
- [28] Wang M., Yang N., and Guo Z. Y. Non-fourier heat conductions in nanomaterials. *J. Appl. Phys.*, 110, 2011.
- [29] Guyer R. A. and Krumhansl J. A. Thermal conductivity, second sound, and phonon hydrodynamic phenomena in nonmetallic crystals*. *Physical Review*, 148(2), 1966.
- [30] Mendoza E. A sketch for a history of early thermodynamics. *Physics Today*, 14(2): 32–42, 1961.
- [31] Tien C. L. and Lienhard J. H. *Statistical Thermodynamics*. Hemisphere Publishing Corporation, Washington D.C, 1979.
- [32] Onsager L. Reciprocal relations in irreversible processes. i. *Physical Review*, 37(4): 405–426, 1931.
- [33] Tzou D. Y. Experimental support for the lagging behavior in heat propagation. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 9(4):686–693, 1995.

- [34] Tolman R. C. On the weight of heat and thermal equilibrium in general relativity. *Physical Review*, 35(8):904–924, 1930.
- [35] Wang M., Cao B. Y., and Guo Z. Y. General heat conduction equations based on the thermomass theory. *Frontiers in Heat and Mass Transfer*, 1, 2010.
- [36] Guo Z. Y. and Hou Q. W. Thermal wave based on the thermomass model. *Journal of Heat Transfer-Transactions of the ASME*, 132(7), 2010.
- [37] Harris P. and Avrami L. Some physics of the grüneisen parameter. *Picatinny Arsenal Dover, New Jersey*, 1972. TECHNICAL REPORT NO. 4423.
- [38] Cao B.Y., Zhang M.K., and Guo Y.C. Numerical studies on dispersion of thermal waves. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 67:1072–1082, 2013.
- [39] Anderson D.A. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. Hemisphere Publishing Corporation - McGraw Hill, 1984.
- [40] Hu R.F. and Cao B. Y. Study on thermal wave based on the thermal mass theory. *Sci China Ser E-Tech Sci*, 52:1786–1792, 2009.
- [41] Lax P. D. and Wendroff B. Systems of conservation laws. *Comm. Pure Appl. Math.*, 13:217–237, 1960.
- [42] Yee H. C., Warning R. F., and Harten A. Implicit total variation diminishing (tvd) schemes for steady-state calculations. *NASA Technical Memorandum*, 1983.
- [43] Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme ii. monotonicity and conservation combined in a second order scheme. *J. Comp. Phys.*, 14:361–370, 1974.
- [44] Sweby P. K. High resolution schemes using flux-limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM J. Num. Anal.*, 21:995–1011, 1984.
- [45] Roe P.L. Characteristic-based schemes for the euler equations. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 18:337–365, 1986.
- [46] Harten A. On a class of high resolution total-variation-stable finite-difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21:1–23, 1984.
- [47] Miklos A. and Lorincz A. Transient thermorefectance of thin metal films in the picosecond regime. *J. Appl. Phys.*, 63:2391–2395, 1988.
- [48] Eesley G. L. Picosecond dynamics of thermal and acoustic transport in metal films. *Int. J. Thermophys.*, 11:811–817, 1990.
- [49] Cottrell A. H. *The mechanical properties of matter*. Wiley, New York, 1964.
- [50] Zhou Z. and Ma Z. Investigation of thermomechanical responses in ultrafast laser heating of metal nanofilms. *Thin Solid Films*, 519:7940–7946, 2011.
- [51] Wang H. D., Ma W. G., Wang X., Zhang W., and Guo Z. Y. Theoretical and experimental study on the heat transport in metallic nanofilms heated by ultra-short pulsed laser. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54:967–974, 2011.

-
- [52] Zou Y., Cai J., Huai X., Xin F., and Guo Z. Molecular dynamics simulation of heat conduction in si nano-films induced by ultrafast laser heating. *Thin Solid Films*, 558: 455–461, 2014.
- [53] Barletta A. and Zanchini E. Hyperbolic heat conduction and local equilibrium: a second law analysis. *J. Heat Mass Transfer*, 40:1007–1016, 1997.