

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA**



**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

**Modelagem da Dinâmica de Rugosidade de Superfície  
Metálica Devido à Corrosão em Sensor Óptico**

**Henrique Patriota Alves**

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

**HENRIQUE PATRIOTA ALVES**

MODELAGEM DA DINÂMICA DE RUGOSIDADE DE SUPERFÍCIE  
METÁLICA DEVIDO À CORROSÃO EM SENSOR ÓPTICO

RECIFE, JULHO DE 2016

HENRIQUE PATRIOTA ALVES

MODELAGEM DA DINÂMICA DE RUGOSIDADE DE SUPERFÍCIE  
METÁLICA DEVIDO À CORROSÃO EM SENSOR ÓPTICO

**Dissertação** submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos para obtenção do grau de **Mestre em Engenharia Elétrica**.

ORIENTADOR: PROF. JOAQUIM FERREIRA MARTINS-FILHO, PHD

CO-ORIENTADOR: PROF. JEHAN FONSECA DO NASCIMENTO, DR.

RECIFE, JULHO DE 2016

©Henrique Patriota Alves, 2016

Catálogo na fonte  
Bibliotecária Valdicéa Alves, CRB-4 / 1260

A474m Alves. Henrique Patriota.  
Modelagem da dinâmica de rugosidade de superfície metálica devido à  
corrosão em sensor óptico / Henrique Patriota Alves - 2016.  
89folhas, Il.; Tabs.; Simb.; e Sigl.

Orientador: Prof. Dr. Joaquim Ferreira Martins-filho.  
Coorientador: Prof. Dr. Jehan Fonseca do Nascimento.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG.  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, 2016.  
Inclui Referências e Apêndice.

1. Engenharia Elétrica. 2. Rugosidade. 3. Corrosão.  
4. Modelagem. 5. Sensor óptico. 6. Ressonância de plásmo de superfície.  
I. Martins-filho, Joaquim Ferreira(Orientador). II. Nascimento, Jehan  
Fonseca do(Coorientador).

UFPE

621.3 CDD (22. ed.)

BCTG/2016 - 258



# Universidade Federal de Pernambuco

## *Pós-Graduação em Engenharia Elétrica*

PARECER DA COMISSÃO EXAMINADORA DE DEFESA DE  
DISSERTAÇÃO DO MESTRADO ACADÊMICO DE

# HENRIQUE PATRIOTA ALVES

## TÍTULO

**“MODELAGEM DA DINÂMICA DE RUGOSIDADE DE SUPERFÍCIE  
METÁLICA DEVIDO À CORROSÃO EM SENSOR ÓPTICO”**

A comissão examinadora composta pelos professores: JOAQUIM FERREIRA MARTINS FILHO, DES/UFPE; JEHAN FONSÊCA DO NASCIMENTO, CAA/UFPE; EDUARDO FONTANA, DES/UFPE e SERGIO CAMPELLO OLIVEIRA, POLI/UPE, sob a presidência do primeiro, consideram o candidato **HENRIQUE PATRIOTA ALVES APROVADO.**

Recife, 22 de julho de 2016.

---

**MARCELO CABRAL CAVALCANTI**  
Coordenador do PPGEE

---

**JOAQUIM FERREIRA MARTINS FILHO**  
Orientador e Membro Titular Interno

---

**JEHAN FONSÊCA DO NASCIMENTO**  
Coorientador e Membro Titular Externo

---

**EDUARDO FONTANA**  
Membro Titular Interno

---

**SERGIO CAMPELLO OLIVEIRA**  
Membro Titular Externo

*O poder da vontade...*

*À minha amada Avó, Dulcinéia (Mãe Dulci).  
Você é meu maior Tesouro.  
O que sou hoje, e o que serei amanhã, é graças à sua  
criação.  
Essa conquista é nossa!*

*À minha amada Mãe, Aldira (Mãe Dira).  
Você faz Eu e Ellyakim sentirmos ser os filhos mais  
amados do mundo.  
Este Mestrado é mais uma conquista para nós!*

*Ao meu amado Irmão, Ellyakim.  
Obrigado por sempre me apoiar no caminho que escolhi seguir. Assim como sempre lhe apoiarei.  
Com nossa união tão abençoada, venceremos juntos!*

*À minha amada, Paula Juliane.  
Você é minha fonte de inspiração.  
É um presente de Deus ter você em minha vida.  
Dividir essa conquista com você é algo maravilhoso.  
Dedico a você esta Dissertação!*

# Agradecimentos

Durante estes dois anos do Mestrado, Deus enviou pessoas muito especiais para contribuírem em minha formação e na construção desta Dissertação. Foram pessoas novas, as quais tive o prazer de trabalhar junto, discutir ideias e receber orientações valiosas, e pessoas que sempre estiveram próximo de mim, me motivando, compartilhando suas experiências e torcendo pelas minhas conquistas.

Em especial,

- I. Agradeço a Deus, por sempre iluminar meus passos e permitir a realização desta Dissertação;
- II. Agradeço ao meu Orientador, Prof. Joaquim F. Martins Filho, primeiramente, por me aceitar em seu Grupo de Pesquisa em Sensores e Instrumentação, por depositar confiança no trabalho que realizei durante este Mestrado e pela sua ótima orientação, que sempre deu contribuições valiosas, marcadas pela sua experiência, para a minha formação de pesquisador e na construção desta Dissertação;
- III. Agradeço ao meu Co-orientador, Prof. Jehan Fonsêca do Nascimento, pela sua ótima orientação, pelos seus valiosos conselhos e por estar sempre presente durante todo o Mestrado, sempre contribuindo para minha formação de pesquisador e me ajudando no desenvolvimento desta Dissertação;
- IV. Agradeço aos meus colegas do Laboratório de Fotônica, Marcionilo, Elias, Aldsmyth, Leonardo, Maylson, Hebio e Valdemir, pelos vários momentos descontraídos e pela partilha de suas experiências;
- V. Agradeço ao meu amigo, Prof. Paulo Peixoto, pelos seus valiosos conselhos, que sempre ajudaram a me guiar neste caminho que escolhi seguir;
- VI. Agradeço ao meu amigo, Aristóteles Rodrigues, sua amizade é algo inestimável. Que Deus abençoe todos os seus passos e que nunca pares de discutir de forma tão bela sobre História e Filosofia da Ciência;
- VII. Agradeço ao meu Tio Sebastião, minha Tia Cecília e aos meus primos, Larissa e Ricardo, pelo apoio Familiar e por sempre torcerem pelas minhas conquistas. Que Deus abençoe vocês;
- VIII. Agradeço aos meus amigos de sempre, Lêdson, André, Augusto, Dimy, Florisval, Daniel e Dayllon, pelo apoio e momentos descontraídos;
- IX. Agradeço ao CNPq e ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica pelo suporte financeiro.

Resumo da Dissertação apresentada à UFPE como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Elétrica

# **MODELAGEM DA DINÂMICA DE RUGOSIDADE DE SUPERFÍCIE METÁLICA DEVIDO À CORROSÃO EM SENSOR ÓPTICO**

**Henrique Patriota Alves**

Julho/2016

**Orientador:** Joaquim Ferreira Martins Filho, PhD.

**Co-orientador:** Jehan Fonseca do Nascimento, Dr.

**Área de Concentração:** Fotônica.

**Palavras-chaves:** rugosidade, corrosão, modelagem, sensor óptico, ressonância de plásmon de superfície.

**Número de páginas:** 89.

Esta dissertação apresenta uma modelagem computacional da dinâmica de rugosidade de superfície gerada durante o processo de corrosão de um elemento transdutor metálico do sensor à fibra óptica. Tal modelagem é implementada num software dedicado de simulação multifísica que faz uso do Método dos Elementos Finitos. Considerando que a rugosidade de superfície pode ser definida por geometria fractal, que pode ser complexa, é proposta nesta dissertação uma forma alternativa e simples para modelar a superfície rugosa e a sua dinâmica sob corrosão. Para a modelagem computacional, é definida uma função periódica, chamada de função rugosidade, onde seus parâmetros são ajustados com dados experimentais do processo de corrosão. Os resultados da simulação computacional são comparados com um modelo analítico, que faz uso das equações de Fresnel. Nos resultados da simulação, é observado o acoplamento do sinal óptico na superfície rugosa do filme metálico. Esse acoplamento observado é explicado pelo fenômeno de Ressonância de Plásmon de Superfície. A modelagem proposta nesta dissertação apresenta excelente ajuste aos resultados experimentais.

Abstract of Dissertation presented to UFPE as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master in Electrical Engineering

# **MODELING OF METAL SURFACE ROUGHNESS DYNAMICS DUE TO CORROSION IN OPTICAL SENSOR**

**Henrique Patriota Alves**

July/2016

**Supervisor:** Joaquim Ferreira Martins Filho, PhD.

**Co-supervisor:** Jehan Fonseca do Nascimento, Dr.

**Area of Concentration:** Photonics.

**Keywords:** roughness, corrosion, modeling, optical sensor, surface plasmon resonance.

**Number of pages:** 89.

This dissertation presents a computer modeling of the surface roughness dynamics generated during the corrosion process of a metallic element transducer of the fiber-optic sensor. This modeling is implemented in dedicated software that uses the Finite Element Method. Since the surface roughness can be defined by the fractal geometry, which can be complex, it is proposed in this dissertation an alternative and simple way to model the surface roughness and its dynamics under corrosion. The proposed modeling uses a roughness function that is defined by a periodic function, where their parameters are obtained from experimental data of the corrosion process. The computer simulation results are compared to an analytical model, which uses the Fresnel's equations. In the simulation results, it is observed the optical signal coupling with the rough surface of the metallic film. This observed coupling is explained by the phenomenon of Surface Plasmon Resonance. The proposed modeling and simulations presents excellent fitting to the experimental results.

# Lista de Figuras

2.1	Diagrama esquemático do sensor de corrosão. Cabeças sensoras estão enumeradas de 1 à 7. Fonte: figura obtida em [4]. . . . .	27
2.2	Traço do OTDR correspondente à intensidade da luz refletida como uma função da distância ao longo da fibra. Os números das cabeças sensoras são mostrados [4]. . . . .	28
2.3	Intensidade relativa como função do tempo de corrosão. Fonte: figura obtida em [4]. . . . .	28
2.4	Aparato experimental para o estudo da corrosão em diferentes meios (água, ar e álcool isopropílico) e também para diferentes comprimentos de onda (980, 1320 e 1551 nm). Fonte: figura obtida em [9]. . . . .	29
2.5	Traços teóricos e experimentais da reflectância em função da espessura do Al para diferentes meios e comprimentos de onda. Fonte: figura obtida em [9].	31
3.1	Dimensão Euclidiana vs Dimensão Fractal. Fonte: figura obtida em [20]. . .	33
3.2	(a) Fractal Determinístico; (b) Versão Randômica. Fonte: figura adaptada de [21]. . . . .	34
3.3	<i>Função Fractal de Weierstrass-Mandelbrot</i> , com $ n  = 9$ , $\gamma = 2$ e $D = 1.5$ . Fonte: figura elaborada pelo autor. . . . .	35
3.4	<i>Função Fractal de Weierstrass</i> , com $n = 9$ , $\gamma = 2$ e $D = 1.5$ . Fonte: figura elaborada pelo autor. . . . .	35
3.5	Representação esquemática da reflexão de um feixe incidente numa superfície rugosa. Fonte: figura adaptada de [25]. . . . .	37
3.6	(a) Oscilações dos elétrons livres na superfície do metal; (b) Plásmon de Superfície com vetor de onda $\vec{k}_{SP}$ . Fonte: figura adaptada de [8]. . . . .	39
3.7	Perfil morfológico da rugosidade de superfície num filme fino metálico. Fonte: figura elaborada pelo autor. . . . .	42
3.8	Dinâmica da <i>Função Rugosidade</i> ao longo do processo de corrosão. Fonte: figura elaborada pelo autor. . . . .	43
3.9	Grade metálica para observação do efeito de SPR. Fonte: figura obtida em [34]. . . . .	44
4.1	Tipos de elementos finitos para geometrias em 1D, 2D e 3D. Fonte: figura adaptada de [36]. . . . .	46
4.2	(a) Região da solução; (b) Discretização por elementos finitos. Fonte: figura adaptada de [36]. . . . .	47
4.3	(a) Elemento descrito no plano $xy$ ; (b) Elemento de referência descrito no plano $\xi\eta$ do espaço padrão. Fonte: figura adaptada de [39]. . . . .	48
4.4	Diagrama de blocos para discretização de um problema contínuo por elementos finitos. Fonte: figura adaptada de [42]. . . . .	49

4.5	Relação entre as portas 1 e 2 e o parâmetro $S$ no guia de onda. Fonte: figura elaborada pelo autor. . . . .	57
4.6	Modelagem computacional em 2D do transdutor de um sensor à fibra óptica de corrosão usando o COMSOL. Fonte: captura de tela do COMSOL <i>Multiphysics</i> © com adaptações feitas pelo autor. . . . .	60
4.7	Malha triangular aplicada a geometria do modelo, com 123640 elementos finitos no domínio e 1842 elementos de fronteira. Fonte: captura de tela do COMSOL <i>Multiphysics</i> © com adaptações do autor. . . . .	63
5.1	Medida da reflectância em função da espessura do metal obtida pelo método analítico e pelo método numérico. . . . .	66
5.2	Resultado da simulação com filme metálico de (a) 40 nm de espessura; (b) 2 nm de espessura. . . . .	66
5.3	Fluxograma para representação dos passos necessários à obtenção das funções $A(d)$ e $A_0(d)$ . . . . .	68
5.4	(a) Amplitude da função <i>Rugosidade</i> ; (b) <i>off set</i> da função <i>Rugosidade</i> . . . . .	69
5.5	Reflectância em função da espessura do metal obtida por método numérico no COMSOL, por método analítico no Matlab e por experimento. . . . .	71
5.6	(a) Variação da profundidade do vale em função do período $\Lambda$ ; (b) Variação da posição do vale em função do período $\Lambda$ . . . . .	72
5.7	Acoplamento do sinal óptico na superfície do filme metálico devido à rugosidade em sua superfície. . . . .	72
5.8	Perfil da distribuição da intensidade do sinal óptico acoplado na superfície rugosa para diferentes espessuras do filme metálico. . . . .	73
5.9	Curvas de reflectância obtidas pelo COMSOL e experimentalmente, para corrosão no ar de 40 nm de alumínio para um (a) comprimento de onda de 1320 nm; (b) comprimento de onda de 1550 nm. . . . .	74
5.10	Comparativo dos resultados obtidos, pelo COMSOL e experimentalmente, com a medida da reflectância feita para corrosão em (a) água; (b) álcool isopropílico. . . . .	75
5.11	Resultados experimentais e da modelagem computacional, para posição do vale em função do índice de refração do meio externo. . . . .	76
5.12	Curvas de reflectância obtidas usando os modos de propagação (a) TE e TM; (b) TE e Híbrido. . . . .	78
5.13	Curvas de reflectância obtidas através da corrosão de um filme dielétrico e um filme metálico. . . . .	79

# Lista de Tabelas

4.1	Valores numéricos para os <i>Coefficientes de Sellmeier</i> . . . . .	61
4.2	Parâmetros Ópticos [53], [54], [55] e [56]. . . . .	62

# Lista de Símbolos

$d_f$  - Dimensão fractal

$\gamma$  - Parâmetro vertical da função fractal

$k_{SP}$  - Número de onda do Plásmon de Superfície

$k_0$  - Número de onda no vácuo

$\epsilon_m$  - Permissividade elétrica do metal

$\epsilon_d$  - Permissividade elétrica do dielétrico

$k_x$  - Componente paralela à superfície do vetor de onda da luz incidente

$\omega$  - Frequência de propagação

$c$  - Velocidade da luz no vácuo

$\lambda$  - Comprimento de onda

$\theta_0$  - Ângulo de incidência

$\Delta k_x$  - Perturbação

$m$  - Ordem de difração

$\Lambda$  - Periodicidade da grade de difração

$\theta$  - Ângulo de espalhamento

$R$  - Função *Rugosidade*

$A$  - Amplitude da função *Rugosidade*

$A_0$  - *off set* da função *Rugosidade*

$d$  - Espessura do metal

$y$  - Parâmetro de varredura

$h$  - Amplitude da grade de difração

$\phi$  - Função de forma do elemento finito

$a$  - Constante

$b$  - Constante

$c$  - Constante

$d$  - Constante  
 $\xi$  - Coordenada do espaço padrão  
 $\eta$  - Coordenada do espaço padrão  
 $\alpha_i$  - Funções de Base  
 $n$  - Número de nós  
 $e$  - Número de elementos  
 $E$  - Campo elétrico  
 $E^h$  - Campo elétrico discretizado  
 $w$  - Função de ponderação  
 $w^h$  - Função de ponderação discretizada  
 $[A]_{N \times N}$  - Matriz global dos elementos finitos  
 $[B]_{N \times 1}$  - Matriz global dos parâmetros  
 $[U]_{N \times 1}$  - Matriz global das incógnitas  
**H** - Vetor campo magnético  
**E** - Vetor campo elétrico  
**J** - Vetor densidade de corrente elétrica  
**B** - Vetor densidade de fluxo magnético  
**D** - Vetor densidade de fluxo elétrico  
 $\varepsilon$  - Permissividade elétrica  
 $\mu$  - Permeabilidade magnética  
 $\sigma$  - Condutividade elétrica  
 $\nabla^2$  - Operador Laplaciano  
 $\nabla \times$  - Operador Rotacional  
 $\nabla \cdot$  - Operador Divergente  
 $(x, y, z)$  - Coordenadas cartesianas  
 $t$  - Coordenada temporal  
 $j$  - Número complexo  
 **$\Re$**  - Parte Real  
 $\alpha$  - Atenuação  
 $\delta_z$  - Constante de amortecimento  
 $\beta$  - Constante de propagação  
 $E_z$  - Componente  $z$  do campo elétrico

$H_z$  - Componente z do campo magnético  
 $S$  - Parâmetro de espalhamento  
 $S_{11}$  - Elemento da matriz de espalhamento  
 $S_{21}$  - Elemento da matriz de espalhamento  
 $\tilde{S}$  - Matriz de espalhamento  
 $E_c$  - Campo elétrico emitido pela porta 1  
 $E_1$  - Campo elétrico medido na porta 1  
 $E_2$  - Campo elétrico medido na porta 2  
 $R$  - Reflectância  
 $T$  - Transmitância  
 $S$  - Vetor de *Poynting*  
 $n$  - Vetor normal  
 $S_1$  - Vetor de *Poynting* medido na porta 1  
 $S_2$  - Vetor de *Poynting* medido na porta 2  
 $W$  - Comprimento da fibra óptica  
 $W_{ext}$  - Comprimento do meio externo  
 $D_{core}$  - Diâmetro do núcleo da fibra óptica  
 $D_{clad}$  - Diâmetro da casca da fibra óptica  
 $n_{core}$  - Índice de refração do núcleo da fibra óptica  
 $n_{clad}$  - Índice de refração da casca da fibra óptica  
 $n_{ext}$  - Índice de refração do meio externo  
 $A_i$  - Coeficientes de *Sellmeier*  
 $B_i$  - Coeficientes de *Sellmeier*  
 $n_{Al}$  - Índice de refração do alumínio  
 $\kappa$  - Coeficiente de extinção  
 $r_{12}$  - Coeficiente de reflexão na interface fibra óptica/filme metálico  
 $r_{23}$  - Coeficiente de reflexão na interface filme metálico/meio externo

# Lista de Siglas

- OTDR - *Optical Time-Domain Reflectometry*
- RPS - Ressonância de Plasmons de Superfície
- WDM - *Wavelength Division Multiplexing*
- OSA - *Optical Spectrum Analyser*
- SP - *Surface Plásmom*
- MEF - Método dos Elementos Finitos
- MDF - Método das Diferenças Finitas
- MDM - Método dos Momentos
- TE - Transverso Elétrico
- TM - Transverso Magnético
- TEM - Transverso Eletromagnético

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>23</b>
1.1	Motivação . . . . .	23
1.2	Organização da Dissertação . . . . .	25
<b>2</b>	<b>Sensor à Fibra Óptica para Monitoramento da Corrosão</b>	<b>26</b>
2.1	Sistema Sensor à Fibra Óptica Multiponto para Monitoramento de Corrosão	26
2.2	Investigação Experimental da Medição do Sensor de Corrosão . . . . .	29
<b>3</b>	<b>Rugosidade de Superfície</b>	<b>32</b>
3.1	Fractais . . . . .	32
3.2	Influência da Rugosidade em Efeitos Ópticos . . . . .	36
3.2.1	Espalhamento de Ondas Eletromagnéticas Devido às Superfícies Rugosas . . . . .	37
3.2.2	Acoplamento de Plásmon em Superfície Rugosa . . . . .	38
3.3	Função Rugosidade . . . . .	41
<b>4</b>	<b>Modelagem do Elemento Transdutor do Sensor Óptico de Corrosão Usando o COMSOL Multiphysics</b>	<b>45</b>
4.1	Método dos Elementos Finitos . . . . .	45
4.2	Módulo de Ondas Ópticas . . . . .	51
4.2.1	Equação de Onda . . . . .	51
4.2.2	Estudo de Análise de Modo de Fronteira . . . . .	53
4.2.3	Excitação de Ondas Eletromagnéticas . . . . .	54
4.2.4	Cálculo da Reflectância . . . . .	56
4.3	Modelagem do Elemento Transdutor . . . . .	59
<b>5</b>	<b>Resultados da Modelagem Computacional da Dinâmica de Corrosão do Elemento Transdutor Metálico</b>	<b>64</b>
5.1	Comparativo do Método Numérico com Método Analítico . . . . .	64
5.2	Ajuste das Funções $A(d)$ e $A_0(d)$ a partir dos Dados Experimentais . . . . .	67
5.3	Correção na Função Rugosidade . . . . .	74
5.4	Exploração do Efeito de Ressonância de Plasmons de Superfície . . . . .	77
5.4.1	Influência do Modo de Propagação . . . . .	78
5.4.2	Influência do Tipo de Material que Compõe o Filme Fino . . . . .	79
<b>6</b>	<b>Conclusão e Perspectivas Futuras</b>	<b>80</b>
6.1	Contribuições do Trabalho . . . . .	81
6.2	Proposta para Trabalhos Futuros . . . . .	81

<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>83</b>
<b>Apêndice</b>	<b>87</b>
<b>A Artigo Publicado em Conferência Nacional</b>	<b>87</b>
<b>B Implementação em Matlab do Modelo Analítico para Reflectância</b>	<b>88</b>

# Capítulo 1

## Introdução

Nos últimos anos, estudos sobre o monitoramento e inibição do processo de corrosão vêm recebendo investimentos financeiros da ordem de bilhões de dólares por parte do setor produtivo [1]. Esse investimento é justificado pelos grandes impactos financeiros e ambientais que são gerados pela corrosão [2]. Especificamente, sistemas de monitoramento de corrosão, em particular os sensores ópticos à fibra óptica, podem ser uma alternativa para monitoramento do processo de corrosão, devido à alta sensibilidade de medição, simplicidade, versatilidade, segurança, baixo peso e confiabilidade [3]. Além disso, as fibras ópticas podem transportar sinais ópticos a grandes distâncias sem perda apreciável de potência [3].

Sensores ópticos de corrosão à base de fibra óptica são relatados em diversas configurações [3]. Nesta Dissertação é destacado o sensor proposto por Martins-Filho, J. F. e Colaboradores [4], e mais recentemente por Nascimento, J. F. e Colaboradores [5], para sensoriamento amplificado. Contudo, como objetivo desta Dissertação, é analisada a presença da rugosidade de superfície criada no elemento transdutor do sistema sensor durante o processo de corrosão. Essa rugosidade criada no transdutor metálico no processo de corrosão pode influenciar na resposta óptica do sensor. Tal influência já é relatada na literatura em fenômenos magnéticos e ópticos [6, 7, 8]. Sendo assim, do ponto de vista tecnológico, o entendimento da rugosidade gerada na superfície do metal pode proporcionar possíveis ajustes no sensor de corrosão, ao ponto de evitar tal fenômeno físico, ou, como motivação futura, pode ser usada como uma nova alternativa para novas classes de sensores ópticos.

### 1.1 Motivação

Martins-Filho, J. F. e Colaboradores [4] propuseram um sistema sensor à fibra óptica para monitoramento multiponto da corrosão, baseado na técnica de Reflectometria Óp-

tica no Domínio do Tempo (OTDR - *Optical Time-Domain Reflectometry*). Essa técnica consiste basicamente em enviar, numa fibra óptica, um sinal de pulso óptico curto e observar o pulso retroespalhado pela fibra óptica [9]. Se houver algum problema na fibra, acarretando perdas no sistema, o sinal retroespalhado mostrará esse problema com a diminuição da intensidade óptica espalhada [9]. Fazendo uso da técnica de OTDR, o sistema sensor proposto por Martins-Filho, J. F. e Colaboradores [4] opera medindo a reflectância do sinal óptico ao longo do tempo de corrosão do elemento transdutor metálico do sensor óptico. Detalhes sobre a construção, funcionamento, e figuras de mérito desse sensor são apresentados no Capítulo 2 desta Dissertação.

As curvas de reflectância em função do tempo de corrosão, mensuradas pelo sensor, apresentam a existência de um vale (ponto de mínimo). O modelo teórico usado para descrever a curva de reflectância, obtida experimentalmente, é baseado nas equações de *Fresnel*, mas considera que a corrosão ocorre de maneira uniforme e laminar [12]. Sendo assim, não é possível prever a existência desse vale, pela modelagem. Até o momento, o vale não foi previsto por nenhum modelo teórico existente. Isso porque a rugosidade de superfície gerada durante o processo de corrosão do filme metálico que compõe o elemento transdutor influencia na existência desse vale nas curvas de reflectância e não está sendo considerada na modelagem teórica. Portanto, na ausência de uma modelagem que explique o comportamento das curvas experimentais do sensor à fibra óptica proposto por Martins-Filho, J. F. e Colaboradores [4], e, levando em consideração a hipótese de que suas medidas experimentais estão sendo influenciadas pela rugosidade de superfície, é proposta nesta Dissertação uma modelagem computacional para a dinâmica de rugosidade de superfície gerada durante o processo de corrosão do elemento transdutor metálico.

A modelagem computacional proposta nesta Dissertação, busca uma análise indireta da rugosidade de superfície, partindo de resultados experimentais do processo de corrosão do elemento transdutor metálico do sensor óptico. O *software* utilizado para o desenvolvimento da modelagem computacional é o COMSOL Multiphysics 5.2© e os dados experimentais foram obtidos por Nascimento, J. F. [9]. Os resultados obtidos na simulação apresentam boa concordância com os resultados experimentais, mostrando que a modelagem proposta representa bem a dinâmica de corrosão do elemento transdutor. A partir dos resultados da simulação computacional, também é mostrada a ocorrência do fenômeno de Ressonância de Plasmons de Superfície devido ao acoplamento de luz na superfície rugosa.

Esse resultado comprova a hipótese adicional, lançada por Martins-Filho, J. F. e Colaboradores, de que o vale existente nas curvas de reflectância é influenciado pela rugosidade de superfície gerada no filme metálico e que é decorrente do fenômeno de Ressonância de Plasmons de Superfície.

## 1.2 Organização da Dissertação

Além deste capítulo, esta Dissertação está organizada em mais cinco capítulos. Os demais capítulos estão formulados como:

- Capítulo 2: nesse capítulo é destacado o sensor à fibra óptica no qual teve seu elemento transdutor metálico modelado nesta dissertação. São mostradas as figuras de mérito desse sensor e o procedimento experimental que forneceu os dados usados como base nesta dissertação;
- Capítulo 3: nele é discutida a natureza geométrica da rugosidade e suas técnicas de modelagem, as quais podem ser por funções contínuas ou distribuições discretas. É discutida também a influência de superfícies rugosas em dois efeitos ópticos, espalhamento e Ressonância de Plasmons de Superfície. Por fim, é mostrada a proposta de modelagem para rugosidade de superfície por uma função senoidal;
- Capítulo 4: nesse capítulo é apresentado o *software* multifísica utilizado para construção do modelo computacional, a física utilizada, construção de geometria, equações resolvidas pelo método numérico e a malha utilizada. Inicialmente é mostrado o processo de resolução de problemas do eletromagnetismo pelo Método dos Elementos Finitos, método numérico usado pelo COMSOL;
- Capítulo 5: nesse capítulo são mostrados os resultados da modelagem para o processo de corrosão do elemento transdutor metálico do sensor óptico. É feito o confronto com dados experimentais e explorada a ocorrência da Ressonância de Plasmons de Superfície devido ao acoplamento da luz na superfície rugosa do filme metálico;
- Capítulo 6: esse capítulo apresenta reflexões sobre a contribuição desta Dissertação, a qualidade da modelagem desenvolvida e uma proposta para trabalhos futuros.

## Capítulo 2

# Sensor à Fibra Óptica para Monitoramento da Corrosão

Há na literatura diversos tipos de sensores à fibra óptica para monitoramento de corrosão [10]. Contudo, neste capítulo, é destacado o sensor à fibra óptica multiponto para monitoramento de corrosão usando reflectometria óptica no domínio do tempo, proposto por Martins-Filho, J. F. e Colaboradores [4]. Os resultados desse sensor são usados na modelagem física desenvolvida nesta dissertação, visto que as curvas de intensidade refletida, medidas experimentalmente nesse sensor, apresentam um efeito não previsto pela modelagem teórica existente, o que torna um problema teórico em aberto. Na Seção 2.1, é feita uma introdução sobre esse sistema sensor, destacando sua técnica de monitoramento e suas figuras de mérito. Na Seção 2.2, são destacados detalhes da investigação experimental feita por Nascimento, J. F. [9], que levou aos resultados experimentais usados como guia para modelagem proposta nesta dissertação.

### 2.1 Sistema Sensor à Fibra Óptica Multiponto para Monitoramento de Corrosão

Em 2007, Martins-Filho, J. F. e Colaboradores [4] propuseram um sistema sensor à base de fibra óptica para monitoramento da corrosão usando Reflectometria Óptica no Domínio do Tempo (OTDR - *Optical Time-Domain Reflectometry*). A técnica de OTDR consiste basicamente em enviar, numa fibra óptica, um sinal de pulso óptico curto e observar o pulso retroespalhado pela fibra óptica [9]. Essa técnica é bastante utilizada para monitoramento de falhas em sistemas ópticos de longas distâncias [11], uma vez que sabendo o tempo de propagação do pulso, é possível determinar a posição da falha. Se houver algum problema

na fibra, acarretando perdas no sistema, o sinal retroespalhado mostrará esse problema com a diminuição da intensidade óptica espalhada [9]. No entanto, a técnica de OTDR é utilizada por Martins-Filho e Colaboradores [4] para monitorar a intensidade do sinal óptico refletido nas cabeças sensoras de seu sistema sensor, como é detalhado no decorrer desta seção.

A Figura 2.1 mostra uma esquema simplificado do sistema sensor proposto por Martins-Filho, J. F. e Colaboradores [4]. Ele consiste de sete cabeças sensoras conectadas num equipamento de OTDR comercial por meio de uma fibra óptica monomodo [4]. Essas cabeças sensoras são prolongações de fibras ópticas monomodo onde, na face clivada dessas fibras, são depositados filmes metálicos usando a técnica de evaporação térmica [4]. Esses filmes metálicos constituem o elemento transdutor das cabeças sensoras. Ainda na Figura 2.1, são observados acopladores direcionais, que dividem o sinal óptico de modo que apenas uma pequena parte (1, 5 ou 10%) desse sinal seja direcionado para as cabeças sensoras [4].

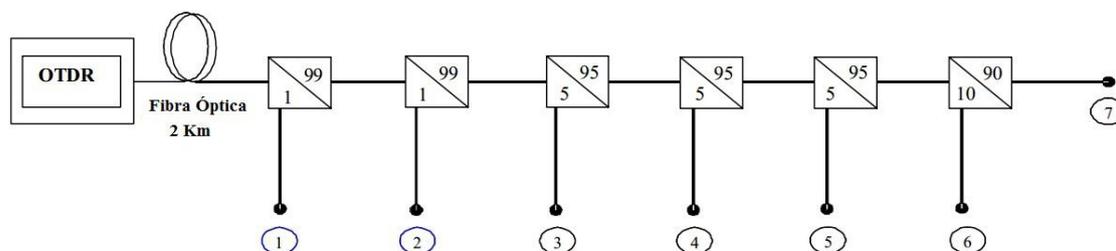


Figura 2.1: Diagrama esquemático do sensor de corrosão. Cabeças sensoras estão enumeradas de 1 à 7. Fonte: figura obtida em [4].

A Figura 2.2 mostra o traço do OTDR medido a partir do sistema sensor ilustrado na Figura 2.1. Como pode ser observado, o OTDR detecta uma maior intensidade de luz refletida a partir das cabeças sensoras. Isso é resultado da reflexão que ocorre na interface da fibra óptica com o filme fino metálico depositado em sua face clivada. Devido a alta sensibilidade do OTDR, quando é iniciado um processo de corrosão do filme metálico que compõe o elemento transdutor das cabeças sensoras, as variações na intensidade da luz refletida são detectadas e medidas por esse aparelho, de modo que é feito o monitoramento da corrosão. Para simular esse processo de corrosão, detectado pelo OTDR e ilustrado nas Figuras 2.2 e 2.3, a cabeça sensora que contém o filme metálico de alumínio é imersa numa solução ácida do tipo  $25 H_2PO_4 : 1 HNO_3 : 5 CH_3COOH$ , chamada de Al-etcher [4]. A medida da taxa de corrosão é feita da seguinte maneira: com a cabeça sensora mergulhada no ácido são medidos, com um cronômetro, intervalos de tempo curtos (em segundos). O traço do OTDR é obtido para cada intervalo de tempo de exposição ao ácido. À medida que o metal

é removido da face da fibra, a intensidade da luz medida no OTDR diminui, como ilustrado na Figura 2.3.

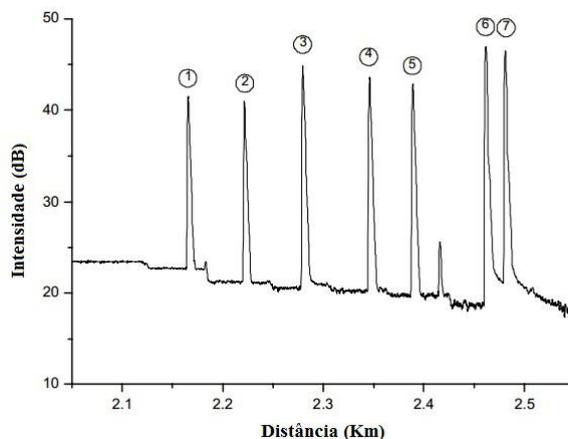


Figura 2.2: Traço do OTDR correspondente à intensidade da luz refletida como uma função da distância ao longo da fibra. Os números das cabeças sensoras são mostrados [4].

Na Figura 2.3, é mostrada a variação da intensidade relativa refletida em uma das cabeças sensoras ao longo do tempo de corrosão do filme metálico [4]. Como pode ser observado, a partir da espessura do filme metálico e do tempo de corrosão, é possível obter a taxa de corrosão.

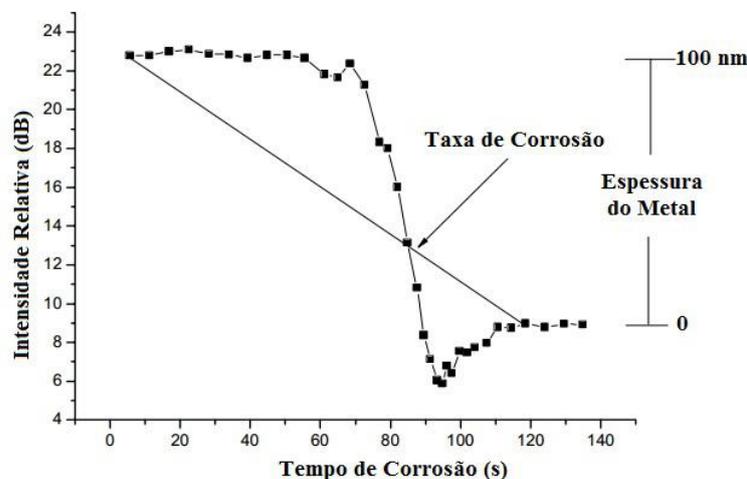


Figura 2.3: Intensidade relativa como função do tempo de corrosão. Fonte: figura obtida em [4].

Como é destacado por Martins-Filho, J. F. e Colaboradores [4], o vale (ou ponto de mínimo) mostrado na curva da Figura 2.3 não é previsto pela modelagem teórica utilizada. Há um modelo para reflectância em função da espessura do metal construído a partir das equações de *Fresnel* [12]. No entanto, tal modelo considera que a corrosão do metal ocorre de maneira uniforme e laminar. Contudo, os autores lançaram a hipótese de que esse

efeito físico na curva da Figura 2.3 está atrelado ao fenômeno de Ressonância de Plasmons de Superfície, o qual estaria sendo induzido pela rugosidade de superfície gerada no filme metálico durante o processo de corrosão. Isso porque a superfície rugosa do filme estaria provocando algum tipo de acoplamento da luz na interface do metal com o meio ácido [4].

## 2.2 Investigação Experimental da Medição do Sensor de Corrosão

Em 2012, Nascimento, J. F. [9], reproduziu o resultado obtido por Martins-Filho, J. F. e Colaboradores [4], visto na Seção 2.1, usando uma nova configuração experimental, como ilustrada na Figura 2.4 [9]. Tal aparato experimental tem como objetivo estudar o efeito de Ressonância de Plasmons de Superfície (RPS), analisando a variação do comprimento de onda e do índice de refração do meio externo, já que são dois parâmetros importantes na verificação de RPS [7]. O aparato experimental da Figura 2.4 opera com de três lasers emitindo em 980, 1320 e 1551 nm. Os lasers são acionados simultaneamente e a luz gerada por eles é guiada ao longo da fibra monomodo padrão com o auxílio de acopladores direcionais (95/05 e 50/50) e do multiplexador de comprimento de onda (WDM - *Wavelength Division Multiplexing*) [9]. Utilizam-se atenuadores de 10 e 20 dB para equalizar os níveis de potência dos lasers. A luz proveniente das fontes se propaga através do acoplador 50/50 e é refletida na face da fibra óptica que é metalizada com um filme de Alumínio (Al) de espessura nominal de 126 nm [9]. A luz refletida é derivada para o analisador de espectro óptico (OSA - *Optical Spectrum Analyser*) onde é feita a aquisição dos dados [9].

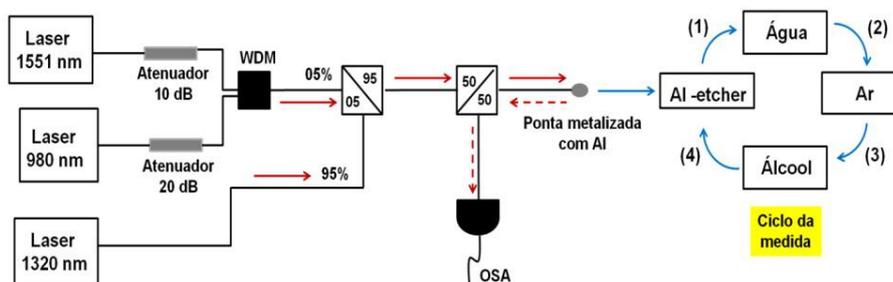


Figura 2.4: Aparato experimental para o estudo da corrosão em diferentes meios (água, ar e álcool isopropílico) e também para diferentes comprimentos de onda (980, 1320 e 1551 nm). Fonte: figura obtida em [9].

Como pode ser observado na Figura 2.4, uma vez multiplexados os comprimentos de onda na fibra óptica, a medida de reflectância ao longo da corrosão do filme metálico

é feita de acordo com a seguinte ordem de medida: 1) a ponta metalizada é mergulhada na solução ácida e é cronometrado o tempo de imersão; 2) retira-se a ponta metalizada do ácido, coloca-se na água e efetua-se a medida da intensidade refletida; 3) retira-se a ponta metalizada da água, seca-se e efetua-se a medida da intensidade refletida no ar; 4) mergulha-se a ponta metalizada no álcool isopropílico, efetua-se a medida da intensidade refletida e volta-se a mergulhar a fibra no ácido [9]. O ciclo se repete até que o filme metálico seja completamente corroído [9]. Contudo, apesar de usar uma sequência na medição de cada meio externo, foi verificado que a mudança dessa sequência não influencia no resultado da medição [9].

Com a investigação experimental ilustrada na Figura 2.4, cada medida do sinal óptico refletido para os diferentes meios externos foi feita para um mesmo perfil de superfície rugosa, uma vez que tal rugosidade é gerada apenas enquanto o filme metálico está em contato com o ácido [9]. A Figura 2.5 mostra as curvas da intensidade refletida em função da espessura do metal, para os três comprimentos de onda e para os três meios externos, obtidas através dos dados do experimento ilustrado na Figura 2.4. Ainda nas curvas da Figura 2.5 estão destacadas também as curvas teóricas do modelo baseado nas equações de *Fresnel*, o qual não leva em consideração a rugosidade de superfície gerada no filme metálico durante o processo corrosivo [12]. Como pode ser observado, essas curvas teóricas não apresentam o vale observado nas curvas experimentais.

Pode-se observar nos gráficos da Figura 2.5, que a posição do vale não varia com o comprimento de onda, mas ela muda com a mudança do meio externo. Ou seja, ela é sensível às variações do índice de refração do meio externo. Essa observação reforça a hipótese de que possa estar ocorrendo ressonância de plásmons de superfície influenciada pela rugosidade de superfície, uma vez que esse efeito apresenta forte dependência com o índice de refração do meio externo [9].

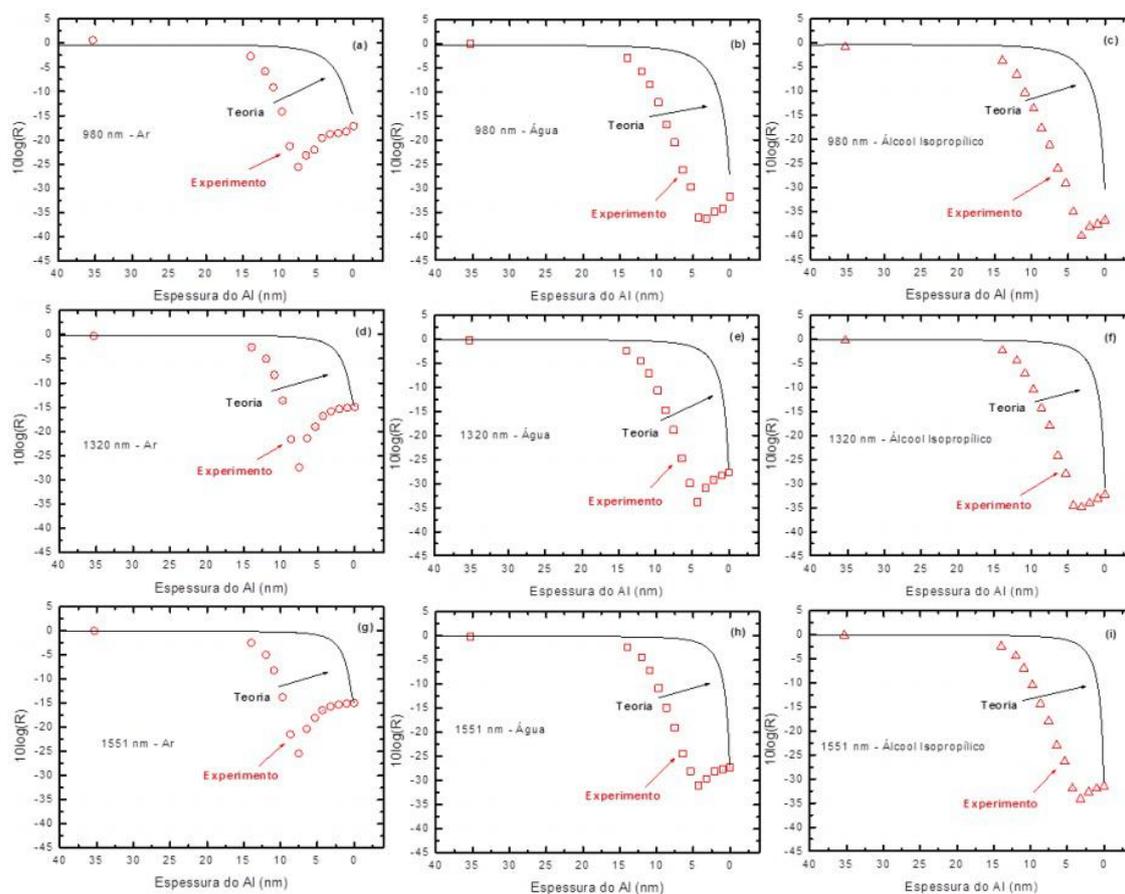


Figura 2.5: Traços teóricos e experimentais da reflectância em função da espessura do Al para diferentes meios e comprimentos de onda. Fonte: figura obtida em [9].

Na ausência de uma análise teórica que explique o comportamento das curvas experimentais, nos trabalhos de Martins-Filho, J. F. e Nascimento, J. F., os resultados do sensor óptico de corrosão destacados neste capítulo continuam levantando apenas hipóteses e cercando o problema através de testes experimentais [4, 5, 9]. Sendo assim, por meio das contribuições experimentais de Nascimento, J. F., esta dissertação contribui através de uma modelagem física da corrosão num filme metálico que constitui o elemento transdutor do sensor óptico em estudo, de modo que possa explicar o comportamento dos dados experimentais destacados na Figura 2.5 e, conseqüentemente, poder confirmar a ocorrência do efeito de Ressonância de Plasmons de Superfície. Esses resultados experimentais serão usados no Capítulo 5.

# Capítulo 3

## Rugosidade de Superfície

A rugosidade de superfície pode ser caracterizada de maneira geral por uma geometria irregular não Euclidiana, tipo fractal [13]. O interesse no estudo da rugosidade está presente na Matemática, na Ciência e até nas Artes [14]. Isso porque tais estruturas podem apresentar tanto uma vasta aleatoriedade, quanto uma forte auto-similaridade, trazendo desafios para sua modelagem. Este capítulo explora a natureza fractal da rugosidade e algumas formas alternativas para modelá-la por funções contínuas, com estrutura periódica semelhante à de uma grade de difração. Na Seção 3.1, é destacada a geometria fractal e a modelagem da rugosidade por funções fractais. Já na Seção 3.2 são destacados alguns efeitos ópticos influenciados por superfícies rugosas. Por fim, na Seção 3.3, é proposta uma simples modelagem para superfície rugosa.

### 3.1 Fractais

Em seu livro intitulado de *The Fractal Geometry of Nature*, publicado em 1982, Mandelbrot propôs a Geometria Fractal como a representação real das formas encontradas na natureza [15]. O fractal pode ser observado em diversos fenômenos físicos e químicos, como em processos de erosão, crescimento de superfícies por deposição [16] e corrosão [17]. Fractais são definidos como um conjunto gerado recursivamente que apresenta auto-similaridade e complexidade. A auto-similaridade é uma característica que implica na observação da mesma forma geométrica, independente da escala em que é observado. Já a complexidade está relacionada com a natureza infinita do fractal, visto que ele nunca será representado completamente, porque é fruto de um processo recursivo aplicado indefinidamente, onde sempre será possível aumentar o número de seus detalhes através de novas iterações da fórmula recursiva que gera o fractal [18].

A dimensão fractal é algo a ser discutido, pois diferentemente da Geometria Euclidiana, em que a dimensão é definida por valores inteiros (1D, 2D, 3D, por exemplo), na Geometria Fractal ela não possui valores necessariamente inteiros, podendo assumir valores semi-inteiros. Uma das formas de se calcular a dimensão fractal  $d_f$  [15] é mostrada na Equação (3.1),

$$d_f = \lim_{l \rightarrow 0} \frac{\ln[N(l)]}{\ln(1/l)}, \quad (3.1)$$

em que  $N(l)$  é o número de repetições do objeto e  $l$  é a escala em que ele foi reduzido. A Figura 3.1 mostra um comparativo entre a dimensão euclidiana e a dimensão fractal. As formas regulares estão representadas pela geometria euclidiana, em que o conceito de dimensão é bem definido e está relacionado com o número de coordenadas necessárias para descrever um objeto no espaço euclidiano. Já às formas irregulares, elas são representadas pela geometria fractal, em que a dimensão é fracionária e está associada ao grau de ocupação da estrutura no espaço que a contém [19].

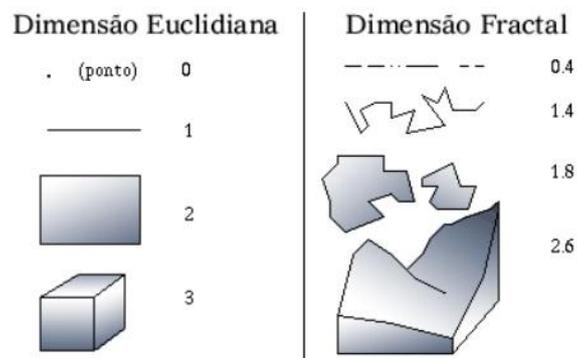


Figura 3.1: Dimensão Euclidiana vs Dimensão Fractal. Fonte: figura obtida em [20].

Como dito no início desta seção, os fractais são gerados segundo uma sequência indefinida de processos recursivos. Alguns deles seguem regras determinísticas de construção, os quais são classificados por *Fractais Determinísticos*. Já outros tipos seguem regras aleatória de construção, os quais são chamados de *Fractais Randômicos*. A análise dessas duas classes de fractais é feita por distribuições discretas. A Figura 3.2 mostra um comparativo entre um fractal determinístico e sua versão randômica, em que os dois possuem a mesma dimensão  $d_f = 1,585$  [21]. A regra determinística que gerou o fractal da Figura 3.2(a) é que o canto superior direito do quadrante deve ser sempre excluído em cada passo do processo

recursivo [21]. Já a versão randômica, mostrada na Figura 3.2(b), é obtida com a adição de um processo estocástico para a escolha do quadrante que deve ser excluído em cada passo do processo recursivo [21].



Figura 3.2: (a) Fractal Determinístico; (b) Versão Randômica. Fonte: figura adaptada de [21].

Fractais também podem ser representados por distribuições contínuas, chamadas de *Funções Fractais* [21]. Essas funções são importantes na modelagem contínua de algumas formas geométricas encontradas na natureza, como, por exemplo, a rugosidade de superfície, uma vez que sua modelagem é objeto de estudo desta dissertação. Na Literatura Científica [21, 22, 23] são destacados dois tipos de funções fractais para representação contínua da rugosidade de superfície. Essas funções fractais podem ser usadas para modelar a rugosidade gerada devido a corrosão em metais [22] e para rugosidade gerada pelo contato mecânico de fricção [23].

- *Função Fractal de Weierstrass-Mandelbrot*

$$C(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1 - \cos(\gamma^n t)}{\gamma^{(2-D)n}}; \quad (3.2)$$

- *Função Fractal de Weierstrass*

$$W(t) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\cos(\gamma^n t)}{\gamma^{(2-D)n}}, \quad (3.3)$$

em que  $D$  é a dimensão do fractal e está no intervalo  $1 < D < 2$  e  $\gamma$  é um fator relacionado às direções horizontal e vertical da curva gerada por essas suas funções fractais, com  $\gamma > 1$ .

As Figuras 3.3 e 3.4 trazem a representação gráfica para as duas funções fractais destacadas nas Equações (3.2) e (3.3), respectivamente.

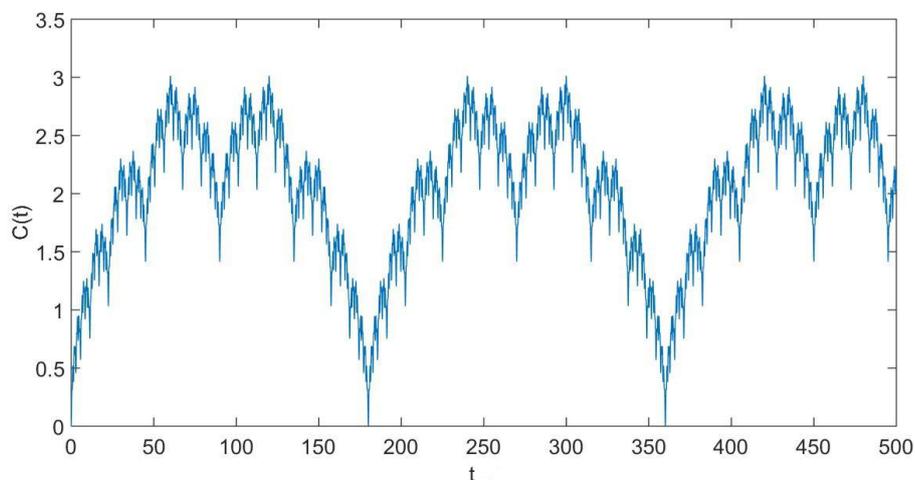


Figura 3.3: *Função Fractal de Weierstrass-Mandelbrot*, com  $|n| = 9$ ,  $\gamma = 2$  e  $D = 1.5$ . Fonte: figura elaborada pelo autor.

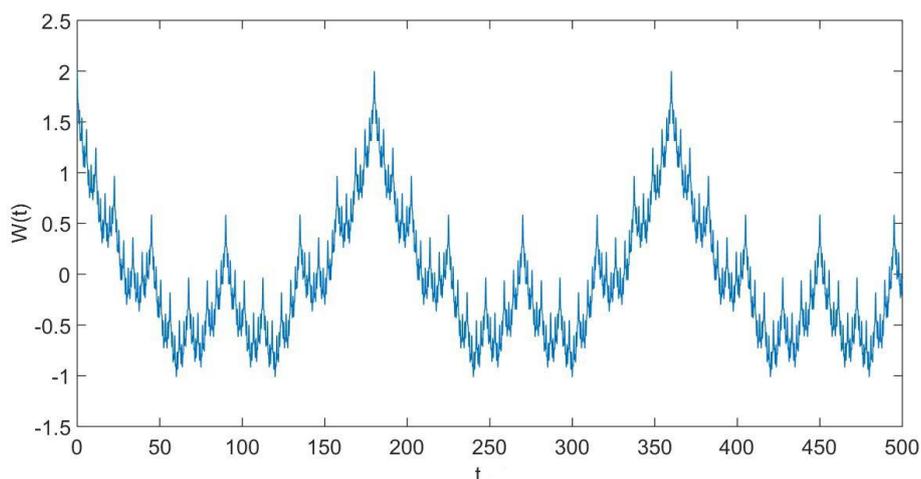


Figura 3.4: *Função Fractal de Weierstrass*, com  $n = 9$ ,  $\gamma = 2$  e  $D = 1.5$ . Fonte: figura elaborada pelo autor.

Pode-se observar, nas Figuras 3.3 e 3.4, que as funções fractais que descrevem a rugosidade de superfície apresentam um perfil periódico, no entanto, por serem fractais, não possuem uma curva suavizada como a de uma função senoidal, visto que a curva apresenta um grande número de detalhes (relacionados à ordem  $n$  do fractal) [21]. Em termos de modelagem computacional, quanto maior for esse número de detalhes, maior será o recurso necessário à implementação destas funções. Isso porque a modelagem proposta neste trabalho faz uso do *Método dos Elementos Finitos*, como será discutido no Capítulo 4, onde é feito o uso de uma malha para discretização do domínio em estudo. Com isso, quanto maior

for o número de detalhes geométricos e menor for a dimensão deles, mais densa será essa malha, o que significa num número muito grande de equações para serem resolvidas.

Ainda sobre as Figuras 3.3 e 3.4, nota-se que elas apresentam característica determinísticas do fractal. Nesse caso, elas podem ser utilizadas na modelagem contínua da rugosidade gerada no processo corrosivo, fazendo o tratamento determinístico da superfície rugosa [22]. Ou seja, um mesmo perfil de corrosão seria observado em determinadas regiões do metal. Para o tratamento aleatório da rugosidade de superfície por funções fractais, é adicionada uma fase no argumento das funções cosseno das Equações (3.2) e (3.3), de tal modo que essa fase seja uma variável aleatória [23].

Com o objetivo de modelar a dinâmica de rugosidade de superfície gerada durante o processo de corrosão do elemento transdutor metálico do sensor óptico, as funções que descrevem a rugosidade devem ser adequadas para o processo dinâmico de corrosão. Ou seja, as funções fractais destacadas nesta seção podem ser utilizadas, desde que seus parâmetros sejam manipulados de forma a saírem de uma condição estática para evoluírem ao longo do processo corrosivo. Em outras palavras, como o processo corrosivo é analisado a partir da variação da espessura do filme metálico  $d$  durante a corrosão, os parâmetros  $D$  e  $\gamma$  devem ser função dessa espessura, ou seja,  $D = D(d)$  e  $\gamma = \gamma(d)$ . Deve-se destacar que, mesmo passando a ser uma função, esses parâmetros ainda estão condicionados a variar apenas no intervalo em que foram definidos anteriormente ( $1 < D < 2$  e  $\gamma > 1$ ), pois a condição de função fractal deve ser mantida.

Visto que as funções fractais tem suas limitações quanto a implementação de um processo dinâmico e que necessitam de grandes recursos computacionais para serem implementadas, devido a sua quantidade de detalhes, é proposta na Seção 3.3 uma *Função Rugosidade*. Essa função tem a forma senoidal e permite fácil manipulação de seus parâmetros, sem intervalo de validade, para adequação ao processo dinâmico. Contudo, é necessário antes destacar a influência da rugosidade em efeitos ópticos.

## 3.2 Influência da Rugosidade em Efeitos Ópticos

Nesta seção são destacados dois efeitos ópticos, influenciados pela rugosidade de superfície, que podem estar presentes num processo de corrosão de um filme metálico: o primeiro é o de espalhamento de ondas eletromagnéticas numa superfície rugosa; já o segundo

é a influência da rugosidade na geração do efeito de Ressonância de Plasmons de Superfície, visto que esse trabalho também busca verificar a hipótese lançada por Martins-Filho e Colaboradores [4], de que o efeito observado nas curvas de reflectância, obtidas por seu sensor, é devido o acoplamento de Plasmons na superfície rugosa.

### 3.2.1 Espalhamento de Ondas Eletromagnéticas Devido às Superfícies Rugosas

A influência da rugosidade de superfície no espalhamento de ondas eletromagnéticas no domínio óptico foi notada inicialmente por *Rayleigh* em 1901 [24], quando ele observou efeitos na luz refletida devido a incidência de um feixe de luz em superfícies fracamente polidas, ou seja, com rugosidade. Em sua observação, ele analisou a influência do comprimento de onda da luz incidente e do ângulo de incidência sobre a superfície rugosa [25]. Mais tarde, em 1919, foi proposta uma teoria para o espalhamento da luz baseada na análise da mudança de fase do feixe refletido devido a rugosidade de superfície [26].

A Figura 3.5 mostra uma típica situação de espalhamento, em que um feixe incide sobre uma superfície rugosa, caracterizada pelo parâmetro  $\sigma$ , e o feixe refletido pode ser espalhado em várias direções, inclusive na direção do feixe especular (característica da incidência sobre uma superfície lisa). Em termos de modelagem matemática, o parâmetro  $\sigma$  está relacionado com uma distribuição de probabilidades para a variação da altura ao longo da superfície rugosa, para uma abordagem probabilística dessa superfície [27].

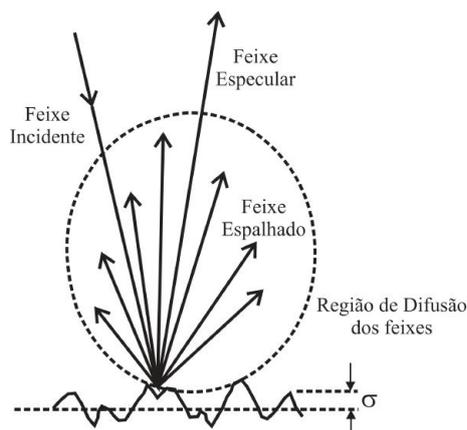


Figura 3.5: Representação esquemática da reflexão de um feixe incidente numa superfície rugosa. Fonte: figura adaptada de [25].

Bennetti e Porteus [27] propuseram um modelo para a medida da reflectância para uma incidência normal na superfície levemente rugosa, tratada de forma estatística por uma

distribuição *Gaussiana* para os vales e picos dessa superfície. Nesse modelo, a quantidade de luz refletida é calculada levando em consideração a contribuição do feixe especular, somada à contribuição dos feixes espalhados [27]. No entanto, o termo relacionado com o espalhamento cai com a quarta potência do comprimento de onda. De modo que para comprimentos de onda suficientemente grandes, a difusão dos feixes incidentes na superfície torna-se desprezível [27].

O modelo proposto por Bennetti e Porteus [27] é limitado à incidência normal e superfícies levemente rugosas. No entanto, modelos mais completos já foram propostos, como o obtido em [28]. Em que é proposto o modelo para o *Espalhamento Integrado Total*, o qual estende uma arbitrariedade ao ângulo de incidência e ao tipo de rugosidade de superfície. Esse tratamento arbitrário permite o estudo do espalhamento, através da refletividade, em superfícies rugosas encontradas nos mais diversos meios ópticos. É feito um destaque aos dispositivos ópticos, pois a rugosidade de superfície também pode ser resultado de falhas nos processos de fabricação de tais dispositivos, acarretando em efeitos de espalhamento [28, 29].

### 3.2.2 Acoplamento de Plásmon em Superfície Rugosa

O Plásmon de Superfície (SP - *Surface Plasmon*) é uma onda eletromagnética resultante das oscilações longitudinais de elétrons livres na superfície do metal com interface em um meio dielétrico, confinada a se propagar na interface metal/dielétrico [7]. A Figura 3.6(a) ilustra as oscilações das cargas elétricas na superfície do metal e o campo elétrico associado. A condição de confinamento é consequência da solução de um problema do Eletromagnetismo relacionado à incidência de uma onda eletromagnética, com campo elétrico definido no plano de incidência, como mostra a Figura 3.6(b), na interface simples entre um meio metálico e um meio dielétrico, com frequência abaixo da frequência de plasma para que o metal exiba uma permissividade negativa [30]. Nessas condições, mostra-se que existe uma onda evanescente que se propaga na interface metal/dielétrico, com sua densidade potência fortemente atenuada nas direções perpendiculares à interface, na qual é chamada de Plásmon de Superfície [30].

A Figura 3.6(b) ilustra a propagação do Plásmon de Superfície com vetor de onda  $\vec{k}_{SP}$  na interface metal/dielétrico, em que  $\epsilon_m$  é a permissividade do metal e  $\epsilon_d$  é a permissividade do dielétrico. Ainda na Figura 3.6(b) é ilustrada a densidade de potência associada ao

SP nas direções perpendiculares à interface, mostrando sua atenuação nessas direções [30].

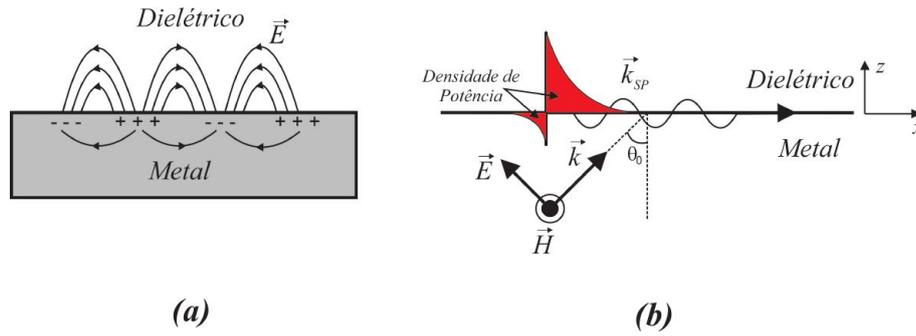


Figura 3.6: (a) Oscilações dos elétrons livres na superfície do metal; (b) Plásmon de Superfície com vetor de onda  $\vec{k}_{SP}$ . Fonte: figura adaptada de [8].

A partir da solução das Equações de *Maxwell*, com condições de contorno adequadas, é obtida uma expressão para o número de onda  $k_{SP}$  do Plásmon de Superfície [8]. Por ser uma onda que se propaga apenas na interface metal/dielétrico, como mostrado na Figura 3.6(b), o número de onda  $k_{SP}$  depende tanto da permissividade do meio metálico  $\epsilon_m$  quanto da permissividade do meio dielétrico  $\epsilon_d$ ,

$$k_{SP} = k_0 \sqrt{\frac{\epsilon_m \epsilon_d}{\epsilon_m + \epsilon_d}}, \quad (3.4)$$

em que  $k_0$  é o número de onda no vácuo. Quando a interface é iluminada por uma luz com campo elétrico definido no plano de incidência, como ilustrado na Figura 3.6(b), que corresponde à polarização paralela à interface metal/dielétrico, é possível obter uma condição de ressonância, se a componente paralela à interface do vetor de onda da luz incidente for igual à do vetor de onda do Plásmon de Superfície, ou seja,  $k_x = k_{SP}$  [8]. Nessa condição, praticamente toda (ou boa parte) a energia da onda incidente é absorvida pelo Plásmon de Superfície. Esse efeito permitiu o desenvolvimento, nas últimas décadas, de sensores ópticos com alta sensibilidade às variações do índice de refração do meio dielétrico externo [31]. Esses sensores foram construídos seguindo as mais diversas configurações, fazendo o uso de prismas, grades de difração metalizadas e guias de onda, para obter acoplamento e Ressonância de Plasmons de Superfície [31].

Como dito anteriormente, para se obter a Ressonância de Plasmons de Superfície (RPS), é necessário que  $k_x = k_{SP}$ . Sendo que essa componente do vetor de onda da luz incidente é definida, de forma geral, por

$$k_x = \frac{\omega}{c} \sin\theta_0 \pm \Delta k_x, \quad (3.5)$$

em que  $\omega = 2\pi/\lambda$  é a frequência de propagação,  $c$  é a velocidade da luz no vácuo,  $\theta_0$  é o ângulo de incidência da luz e  $\Delta k_x$  é uma perturbação que depende do perfil da superfície da interface entre o meio metálico e o meio dielétrico [8]. Um estudo para Plasmons de Superfícies em estruturas com superfície lisa, com rugosidade e em grades de difração foi feito por Raether [8]. Para cada uma dessas estruturas é mostrada a influência da perturbação  $\Delta k_x$ :

- Superfície Lisa - Não ocorre perturbação, pois  $\Delta k_x = 0$ . Dessa forma o acoplamento da onda incidente com o Plásmom de Superfície dá-se pelo ajuste do ângulo de incidência  $\theta_0$  ou do comprimento de onda  $\lambda$  [8]. Essas estruturas são comuns em sensores de RPS que fazem uso de prismas ou guias de onda [31];
- Grade de Difração - A perturbação ocorre devido às ordens de difração da grade  $m = 1, 2, \dots$ , de modo que  $\Delta k_x = m \frac{2\pi}{\Lambda}$ , em que  $\Lambda$  é a periodicidade da grade. Isso indica que ocorre o acoplamento entre as ondas difratadas na direção paralela à superfície e o Plásmom de Superfície, na grade de difração [8].

Quando a superfície da interface entre o metal e meio externo possui rugosidade, a modelagem para  $\Delta k_x$  torna-se mais delicada. É preciso definir se ela será tratada por uma função contínua ou por uma distribuição discreta. Boa parte dos trabalhos que envolvem rugosidade de superfície e Plasmons fazem o tratamento estatístico da rugosidade com distribuições *Gaussianas* [7, 8, 32]. Uma solução simples para  $\Delta k_x$  é mostrada na Equação (3.6), a qual é obtida quando considerado o espalhamento da onda incidente na superfície rugosa, com a simplificação adicional de que a superfície rugosa é isotrópica [8],

$$\Delta k_x = \frac{\omega}{c} [\sin\theta_0 + \sin\theta] \quad (3.6)$$

em que  $\theta_0$  é o ângulo de incidência e  $\theta$  é o ângulo de espalhamento. Ou seja, as componentes espalhadas na direção paralela à superfície acoplam com o Plásmom de Superfície.

No trabalho de Fontana e Pantel [7] é obtida uma expressão para  $\Delta k_x$  bem mais complexa que a mostrada na Equação (3.6). É adotada uma *Gaussiana* para representar a distribuição de vales e picos ao longo da superfície rugosa. De modo que a expressão obtida depende diretamente de parâmetros que caracterizam estatisticamente a rugosidade. É destacado que  $\Delta k_x$  possui uma parte real, relacionada à modificação da relação de dispersão do Plásmon de Superfície e uma parte imaginária, relacionada ao amortecimento do Plásmon de Superfície ao longo da superfície rugosa.

O que pode-se concluir é que a mudança no perfil de superfície influencia no acoplamento com o Plásmon de Superfície. Para o caso de superfícies rugosas, além de provocar mudança na relação de dispersão, a rugosidade também resulta no amortecimento da onda de superfície. Um efeito que pode ser resultante da influência da rugosidade no Plásmon de Superfície é relatado por Martins-Filho e Colaboradores [4], em que é observado um ponto de mínimo nas curvas de reflectância (característico da Ressonância de Plasmons) do sensor óptico destacado no Capítulo 2. Como o sensor opera numa configuração que não deveria excitar a Ressonância de Plasmons, foi levantada a hipótese de que a rugosidade estaria fornecendo o incremento necessário para que a luz acoplasse com o Plásmon na superfície do filme fino metálico e ocorresse a ressonância. A confirmação para essa hipótese é apresentada no Capítulo 5 desta dissertação, em que é mostrado o acoplamento da luz na superfície rugosa do filme metálico que compõe o elemento transdutor desse sensor óptico.

### 3.3 Função Rugosidade

Nesta seção, é proposta uma função senoidal, chamada de *Função Rugosidade*, para a caracterização da rugosidade de superfície gerada durante o processo de corrosão do elemento transdutor do sensor à fibra óptica de corrosão. A escolha dessa função é devida a proposta de morfologia para superfície rugosa do filme fino mostrada na Figura 3.7.

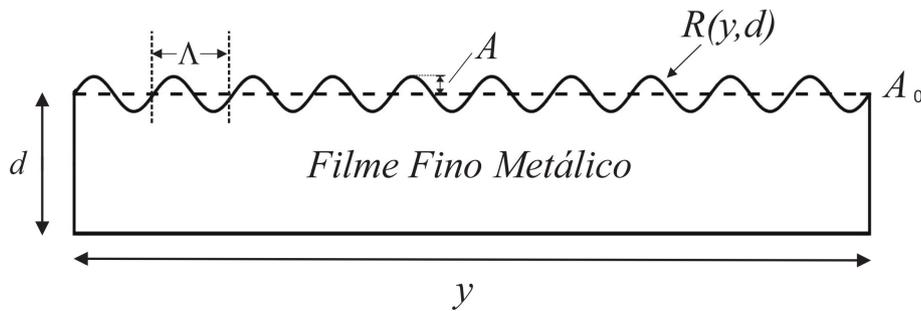


Figura 3.7: Perfil morfológico da rugosidade de superfície num filme fino metálico. Fonte: figura elaborada pelo autor.

A Função Rugosidade  $R(y, d)$  que descreve a superfície mostrada na Figura 3.7 está definida na Equação (3.7),

$$R(y, d) = A(d) \sin\left(\frac{2\pi}{\Lambda} y\right) + A_0(d), \quad (3.7)$$

em que  $d$  é a espessura do metal,  $A(d)$  é a amplitude da rugosidade em função da espessura do metal,  $\Lambda$  é a periodicidade da rugosidade,  $A_0(d)$  é o *off-set* em função da espessura do metal e  $y$  é o parâmetro de varredura da rugosidade num intervalo  $[0, D_{clad}]$ , em que  $D_{clad} = 125 \mu\text{m}$  é o diâmetro da face clivada de uma fibra óptica monomodo padrão [33].

Os parâmetros  $A$  e  $A_0$  estão definidos em função da espessura  $d$  do metal para que possam se adequar à dinâmica do processo corrosivo. É importante destacar que o parâmetro  $A$  determina como o processo corrosivo faz os vales aumentarem sua profundidade, como mostra a Figura 3.7. Em contrapartida, o parâmetro  $A_0$  determina como a rugosidade, como um todo (vales e picos), se desloca com a diminuição da espessura do filme metálico. Assim, eles deverão assumir os valores que melhor ajustem a medida de reflectância em função da espessura do metal realizada nas simulações no COMSOL *Multiphysics*©, com as medidas experimentais obtidas por Nascimento [9]. Com isso,  $A$  e  $A_0$  devem ser obtidos por uma interpolação e a função  $R(y, d)$  ficará definida explicitamente.

A Figura 3.8 ilustra a dinâmica do processo de corrosão do filme metálico proposta nesta dissertação por meio da Função Rugosidade  $R(y, d)$ . As setas apontam quais partes da superfície rugosa, vales ou picos, estão corroendo mais rapidamente que as outras. Já as linhas tracejadas representam a espessura do metal. Como pode ser observado na Figura 3.8, inicialmente já existe uma rugosidade na superfície do filme. Isso é decorrência do processo de deposição do material metálico [16]. Deve-se destacar que apenas algumas curvas estão

ilustradas na Figura 3.8, sendo essas curvas uma representação instantânea do perfil de rugosidade em algum momento do processo de corrosão. A hipótese implícita nessa dinâmica de corrosão, proposta pela Equação (3.7) e ilustrada na Figura 3.8, é que, inicialmente, os vales devem penetrar mais rapidamente que os picos no metal, até ficarem muito próximos de serem completamente corroídos. Quando chegarem nessa condição, os picos deverão corroer mais rapidamente, fazendo sua altura diminuir cada vez mais ao longo do processo de corrosão.

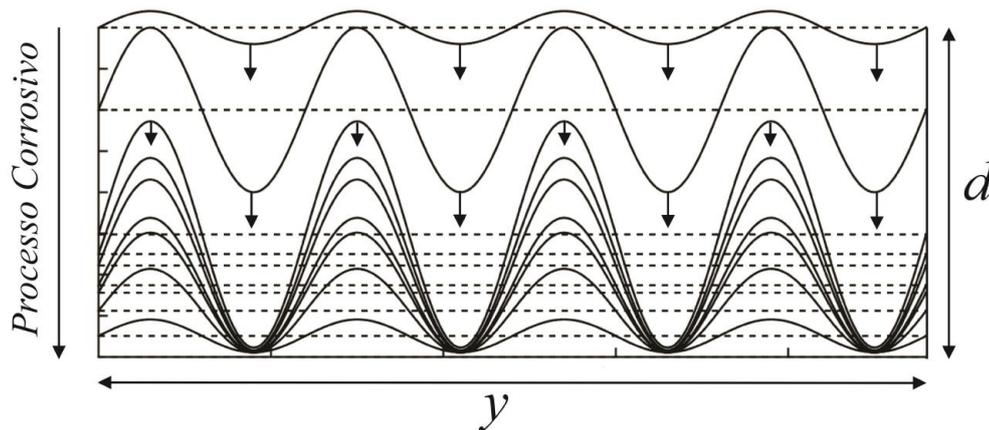


Figura 3.8: Dinâmica da *Função Rugosidade* ao longo do processo de corrosão. Fonte: figura elaborada pelo autor.

O perfil de rugosidade mostrado na Figura 3.7 ou, alternativamente, na dinâmica mostrada na Figura 3.8, é razoavelmente diferente do perfil de rugosidade ilustrado nas Figuras 3.3 e 3.4, resultante das funções fractais definidas nas Equações (3.2) e (3.3), respectivamente. No entanto, para  $n = 1$ , tanto a *Função Fractal de Weierstrass-Mandelbrot* quanto a *Função Fractal de Weierstrass* equivalem à *Função Rugosidade*, distintas apenas por uma fase e dos parâmetros  $D$  e  $\gamma$ , dado que essas funções fractais fazem uso de cossenos e a função aqui proposta faz uso de um seno.

Uma melhor comparação para o perfil de rugosidade da Figura 3.7 é feita com a análise de uma grade de difração. A Figura 3.9 mostra uma grade de difração de perfil senoidal usada para estudar o efeito de Ressonância de Plasmons de Superfície [34].

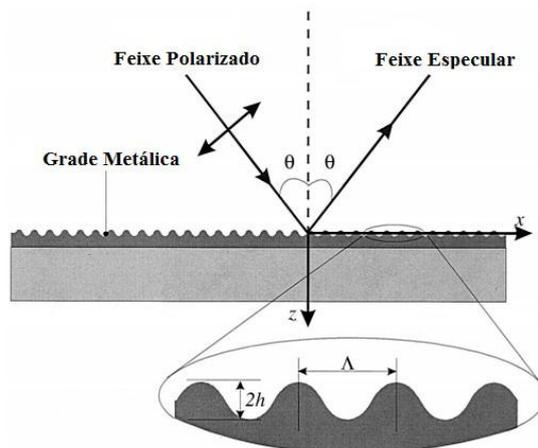


Figura 3.9: Grade metálica para observação do efeito de SPR. Fonte: figura obtida em [34].

A função que descreve a grade de difração da Figura 3.9 é mostrada na Equação (3.8).

$$s(x) = h \sin\left(\frac{2\pi}{\Lambda}x\right), \quad (3.8)$$

em que  $h$  é amplitude da grade e  $\Lambda$  é a periodicidade.

Fazendo um comparativo entre a função  $s(x)$  e a função  $R(y, d)$ , tem-se que:

- $h$  corresponde a  $A$ ;
- $\Lambda$  tem o mesmo significado nas duas funções, pois ele representa a periodicidade da superfície;
- $x$  corresponde a  $y$ ;
- o parâmetro correspondente a  $A_0$  é nulo.

Ou seja, o perfil morfológico para superfície rugosa do filme metálico gerado pela *Função Rugosidade* é o mesmo de uma grade de difração. No entanto, nesta Dissertação a grade de difração é usada para modelar um processo dinâmico de corrosão, de modo que seus parâmetros geométricos variam ao longo do processo corrosivo. Já uma grade de difração usada para excitar Plasmons de Superfície tem seus parâmetros geométricos fixados.

## Capítulo 4

# Modelagem do Elemento Transdutor do Sensor Óptico de Corrosão Usando o COMSOL Multiphysics

Este capítulo apresenta uma modelagem computacional do elemento transdutor metálico do sensor óptico de corrosão usando o *software* COMSOL *Multiphysics*©. Na Seção 4.1, é feita uma abordagem sobre o método numérico usado pelo *software*, mostrando como ele é empregado na resolução de problemas do Eletromagnetismo. Na Seção 4.2, é apresentado o Módulo físico utilizado na simulação, que o COMSOL faz uso para estudar a propagação de ondas eletromagnéticas com frequências no domínio óptico. Por fim, na Seção 4.3, é mostrada a modelagem do elemento transdutor implementada no COMSOL.

### 4.1 Método dos Elementos Finitos

O método numérico usado pelo COMSOL é o Método dos Elementos Finitos (MEF) [35], que teve sua origem na década de 40 no campo da análise estrutural. No entanto, só começou a ser empregado na resolução de problemas ligados ao Eletromagnetismo no final da década de 60 [36]. Embora existam métodos conceitualmente mais simples de serem compreendidos e implementados em alguma linguagem de programação, tais como o Método das Diferenças Finitas (MDF) e o Método dos Momentos (MDM), o MEF apresenta vantagens sobre esses no que se diz respeito a problemas envolvendo geometrias complexas e meios não-homogêneos. Por apresentar uma generalidade sistemática, o MEF torna possível a construção de programas de computador de uso geral para resolução de uma ampla gama de problemas nas mais diferentes áreas, com a necessidade de poucos ou nenhum ajuste para o problema em questão [37].

Em problemas relacionados ao Eletromagnetismo, o MEF é empregado para resolver equações diferenciais parciais como, por exemplo, as equações de *Laplace*, de *Poisson* e de *Helmholtz* [36]. Basicamente, pode-se aplicar o Método dos Elementos Finitos de acordo com uma sequência de quatro passos [38], os quais estão destacados a seguir:

1. discretização da região da solução num número finito de elementos (ou sub-regiões);
2. derivação de equações que governem um elemento típico da região da solução;
3. montagem de todos os elementos na região da solução;
4. resolução do sistema de equações obtido.

A discretização da região da solução é feita através de elementos finitos, cujas formas dependem da dimensão espacial em que o problema está sendo abordado. Em 1D, os elementos são apenas pequenos segmentos de reta. Já em 2D, tais elementos podem assumir a forma triangular, quadrática ou quadrilátera. Em 3D, os elementos possuem formas tetraédricas ou hexagonais. A Figura 4.1 ilustra esses diversos tipos de elementos e a quantidade de nós que esses elementos possuem.

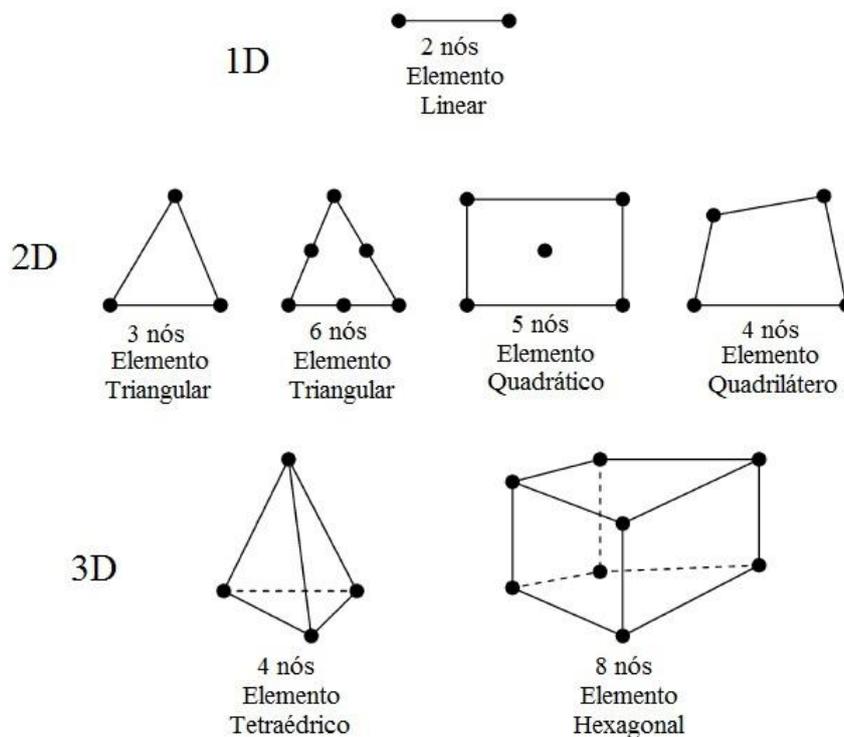


Figura 4.1: Tipos de elementos finitos para geometrias em 1D, 2D e 3D. Fonte: figura adaptada de [36].

Um exemplo de discretização numa região (passo 1) em 2D por elementos triangulares e quadriláteros é mostrado na Figura 4.2. Nota-se que a fronteira real da região da solução é aproximada por uma nova fronteira criada pelos elementos finitos. Subentende-se que, quanto maior o número desses elementos utilizados na discretização da região, melhor será a aproximação de sua fronteira.

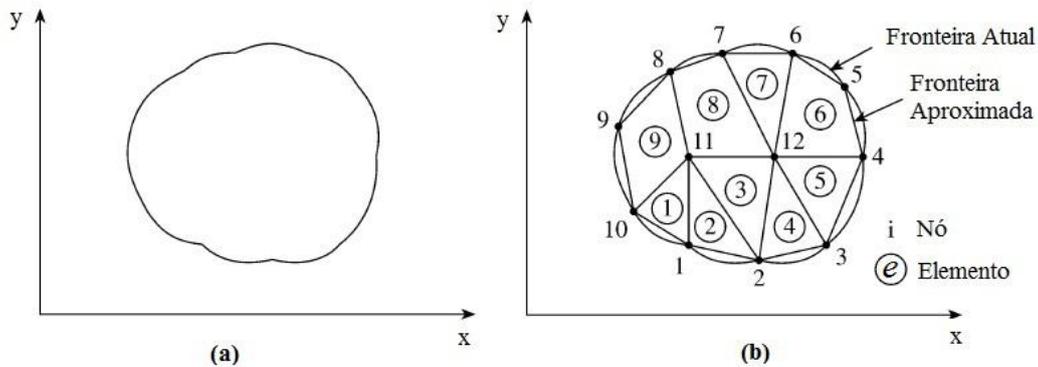


Figura 4.2: (a) Região da solução; (b) Discretização por elementos finitos. Fonte: figura adaptada de [36].

A derivação de uma equação que governe o elemento finito (passo 2) irá depender do tipo de elemento que está sendo utilizado para discretizar a região da solução (ou domínio estudado). Um elemento triangular é descrito pela função  $\phi$  definida na Equação (4.1). Tais funções podem representar qualquer variável física no elemento finito, como por exemplo, campo elétrico ou potencial elétrico. Isso é uma das versatilidades do MEF, pois uma vez definida a forma do elemento, pode-se modelar qualquer variável por uma mesma função.

$$\phi(\xi, \eta) = a + b\xi + c\eta \quad (4.1)$$

Já para um elemento quadrilátero, a função que o descreve é

$$\phi(\xi, \eta) = a + b\xi + c\eta + d\xi\eta, \quad (4.2)$$

em que  $a$ ,  $b$ ,  $c$  e  $d$  são constantes e  $\xi$  e  $\eta$  correspondem às coordenadas de um espaço padrão, para uso computacional, onde é definido um elemento de referência [39], como mostrado na Figura 4.3, que simplifica os cálculos.

Uma vez conhecidos os valores da função  $\phi$  nos nós do elemento, pode-se deter-

minar o valor dessa função em qualquer ponto no interior desse elemento com o auxílio de funções de interpolação  $\alpha_i$ , chamadas de *Funções de Base* [40]. Isso é uma vantagem em relação ao Método das Diferenças Finitas, uma vez que esse método só permite determinar o valor das variáveis apenas nos nós [36]. Com a Equação (4.3), é possível calcular o valor de  $\phi$  em qualquer ponto interno ao elemento de referência.

$$\phi(\xi, \eta) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi_i(\xi, \eta), \quad (4.3)$$

em que  $\phi_i$  é o valor da função no nó  $i$  e  $n$  corresponde ao número de nós do elemento. No caso de um elemento triangular, tem-se que  $n = 3$ . Durante o texto, se faz referências aos elementos triangulares visto que eles são a melhor opção para se discretizar domínios que possuem uma geometria complexa [41].

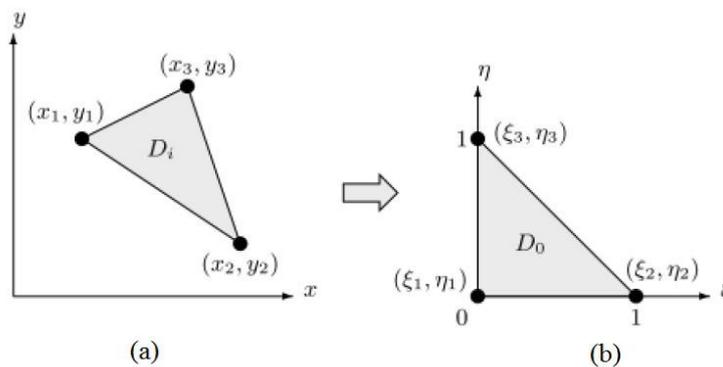


Figura 4.3: (a) Elemento descrito no plano  $xy$ ; (b) Elemento de referência descrito no plano  $\xi\eta$  do espaço padrão. Fonte: figura adaptada de [39].

Uma vez definido o problema físico a ser resolvido num domínio que será discretizado pelos elementos finitos, a partir de leis físicas, deve ser obtida uma equação diferencial que rege o fenômeno envolvido. Isso consiste na formulação contínua do problema. Para se obter uma solução aproximada pelo MEF, é necessário desenvolver uma formulação discreta para o problema. A Figura 4.4 mostra, na forma de diagrama de blocos, dois processos no qual é possível transformar um problema contínuo num problema discreto.

No diagrama, são mostrados dois caminhos para de chegar à equação discreta: 1) o caminho do lado esquerdo faz uso da minimização de funções de energia (ou funções equivalente) por meio do princípio variacional [42]. Nesse processo, o método variacional empregado é o método de *Ritz*. Tal método é aplicado com a limitação de que as funções

minimizadas são válidas apenas nos subdomínios da região discretizada, ou seja, nos elementos finitos; 2) o caminho do lado direito consiste na aplicação de métodos de resíduos [42], também válido apenas nos subdomínios. Para tal, é empregado o Método de *Galerkin*. Esse método transforma a equação diferencial que rege o problema numa equação integral, com o auxílio de uma função de ponderação (ou função de prova). Por fim, a variável física é discretizada no interior do elemento finito em termos das funções de interpolação e dos valores desconhecidos dessa variável nos nós desse elemento. A função de ponderação também é discretizada de modo semelhante, porém ela é representada apenas em termos das funções de interpolação (ou *Funções de Forma*), mostrando a influência dessas funções na construção do método.

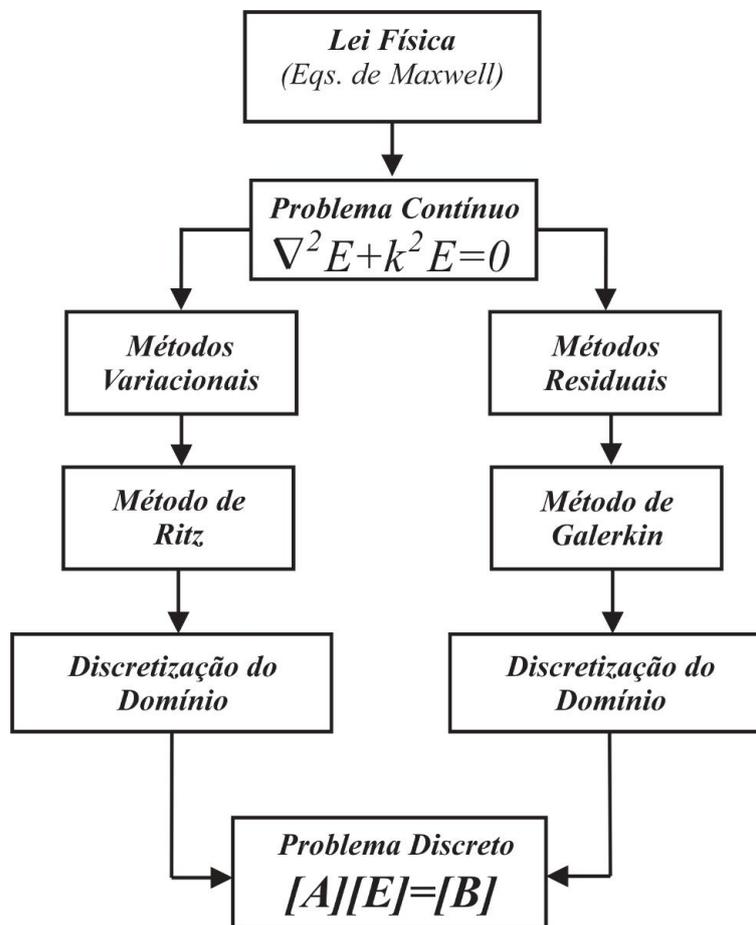


Figura 4.4: Diagrama de blocos para discretização de um problema contínuo por elementos finitos. Fonte: figura adaptada de [42].

A Equação (4.4) mostra, como exemplo, a discretização para o campo elétrico. Nela, o campo elétrico  $E$  é aproximado por  $E^h$ . A interpretação para  $E$  é que ele é obtido pela solução exata do problema, a qual está contida num espaço de dimensão infinita. Já  $E^h$  é obtido da solução aproximada do problema, que está condita num espaço de dimensão finita.

Na Equação (4.5), tem-se a discretização da função de ponderação [39]. A interpretação para  $w$  e  $w^h$  é análoga de  $E$  e  $E^h$ .

$$E \approx E^h = \sum_{i=1}^n \alpha_i E_i + g^h; \quad (4.4)$$

$$w \approx w^h = \sum_{i=1}^n \alpha_i b_i, \quad (4.5)$$

em que  $E_i$  é o campo desconhecido dos nós, o termo  $g^h$  corresponde à contribuição do conjunto de pontos em que o campo é conhecido no domínio,  $n$  é o número de nós de um dado elemento e  $b_i$  é uma constante arbitrária. Pode-se notar que, basicamente, as Equações (4.4) e (4.5) correspondem à condição  $\phi \rightarrow E^h$  e  $\phi \rightarrow w^h$ . Como dito anteriormente, essas funções podem assumir a forma de qualquer variável que se deseja obter para o elemento finito.

Como mostrado no diagrama da Figura 4.4, no final do processo é obtida uma equação matricial que representa o problema discretizado. As matrizes  $[A]_{N \times N}$  e  $[B]_{N \times 1}$  correspondem às contribuições de todos os elementos finitos utilizados para discretizar determinado domínio. Já a matriz  $[E]_{N \times 1}$ , mostrada no diagrama da Figura 4.4, corresponde à matriz das incógnitas  $E^h$ , em que  $N$  é o número total de nós.

A montagem (ou *assembling*) de todos os elementos na região da solução (passo 3) consiste em construir uma malha de elementos finitos nessa região e colocar a contribuição de todos esses elementos da malha numa matriz global  $[A]_{N \times N}$ . Por exemplo, a Figura 4.2 (b) mostra uma malha construída com elementos triangulares e quadriláteros. É importante destacar que a região (ou subdomínio) ocupada por cada elemento finito deve ser homogênea, sendo assim, mesmo que a região da solução (domínio em estudo) não seja homogênea, ela pode ser discretizada por elementos finitos suficientemente pequenos para que a região ocupada por cada um deles seja homogênea [36].

A resolução do sistema de equações obtido (passo 4) consiste em resolver um sistema de equações definido na forma matricial por [36]

$$[A][U] = [B], \quad (4.6)$$

em que  $[U]$  é a matriz coluna das incógnitas.

Na Seção 4.3 são mostrados detalhes da implementação feita no COMSOL e, com isso, são sinalizados os passos 1 a 4 destacados nesta seção, que o *software* executa. A seção seguinte irá destacar o tratamento teórico, por meio de equações para os campos elétrico e magnéticos, que dá embasamento para resolver problemas ligados ao Eletromagnetismo no COMSOL.

## 4.2 Módulo de Ondas Ópticas

O Módulo de Ondas Ópticas (*Wave Optics Module*, no COMSOL) permite simular a propagação de ondas eletromagnéticas com altas frequências em estruturas ópticas no domínio da frequência ou do tempo. São permitidas propagações em meios isotrópicos e anisotrópicos, dado que esse módulo dá acesso à forma tensorial para diversas propriedades físicas, por exemplo, a permissividade elétrica. Trata-se de um módulo apropriado para simulações que envolvem: guias de onda; cristais fotônicos; óptica não-linear; sensores ópticos; *lasers* [43].

### 4.2.1 Equação de Onda

A base teórica utilizada no Módulo de Ondas Ópticas consiste em formulações de equações diferenciais parciais para os campos elétricos e magnéticos que se propagam com altas frequências [43]. O tratamento matemático parte da *Lei de Ampère-Maxwell* e da *Lei de Faraday* [44], as quais estão destacadas nas Equações (4.7) e (4.8), respectivamente.

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (4.7)$$

e

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (4.8)$$

em que  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{H}$  correspondem aos vetores campo elétrico e campo magnético, respectivamente,  $\mathbf{J}$  é o vetor densidade de corrente,  $\mathbf{B}$  e  $\mathbf{D}$  correspondem aos respectivos vetores densidade de fluxo magnético e densidade de fluxo elétrico.

Fazendo o uso das relações constitutivas  $\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$  e  $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$ , em que  $\varepsilon$

é a permissividade elétrica,  $\mu$  é a permeabilidade magnética e  $\sigma$  é a condutividade elétrica, tem-se que

$$\nabla \times \mathbf{H} = \sigma \mathbf{E} + \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (4.9)$$

e

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}. \quad (4.10)$$

Assumindo os campos elétrico e magnético no regime permanente senoidal, tem-se que

$$\mathbf{E}(x, y, z, t) = \mathbf{E}(x, y, z)e^{j\omega t} \quad (4.11)$$

e

$$\mathbf{H}(x, y, z, t) = \mathbf{H}(x, y, z)e^{j\omega t}. \quad (4.12)$$

Combinando as Eqs. (4.11) e (4.12) com as Eqs. (4.9) e (4.10), obtém-se

$$\nabla \times (\mu^{-1} \nabla \times \mathbf{E}) - \omega^2 \varepsilon \mathbf{E} = \mathbf{0} \quad (4.13)$$

e

$$\nabla \times (\varepsilon^{-1} \nabla \times \mathbf{H}) - \omega^2 \mu \mathbf{H} = \mathbf{0}, \quad (4.14)$$

em que  $\mathbf{0}$  corresponde ao vetor nulo.

Em especial, a simulação proposta nesta dissertação resolve a Equação (4.13), dado que o COMSOL faz seu uso no estudo de ondas eletromagnéticas no domínio da frequência (*Electromagnetic Waves Frequency Domain Study*) [43]. Fazendo o uso de  $k_0 = \omega \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$ , em

que  $k_0$  é o número de onda no vácuo,  $\omega$  é a frequência de propagação,  $\epsilon_0$  é a permissividade elétrica no vácuo e  $\mu_0$  é a permeabilidade magnética no vácuo;  $\epsilon_r = \epsilon/\epsilon_0$ , com  $\epsilon_r$  definida como a permissividade elétrica relativa e  $\epsilon_r = n^2$  (para frequências ópticas), em que  $n$  é o índice de refração, tem-se que a Equação (4.13) é modificada para

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) - k_0^2 n^2 \mathbf{E} = \mathbf{0}. \quad (4.15)$$

Por meio de uma identidade vetorial para  $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E})$ , e, sabendo que  $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$  (na ausência de fontes e sorvedouros), a Equação (4.15) é a conhecida equação de Helmholtz, ou seja,

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = 0, \quad (4.16)$$

para  $k = k_0 n$ . Essa Equação 4.16 é tipicamente resolvida em problemas do Eletromagnetismo que envolvem a propagação de ondas eletromagnéticas nos mais diferentes meios. Por exemplo, no espaço livre ou em um guias de onda.

## 4.2.2 Estudo de Análise de Modo de Fronteira

Adicional ao estudo de frequência, destacado anteriormente na Seção 4.2.1, é necessário um estudo de análise de modo de fronteira (*Boundary Mode Analysis*). Esse estudo complementar permite que o COMSOL *Multiphysics* obtenha os modos que se propagam no guia de onda, dado que a constante de propagação  $\beta$  seja conhecida. O estudo é feito através da resolução da Equação (4.13) ou, alternativamente, pela Equação (4.16), com o campo elétrico definido na forma harmônica por [43]

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \Re\{\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r})e^{j\omega t - \alpha z}\}, \quad (4.17)$$

em que o parâmetro espacial  $\alpha$  é definido por  $\delta_z + j\beta$ , onde  $\delta_z$  corresponde ao amortecimento na direção de propagação  $z$ .

Os modos de propagação utilizados nas simulações propostas neste trabalho foram:

- **Modo TE –Transverso-Elétrico:** nesse modo a componente  $E_z$  do campo elétrico na

direção de propagação é nula, ou seja,  $E_z = 0$ , mas  $H_z \neq 0$  [45];

- **Modo TM –Transverso-Magnético:** a componente  $H_z$  do campo magnético na direção de propagação é nula,  $H_z = 0$ , com  $E_z \neq 0$  [45];
- **Modo Híbrido:** comuns em guias de onda planares e fibra óptica, os modos híbridos consistem na coexistência dos modos TE e TM [45].

Para fazer uso dos modos de propagação citados, é necessário definir no COMSOL, quais componentes do vetor campo elétrico devem ser revolvidas. Na aba *Electromagnetic Waves, Frequency Domain (ewfd)* do COMSOL, é necessário escolher uma das três opções listadas a seguir:

- *out-of-plane:* campo elétrico fora do plano de modelagem, corresponde ao modo TE [43];
- *in-plane:* campo elétrico no plano de modelagem, corresponde ao modo TM [43];
- *three-component:* campo elétrico pode ter três componentes, corresponde ao modo híbrido [43].

Neste trabalho, o uso desses modos foi útil para investigar a influência dos modos de propagação na modelagem dos resultados experimentais. No Capítulo 5, são abordados os resultados da simulação, que fez uso de modos híbridos, onde é apresentada sua concordância com os dados experimentais.

### 4.2.3 Excitação de Ondas Eletromagnéticas

Para que um modo de propagação seja introduzido no guia de onda, no caso desta dissertação, na fibra óptica, é necessário a excitação da onda eletromagnética na entrada do guia. Ou seja, é necessário entrar com um sinal óptico na entrada da fibra óptica. Para tal, são introduzidas entidades do COMSOL *Multiphysics* denominadas de portas (*ports*). O COMSOL disponibiliza diferentes tipos de portas com suas respectivas funções, sendo que sua disponibilidade depende da dimensão do modelo em estudo, 2D ou 3D. A seguir são listados os diferentes tipos de portas:

- **Numérica:** disponível para simulações em 2D e 3D, a porta numérica é a maneira mais genérica de introduzir um modo de propagação numa fibra óptica. Trata-se de selecionar apenas a face de entrada do sinal na fibra e definir a potência de entrada do sinal óptico  $P_{in}$  (em W no SI). Isso é suficiente para que o COMSOL obtenha, através do estudo de análise de modo de fronteira (*Boundary Mode Analysis*), o modo que se propaga na configuração do guia de onda definido na geometria do modelo. Mesmo quando se trabalha com geometrias em 2D (caso do modelo utilizado nesta dissertação), essa porta permite que o COMSOL resolva como se o guia de onda fosse cilíndrico (caso da fibra óptica) [43]. Por fim, essa porta ainda tem suporte ao parâmetro  $S$ , que consiste num parâmetro de espalhamento e que o COMSOL faz uso para efetuar os cálculos de reflectância e transmitância (detalhes desse parâmetro são encontrados na Seção 4.2.4);
- **Retangular:** numa configuração em 3D, essa porta é capaz de excitar um dos modos transversos, como por exemplo,  $TE_{10}$  ou  $TM_{11}$ . Ao contrário da porta numérica, é preciso especificar o modo a ser propagado, por isso estão explicitados os coeficientes dos modos  $TE$  e  $TM$ . Já para um modelo em 2D, essa porta ainda é capaz de excitar além desses modos, o modo  $TEM$  (Transverso-Eletromagnético). Essa porta é usual para simulação de guias de onda retangulares [43];
- **Periódica:** esse tipo de porta está disponível para modelos em 2D e 3D. Ela é usada para o estudo da incidência de ondas eletromagnéticas em interfaces e para o estudo da difração dessas ondas. É necessário definir o módulo do campo elétrico ou campo magnético incidente e o ângulo de incidência [43];
- **Coaxial:** disponível apenas para configurações em 3D, essa porta é utilizada no estudo das linhas de transmissão. O único modo de propagação disponível para essa porta é o modo  $TEM$  [43]. É vantajoso, já que esse modo se propaga na linha de transmissão independentemente da frequência [45];
- **Circular:** disponível também apenas para simulações em 3D, a porta circular é utilizada para investigar a polarização da onda que se propaga num guia circular. Ou seja, é possível definir uma polarização de entrada e verificar a polarização da saída do guia. Assim como definir uma polarização de entrada e outra de saída, e investigar a propagação da onda ao longo do guia [43].

É importante conhecer a utilidade dos diferentes tipos de portas para que possa ser feita a escolha adequada para o problema que se deseja investigar. Nesta dissertação é utilizada a porta numérica. Isso permitiu a construção de um modelo que simule uma condição mais próxima do objeto real que se deseja estudar. Na situação real do sensor, o sinal óptico propagado na fibra vem do laser no qual é configurado apenas o comprimento de onda. Nesse caso, a porta numérica está fazendo o papel desse laser. Em relação ao comprimento de onda, ele não é definido nas configurações da porta numérica, pois ele consiste num parâmetro global, no qual é definido no início da construção do modelo.

#### 4.2.4 Cálculo da Reflectância

Para efetuar os cálculos para Reflectância e Transmitância, o COMSOL faz uso de um parâmetro de espalhamento denominado de parâmetro  $S$  ( $S$ -parameter). Sua origem é na Teoria de Linhas de Transmissão, mas o COMSOL generalizou para outros problemas do eletromagnetismo que envolva reflexão e transmissão de ondas eletromagnéticas com altas ou baixas frequências [47].

Como já foi dito na Seção 4.2.3, o uso de uma porta também é necessário para dar suporte ao parâmetro  $S$ . O diagrama da Figura 4.5 mostra o uso das portas 1 e 2, e suas relações com o parâmetro  $S$ . A porta 1, estando com *status On*, tem a função de emissor e receptor do sinal óptico, ou seja, ela emite o sinal no guia de onda e mede o sinal refletido. Sendo assim, ela dá suporte ao parâmetro  $S_{11}$ , que mede o quanto de potência emitida pela porta 1 é refletida para essa mesma porta 1. Já a porta 2, estando com *status Off*, tem apenas a função de receber o sinal óptico emitido pela porta 1. Desse modo, ela dá suporte ao parâmetro  $S_{21}$ , que tem a função de medir o quanto de potência emitida pela porta 1 é transmitida para a porta 2.

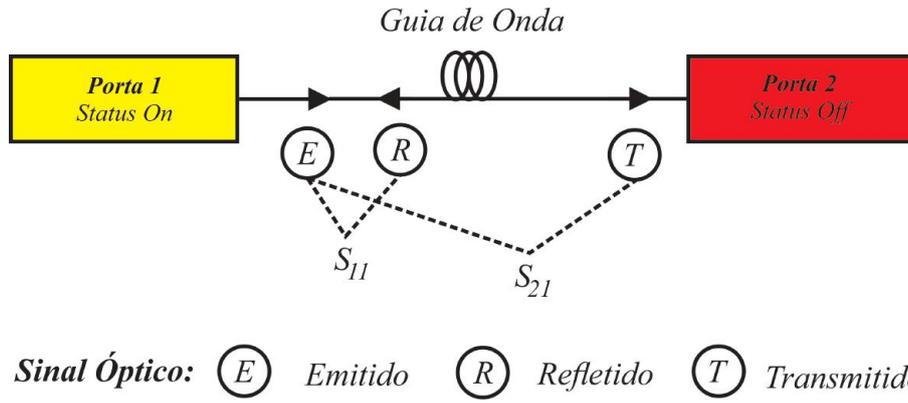


Figura 4.5: Relação entre as portas 1 e 2 e o parâmetro  $S$  no guia de onda. Fonte: figura elaborada pelo autor.

Os parâmetros  $S_{11}$  e  $S_{21}$  são elementos da matriz de espalhamento  $\tilde{S}_{2 \times 2}$  definida por [47]

$$\tilde{S} = \begin{vmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{vmatrix}, \quad (4.18)$$

em que essa matriz é de ordem dois por serem usadas duas portas no modelo [47]. Para a modelagem proposta nesta dissertação, os elementos  $S_{12}$  e  $S_{22}$ , da segunda coluna, são nulos, pois estão relacionados ao *status Off* da porta 2, que não tem a função de emissor. Desse modo, a matriz  $\tilde{S}$  é dada por

$$\tilde{S} = \begin{vmatrix} S_{11} & 0 \\ S_{21} & 0 \end{vmatrix}, \quad (4.19)$$

em que os parâmetros  $S_{11}$  e  $S_{21}$  estão definidos nas Equações (4.20) e (4.21), respectivamente [47].

$$S_{11} = \frac{\int_{porta\ 1} ((\mathbf{E}_c - \mathbf{E}_1) \cdot \mathbf{E}_1^*) dA_1}{\int_{porta\ 1} (\mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{E}_1^*) dA_1} \quad (4.20)$$

$$S_{21} = \frac{\int_{\text{porta 2}} (\mathbf{E}_c \cdot \mathbf{E}_2^*) dA_2}{\int_{\text{porta 2}} (\mathbf{E}_2 \cdot \mathbf{E}_2^*) dA_2} \quad (4.21)$$

Definem-se o parâmetro  $S_{11}$ , como o coeficiente de reflexão, e o parâmetros  $S_{21}$ , como o coeficiente de transmissão [47]. O campo elétrico  $\mathbf{E}_c$  consiste no campo elétrico emitido pela porta 1 somado ao campo elétrico refletido para essa porta.  $\mathbf{E}_1$  é o campo elétrico medido pela porta 1 e  $\mathbf{E}_2$  é o campo elétrico medido pela porta 2. Em termos da matriz de espalhamento  $\tilde{S}$ , esses campos  $\mathbf{E}_1$  e  $\mathbf{E}_2$  são definidos por [47]

$$\begin{bmatrix} \mathbf{E}_1 \\ \mathbf{E}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & 0 \\ S_{21} & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \mathbf{E}_c \\ \mathbf{E}_c \end{bmatrix}. \quad (4.22)$$

No COMSOL, tem-se que a Reflectância  $R$  e Transmitância  $T$  são definidas por [43]

$$R = |S_{11}|^2 \quad (4.23)$$

e

$$T = |S_{21}|^2 \quad (4.24)$$

Além disso, é importante destacar que o fluxo de potência média, medido nas portas 1 e 2, está relacionado aos campos  $\mathbf{E}_1$  e  $\mathbf{E}_2$ , pelo vetor de *Poynting* [47]

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \Re(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*). \quad (4.25)$$

Usando a Equação (4.25), tem-se que o fluxo de potência média medido na porta 1 é descrito pela componente normal  $\mathbf{n}$  do vetor de *Poynting*

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{S}_1 = \mathbf{n} \cdot \frac{1}{2} \Re(\mathbf{E}_1 \times \mathbf{H}_1^*). \quad (4.26)$$

De modo análogo, o fluxo de potência média medido na porta 2 é descrito por

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{S}_2 = \mathbf{n} \cdot \frac{1}{2} \Re(\mathbf{E}_2 \times \mathbf{H}_2^*). \quad (4.27)$$

Em resumo, esta seção aborda os aspectos conceituais necessários à modelagem de problemas do Eletromagnetismo pelo COMSOL. Na Seção 4.3, é desenvolvida uma modelagem do elemento transdutor do sensor óptico de corrosão usando o COMSOL.

### 4.3 Modelagem do Elemento Transdutor

O elemento transdutor do sensor de corrosão à base de fibra óptica, proposto inicialmente por Martins-Filho e Colaboradores [4], consiste de um filme metálico de alumínio depositado sobre a face clivada de uma fibra óptica monomodo. A modelagem desse elemento transdutor, proposta nesta dissertação, investiga a dinâmica de seu processo corrosivo por meio da análise da rugosidade. Essa dinâmica de corrosão é elaborada numa geometria 2D construída no COMSOL. Uma modelagem em 3D não seria conveniente, visto que para uma simulação seria necessário uma memória RAM de no mínimo 64 GB. Além disso, não há perda de generalidade na simulação em 2D [48].

A Figura 4.6 apresenta o perfil 2D do elemento transdutor. A geometria proposta consiste de uma fibra óptica, com um filme fino metálico depositado em sua extremidade direita, seguido do meio externo. A janela, à direita da Figura 4.6, mostra uma ampliação da região onde é encontrado o filme fino, para que possa ser visualizada a rugosidade gerada na superfície do metal definida pela função rugosidade, discutida no Capítulo 3. Nessa mesma janela está destacada a profundidade da superfície rugosa  $A$  e a posição dessa superfície  $A_0$ . Ainda na Figura 4.6, é destacado o posicionamento das portas numéricas 1 e 2, utilizadas na modelagem. Em amarelo, a porta numérica 1 está com *status On*, significa que essa porta está enviando um sinal óptico na fibra óptica. Já em vermelho, a porta numérica 2 está com *status Off*, a função dessa porta é de apenas medir o sinal óptico enviado da porta 1.

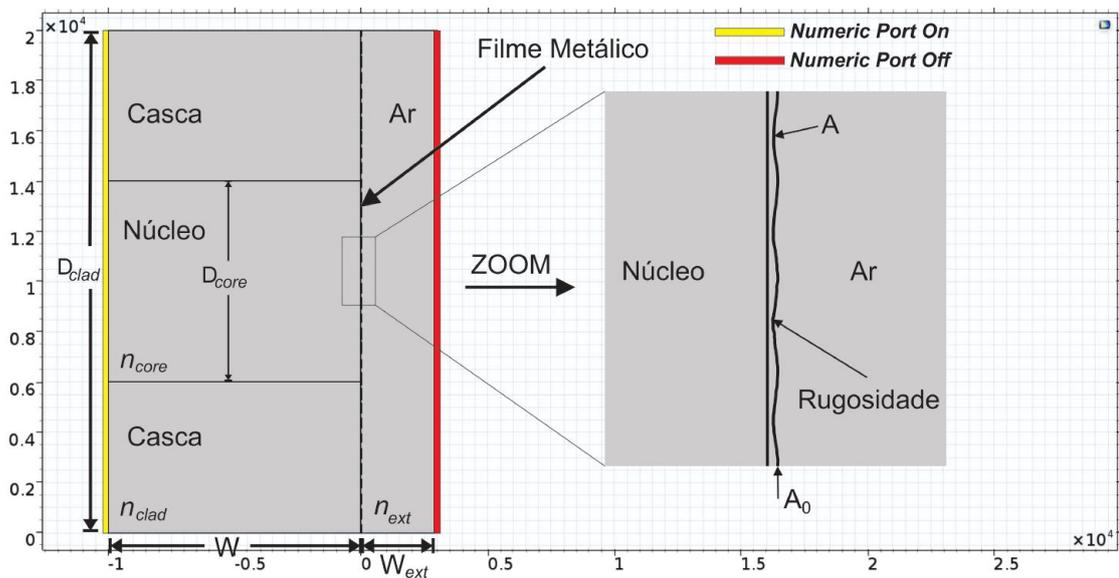


Figura 4.6: Modelagem computacional em 2D do transdutor de um sensor à fibra óptica de corrosão usando o COMSOL. Fonte: captura de tela do COMSOL *Multiphysics*© com adaptações feitas pelo autor.

Os parâmetros  $W$ ,  $W_{ext}$ ,  $D_{core}$ ,  $D_{clad}$ ,  $n_{core}$ ,  $n_{clad}$  e  $n_{ext}$ , ilustrados na Figura 4.6, são definidos como o comprimento da fibra, a espessura do meio externo, o diâmetro do núcleo da fibra, o diâmetro da casca, o índice de refração do núcleo, o índice de refração da casca e o índice de refração do meio externo, respectivamente. Na Figura 4.6 está apresentado o ar como meio externo, mas também foram utilizados a água e o álcool isopropílico, uma vez que os dados experimentais disponíveis em Nascimento [9] foram obtidos para esses três meios externos.

Os valores para os parâmetros dimensionais destacados no modelo da Figura 4.6 são:  $W = 20 \mu\text{m}$ ,  $W_{ext} = 3 \mu\text{m}$ ,  $D_{core} = 8 \mu\text{m}$  e  $D_{clad} = 20 \mu\text{m}$ . Destacamos que o uso, sem perda de generalidade, de  $D_{clad} = 20 \mu\text{m}$  é apenas para reduzir o recurso computacional exigido pelo COMSOL, pois é reduzido o número de elementos finitos usados para discretizar a geometria do modelo. Como a maior parte da onda eletromagnética é propagada no núcleo, sendo propagada na casca apenas uma onda evanescente, essa não deve ter influência nas medidas de reflectância, pois a maior parte da luz refletida é devido a incidência da onda que se propaga no núcleo com o filme metálico. Além disso, a onda evanescente penetra aproximadamente  $0,73 \mu\text{m}$  na casca da fibra óptica [49] para o comprimento de onda de  $1550 \text{ nm}$ . De modo que o diâmetro utilizado na simulação para casca da fibra óptica é suficiente.

O fato de ser usado  $W = 20 \mu\text{m}$  para o comprimento da fibra óptica é porque o foco da modelagem está no elemento transdutor, não sendo necessário utilizar o comprimento real usado em Nascimento [9]. Já para o valor de  $W_{ext} = 3 \mu\text{m}$ , ele foi otimizado para

que o COMSOL, no cálculo de suas soluções, não encontrasse algum tipo de confronto nas condições de contorno estabelecidas, acarretando em alguma solução não física. Isso poderia acontecer se fosse definido um valor para  $W_{ext}$  da mesma ordem da espessura do filme fino.

O índice de refração do núcleo e da casca da fibra óptica são parâmetros ópticos que dependem do comprimento de onda [50]. Na modelagem proposta nesta Dissertação foram utilizados três comprimentos de onda,  $\lambda_1 = 1550$  nm,  $\lambda_2 = 1320$  nm e  $\lambda_3 = 980$  nm, uma vez que foram os valores utilizados por Nascimento [9]. Para  $\lambda_1$ , foram utilizados os valores para o índice de refração do núcleo e da casca relativos à fibra óptica monomodo convencional,  $n_{core} = 1,4457$  e  $n_{clad} = 1,4378$  [51]. Para os demais comprimentos de onda, o índice de refração é obtido a partir da *Série de Sellmeier* [52]

$$n(\lambda)^2 - 1 = \sum_{i=1}^3 \frac{A_i \lambda^2}{\lambda^2 - B_i^2}, \quad (4.28)$$

em que os coeficientes  $A_i$  e  $B_i$  são denominados de *Coefficientes de Sellmeier* e variam de acordo com o tipo de material dielétrico. Para sílica pura, usada no núcleo, e para sílica dopada com flúor, usada na casca da fibra óptica [51], os coeficientes estão destacados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Valores numéricos para os *Coefficientes de Sellmeier*.

Coeficiente	Sílica Pura	Sílica Dopada com Flúor (concentração molar de 1%)
$A_1$	0,6968	0,6911
$B_1$	0,06907	0,06840
$A_2$	0,4082	0,4079
$B_2$	0,1157	0,1162
$A_3$	0,8908	0,8975
$B_3$	9,901	9,896

O índice de refração do Alumínio é da forma  $n_{Al} = n - j\kappa$ , em que  $n$  é a parte real do índice e  $\kappa$  é o coeficiente de extinção (parte imaginária do índice de refração). Para os comprimentos de onda destacados anteriormente, os valores das partes real e imaginária do índice de refração desse metal estão listados na Tabela 4.2. Também estão listados na Tabela 4.2 os índices de refração para os meios externos utilizados na modelagem (ar, água e álcool isopropílico).

Tabela 4.2: Parâmetros Ópticos [53], [54], [55] e [56].

<i>Meios</i>	$\lambda$ (nm)	$n$	$\kappa$
Alumínio	980	1,5784	9,0372
	1320	1,3291	12,803
	1550	1,5137	15,234
Ar	980	1,00027423	0
	1320	1,0002735	0
	1550	1,00027326	0
Água	980	1,327	$3,362 \times 10^{-6}$
	1320	1,32235	$8,6756 \times 10^{-5}$
	1550	1,318	$9,8363 \times 10^{-5}$
Álcool Isopropílico	980	1,365093	0
	1320	1,36604	0
	1550	1,362306	0

Uma vez definida a geometria para o elemento transdutor, é necessário definir uma malha apropriada para discretizar o domínio definido na Figura 4.6. O COMSOL disponibiliza os tipos de elementos finitos destacados na Figura 4.1. Como a geometria da Figura 4.6 possui uma rugosidade na superfície do filme fino, devido ao processo de corrosão, é feita a escolha de elementos finitos triangulares, por que eles se adequam melhor à geometrias complexas [41]. Problemas que envolvem a propagação de ondas eletromagnéticas com altas frequências requerem que o tamanho dos elementos finitos sejam da ordem de  $\lambda/20$  [43], em que  $\lambda$  é o comprimento de onda.

A Figura 4.7 ilustra os passos 1 e 3 do Método dos Elementos Finitos, destacados na Seção 4.1, os quais estão relacionados com a discretização da região da solução (geometria da Figura 4.6) e a montagem dos elementos finitos nessa região (construção da malha). Pode-se observar que, na região da rugosidade, há uma maior densidade de elementos finitos. Essa determinação do quantitativo de elementos que constitui a malha é otimizada pelo próprio COMSOL, para que regiões com dimensões menores e que possuam geometria complexa possam ser resolvidas como a melhor aproximação possível. Por outro lado, um maior recurso computacional é exigido, dado que a região da solução está sendo discretizada por um número maior de elementos finitos.

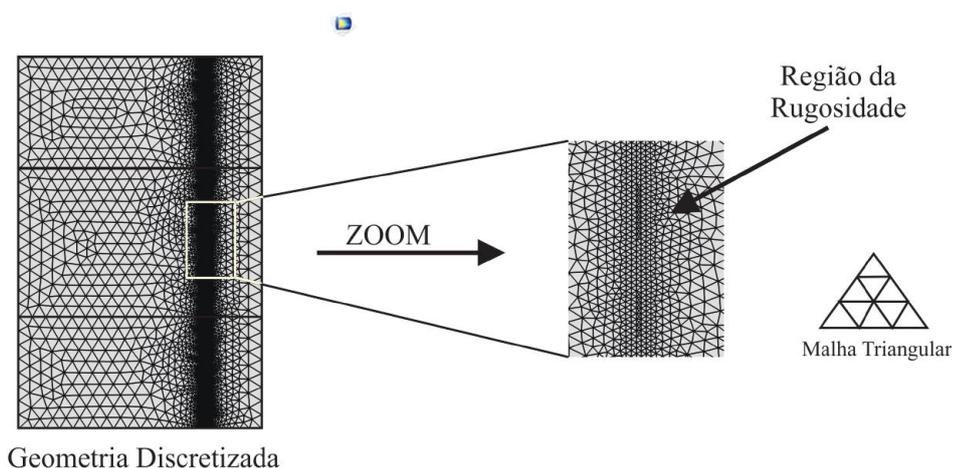


Figura 4.7: Malha triangular aplicada a geometria do modelo, com 123640 elementos finitos no domínio e 1842 elementos de fronteira. Fonte: captura de tela do COMSOL *Multiphysics*® com adaptações do autor.

Os passos 2 e 4 do Método dos Elementos Finitos, relacionados às equações que governam o elemento triangular e a solução do sistema de equações obtido no final da construção do modelo, são executados implicitamente pelo COMSOL. Os resultados da modelagem construída neste capítulo encontram-se no Capítulo 5 desta dissertação.

# Capítulo 5

## Resultados da Modelagem Computacional da Dinâmica de Corrosão do Elemento Transdutor Metálico

Este capítulo apresenta os resultados obtidos a partir da modelagem computacional para a dinâmica de corrosão do elemento transdutor metálico do sensor óptico. Na Seção 5.1, é feita a validação do método numérico usado pelo COMSOL a partir do comparativo entre os resultados do modelo analítico com os resultados obtidos por esse *software*. Na Seção 5.2, é mostrado o ajuste para os parâmetros da função rugosidade através de dados experimentais. Já na Seção 5.3, é apresentada a correção na função rugosidade, para que todos os resultados obtidos na modelagem aproximem-se dos resultados experimentais mostrados no Capítulo 2. Por fim, na Seção 5.4, é explorada a ocorrência do efeito Ressonância de Plasmons de Superfície.

### 5.1 Comparativo do Método Numérico com Método Analítico

Numa tentativa de verificar a consistência nos resultados obtidos pela modelagem feita no COMSOL, foi elaborada uma simulação computacional para fazer um comparativo entre o modelo analítico para reflectância, obtido a partir das equações de *Fresnel*, com os resultados obtidos pelo método numérico. O modelo analítico para reflectância em função da espessura do metal, proposto por Martins-Filho, J. F. e Fontana, E. [12], considera que a corrosão do filme metálico ocorre de maneira uniforme e laminar e utiliza as equações de *Fresnel*. Uma simulação de uma corrosão laminar foi elaborada no COMSOL, sob as

mesmas condições do modelo analítico, com o adicional de que esse *software* leva em consideração a geometria do problema, ao contrário do modelo analítico, que resolve apenas o problema de interfaces.

A Equação (5.1) é a reflectância em função da espessura do filme metálico para interface (fibra óptica/filme metálico/meio externo), para o caso de uma incidência normal, obtida a partir de um modelo analítico [12],

$$R = \left| \frac{r_{12} + r_{23} e^{-j2k_0 \sqrt{\varepsilon_2} d}}{1 + r_{12} r_{23} e^{-j2k_0 \sqrt{\varepsilon_2} d}} \right|^2 \quad (5.1)$$

com

$$r_{i,i+1} = \frac{\sqrt{\varepsilon_{i+1}} - \sqrt{\varepsilon_i}}{\sqrt{\varepsilon_{i+1}} + \sqrt{\varepsilon_i}} \quad (5.2)$$

em que  $i$  representa o número de interfaces ( $i = 2$  para o problema em questão),  $r_{12}$  e  $r_{23}$  são os coeficiente de reflexão, para incidência normal, nas interfaces simples (fibra óptica/filme metálico) e (filme metálico/meio externo), respectivamente,  $\varepsilon_i$  é a permissividade elétrica relativa dos meios em questão e  $d$  é a espessura do filme metálico. No COMSOL, a reflectância é medida a partir do parâmetro de espalhamento  $S_{11}$  e definida na Equação (4.23) [43].

A Figura 5.1 mostra a curva (em vermelho) da reflectância obtida pela implementação da Equação (5.1) em um programa em Matlab©, no qual os cálculos são encontrados no Apêndice B, e os pontos (em preto) são a reflectância obtida na simulação do COMSOL, medida através da Equação (4.23). O gráfico da Figura 5.1 corresponde à corrosão laminar de um filme metálico de alumínio com 40 nm de espessura, sobre a face clivada de uma fibra óptica monomodo, com o ar no meio externo, ou seja, o objetivo é calcular a reflectância para configuração sílica/alumínio/ar.

Deve-se notar no gráfico da Figura 5.1 que os valores da reflectância medida pelo COMSOL coincidem com os valores calculados a partir do modelo analítico. Esse resultado fornece confiabilidade no modelo implementado no COMSOL e também nas soluções obtidas pelo método numérico usado por esse *software*. Na Figura 5.1, o ponto p1 destaca o valor da reflectância medida para uma espessura de 40 nm do filme metálico. Já o ponto p2 corresponde à reflectância medida para uma espessura de apenas 2 nm do filme metálico.

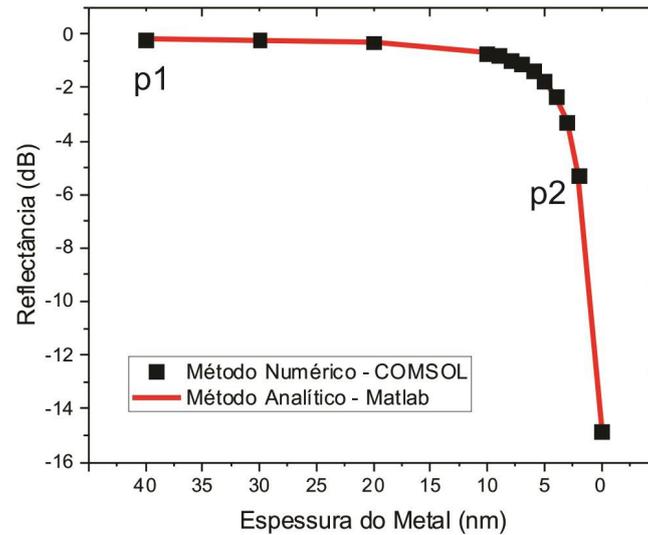


Figura 5.1: Medida da reflectância em função da espessura do metal obtida pelo método analítico e pelo método numérico.

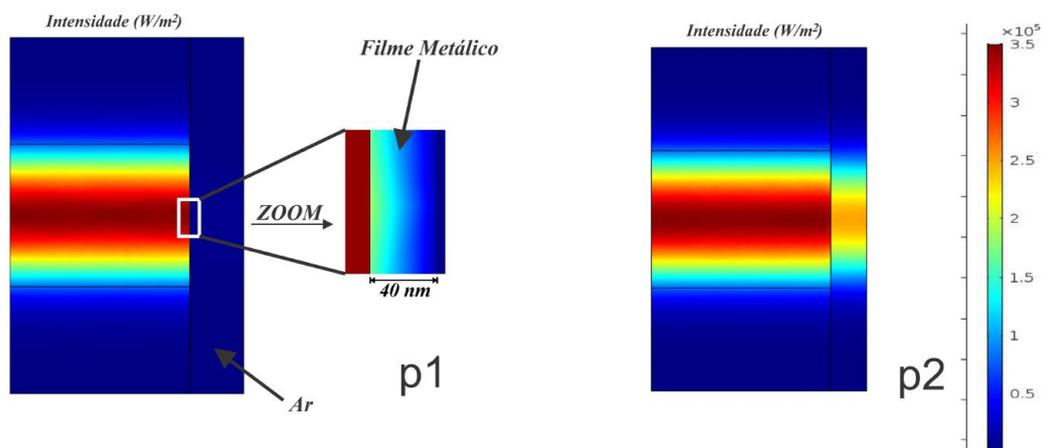


Figura 5.2: Resultado da simulação com filme metálico de (a) 40 nm de espessura; (b) 2 nm de espessura.

A Figura 5.2 contém duas capturas de tela da simulação feita no COMSOL. Ela consiste da mesma modelagem proposta na Seção 4.3 e ilustrada na Figura 4.6, com a simplificação de que o filme metálico possui superfície laminar. Na Figura 5.2(a) pode-se observar que nenhuma potência está sendo transmitida para o meio externo, isso porque o filme metálico tem 40 nm de espessura, de modo que maior parte da intensidade da onda eletromagnética incidente no metal é refletida e a outra parte que é transmitida é completamente absorvida por ele, como mostra a janela na Figura 5.2(a). Ainda na Figura 5.2(a), é destacado o ponto p1 que também aparece no gráfico da Figura 5.1. Isso é para relacionar o valor da reflectância mostrado no gráfico com a ilustração da intensidade da onda refletida na fibra

óptica.

Na Figura 5.2(b), pode-se observar que parte da onda eletromagnética incidente no metal está sendo transmitida para o meio externo. Nessa situação, o filme metálico possui apenas 2 nm de espessura, permitindo que a potência da onda incidente não seja completamente absorvida no meio metálico (absorvedor). Na Figura 5.2(b) é mostrado o ponto p2, que também aparece no gráfico da Figura 5.1, e relaciona a reflectância medida para uma espessura de 2 nm com a distribuição de potência observada na configuração, que passa a apresentar uma potência transmitida, ao contrário do que é observado na Figura 5.2(a), e, conseqüentemente, uma diminuição na potência refletida, que acarreta no decréscimo da reflectância.

A equivalência entre o resultado da modelagem feita no COMSOL com o resultado obtido pelo modelo analítico, além de confirmar a consistência do modelo usado nesta Dissertação, também reforça a simplificação feita na Seção 4.3, de que o fato de simular apenas parte da casca da fibra óptica não tem influência nos resultados. Pois o modelo analítico não considera a geometria do problema, de modo que a reflectância medida depende apenas da interface núcleo/metal/meio externo.

## 5.2 Ajuste das Funções $A(d)$ e $A_0(d)$ a partir dos Dados Experimentais

A função *Rugosidade* descrita pela Equação (3.7) depende de parâmetros ajustáveis à dinâmica do processo corrosivo. Esses parâmetros são  $A(d)$  e  $A_0(d)$ , e devem assumir os valores que melhor ajuste o resultado da medição da reflectância obtida pelo COMSOL com a reflectância mensurada experimentalmente por Nascimento, J. F. [9]. Esse ajuste é feito de acordo com os passos mostrados no fluxograma da Figura 5.3.

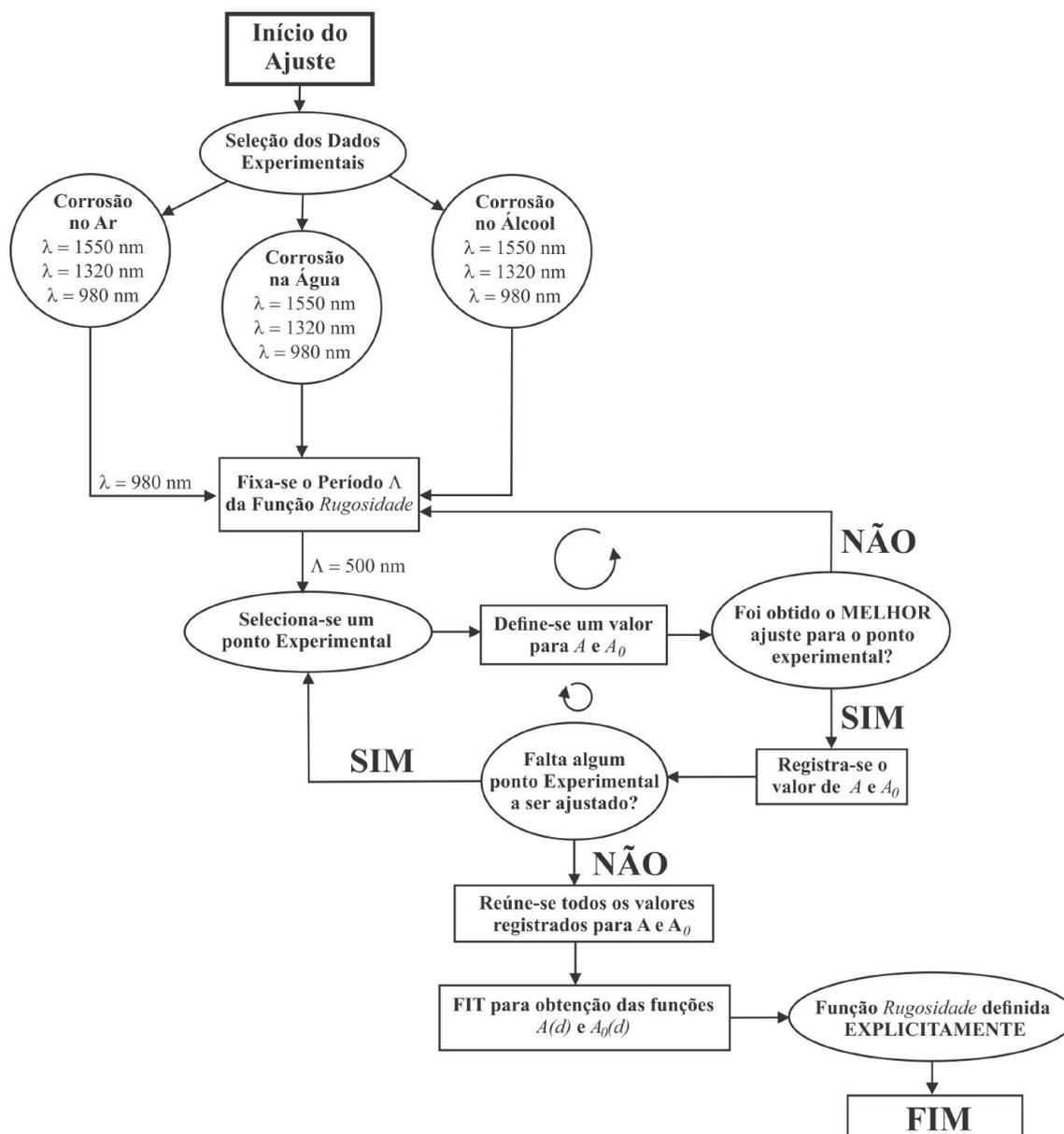


Figura 5.3: Fluxograma para representação dos passos necessários à obtenção das funções  $A(d)$  e  $A_0(d)$ .

Como pode ser observado na Figura 5.3, inicialmente, é feita a escolha dos dados experimentais a serem ajustados. Nesta Dissertação, são escolhidos os dados da curva de reflectância em função da espessura do metal, para corrosão no ar, para o comprimento de onda de 980 nm. Com isso, fixa-se um valor para o período  $\Lambda$  da função *Rugosidade*. Nesta Dissertação, é utilizado  $\Lambda = 500$  nm, já que é o valor que melhor ajusta os resultados do COMSOL com os dados experimentais. Para um dado ponto experimental, define-se o valor de  $A$  e  $A_0$  de tal forma que a reflectância medida na simulação melhor se aproxime desse ponto experimental. Por exemplo, para  $d = 40$  nm foi utilizado  $A = 2$  nm e  $A_0 = 40$  nm. Deve-se observar no fluxograma da Figura 5.3, que um processo cíclico é estabelecido en-

quanto não for obtido o melhor ajuste para cada ponto experimental. Ou seja, se o valor da reflectância medido pelo COMSOL não estiver em concordância com o valor medido experimentalmente, deve-se alterar o valor do período  $\Lambda$  e repetir o procedimento. Outro processo cíclico é observado no ajuste de todos os pontos experimentais. Ou seja, o procedimento deve ser repetido até que todos os pontos da curva experimental tenham sido ajustados. Uma vez ajusta a curva do COMSOL com a curva experimental, os valores utilizados para  $A$  e  $A_0$  nesse ajuste devem ser fitados, para que as funções  $A(d)$  e  $A_0(d)$  sejam definidas, e por fim, a função *Rugosidade* fica definida explicitamente.

A Figura 5.4 mostra o perfil das funções  $A(d)$  e  $A_0(d)$  obtidas após o ajuste da curva do COMSOL com a curva experimental da reflectância. Na Figura 5.4(a), é mostrada a variação da amplitude da função *Rugosidade* ao longo da corrosão de um filme metálico de alumínio com 40 nm de espessura. A função  $A(d)$  é obtida após uma interpolação polinomial de quarta ordem e mostrada na Equação (5.3). Já na Figura 5.4(b), é mostrada a variação do *off set* ao longo da corrosão e a interpolação linear que deu origem à função  $A_0(d)$ , mostrada na Equação (5.4).

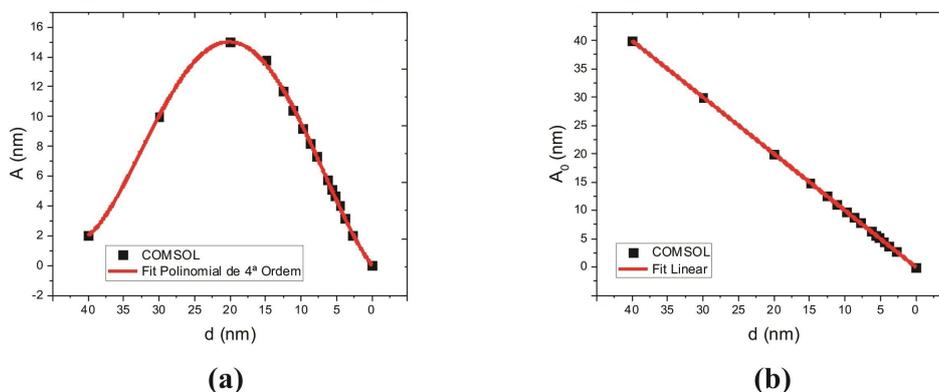


Figura 5.4: (a) Amplitude da função *Rugosidade*; (b) *off set* da função *Rugosidade*.

$$A(d) = 0,038 + 0,68d + 0,078d^2 - 0,0046d^3 + 0,00061d^4; \quad (5.3)$$

$$A_0(d) = d. \quad (5.4)$$

Fazendo uso das Equações (5.3) e (5.4), e  $\Lambda = 500$  nm, tem-se que a função *Rugosidade*, definida na Equação (3.7), fica definida explicitamente através da Equação (5.5).

$$R(y, d) = \left(0,038 + 0,68d + 0,078d^2 - 0,0046d^3 + 0,00061d^4\right) \sin\left(\frac{2\pi}{500}y\right) + d \quad (5.5)$$

A Figura 5.5 ilustra a curva (em vermelho) para a reflectância obtida pelo COMSOL e a curva (em preto) para reflectância obtida a partir os dados experimentais de Nascimento, J. F. [9]. Já curva (em azul) é a reflectância obtida a partir do modelo analítico destacado na Seção 5.1. Elas correspondem à corrosão no ar de um filme metálico de alumínio de 40 nm de espessura, usando um comprimento de onda de 980 nm para o sinal óptico propagado na fibra óptica. Na Figura 5.5, estão destacados os pontos  $P_1$ ,  $P_2$ ,  $P_V$  e  $P_3$ . Eles correspondem à pontos importantes, em que a medida da reflectância é influenciada pela rugosidade de superfície. Nota-se que a partir do ponto  $P_1$ , a reflectância medida pelo COMSOL difere da obtida pelo modelo analítico que considera uma corrosão uniforme e laminar.

Como pode ser observado na Figura 5.5, a curva do COMSOL apresenta concordância com a curva experimental, ao contrário da curva obtida pelo modelo analítico. Isso significa que a modelagem para dinâmica do processo corrosivo por meio da função *Rugosidade* é uma boa opção para explicar o comportamento dos dados experimentais obtidos por Nascimento, J. F. [9]. Com isso, é possível identificar a influência da rugosidade de superfície gerada no elemento transdutor do sensor óptico mostrado no Capítulo 2 desta Dissertação.

Ainda sobre a Figura 5.5, é notado que para valores relativamente altos da espessura do metal, de 40 a 20 nm, os resultados para a reflectância obtidos dos modelos utilizados, COMSOL e analítico, convergem para o mesmo valor medido experimentalmente. Isso ocorre pelo fato de se ter pouca interação, praticamente desprezível, entre o sinal óptico e o meio externo, uma vez que praticamente toda a luz incidente está sendo refletida na interface fibra óptica/filme metálico. Isso faz com que a leitura do sinal óptico não permita fazer distinção se a corrosão está se dando de forma uniforme e laminar ou gerando rugosidade.

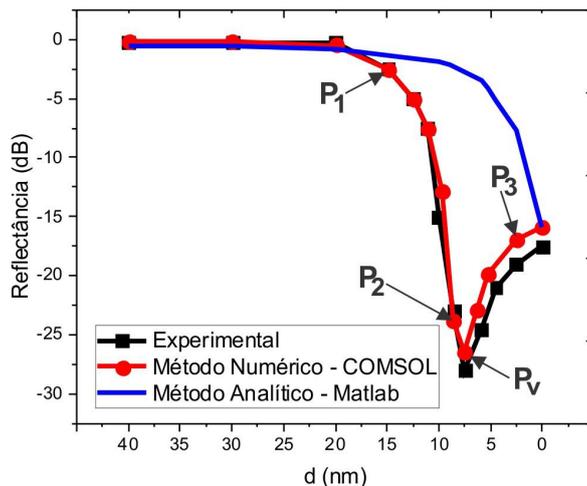


Figura 5.5: Reflectância em função da espessura do metal obtida por método numérico no COMSOL, por método analítico no Matlab e por experimento.

Sobre os valores para os parâmetros da função *Rugosidade*, amplitude  $A$ , *offset*  $A_0$  e período  $\Lambda$ , é importante destacar que eles foram obtidos após várias tentativas de ajustar os resultados do COMSOL com os resultados experimentais. Dos parâmetros da função *Rugosidade*, o mais influente no ajuste é o período  $\Lambda$ , pois foi observado nas simulações computacionais que o vale da curva de reflectância ocorre apenas para uma dada faixa de variação desse parâmetro, definida no intervalo de 300 à 700 nm. Fazendo uma varredura manual nesse intervalo, foi obtido  $\Lambda = 500$  nm como o melhor valor para o ajuste. Nessa varredura foi observado que  $\Lambda$  tem maior influência na profundidade do vale (eixo da reflectância em dB) do que na posição do vale (eixo da espessura do metal em nm). Deve-se enfatizar, como já dito anteriormente, que uma vez escolhido o melhor valor para o período  $\Lambda$ , deve-se fixá-lo e ajustar os demais parâmetros  $A$  e  $A_0$ .

A Figura 5.6(a) mostra a variação da profundidade do vale da curva de reflectância, obtida para um sinal óptico com comprimento de onda de 980 nm para corrosão no ar, em função do período  $\Lambda$ . Já a Figura 5.6(b) mostra a variação na posição do vale em função do período  $\Lambda$  da função *Rugosidade*. Como pode ser observado na Figura 5.6(a), uma variação de 200 nm na periodicidade causa uma variação de aproximadamente 15 dB na profundidade do vale. Já para posição no vale, como pode ser visto na Figura 5.6(b), para variação de 200 nm na periodicidade, o vale desloca apenas 1,8 nm.

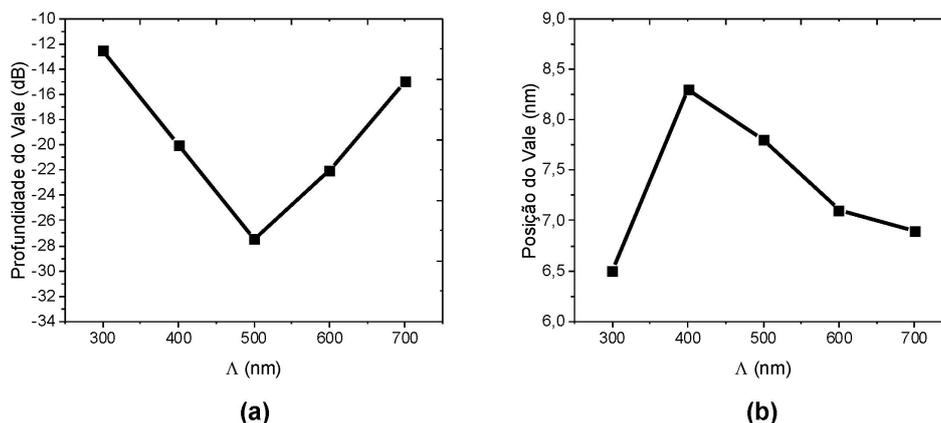


Figura 5.6: (a) Variação da profundidade do vale em função do período  $\Lambda$ ; (b) Variação da posição do vale em função do período  $\Lambda$ .

A Figura 5.7 mostra um efeito óptico observado durante a simulação da corrosão do filme metálico. Como pode ser observado na Figura 5.7, a ocorrência do acoplamento do sinal óptico com a superfície rugosa do filme metálico acontece em 7,8 nm de espessura do filme. Esse ponto corresponde ao ponto  $P_V$ , destacado no gráfico da Figura 5.5, onde ocorre o vale na curva da reflectância. Experimentalmente, esse ponto ocorre numa espessura de  $d = 7,5$  nm, resultando numa diferença relativa de 4% em relação ao resultado obtido pelo COMSOL. Isso evidencia a qualidade do ajuste obtido através da modelagem feita no COMSOL, visto que essa diferença relativa pode estar relacionada à incerteza associada a medida experimental.

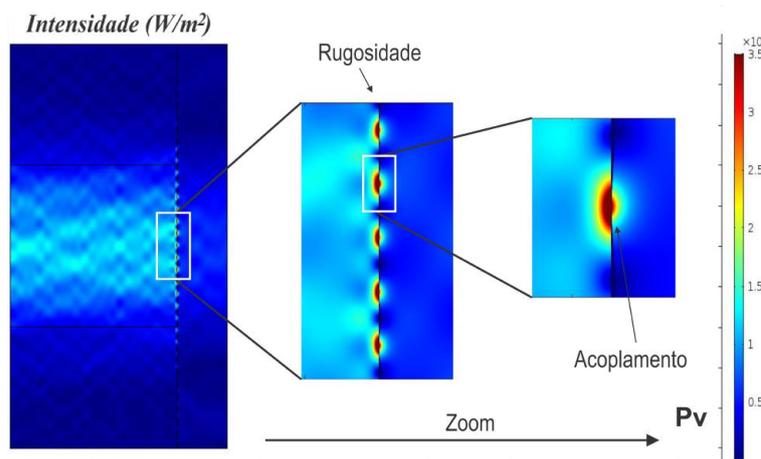


Figura 5.7: Acoplamento do sinal óptico na superfície do filme metálico devido à rugosidade em sua superfície.

O acoplamento da luz com o filme de alumínio confirma a hipótese lançada por Martins-Filho, J. F. e Colaboradores [4], quando apresentam que a rugosidade gerada pelo

processo corrosivo deveria resultar num acoplamento da luz na superfície rugosa por plásmon. É importante destacar que o perfil dos modos acoplados na superfície rugosa varia durante a dinâmica do processo de corrosão. Ou seja, na Figura 5.8, a distribuição da intensidade da luz acoplada na superfície varia de perfil à medida que a espessura  $d$  do metal também varia. Como pode ser observado, numa dada espessura do metal, destacada pelo ponto  $P_V$ , esse acoplamento gera o ponto de mínimo (ou ponto de vale) na curva da reflectância da Figura 5.5, o que pode estar caracterizando uma Ressonância de Plasmons de Superfície. Em outras palavras, num dado ponto, a luz acoplada na superfície rugosa é suficiente para dar o incremento necessário à ocorrência da ressonância. Na Figura 5.8,  $P_1$  e  $P_2$  correspondem aos modos observados antes do ponto de vale, para espessura de 15 e 8,75 nm, respectivamente, e  $P_3$  corresponde ao modo observado depois do vale, para espessura de 2,5 nm, em que o perfil do modo acoplado não é tão resolvido comparado com os demais modos destacados.

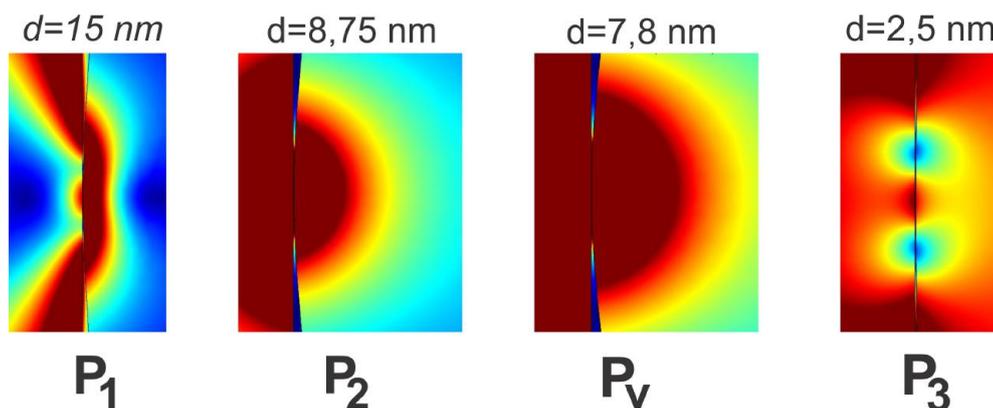


Figura 5.8: Perfil da distribuição da intensidade do sinal óptico acoplado na superfície rugosa para diferentes espessuras do filme metálico.

A Figura 5.9 mostra as curvas obtidas no COMSOL para as medidas da reflectância ao longo da corrosão para os demais comprimentos de onda usados na obtenção dos dados experimentais por Nascimento, J. F. [9]. Na Figura 5.9(a), tem-se as curvas de reflectância, do COMSOL e experimental, para corrosão no ar de 40 nm de alumínio, medidas por meio do sinal óptico de comprimento de onda centrado em 1320 nm. Já na Figura 5.9(b), tem-se as curvas de reflectância medidas por meio do sinal óptico de comprimento de onda centrado em 1550 nm.

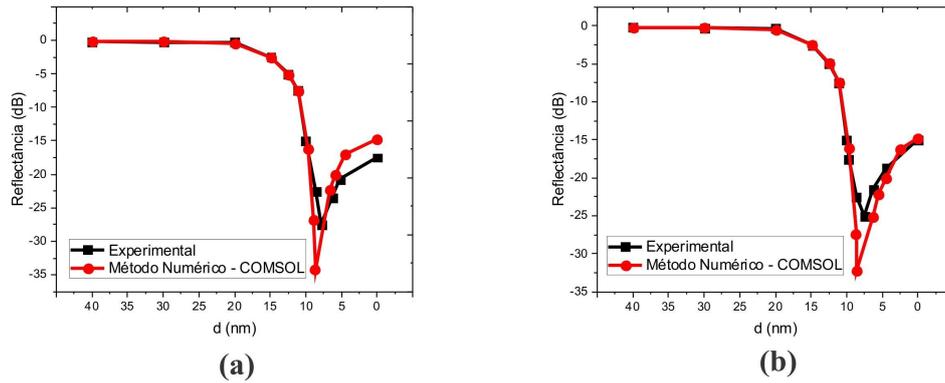


Figura 5.9: Curvas de reflectância obtidas pelo COMSOL e experimentalmente, para corrosão no ar de 40 nm de alumínio para um (a) comprimento de onda de 1320 nm; (b) comprimento de onda de 1550 nm.

É importante destacar que os resultados mostrados na Figura 5.9 foram obtidos para o mesmo perfil de rugosidade utilizado para obter as curvas do gráfico da Figura 5.5. Isso mostra que o ajuste feito a partir dos dados experimentais da curva de corrosão no ar, usando um comprimento de onda de 980 nm, se aplica aos demais comprimentos de onda, desde que o meio externo seja mantido o mesmo, que nesse caso foi o ar. Para os demais meios externos, água e álcool isopropílico, usados nas medidas de corrosão feitas por Nascimento, J. F. [9], foi necessária uma correção na função *Rugosidade*. Isso é mostrado na Seção 5.3.

### 5.3 Correção na Função Rugosidade

Como foi visto na Seção 5.2, uma vez explicitada a função *Rugosidade* a partir do ajuste obtido para as funções  $A(d)$  e  $A_0(d)$ , através de dados experimentais, a modelagem proposta nesta Dissertação é capaz de reproduzir de maneira aproximada as curvas experimentais obtidas para corrosão num mesmo meio externo. No caso dos resultados mostrados na Seção 5.2, eles foram para medição da reflectância feita para corrosão no ar. Para as medições da reflectância feitas para corrosão na água e no álcool isopropílico, é necessário fazer o seguinte ajuste na função *Rugosidade*, definida explicitamente pela Equação (5.5),

$$R(y, d) \implies R(n_{ext}y, d) \implies$$

$$R(y, d) = \left(0,038 + 0,68d + 0,078d^2 - 0,0046d^3 + 0,00061d^4\right) \sin \left[ \frac{2\pi}{500}(n_{ext}y) \right] + d, \quad (5.6)$$

em que  $n_{ext}$  é o índice de refração do meio externo (ar, água ou álcool isopropílico). Antes de apresentar algumas hipóteses relativas a esse ajuste através do índice de refração, são mostrados, na Figura 5.10, os resultados obtidos pelo COMSOL após esse ajuste e as curvas experimentais.

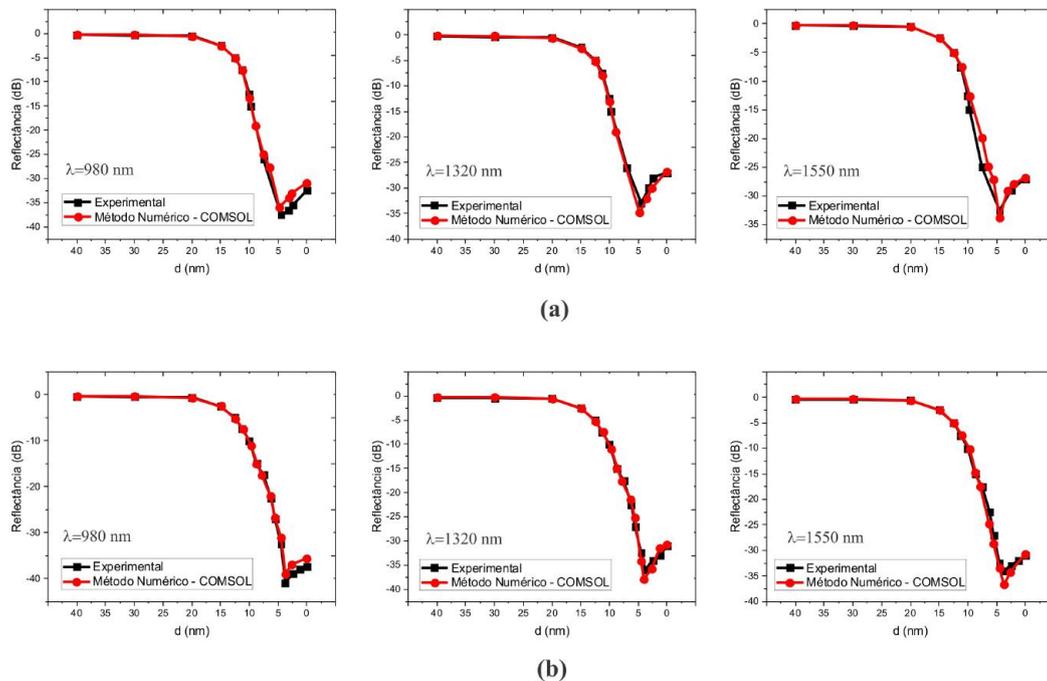


Figura 5.10: Comparativo dos resultados obtidos, pelo COMSOL e experimentalmente, com a medida da reflectância feita para corrosão em (a) água; (b) álcool isopropílico.

Na Figura 5.10(a), tem-se as medidas da reflectância obtida pelo COMSOL, usando os comprimentos de onda de 980 nm, 1320 nm e 1550 nm, para o sinal óptico, para simulação da corrosão na água. Já na Figura 5.10(b), tem-se as medidas da reflectância para esses comprimentos de onda, mas com a simulação da corrosão no álcool isopropílico. Pode-se observar, na Figura 5.10, que as curvas obtidas pelo modelo construído no COMSOL são boas aproximações para as curvas experimentais. No entanto, esse ajuste só é possível com a correção da função *Rugosidade*, que passa a ser definida pela Equação (5.6).

A partir dos resultados obtidos com a correção da função *Rugosidade*, é possível verificar a influência do meio externo na mudança da posição do vale, para verificar o resultado, obtido por Nascimento, J. F. [9]. A Figura 5.11 mostra o comparativo entre a variação da posição do vale em função do índice de refração do meio externo obtida a partir dos resultados da modelagem computacional com os resultados obtidos experimentalmente, para diferentes comprimentos de onda. Pode-se observar que os pontos obtidos pelo COMSOL são pratica-

mente os mesmos obtidos experimentalmente, e que a maior discrepância é observada para a posição do vale correspondente ao índice de refração do ar. Deve-se destacar também, na Figura 5.11, que a posição do vale obtido na modelagem feita no COMSOL independe da mudança do comprimento de onda, em concordância com os resultados experimentais.

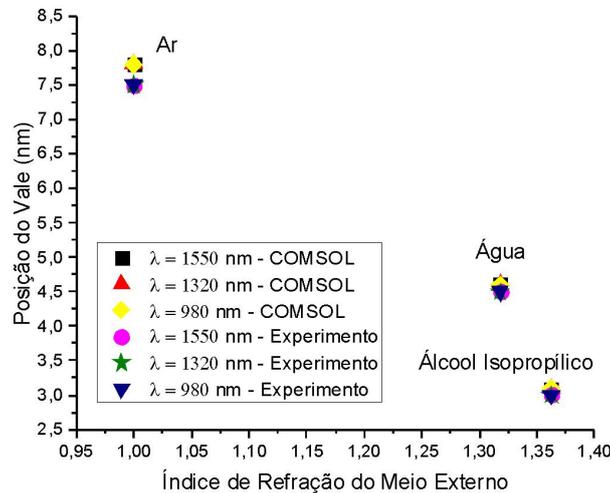


Figura 5.11: Resultados experimentais e da modelagem computacional, para posição do vale em função do índice de refração do meio externo.

É importante destacar que, a análise dos resultados da modelagem para meios externos diferentes (ar, água e álcool isopropílico) e para comprimentos de onda diferentes (980 nm, 1320 nm e 1550 nm), mostrada na Figura 5.11, é motivada pelo trabalho experimental de Nascimento, J. F. [9]. Pois, experimentalmente, esse autor verificou que a posição do vale, observado nas curvas da reflectância em função da espessura do metal, não muda com a variação do comprimento de onda, mas muda com a variação do meio externo. Com essa análise, Nascimento, J. F. [9] busca evidenciar a ocorrência do fenômeno de Ressonância de Plásmom de Superfície durante a corrosão do filme metálico, pois esses são dois parâmetros importantes na verificação desse fenômeno [7].

Visto que os resultados obtidos até aqui são uma boa aproximação para os resultados experimentais, e, conseqüentemente, promovem as mesmas análises feitas por Nascimento, J. F. [9], acerca da influência do meio externo e do comprimento de onda na posição do vale, resta provar a existência do fenômeno de Ressonância de Plásmom de Superfície durante a corrosão do filme metálico. Isso é feito na Seção 5.4, em que somada as contribuições deixadas por Nascimento, J. F. [9], são feitas novas investigações sobre o fenômeno que acarreta na existência do vale observado nas curva de reflectância.

Por fim, sobre a correção na função *Rugosidade*, tem-se algumas hipóteses quanto à sua natureza. A primeira delas é que ela pode ser considerada como um ajuste de escala na coordenada  $y$ , que está relacionada com a distribuição da rugosidade de superfície ao longo de toda extensão do filme metálico. Ou seja, para a simulação do COMSOL não basta apenas alterar o índice de refração do meio externo com a mudança desse meio do ar para água ou álcool isopropílico. Isso implica que essa correção é decorrente apenas do problema de modelagem feita nesse *software*, não sendo de natureza física. Uma segunda hipótese estaria relacionada com a influência da rugosidade de superfície na interação entre o sinal óptico e o meio externo. Ou seja, a luz poderia não estar percebendo a mesma variação, em todas as direções, no índice de refração do meio externo, devido a rugosidade estar introduzindo anisotropia no sistema. Isso faria com que a permissividade elétrica, e, conseqüentemente, o índice de refração deixassem de ser tratados de forma escalar, para assumirem a forma tensorial. Sendo assim, a modelagem do problema tomaria outro grau de sofisticação, visto que o tratamento tensorial das grandezas físicas torna o problema mais complexo.

## 5.4 Exploração do Efeito de Ressonância de Plasmons de Superfície

O efeito de Ressonância de Plasmons de Superfície é observado em metais, pois eles exibem permissividade negativa para frequências abaixo da frequência de plasma [30]. Logo, essa é uma condição necessária para obter o confinamento da luz numa interface metal/dielétrico [30]. Outra condição é que a onda eletromagnética usada para excitar o Plásmom de Superfície deve ter o campo elétrico definido no plano de incidência, o que corresponde a uma polarização tipo  $P$  [30]. Para verificar que o efeito resultante do acoplamento da luz na interface rugosa entre o metal e o meio externo é uma Ressonância de Plásmom, são feitas duas simulações usando a modelagem proposta nesta Dissertação: 1) a primeira simulação verifica a influência da polarização do sinal óptico. Nessa primeira simulação são usados os modos de propagação Transverso-Magnético (TM) e Transverso-Elétrico (TE), correspondente às polarizações  $P$  e  $S$ , respectivamente, e um modo híbrido, no qual coexistem os modos TM e TE; 2) a segunda simulação faz o comparativo da corrosão de um filme dielétrico hipotético, cujo índice de refração é igual ao do alumínio, com o próprio filme de alumínio.

### 5.4.1 Influência do Modo de Propagação

A Figura 5.12 apresenta as curvas de reflectância em função da espessura do metal para corrosão no ar de 40 nm de alumínio, usando um sinal óptico com comprimento de onda de 1550 nm. A Figura 5.12(a) mostra o comparativo entre a medida da reflectância de uma simulação que fez uso do sinal óptico com polarização tipo  $P$ , com a medida que fez uso do sinal óptico com polarização tipo  $S$ . Como pode ser observado na Figura 5.12(a), a curva que apresenta o vale corresponde à polarização tipo  $P$ . Para o caso do vale ser provocado pela Ressonância de Plasmons de Superfície, esse é um resultado esperado, pois, para polarização  $S$ , esse vale não deve ocorrer. A curva para polarização tipo  $S$  possui comportamento igual à obtida para o caso de uma corrosão laminar, mostrando que a rugosidade de superfície não influenciou na medida da reflectância. Na Figura 5.12(b), é observada a curva da reflectância referente à medição da corrosão usando o modo híbrido. Note que nesse caso também ocorre o vale. O modo híbrido é utilizado em toda modelagem proposta nesta Dissertação, pois ele é o modo que se propaga na fibra óptica monomodo para o caso em que não é definida uma polarização, correspondendo assim a configuração experimental descrita por Nascimento, J. F. [9]. Nesse caso, pode-se concluir que o efeito observado na curva em vermelho do gráfico da Figura 5.12(b) é devido a contribuição da componente  $TM$  contida no modo híbrido. Pode-se notar que a profundidade do vale para o modo  $TM$ , mostrado na Figura 5.12(a), é aproximadamente 6,5 dB maior que a do modo híbrido, mostrado na Figura 5.12(b). Essa diferença é esperada, visto que no modo híbrido o acoplamento que resulta no vale ocorre apenas na componente  $TM$  desse modo de propagação, enquanto que para o modo puramente  $TM$  ocorre o acoplamento total, resultando numa maior perda do sinal óptico refletido.

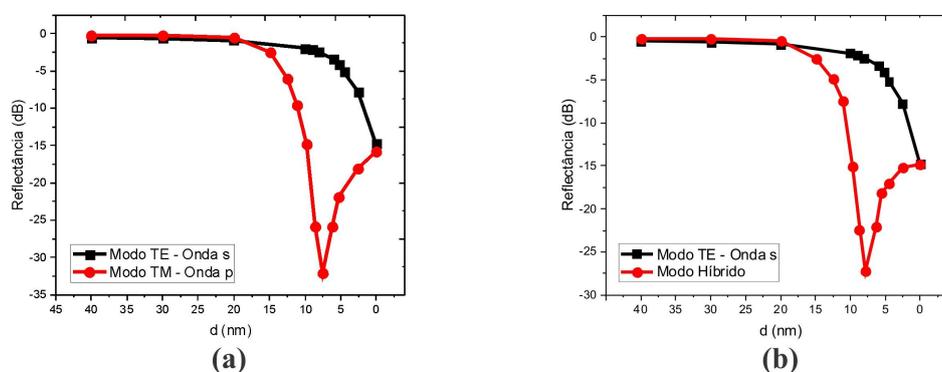


Figura 5.12: Curvas de reflectância obtidas usando os modos de propagação (a) TE e TM; (b) TE e Híbrido.

Os resultados mostrados na Figura 5.12 levam a concluir que a rugosidade de superfície influencia na ocorrência da Ressonância de Plasmons. Para ampliar essa conclusão, na Seção 5.4.2, é feito um comparativo quanto ao tipo de material utilizado para compor o filme fino.

#### 5.4.2 Influência do Tipo de Material que Compõe o Filme Fino

A Figura 5.13 mostra a curva (em preto) para a reflectância obtida, usando um comprimento de onda de 1550 nm e modo de propagação híbrido, para corrosão de um filme dielétrico hipotético de 40 nm de espessura com índice de refração  $n_d = 15,3090$ , corresponde ao valor absoluto do índice de refração do alumínio para o mesmo comprimento de onda. É utilizado o valor absoluto do índice de refração para que os níveis de reflectância sejam semelhantes aos do metal. Já a curva em vermelho é para corrosão de um filme fino de alumínio de 40 nm de espessura.

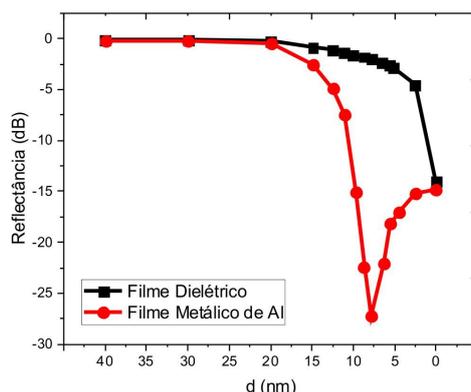


Figura 5.13: Curvas de reflectância obtidas através da corrosão de um filme dielétrico e um filme metálico.

Como pode ser observado na Figura 5.13, apenas a curva referente a corrosão do filme metálico apresentou o vale. Esse resultado evidencia ainda mais a ocorrência da Ressonância de Plasmons de Superfície, pois esse efeito é excitado apenas em metais. Portanto, com as análises feitas nas Seções 5.4.1 e 5.4.2, somadas às análises feitas por Nascimento, J. F. [9], a partir de seus resultados experimentais, e reproduzidas nas Seções 5.2 e 5.3, a partir dos resultados da modelagem computacional, pode-se concluir que o acoplamento da luz na superfície rugosa, gerada pelo processo de corrosão do filme metálico, está resultando no efeito de Ressonância de Plasmons de Superfície que causa o vale observado nos resultados.

# Capítulo 6

## Conclusão e Perspectivas Futuras

Esta Dissertação apresenta uma modelagem simples, através da função *Rugosidade*, para dinâmica de rugosidade de superfície gerada durante o processo de corrosão do elemento transdutor metálico do sensor à fibra óptica. A partir do modelo implementado no COMSOL, foi possível reproduzir, com boa aproximação, os resultados experimentais obtidos por Nascimento, J. F. [9]. Isso trouxe credibilidade ao modelo proposto e permitiu ir além das análises feitas por esse autor, pois com os resultados da simulação computacional, foi observado o acoplamento do sinal óptico com a superfície rugosa, e, conseqüentemente, a ocorrência do fenômeno de Ressonância de Plasmons de Superfície. Visto que Nascimento, J. F. [9] fez a investigação experimental buscando evidências desse fenômeno, por meio da variação de parâmetros nos quais esse fenômeno é sensível, e somada com as explorações feitas nesta Dissertação, a partir da análise da influência da polarização do sinal óptico e do tipo de material que compõe o filme fino, está provado que ocorre Ressonância de Plasmons de Superfície durante a corrosão do elemento transdutor do sensor óptico.

Além de promover a reprodução dos resultados experimentais, nos quais nenhuma modelagem teórica existente conseguiu explicar seu comportamento, esta Dissertação também apresenta discussões sobre a natureza geométrica da rugosidade de superfície. Devido suas formas geométricas irregulares, a rugosidade de superfície é representada pela geometria fractal. São apresentadas duas funções fractais adequadas para a modelagem da rugosidade de superfície e também discutido a forma como essas funções podem modelar a rugosidade de superfície de forma determinística ou aleatória. A exploração dessas funções fractais também serviu para motivar o uso da função *Rugosidade*, pois ela forneceu fácil manipulação de seus parâmetros, sem limitações, para que o ajuste feito nessa função resultasse na boa aproximação entre os resultados experimentais e os da modelagem. Enquanto que

as funções fractais tornariam o problema mais complexo, pois consistiria em resolver uma geometria fractal no tempo, visto que esta Dissertação buscou a modelagem de um problema dinâmico.

Por fim, o *software* COMSOL *Multiphysics*© se mostrou uma ótima ferramenta para modelagem de problemas ligados ao Eletromagnetismo. Como pode ser visto, a concordância entre os resultados do método numérico com os do modelo analítico, quando confrontados numa mesma situação, e a modelagem proposta nesta Dissertação, que reproduziu os dados experimentais, demonstram a capacidade que esse *software* tem em reproduzir tanto problemas ideais, relacionados às soluções analíticas, quanto problemas reais, relacionados à reprodução de resultados experimentais.

## 6.1 Contribuições do Trabalho

Esta Dissertação contribui com um método capaz de modelar a dinâmica de rugosidade de superfície gerada durante a corrosão do filme fino metálico que compõe o elemento transdutor do sensor à fibra óptica. Por meio da análise da reflectância, medida experimentalmente, é possível modelar o processo dinâmico de corrosão do filme metálico por meio do ajuste nos parâmetros  $A$  e  $A_0$  da função *Rugosidade*. Adicionalmente, esta Dissertação contribui com a confirmação da hipótese lançada por Martins-Filho e Colaboradores [4], de que a rugosidade de superfície fornece o incremento necessário à ocorrência do fenômeno de Ressonância de Plasmons de Superfície em um dado estágio do processo corrosivo. Além disso, esta Dissertação também contribui com um artigo publicado nos Anais do MOMAG 2016, intitulado de *Modelagem da Dinâmica de Rugosidade de Superfície Gerada Durante Processo de Corrosão do Elemento Transdutor Metálico do Sensor Óptico* [57].

## 6.2 Proposta para Trabalhos Futuros

Como continuação desta Dissertação, as seguintes propostas são sugeridas:

- Efetuar novas medidas da corrosão do filme metálico e capturar imagens microscópicas do perfil de rugosidade gerado em diferentes estágios da corrosão, para que possam ser confrontados com o perfil de rugosidade proposto nesta Dissertação;

- Fazer um estudo aprofundado sobre a natureza do ajuste que levou à correção na função *Rugosidade*, verificando se é de natureza física ou apenas um problema de modelagem computacional;
- Desenvolver novas configurações para o elemento transdutor, analisando a rugosidade em bicamadas metálicas, perfil D e outros;
- Utilizar algum método de otimização multiparâmetro para ajustar os parâmetros da função *Rugosidade* por meio do comparativo entre os resultados da simulação do COMSOL com os resultados experimentais. O COMSOL *Multiphysics*© junto com *LiveLink for Matlab*© permite a implementação de algum algoritmo para uso do método de otimização multiparâmetro.

# Referências Bibliográficas

- [1] R. P. ROBERGE, **Corrosion Engineering: principles and practice**, 1, Ed. McGraw-Hill, 2008.
- [2] V. GENTIL, **Corrosão**, 6, Ed. LTC, 2011.
- [3] J. HAUS, **Optical Sensors: Basics and Applications**, 3, Ed. Wiley-Vch, 2010.
- [4] J. F. MARTINS-FILHO, E. FONTANA, J. GUIMARÃES, D. F. PIZZATO, I. J. SOUZA COELHO, Fiber-optic-based Corrosion Sensor using OTDR, In: **IEEE Conference on Sensors**, 2007, p. 1172–1174.
- [5] J. F. NASCIMENTO, M. J. SILVA, I. J. S. COELHO, E. CIPRIANO, J. F. MARTINS-FILHO, Amplified OTDR Systems for Multipoint Corrosion Monitoring, *Sensors*, vol. 12, p. 3438-3448, 2012.
- [6] E. SCHLÖMANN, Demagnetizing Fields in Thin Magnetic Films Due to Surface Roughness, *Journal of Applied Physics*, vol. 41, n. 4, 1970.
- [7] E. FONTANA AND R. H. PANTEL, Characterization of multilayer rough surfaces by use of surface-plasmon spectroscopy, *Physical Review B*, vol. 37, p. 3164–3182, 1988.
- [8] H. RAETHER, **Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings**, 111, Ed. Springer Tracts in Modern Physics, 1988.
- [9] J. F. NASCIMENTO, Sensor Multiponto de Corrosão Baseado em Reflectometria Amplificada em Fibra Óptica, Universidade Federal de Pernambuco, **Tese de Doutorado**, 2013.
- [10] E. UDD, **Fiber Optic Sensors: An Introduction for Engineers and Scientists**, 2, Ed. Wiley, 2011.
- [11] D. DERICKSON, **Fiber optic test and measurement**, 1, Ed. Prentice-Hall, 1998.
- [12] J. F. MARTINS-FILHO, E. FONTANA, Optical fibre sensor system for multipoint corrosion detection, 1<sup>a</sup> ed. In-Tech: Vienna, 2009, cap. Optical Fibre, New Developments, p. 35–44, 2009.
- [13] J.M. LI, L. LÜ, M. O. LAI, B. RALPH, **Image-Based Fractal Description of Microstructures**, p. 79-104, Ed. Springer Science & Business Media, 2003.

- 
- [14] B. MANDELBROT, The Nature of Roughness in Mathematics, Science, and Art, Special Lecture, **ICM - International Congress of Mathematicians**, 2006.
- [15] B. B. MANDELBROT, **The Fractal Geometry of Nature**, Ed. W. H. Freeman, 1982.
- [16] A. -L. BARABÁSI AND H. E. STANLEY, **Fractal Concepts in Surface Growth**, Ed. Cambridge University Press, 1995.
- [17] R. B. ALVAREZ, H. J. MARTIN, M.F. HORSTEMEYER, M. Q. CHANDLER, N. WILLIAMS, P. T. WANG, A. RUIZ, Corrosion relationships as a function of time and surface roughness on a structural AE44 magnesium alloy, *Corrosion Science*, vol. 52, p. 1635–1648, 2010.
- [18] J. E. CUTTING AND J. J. GARVIN, Fractal curves and complexity, *Perception & Psychophysics*, vol. 42, n. 4, p. 365-370, 1987.
- [19] T. A. ASSIS, J. G. V. MIRANDA, F. B. MOTA, R. F. S. ANDRADE, C. M. C. CASTILHO, Geometria fractal: propriedades e características de fractais ideais, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 30, n. 2, p. 2304-2314, 2008.
- [20] R. SIQUEIRA, Introdução aos Fractais. Disponível em: <<http://www.insite.com.br/fractarte/artigos.php>>
- [21] T. TÉL, Fractals, Multifractals, and Thermodynamics: An Introductory Review, *Zeitschrift Naturforsch*, vol. 43, p. 1154-1174 , 1988.
- [22] X. SHANHUA, R. SONGBO, W. YOUDE, Three-Dimensional Surface Parameters and Multi-Fractal Spectrum of Corroded Steel, *Plos One*, p. 1-15, 2015.
- [23] H. ZAHOUANI, R. VARGIOLU, J.-L. LOUBET, Fractal Models of Surface Topography and Contact Mechanics, *Elsevier Mathematical and Computer Modelling*, vol. 28, n. 4-8, p. 517-534.
- [24] L. RAYLEIGH, Polish, *Nature*, vol. 64, p. 385-388, 1901.
- [25] J. E. HARVEY AND R. V. SHACK, Light-Scattering Characteristics of Optical Surfaces, 1975.
- [26] T. K. CHENMOGANADAM, On the Specular Reflection from Rough Surfaces, *Physical Review*, vol. 13, p. 96-101, 1919.
- [27] H. E. BENNETT AND J. O. PORTEUS, Relation Between Surface Roughness and Specular Reflectance at Normal Incidence, *Optical Society of America*, vol. 51, n. 2, p. 123-129, 1961.
- [28] J. E. HARVEY, S. SCHRÖDER, N. CHOI, A. DUPARRÉ, Total integrated scatter from surfaces with arbitrary roughness, correlation widths, and incident angles, *Optical Engineering*, vol. 51, 2012.
- [29] A. DAVID, Surface-Roughened Light-Emitting Diodes: An Accurate Model, *IEEE Journal of Display Technology*, vol. 9, n. 5, p. 301-316, 2013.

- 
- [30] E. FONTANA, Thickness optimization of metal films for the development of surface-plasmon-based sensors for nonabsorbing media, *Applied Optics*, vol. 45, n. 29, p. 7632-7642, 2006.
- [31] J. HOMOLA, S. S. YEE, G. GAUGLITZ, Surface plasmon resonance sensors: review, *Sensors and Actuators B*, vol. 54, p. 3-15, 1999.
- [32] R. G. LLAMAS AND L. E. REGALADO, Transmitted scattered light from a thin film with shallow random rough interfaces, *Applied Optics*, vol. 35, n. 28, p. 5595-5599, 1996.
- [33] INTERNATIONAL TELECOMMUNICATION UNION – ITU, Optical fibres, cables and systems, 2009.
- [34] E. FONTANA, Theoretical and experimental study of the surface plasmon resonance effect on a recordable compact disk, *Applied Optics*, vol. 43, 2004.
- [35] COMSOL MULTIPHYSICS© v. 5.2. www.comsol.com. COMSOL AB, Stockholm, Sweden.
- [36] M. N. O. SADIKU, **Numerical Techniques in Electromagnetics**, 2, Ed. CRC Press LLC, 2000.
- [37] C.S. DESAI AND J. F. ABEL, **Introduction to the Finite Element Method: A Numerical Approach for Engineering Analysis**, 1, Ed. CBS Publisher, 1972.
- [38] M.N.O. SADIKU, A simple introduction to finite element analysis of electromagnetic problems, *IEEE Transactions on Education*, vol. 32, n. 2, p. 85–93, 1989.
- [39] L. S. BARBOSA, FEM-ABC Aplicado à Solução de Problemas de Espalhamento Eletromagnético, Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, **Dissertação de Mestrado**, 2010.
- [40] P. P. SILVESTER AND R.L. FERRARI, **Finite Elements for Electrical Engineers**, 3, Ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1996.
- [41] JO-YU WU AND R. LEE, The Advantages of Triangular and Tetrahedral Edge Elements for Electromagnetic Modeling with the Finite-Element Method, *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 45, n. 9, 1997.
- [42] L. A. PEREIRA, Método dos elementos finitos aplicado ao eletromagnetismo.PUCRS.
- [43] WAVE OPTICS MODULE USER’S GUIDE, COMSOL Multiphysics® v. 5.2. COMSOL AB, Stockholm, Sweden, 2015.
- [44] J. D. JACKSON, **Classical Electrodynamics**, 3, Ed. John Willey Sons, 2001.
- [45] E. FONTANA, Eletromagnetismo - Parte II: Capítulo 10 - Guias de Onda. Disponível em: <<https://www.ufpe.br/fontana/Eletromagnetismo2/>>.

- 
- [46] WAVE OPTICS MODULE USER'S GUIDE, COMSOL Multiphysics® v. 5.2. p. 131, COMSOL AB, Stockholm, Sweden, 2015.
- [47] WAVE OPTICS MODULE USER'S GUIDE, COMSOL Multiphysics® v. 5.2. p. 54-60, COMSOL AB, Stockholm, Sweden, 2015.
- [48] COMSOL MULTIPHYSICS®v.5.2.<https://www.comsol.com/blogs/much-memory-needed-solve-large-comsol-models>. COMSOL AB, Stockholm, Sweden.
- [49] A. LEUNG, P. M. SHANKAR, R. MUTHARASAN, A review of fiber-optic biosensors, *Sensors and Actuators B*, vol. 125, p. 688-703, 2007.
- [50] G. P. AGRAWAL, **Fiber-Optic Communications Systems**, 3, Ed. John Wiley & Sons, 2002.
- [51] D. F. N. DOS SANTOS, Investigação Numérica do Desempenho de um Sensor de Fibra Óptica de Índice de Refração Baseado em SPR e Utilizando COMSOL Multiphysics, Universidade da Madeira, **Tese de Mestrado**, 2012.
- [52] A. MENDEZ AND T. F. MORSE, **Specialty Optical Fibers Handbook**, 1, Ed. Academic Press, 2011.
- [53] M. POLYANSKIY, Refractive Index. Disponível em: <<http://refractive-index.info/>>.
- [54] R. D. LIDE, **Handbook of Chemistry and Physics**, 85, Ed. CRC Press, 2005.
- [55] P. SCHIEBENER, J. STRAUB, L. H. M. J. SENGERS, S. J. GALLAGHER, Refractive index of water and steam as function of wavelength, temperature and density, *Physical and Chemical Reference Data*, vol. 19, p. 677–717, 1990.
- [56] K. CHANG-BONG AND B. C. SU, Measurement of the refractive index of liquids at 1.3 and 1.5micron using a fibre optic fresnel ratiometer, *Measurement Science and Technology*, vol. 15, p. 1683–1686, 2004.
- [57] H. P. ALVES, M. M. S. OLIVEIRA, J. F. NASCIMENTO, J. F. MARTINS-FILHO, Modelagem da Dinâmica de Rugosidade de Superfície Gerada Durante Processo de Corrosão do Elemento Transdutor Metálico do Sensor Óptico. In: **MOMAG 2016**, Porto Alegre-RS, 2016.

# **Apêndice A**

## **Artigo Publicado em Conferência Nacional**

H. P. Alves, M. M. S. Oliveira, J. F. Nascimento, J. F. Martins-Filho. Modelagem da Dinâmica de Rugosidade de Superfície Gerada Durante Processo de Corrosão do Elemento Transdutor Metálico do Sensor Óptico. In: MOMAG 2016. Porto Alegre - RS.

## Apêndice B

# Implementação em Matlab do Modelo Analítico para Reflectância

Neste Apêndice é fornecido o programa em Matlab usado para implementar o modelo analítico da reflectância em função da espessura do metal.

```
1
2     %Variaveis de entrada
3
4     wl=1550e-9           %Comprimento de onda em nm
5     n1=1.4457;          %Indice de refracao da silica para
6     um comprimento de onda de 1550nm
7     n2=1.5137-i*15.234; %Indice de refracao do Aluminio
8     para um comprimento de onda de 1550nm
9     n3=1.00027326;      %Indice de refracao do Ar
10    k0=2*pi/wl           %Numero de onda no vacuo
11    d=0:0.01:40)*1e-9;  %Vetor que contem as
12    espessuras do metal de 0-40 nm
13
14    r12=(n1-n2)/(n1+n2); %Coeficiente de reflexao na
15    interface silica/aluminio
16    r23=(n2-n3)/(n2+n3); %Coeficiente de reflexao na
17    interface aluminio/ar
18
19    R=abs((r12+r23*exp(-i*2*k0*n2.*d./wl))./(1+r12*r23*exp(-i
20    *2*k0*n2.*d./wl))).^2; %Reflectancia
21
22    RdB=10*log(R)/log(10); %Reflectancia em dB
```

```
16
17
18
19     plot(d,RdB) %Grafico da reflectancia em funcao da
        espessura d do metal
20     xlabel('Espessura do Metal (nm)');
21     ylabel('Reflectancia (dB)');
22     legend('Reflectancia');
23     title('Medida da Reflectancia a partir do Modelo Analitico
        ');
```