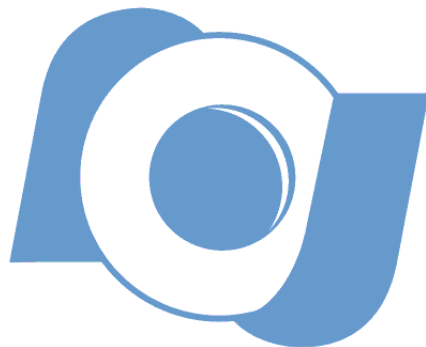


Rio de Janeiro Abril de 2010



**OBSERVATÓRIO NACIONAL  
MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM  
ASTRONOMIA**

# **Livros Grátis**

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.



Aplicação de métodos de transferência radiativa à  
análise de espectros minerais em asteróides e  
meteoritos

Julio Daniel Blanco Zárate  
Orientador: Dr. Jorge Marcio Ferreira Carvano

26 de Fevereiro de 2010



## Agradecimentos

Sei que devo agradecer a muitas pessoas e organismos, por isso espero não ter esquecido nenhuma pessoa e nenhum organismo ou entidade.

Primeiramente quero agradecer a CAPES pela bolsa que possibilitou meus estudos e à Administração Nacional de Ensino Público de Uruguai por haber concedido meu afastamento e a bolsa do 2008.

Um agradecimento especialíssimo para meu orientador Dr. Jorge Marcio Ferreira Carvano, porque além de orientador resultou um grande parceiro para o trabalho. Eu me sinto muito obrigado por ter conhecido ele não somente como professor e orientador porém como essa grande pessoa que ele é. Gostaria também de agradecer especialmente à professora Dra. Daniela Lazzaro por ter acreditado em mim.

Um parágrafo especial para os professores da pós-graduação e inclusive aos que hoje não estão fisicamente conosco. Também para o pessoal administrativo da Secretaria da pós-graduação de Astronomia que sempre estiveram prestes para me ajudar.

Ao pessoal de Uruguai que sempre me deu aquela força que eu precisava nos momentos difíceis: à MSc. Reina Pintos Ganón, ao Dr. Tabaré Gallardo, à Profa. Silvia Dalla Zuanna, aos colegas Prof. Jorge Ramírez e Prof. Rodrigo Sierra.

Um obrigado gigante para minha grande amiga Lic. Rosa Angeli Gonçalves Ledo por ter me acolhido na sua casa estes dois anos, eu sei que sem ela não teria conseguido. A Romir Reis por toda sua disponibilidade para me ajudar com o português e a redação da tese.

A minha família principalmente a minha irmã Beatriz, que foi meu suporte moral e meu administrador na distância.

A meus colegas, que se tornaram grandes amigos, me ajudaram na redação foram corretores e confidentes: a Flavia Luzia Jasmim, Gustavo Bragança, João Victor Sales e Pedro Enrique Hasselmann.

Aos grandes amigos que fiz durante minha estada em Brasil e souberam me fazer sentindo que estava em casa: Leandro Guedes e Jaime Vilas da Rocha porque se tornaram grandes parceiros de projetos no ensino e difusão da Astronomia, minhas grandes paixões. A Andrés Rodríguez Papa, Lilian e Kátia Lopes.

As pessoas que se tornaram colegas especiais porque sempre estavam presentes no momento certo e quando era necessário com seus conselhos e palavras de ânimo: Anderson de Oliveira, Denise Barbosa, Vanderlei Coelho, Gustavo Pinheiro e Thais Mothé-Diniz.

A todos os amigos que tenho que tive e que terei.

**Muito obrigado!**

## Resumo

Este trabalho é um estudo da equação de transferência radiativa com base na teoria desenvolvida por Hapke, e a possível aplicação na análise mineral remota de asteróides. São analisadas as funções que integram a equação assim como os parâmetros que devem ser estimados e que integram cada função, para poder determinar as influências deles na precisão dos cálculos envolvidos na aplicação da equação de transferência radiativa. Devido à complexidade física e química da superfície dos asteroides, o estudo espectral não é simples, e geralmente, são empregados modelos com muitos parâmetros. A complexidade das equações resultantes leva a realizar muitas estimações para ajustar um espectro que reproduza as observações. Mas a transferência das estimações feitas em alguns trabalhos nem sempre podem ser extrapoladas para outros. O trabalho apresenta uma análise comparativa dos resultados obtidos na determinação dos valores das constantes óticas por vários autores, uma tentativa de reproduzir estes resultados a partir de espectros obtidos no RELAB. Também um estudo de trabalhos que realizam a análise mineral de por aplicação da teoria desenvolvida por Hapke. Alguns destes trabalhos se complementa com a aplicação da série de Kramers-Kronig que relaciona a parte real e imaginária de uma função. O objetivo deste trabalho é ajustar os critérios para fazer as estimativas dos parâmetros, para obter, assim, precisões satisfatórias na determinação de constantes óticas e a reconstrução de espectros de refletância a partir de estas constantes.

## Abstract

This work is a study of the radiative transfer equation based on the theory developed by Hapke, and its possible application in remote mineral analysis applied to asteroids and minerals. It analyzes the function that are part of the equation and parameters to be estimated as parts of each function to determinate the influences of these parameters on the accuracy of calculation involved in applying the equation of radiative transfer. Because of the complex physics and chemistry composition of the surface of asteroids, the spectral study is not simple and is usually employed differents models with many parameters. The complexity of the resulting equations leads to perform many estimations to fit a spectrum that reproduces the observations. But the transfer of these estimations made in some studies can not always be extrapolated to others. This work presents a comparative analysis of the results obtained in determining the values of optical constant by several authors, and attempt to reproduce the results from spectras obtained in RELAB. Also there is a study of differents works that analyzes mineral composition by applying the theory of radiative transfer developed by Hapke. Some of these works are complemented with the application of Kramers-Kronig series that related the real and the imaginary part of a function. The goal of this work is to set the criterias for the estimation of parameters to obtain satisfactory presition in the determination of optical constant and the reconstruction of reflectance spectras from these constant.



# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Formação de bandas espectrais em sólidos</b>	<b>7</b>
2.1	Espectroscopia . . . . .	7
2.1.1	Espectrometria de reflexão . . . . .	8
2.2	Mecanismos de absorção . . . . .	9
2.2.1	Rotações moleculares . . . . .	9
2.2.2	Vibrações da rede . . . . .	10
2.3	Transições elétricas . . . . .	12
2.3.1	O modelo de elétrons num sólido . . . . .	12
2.3.2	Centros de cor . . . . .	13
2.4	Efeitos dos campos cristalinos nas transições . . . . .	14
2.4.1	Transferência de carga . . . . .	15
2.4.2	Éxcitons . . . . .	15
2.4.3	Inter-bandas e transições de impurezas . . . . .	17
2.4.4	Portadores livres . . . . .	17
2.5	Forma da banda e efeitos da temperatura . . . . .	17
<b>3</b>	<b>A teoria na transferência radiativa</b>	<b>19</b>
3.1	Introdução . . . . .	19
3.2	Generalidades . . . . .	19
3.3	Partícula isolada . . . . .	20
3.3.1	Eficiências . . . . .	22
3.4	Refletância . . . . .	23
3.5	Espalhamento de aglomerados de partículas . . . . .	25
3.6	Partículas esféricas grandes . . . . .	27
3.7	A equação de transferência radiativa . . . . .	30
3.8	Refletância bidirecional e espalhamento isotrópico . . . . .	32

3.8.1	Generalidades . . . . .	32
3.8.2	A função H . . . . .	37
3.8.3	Espalhamento não isotrópico . . . . .	38
3.8.4	Função de fase . . . . .	40
3.8.5	Efeito de oposição . . . . .	42
3.9	Empacotamento e rugosidade . . . . .	45
3.10	A função de refletância bidirecional . . . . .	47
<b>4</b>	<b>Espectroscopia de refletância</b>	<b>51</b>
4.0.1	Teorema da reciprocidade . . . . .	53
4.0.2	Fotometria de corpos opacos . . . . .	54
4.0.3	Espectroscopia de refletância . . . . .	55
4.0.4	Estimativa do coeficiente de absorção . . . . .	58
<b>5</b>	<b>Constantes óticas</b>	<b>63</b>
5.1	Introdução . . . . .	63
5.1.1	O método de Kramers-Kronig . . . . .	64
5.2	Medições em laboratórios . . . . .	66
5.3	Determinação das constantes óticas por espectrometria . . . . .	70
5.4	Crítica aos trabalhos analisados . . . . .	74
5.4.1	Lucey (1998) . . . . .	74
5.4.2	Roush (2003) . . . . .	79
<b>6</b>	<b>O trabalho realizado</b>	<b>81</b>
6.1	O espectro do Quartzo . . . . .	81
6.1.1	Estrutura mineral e vibrações cristalinas do quartzo . . . . .	82
6.2	A obtenção de dados . . . . .	84
6.2.1	As bases de dados . . . . .	84
6.2.2	Especificações dos instrumentos usados no RELAB. . . . .	86
6.3	As funções usadas . . . . .	88
6.3.1	Comparação de valores das constantes óticas encontradas na bibliografia. . . . .	91
<b>7</b>	<b>Conclusões e sugestões</b>	<b>93</b>
7.1	Análise dos dados bibliográficos . . . . .	93
7.2	Sugestões . . . . .	94



# Capítulo 1

## Introdução

Os asteróides são uma infinidade de objetos rochosos ou de composição metálica de variadas formas e tamanhos que se acham em órbita em torno ao Sol a variadas distâncias e que, acredita-se, foram formados nas origens do Sistema Solar. Eles são resultado da fusão, colisão e ruptura de diversos objetos que se acham localizados em locais preferenciais do Sistema Solar, mas também espalhados por todo ele. Alguns deles apresentam tamanhos significativos como (1)Ceres, (2)Pallas e (4)Vesta.

O interesse principal para o estudo dos asteróides é que eles são uma parte importante na dinâmica do Sistema Solar assim como na evolução química do mesmo. Como os asteróides são remanescentes do Sistema Solar jovem, a análise da composição poderia permitir decifrar alguns dos processos que tiveram lugar na formação de nossa vizinhança estelar. Por isso nas últimas décadas tem-se enviado variadas missões espaciais. A análise dos dados espectroscópicos destas missões permitiria estabelecer modelos da mineralogia, dos asteróides. A partir desses modelos e de estudos das famílias podem ser estabelecidos outros modelos sobre a evolução do Sistema Solar.

Os meteoritos são fragmentos de outros corpos que atingem na Terra e por tanto, são uma amostra do material extraterrestre “*entregue em casa*”. Acredita-se que os meteoritos sejam, em sua maioria, fragmentos de asteróides e até de planetas, que poderiam indicar informação valiosa sobre o material primordial do Sistema Solar e, portanto também sobre seus processos evolutivos.

O estudo dos meteoritos permite indagar na história e nas origens dos corpos progenitores. Há uma associação dos meteoritos com os asteróides, pois se acredita que a maioria dos meteoritos é originada nas múltiplas colisões que sofrem estes corpos. A compreensão da dinâmica química dos meteoritos pode ajudar a entender melhor a composição e dinâmica do Sistema Solar e sua associação com asteróides, mapear a distribuição de parâmetros químicos e físicos no Sistema Solar primordial.

A determinação remota da composição dos asteróides é feita a través da análise de seus espectros. Como a superfície do asteroide é física e quimicamente complexa o estudo destes espectros não é simples e geralmente é feito a través de outros métodos de análise.

Geralmente são empregados modelos de mistura de substâncias em estado padrão, que são conhecidas como ‘end members’, buscando criar um espectro sintético que reproduza o observado.

Para que esse tipo de metodologia seja de fato útil, é necessário que exista uma boa base de dados de constantes óticas das substâncias que são consideradas componentes dos asteróides.

Este trabalho pretende analisar os diferentes métodos de determinação das constantes óticas baseados nos modelos de transferência radiativa. Modelos de transferência radiativa têm sido desenvolvidos por Lume (Lume – Bowell, 1990) e por Hapke (Hapke, 1994), entre outros autores. Estes modelos teóricos têm sido usados por autores como Lucey (Lucey, 1998) e Skuratov (Shkuratov-Starukhina, 1998) para desenvolver modelos matemáticos para a determinação das constantes óticas a partir de espectros de refletância obtidos em laboratório. No capítulo 3 será feita uma breve descrição da teoria.

Estes modelos geralmente são incluídos no chamado modelos IMSA (Isotropic Multiple Scattering Approximation). E se contrapõem aos modelos de código numérico computado propostos por outros autores como Mishchenko, Dlugash, Yanovitskij e Zakharova (MSYZ). Mishchenko e seus colegas têm criticado reiteradamente o modelo IMSA, afirmando que ele é inexato e que leva a deduzir funções de fase erradas. Não entanto, essa crítica não passa de fundamentações teóricas que não tem bases de dados experimentais, e tudo acaba num modelo matemático que indica correções a IMSA a partir de soluções exatas das equações de Maxwell.

Esses autores usam a teoria para modelar a composição superficial e assim a maioria destes modelos (IMSA) precisa das seguintes aproximações e supostos básicos:

1. Assumir que a equação de transferência radiativa (RTE) é válida para o problema, mesmo quando desenvolvida para partículas isoladas. Esta teoria pode ser bem aplicada para nuvens e atmosferas; a aplicação em solos e aglomerados de grãos pode não ser uma aproximação válida.
2. Supor que o meio tem propriedades contínuas que levam à absorção e espalhamento aleatório em todo o volume do corpo. Para isso são supostas propriedades médias para as partículas.
3. Ignorar as interações entre as partículas que requerem o seguimento da fase e a amplitude da luz difusa.

4. Supor que as partículas são esféricas e de tamanhos (raios) comparáveis ao comprimento de onda.
5. Ignorar os efeitos da polarização da luz (análise escalar)

Se bem essas suposições são aceitáveis para um meio de densidade baixa como nuvens, a validade para solos resulta um pouco suspeita, pois nada parece indicar que o comportamento da luz será o mesmo na presença de partículas isoladas que frente a um aglomerado de partículas, onde a trajetória pode ser mudada por diferentes causas e cada raio pode sofrer diferentes interferências.

É necessário então, submeter esses modelos a verificações experimentais mais complexas. Por exemplo, usando amostras de meteoritos e ou regolitos planetários. Também deveriam ser introduzidos fatores experimentais que modelem as condições de empacotamento dos regolitos da superfície.

A idéia geral do trabalho é analisar os formalismos realizados nos modelos usados para a determinação das constantes óticas pelos autores mais referenciados nos trabalhos de mineralogia e comparar com dados experimentais. As críticas a estes trabalhos são apresentadas no capítulo 4.

Quando assumida a validade da equação de transferência radiativa, se assume que os processos fundamentais que modificam a passagem da luz num meio ideal dado são a emissão, o espalhamento e a absorção, gerando assim uma variação de radiação. A radiação incidente interage com as partículas que têm um índice de refração relativo ao meio que a circunda e assim certa quantidade de potência se extingue.

O índice de refração complexo é representado como a soma de dois componentes, uma parte real diretamente ligada à reflexão e outra parte imaginária ligada a extinção. Sendo  $n$  a parte real desse índice e  $k$  a parte imaginária. Como o próprio índice é uma propriedade característica, se deduz que tanto  $n$  como  $k$  vão ter também essa qualidade e por tanto são propriedades características que vão depender somente do comprimento de onda, da composição do material e da temperatura.

Devido às críticas realizadas sobre os métodos de Lucey(Lucey,1998) e Shkuratov (Shkuratov, Staruhkina,1999), tem-se analisado uma metodologia proposta por Roush (Roush, 2002) que combina duas técnicas, a primeira descrita por Clark (Clark – Roush, 1984) que depende dos formalismos de Hapke, tal como nos modelos de Lucey e Shkuratov, e a segunda dependente da análise de Kramer-Kronig. A aplicação de ambas as técnicas permite a determinação de  $n$  e  $k$  por interação sucessiva. O trabalho de Ted Roush será discutido comparativamente no capítulo 5.

A idéia geral do trabalho é também verificar que as hipóteses são corretas, suficientes e não excessivas, pois nem sempre o rigor e a precisão numérica conduzem automaticamente a predições corretas se as premissas fundamentais são deficientes.

A questão principal será verificar se as suposições feitas e se o modelo desenvolvido por Roush conduzem a funções eficazes que permitam predizer a mineralogia, e se o modelo geral é inversível, ou seja, se conhecendo a mineralogia pode ser estimado o espectro.

Um detalhe não menor é que neste trabalho não será desenvolvida (criada) teoria alguma sobre o comportamento dos solos ou se é melhor um modelo de lâminas ou de partículas quase esféricas. Neste trabalho se parte da teoria já desenvolvida por Hapke e da metodologia usada por Ted Roush tentando-se verificar o bom ajuste entre os resultados de laboratório e os modelos minerais aplicados aos asteróides.

# Capítulo 2

## Formação de bandas espectrais em sólidos

### 2.1 Espectroscopia

A espectroscopia é o estudo da interação entre a radiação eletromagnética com a matéria. A análise espectral baseia-se em que determinadas transições eletrônicas, atômicas ou moleculares são fenômenos quânticos que absorvem ou emitem energia. Os planetas e asteróides contem bandas de absorção devido aos minerais presentes nos corpos rochosos, ou a elementos ou moléculas presentes nas atmosferas.

Quando uma molécula absorve radiação, alguns de seus elétrons de valência passam do estado fundamental para um estado excitado envolvendo uma absorção de certa quantidade energia. No caso de elétrons que pertencem a orbitais moleculares, a frequência em que é absorvida a radiação depende além dos elementos do orbital molecular ocupado pelos elétrons envolvidos na transição.

Ou seja, não é o mesmo uma ligação  $\sigma$  que uma ligação  $\pi$  e, ainda mais, o resultado de transições intra-ligantes, como no caso multiplicidade de ligações duplas, é diferente dependendo do tipo de alternância entre as ligações enlaces. Como há diferentes tipos de ligações, mesmo nos silicatos, devemos analisar os diversos tipos de transições:

Transições  $\sigma \rightarrow \sigma^*$

Este tipo de transições ocorre em ligações  $C-H$  ou  $Si-Si$ . A energia requerida para este tipo de transições é muito alta e geralmente ocorre na banda do UV de vácuo, e ocorre para  $\lambda < 150nm$ .

Transições  $n \rightarrow \sigma^*$

Ocorre para  $150nm < \lambda < 200nm$ , o qual ainda é muito alto, embora menor que



para as transições  $\sigma \rightarrow \sigma^*$ . Estas transições pertencem ao UV longínquo, e corresponde a ligações com pares de elétrons não compartilhados, ou seja, com elétrons não ligantes (elétrons em orbitais atômicos ou do elemento) que passam para um orbital molecular.

Transições  $\pi \rightarrow \pi^*$  e transições  $n \rightarrow \pi^*$

Ocorrem para  $200nm < \lambda < 700nm$ , o que envolve a região UV-V. Isto requer que as espécies participantes da transição aportem sistemas de elétrons  $\pi$ . Geralmente estes grupos são chamados de grupos cromóforos e pertencem a compostos não saturados, sistemas aromáticos, ou de múltiplos ciclos. As energias das transições  $\pi \rightarrow \pi^*$  são relativamente altas caindo dentro da região do UV longínquo e próximo. Entanto as transições  $n \rightarrow \pi^*$  requerem menos energia correspondendo à região do UV próximo e à região visível do espectro.

Como estas transições envolvem energias desde UV ate IR-L dependendo da transição, a análise subsequente dos espectros das diferentes regiões pode envolver informação importante das características mineralógicas do asteróide. Por isso geralmente o que se faz é medir o espectro em vários pontos com bandas estreitas, tanto para espectrometria ou espectrofotometria. Medindo diferentes pontos, pode-se estabelecer uma idéia aproximada da forma do espectro.

### 2.1.1 Espectrometria de reflexão

O albedo e as cores dos asteróides estão relacionados à composição química dos mesmos. Mas os detalhes da estrutura física e química dos diversos tipos de asteróides não podem ser resolvidos facilmente, em geral, sendo o resultado de análises complexas e refinadas que incluem modelos do comportamento da estrutura superficial do asteróide.

A maioria destes modelos se baseia nas equações de transferência radiativa e foram, em principio, desenvolvidos por Lumme (Lumme e Bowell, 1981) e por Hapke(1983 - 1994). Estes modelos se baseiam nas propriedades estruturais dos asteroides para determinar as dependências da geometria, da estrutura superficial e da composição química do asteróide a partir de medidas de albedo ignorando as dependências da extinção e a polarização do meio interplanetário.

Estudos espectrais podem ajudar na determinação da composição superficial dos asteróides através da obtenção de espectros em diversos comprimentos de onda e, da comparação destes espectros com medidas de laboratório. A análise dos espectros de reflexão é a principal fonte de informação para determinar a composição dos corpos rochosos; mas também podem ser analisados os espectros de emissão térmica e raios X.

Como o envio de retorno de sondas é uma atividade onerosa, modelar o comportamento espectral de diversos minerais é uma prioridade para o aprofundamento dos estudos mineralógicos de asteróides e meteoritos.

Grande parte dos asteróides e meteoritos possui bandas de absorção na região do visível e do NIR causadas pela absorção de radiação do  $Fe^{+2}$ . Esta banda pode ser reconhecida em muitos dos espectros de reflexão de asteróides. Estas bandas de absorção, identificadas principalmente em asteróides ocorrem devido às transições eletrônicas nos átomos de ferro de olivinas e piroxênios.

Quando átomos metálicos se acham em posições cristalográficas específicas, o campo resultante da distribuição espacial dos cátions e ânions causa uma separação nas camadas de valência do ferro (por ser um metal de transição) assim podem ser absorvidos fótons de uma frequência particular cuja energia satisfaça a necessidade energética dos elétrons. Esta frequência depende do metal e da configuração cristalina.

Outro tipo de banda aparece quando há transferência de cargas entre duas camadas de um mesmo íon, sempre que estejam em posições cristalográficas muito próximas, mas, estas frequências são mais altas, pois os processos envolvidos são mais energéticos. A superposição de bandas no UV é consequência destas transições de campos cristalinos.

Também existem bandas causadas pelas vibrações e movimentos nas ligações moleculares. Estas bandas se devem a alongamentos, rotações, flexões, modificações de ângulos ou trocas de plano de simetria. Estes modos vibracionais acontecem a frequências específicas para cada substância.

## 2.2 Mecanismos de absorção

Os mecanismos pelos quais a radiação eletromagnética interage com a matéria condensada podem ser classificados em quatro: rotações, vibrações, excitação eletrônica e portadores livres. Estes mecanismos serão discutidos nesta seção de forma qualitativa.

### 2.2.1 Rotações moleculares

As moléculas que possuem momento dipolar elétrico permanente contribuem à constante dielétrica complexa devido às modificações da orientação quando submetidas a campo elétrico. Nos líquidos e gases as moléculas podem girar e assim causar polarização elétrica no meio. Já nos sólidos a possibilidade de rotação da molécula vai depender da forma e forçadas interações com a rede. Em geral quanto mais

esférica e menor for a molécula e quanto menor o momento dipolar, a molécula vai ter maior possibilidade de se reorientar como dipolo.

Moléculas que se reorientam tem um período de tempo necessário para a passagem de uma orientação para outra chamada de tempo de relaxação. Se o período de aplicação de uma radiação é maior que o período de relaxação, a substância atinge uma nova orientação, e o valor de constante dielétrica aumenta. Pelo contrário, se o tempo de aplicação da radiação é menor que o período de relaxação, as moléculas não tem tempo de girar e a constante dielétrica é pequena.

A agitação termal faz com que as moléculas se orientem randomicamente e, assim, as mudanças da constante dielétrica associada às vibrações rotacionais diminuem com o aumento da temperatura.

O exemplo típico das mudanças nas constantes dielétricas e, portanto, nas constantes óticas, a causa da polaridade da molécula está dada pela água.

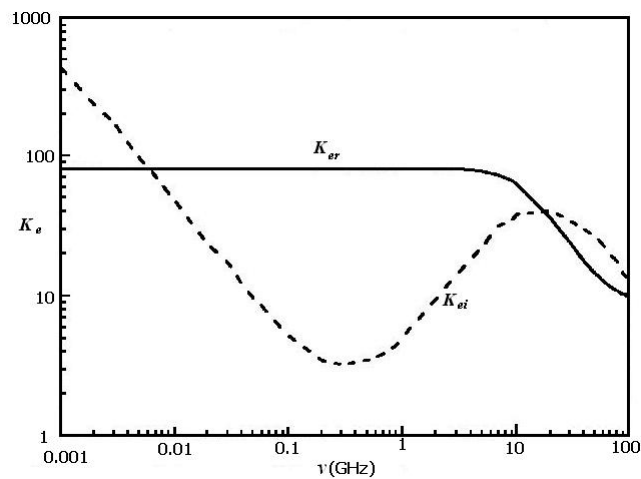


Figura 2.1: Variação do valor da constante dielétrica para água a 27° (Hapke, 1993)

## 2.2.2 Vibrações da rede

Um sólido pode ser considerado como um arranjo de íons positivos e negativos. Se esse arranjo é perfeitamente periódico tem-se um sólido cristalino. Assim cada íon pode vibrar numa posição dada em torno ao seu equilíbrio. Em geral na descrição mecânico-quântica das vibrações de rede fica implícita a produção de ondas chamadas fonônicas. Estas ondas são discretas e quantizadas.

Em geral, tanto na mecânica quântica como na física clássica são dois os tipos de soluções achadas. Um tipo descreve os movimentos conjuntos dos íons positivos

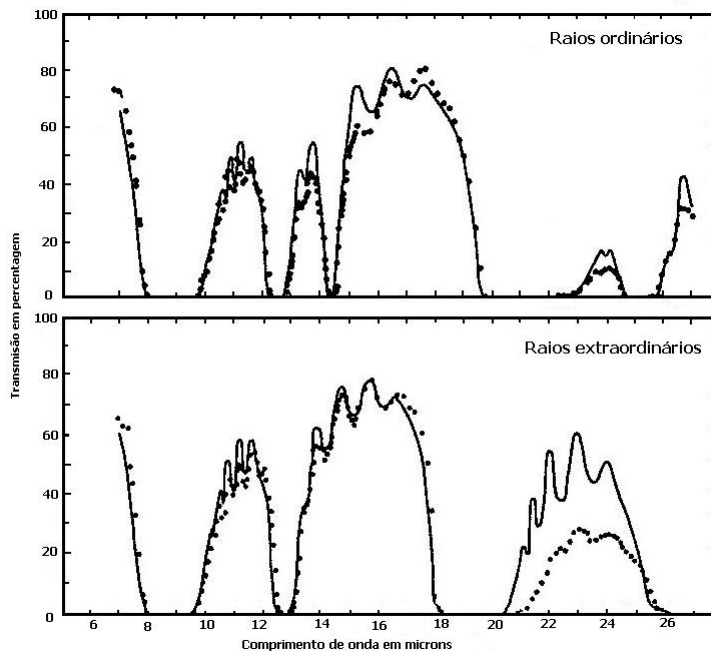


Figura 2.2: Mostra as medidas de absorção vibracional do espectro de quartzo e o ajuste para a teoria clássica de dispersão (Hapke, 1993)

e negativos. Este movimento é randômico e não gera um momento dipolar associado com as vibrações, portanto, não é possível que ele interaja com a radiação eletromagnética. Estas soluções constituem o que é chamado de ramo de vibrações acústicas do espectro porque descrevem a propagação da pressão e o perfil da onda.

Um segundo tipo de solução inclui as ondas que descrevem o movimento em fase dos íons, o que gera um momento dipolar associado ao movimento. Por isso este tipo de movimento produz ondas que interagem absorvendo ou emitindo radiação eletromagnética. Estas vibrações da rede pertencem ao chamado ramo de vibrações óticas do espectro.

Neste último caso, as interações maiores são produzidas quando o deslocamento iônico tem como resultado a produção de um momento dipolar transverso. Assim a radiação pode ser absorvida quando elementos da rede cristalina passam de um estado de vibração para outro de maior energia. O sistema pode retornar para o estado de menor energia emitindo fótons, ou irradiando a energia em forma de calor.

As absorções mais fortes são as associadas às vibrações fundamentais da malha cristalina, estas geralmente ocorrem no IR. Há alguns harmônicos em comprimentos de ondas menores.

## 2.3 Transições elétricas

### 2.3.1 O modelo de elétrons num sólido

As absorções que acontecem no UV, V e NIR podem ser atribuídas a diferentes mecanismos, mas a maioria das vezes, são atribuídas a mecanismos que envolvem saltos individuais de elétrons de um estado de energia para outro estado de energia maior. Essas transições podem ser descritas pelo modelo de bandas eletrônicas de um sólido.

Qualquer sistema clássico de oscilação pode ser caracterizado pela frequência de ressonância. Por exemplo, no caso do pêndulo esta frequência está determinada pelo comprimento. Dois pêndulos idênticos isolados terão a mesma frequência de ressonância, mas se eles são acoplados o número de ressonâncias dobra, pois o sistema atua como um todo. Quanto maior acoplamento, maior o número de ressonâncias.

Do mesmo modo, os elétrons são sistemas que se acham em equilíbrio associados a estados de energia que podem ser calculados pelas equações de Schrödinger. Como os elétrons estão integrados no sólido, há uma sobreposição das funções de onda dos elétrons mais externos que perturbam os elétrons internos. O resultado de esta perturbação é a divisão dos níveis de energia faz com que, quando há uma rede sólida, exista um grande número de estados de energia levemente separados.

Há assim uma sobreposição dos níveis de energia mecânico-quânticos devido à largura dos mesmos. Como resultado disso o sistema adquire uma estrutura na qual existem várias bandas largas contínuas, nas quais os elétrons podem existir. Estas bandas estariam separadas por pequenas lacunas nas quais não haveria solução para a equação de onda.

A banda de maior energia na qual todos os estados eletrônicos estão ocupados é chamada de **banda de valência**. As funções de onda dos elétrons nas bandas de valência geralmente mostram que se localizam em átomos discretos ou íons. A banda de menor energia na qual nem todos os estados estão ocupados é chamada de **banda de condução**, que pode estar parcialmente cheia ou completamente vazia.

Existem estados de energia inferiores ao da banda de valência e estados de energia superiores ao da banda de condução e também podem ser chamado propriamente de valência e banda de condução. No entanto, se não há elétrons nessas outras bandas, elas não terão intervenção na absorção ou emissão e, portanto podem ser ignoradas.

O importante é que os elétrons na banda de condução, mesmo pertencendo a algum átomo da rede, não estão ligados a um átomo ou íon específico e tem a possibilidade de se deslocar quase livremente pela rede sólida, o que constitui uma contribuição às condutividades elétrica e térmica. A média da largura de separação

entre as duas bandas é de vários eV.

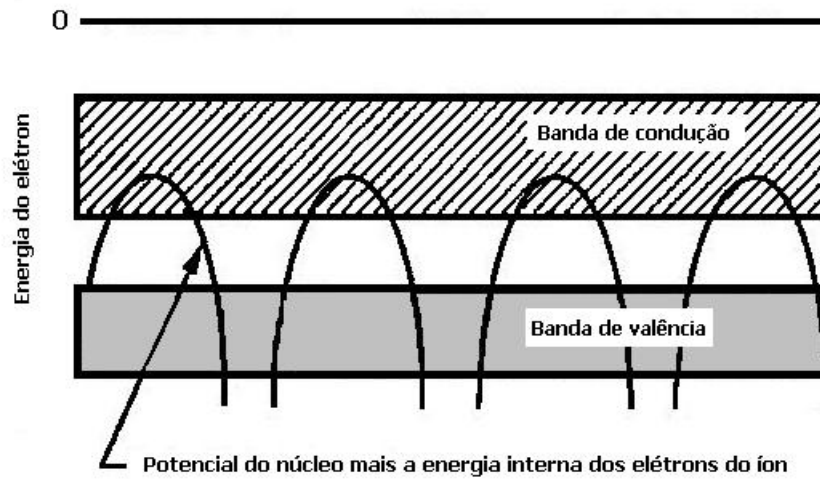


Figura 2.3: Diagrama esquemático das bandas numa rede sólida (Hapke, 1993)

Assim, se um elétron é excitado da banda de valência para a banda de condução, ele gera um íon com um excesso de carga positiva. Isso gera uma vacante eletrônica dentro da rede. Esse “*vácuo*” geralmente é chamado de *buraco*.

O próprio buraco pode “*pular*” de um lugar para outro conseguindo que um elétron do íon secundário passe para o local onde se achava originalmente. O buraco gera então portadores de carga positiva. Este elétron deve transpor a barreira de potencial que separa a esses íons. Este movimento geral de elétrons e buracos, da origem a um grande número de formas de absorção de radiação.

### 2.3.2 Centros de cor

Um sólido real tem muitas imperfeições em sua estrutura; estas imperfeições podem ser:

1. Vacâncias: onde um íon pode ter “sumido” da rede.
2. Interstícios: é um local onde um íon foi forçado a ficar entre outros dois íons mesmo não existindo um local dentro da rede.
3. Impurezas: às vezes há íons da rede que são substituídos por outros íons que não pertencem à substância.

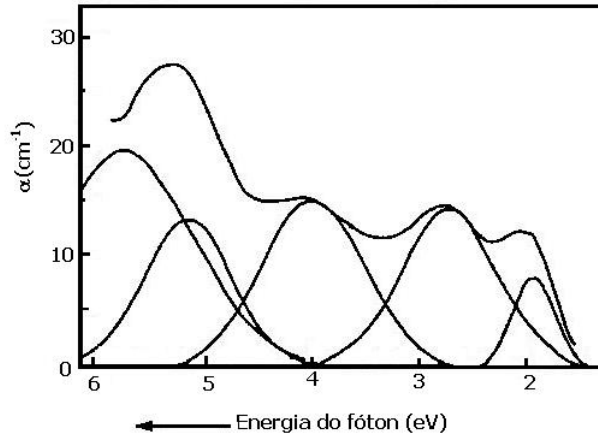


Figura 2.4: Bandas de absorção num silicato de sódio quando irradiado por RX. A curva superior é o espectro de absorção enquanto as outras mostram o espectro das bandas em forma individual. Essas bandas de absorção são causadas por inclusões comuns nos alogenetos de álcalis e nos óxidos metálicos (Hapke, 1993)

Geralmente um excesso (ou defeito) de carga acompanha essa imperfeição da rede, por isso, para preservar a neutralidade elétrica deve existir, perto dela, uma imperfeição secundária que possua a carga oposta a primeira imperfeição.

Um elétron pode orbitar uma imperfeição positiva ou mesmo um buraco, criando assim uma entidade muito parecida com um átomo de hidrogênio. Este sistema é chamado de centro de cor, e pode acontecer absorção quando o elétron (ou o buraco) salta para um nível de energia superior, como se fosse mesmo um “átomo de hidrogênio” .

## 2.4 Efeitos dos campos cristalinos nas transições

Os íons dos elementos de transição d ou f geralmente tem os orbitais degenerados. Por isto os elétrons têm iguais possibilidades de se achar em qualquer estado. No entanto, quando se trata de íons sólidos, o campo elétrico que rodeia aos íons não é isotrópico.

Esta anisotropia modifica as energias dos orbitais degenerados fazendo com que esses orbitais tenham diferentes níveis de energias; um sucesso conhecido como crystal-field splitting. Os elétrons saltam de um orbital para outro de diferente energia por absorção ou emissão de fótons.

A probabilidade desta transição deve cumprir o princípio de exclusão de Pauli e

a regra de Laporte. Por tanto este tipo de transições só é possível em redes, pois fica impossível a existência de estas transições em átomos isolados se não há orbitais degenerados.

O mecanismo é chamado de absorção de campo cristalino. As bandas de  $Fe^{+2}$  em 1.0 e 2.0  $\mu m$  assim como a de  $Fe^{+3}$  são importantes exemplos deste tipo de transições. A figura 2.5 mostra o espectro de absorção da Enstatita um silicato máfico de magnésio.

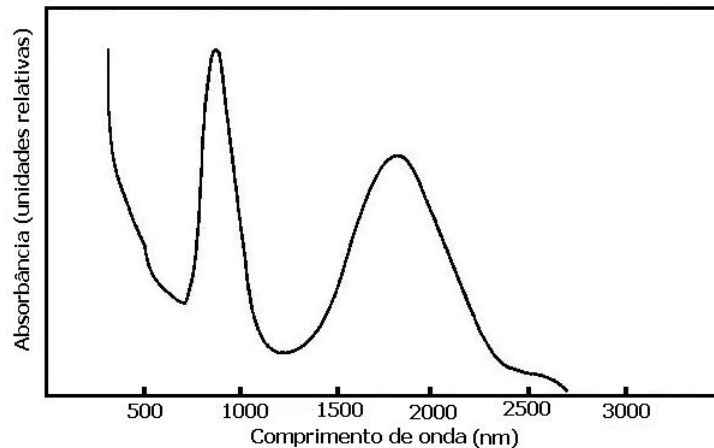


Figura 2.5: Espectro de bandas de absorção da enstatita mostrando as bandas de absorção do Ferro(Hapke, 1993)

### 2.4.1 Transferência de carga

A transferência de carga é um processo pelo qual um elétron migra de um íon para outro vizinho, o qual não necessariamente deve ser da mesma espécie.

Como a transição não necessariamente ajusta à proibição de Laporte, as bandas podem ser muito fortes. Em este caso como ambos os íons podem ser considerados um único sistema, o cálculo do comprimento de onda no qual ocorrerá a transferência é mais complexo. Geralmente a transferência de cargas inter-bandas ocorre no UV. Na figura 2.6 se observa transferência entre  $Fe^{+2}$  e  $Ti^{+4}$ .

### 2.4.2 Éxcitons

Quando um elétron é excitado e levado para a banda de condução, ele deixa um buraco na banda de valência. Este buraco pode atrair um elétron não ligado formando



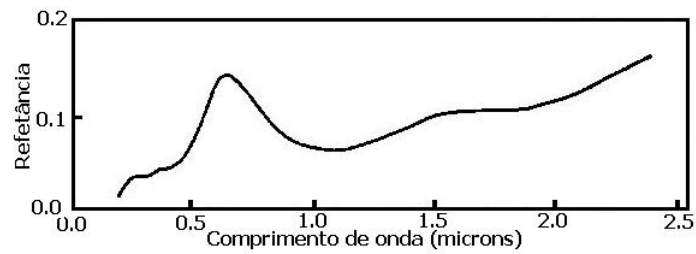


Figura 2.6: Espectro de refletância de poeira de vidro de silicato mostrando as bandas de transferência do Ferro e do Titânio (Hapke, 1993)

um sistema que se comporta como um hidrogênio chamado de éxciton. Este sistema pode absorver luz por interações e transições entre outros níveis de energia da rede.

As energias das transições que envolvem os éxcitons são geralmente menores que as passagens entre a banda de valência e a de condução e as bandas aparecem no UV.

A figura 2.7 mostra o índice de refração da fosterita, onde se observa uma banda de transferência de éxcitons a 9.0 eV.

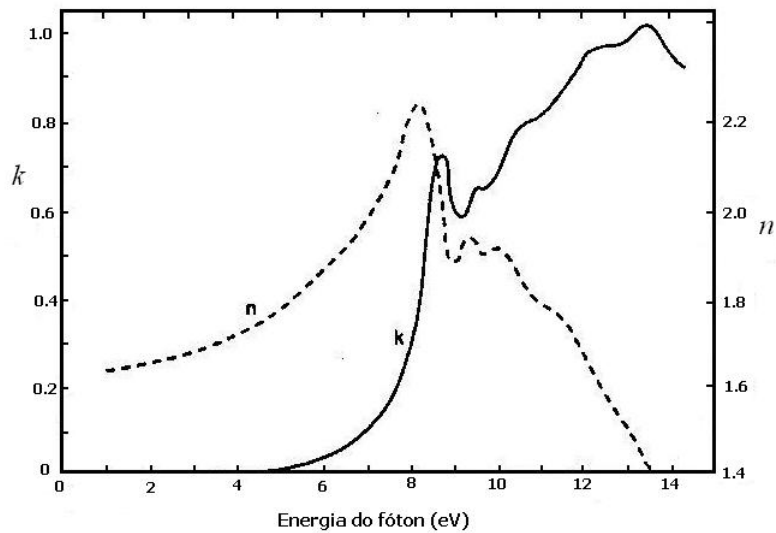


Figura 2.7: Valores das constantes óticas da fosterita mostrando as bandas de éxcitons (Hapke, 1993)

### 2.4.3 Inter-bandas e transições de impurezas

Se o comprimento de onda é suficientemente curto, pode ocorrer absorção porque um elétron pode ser excitado para passar da banda de valência para a de condução. Geralmente este tipo de banda ocorre no UV longínquo, mas para alguns materiais, os semicondutores, esta transição pode ocorrer inclusive no térmico, por exemplo, isto pode ocorrer com o Ge e o Si.

As bandas de absorção que estão associadas com este tipo de transições são muito fortes. Frequentemente elétrons de impurezas têm níveis de energia sem a proibição entre a banda de valência e a da condução; nesse caso podem ocorrer transições nas quais um elétron pode ser excitado da banda de valência para um nível impuro ou do nível impuro para a banda de condução.

### 2.4.4 Portadores livres

Os portadores de carga livres incluem tanto os elétrons como os buracos e podem absorver luz quando são estimulados pelo campo elétrico externo da radiação incidente convertendo parte da energia incidente em vibrações da rede. Como o elétron pode-se propagar se a estrutura é periódica, aparecem absorções quando o elétron colide com as imperfeições da rede.

Estas imperfeições são devidas à vacâncias na rede ou deslocamentos de íons por movimentos térmicos. Assim os portadores livres podem ser fontes de absorção importantes em metais e semicondutores. Estas absorções podem ocorrer em uma grande faixa de comprimentos de onda, principalmente as ondas longas.

## 2.5 Forma da banda e efeitos da temperatura

Analisa-se a expressão:

$$K_{er} = n^2 - k^2 = 1 + \frac{\nu_p^2(\nu_0^2 - \nu^2)}{(\nu_0^2 - \nu^2)^2 + \Xi^2\nu^2} \quad (2.1)$$

Esta é a equação que descreve a banda de absorção de uma partícula carregada que oscila num potencial parabólico que tem forma lorentziana, o que é uma suposição razoável para os mecanismos considerados anteriormente principalmente no IR onde as bandas estão associadas às vibrações da rede.

As bandas na faixa de onda curta podem ter outras formas, mas em geral a forma da banda depende da largura do potencial eletrônico assim com das distâncias entre os íons vizinhos. Estas distâncias não estão bem definidas, pois os íons estão em

constante vibração térmica. O efeito médio destas vibrações é causar uma passagem entre formas de curvas lorentziana e gaussianas que se alargam com o incremento da temperatura.

Além disso, como o aumento de temperatura gera a dilatação dos sólidos, isto significa que haverá uma maior distância entre os íons da rede, alargando assim o potencial. Como o comprimento de onda da função de onda do elétron depende da largura do potencial, há uma variação na energia do estado. Como em geral a energia diminui quando aumenta a temperatura assim também diminui com o comprimento de onda do centro de absorção. Este efeito é visto na figura seguinte.

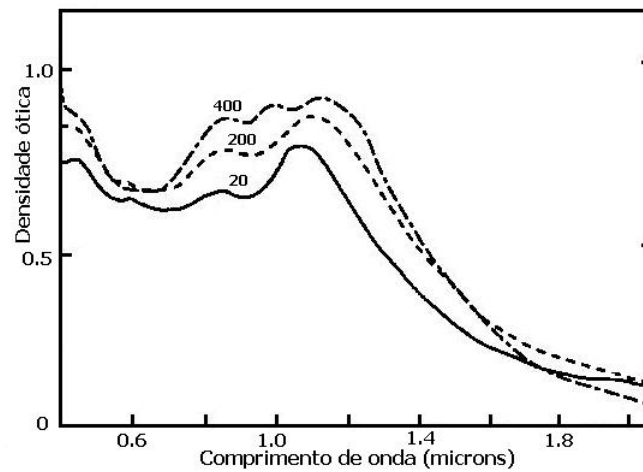


Figura 2.8: Espectro de absorção da fosterita ilustrando os efeitos da Temperatura (Hapke, 1993)

# Capítulo 3

## A teoria na transferência radiativa

### 3.1 Introdução

Neste capítulo pretende-se mostrar o comportamento da radiação frente a uma partícula isolada ou um grupo de partículas empacotadas, assim como definir e analisar alguns dos parâmetros básicos necessários para entender as derivações da equação de transferência radiativa.

O objetivo geral é a apresentação das funções que são usadas no cálculo de refletância bidirecional e analisar como é a influência destas funções na refletância. Logo se tentará verificar a confiabilidade das hipóteses realizadas nos trabalhos analisados e determinar como podem afetar os resultados as variações feitas nessas hipóteses.

Para isso são apresentadas as principais funções desenvolvidas na teoria de Hapke sobre refletância bidirecional e chegar a uma aproximação do significado físico para compreender que variações e quais variáveis afetam o cálculo das constantes óticas.

### 3.2 Generalidades

Os solos dos asteróides do Sistema Solar são formados por partículas de diferentes tamanhos, que geralmente estão muito juntas, tornando a superfície irregular e muito longe de poder ser considerada como uma superfície suave. No caso particular dos corpos menores a dinâmica das colisões e as interações com o próprio meio geram ainda irregularidades comparáveis com o próprio tamanho.

Existe também outro conjunto de fenômenos que causam modificações químicas e físicas nas superfícies e que são conhecidos como processos de interperismo espacial.

O interperismo físico conduz à degradação da rocha sem necessidade de alteração química nos minerais constituintes. Esta degradação pode ser causada em geral pela ação dos ventos solares, impactos de micrometeoritos e raios cósmicos.

Nestas condições é coerente supor que a aglomeração entre partículas da superfície tem orientação randômica e, portanto, quando a superfície é iluminada de diferentes direções, a absorção, a extinção e o espalhamento vão depender tanto da direção da chegada da irradiância como da direção de observação.

Também é certo supor que a intensidade dos raios que penetram numa determinada distância tem uma redução interna. Esta redução interna não é causada só pela extinção de forma exponencial determinada unicamente pela espécie química que compõe o meio, porem há também uma redução de intensidade que é gerada por vários efeitos físicos determinados pelo acaso da distribuição das partículas e pela estrutura cristalina e mineral.

Inicialmente se estuda o comportamento da radiação no caso mais simples: uma partícula esférica e isolada que espalha isotropicamente. Analisam-se quais são os fatores superficiais que determinam modificações no espalhamento da luz pela partícula, para logo chegar a uma expressão de espalhamento não isotrópico para uma partícula esférica isolada. Finalmente neste capítulo tenta-se analisar um modelo onde as condições da superfície da partícula levam à necessidade de usar funções empíricas para modelar o comportamento.

Também é estudado o comportamento da luz frente aos aglomerados de partículas, analisando quais são as hipóteses válidas que podem ser feitas para se ajustar a teoria. A idéia não é de se criar uma teoria, porém analisar as hipóteses usadas nos trabalhos de referência, verificar sua adequação para se obter – dentro da teoria desenvolvida por Hapke (Hapke, 1994) – a seqüência de equações para chegar aos resultados mais ajustados com os dados de laboratório. Este capítulo, é completamente desenvolvido a partir dos trabalhos de Hapke que aparecem na bibliografia.

### 3.3 Partícula isolada

Se uma partícula é pequena, esférica e homogênea, as eficiências de espalhamento, absorção e extinção podem ser calculadas pela teoria de Mie, que na verdade é uma solução analítica das equações de Maxwell para o espalhamento de radiação por partículas esféricas e homogêneas, o que também é chamado de dispersão de Mie.

Mesmo que partículas esféricas perfeitas não sejam achadas nos solos dos planetas ou asteróides, elas podem ser achadas na natureza nas nuvens atmosféricas, e se constituem numa abstração útil no estudo de meios complexos como as nuvens interestelares, o meio interplanetário e as caudas de cometas.

A potência que atravessa uma unidade de área perpendicular à direção de propagação expressada em ângulo sólido  $\Omega$  na posição é chamada de radiância, intensidade ou brilho.

Num campo de radiação de luz não colimada, a potência que atravessa uma unidade de área perpendicular à direção de propagação é chamada de irradiância ou intensidade, há uma diferença com a radiância entanto a última se refere à luz colimada num ângulo sólido. Geralmente a irradiância se simboliza com  $J$ . As dimensões de  $I$  e  $J$  são:

$$[I] = \text{energia} \cdot (\text{tempo})^{-1} \cdot (\text{área})^{-1} \cdot (\text{ângulo sólido})^{-1} \cdot (\text{frequência})^{-1} \quad (3.1)$$

O que equivale a:

$$[I] = \text{erg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{sterad}^{-1} \cdot \text{Hz}^{-1} \quad (3.2)$$

Com um raciocínio semelhante:

$$[J] = \text{erg} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1} \quad (3.3)$$

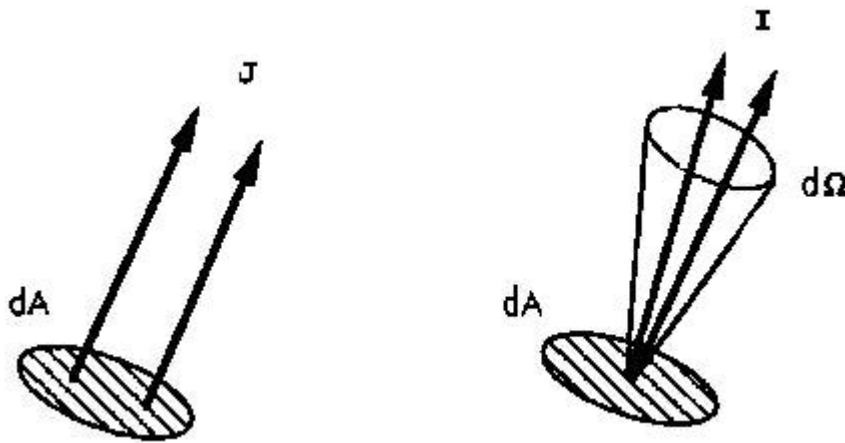


Figura 3.1: Diagrama simples de Irradiância e Radiância

A teoria de Mie pode ser usada para modelar esferas, cilindros infinitos e até esferas estratificadas, ou em geral, quando se trata de casos em Astronomia, podem ser escritas soluções com variáveis separadas para a dispersão radial e angular da luz, mesmo com dependência de soluções respeito da forma das partículas e também

podem ser expressadas soluções de campos magnéticos e elétricos da onda incidente e espalhada. A solução de Mie para a dispersão é válida para todas as dimensões possíveis de diâmetro de partícula e comprimentos de onda, embora a técnica se complique um pouco com somatórios infinitos. As hipóteses para a solução final incluem que o material seja homogêneo, isotrópico e ópticamente linear, além que irradiados por uma onda plana de extensão infinita. Não entanto, com pequenas alterações podem ser obtidos bons resultados quando a solução é aplicada a camadas de esferas ou camadas esféricas.

### 3.3.1 Eficiências

Suponha-se agora que há certa quantidade de irradiância  $J$  incidindo sobre uma partícula onde a porção dessa irradiância que é afetada é  $P_E$  que pode ser definida como a potência removida do feixe incidente. Em função disso a seção eficaz da partícula é definida como:

$$\sigma = \frac{P_E}{J} \quad (3.4)$$

Certa porção de potencia é absorvida ( $P_A$ ) e certa porção é espalhada ( $P_S$ ), podemos então definir a seção eficaz de espalhamento e de absorção como foi definida a própria seção eficaz. Assim:

$$P_E = P_A + P_S \quad (3.5)$$

A razão entre a seção eficaz e a seção geométrica da partícula  $\sigma = \pi a^2$ , é chamada de eficiência, por tanto podemos definir:

$$Q_E = \frac{\sigma_E}{\sigma} \quad (3.6)$$

$$Q_S = \frac{\sigma_S}{\sigma} \quad (3.7)$$

$$Q_A = \frac{\sigma_A}{\sigma} \quad (3.8)$$

E portanto:

$$Q_E = Q_S + Q_A \quad (3.9)$$

Assim se o albedo de espalhamento de partícula isolada é definido como a razão entre a potência espalhada e a potência extinguida pela partícula pode-se escrever:

$$\omega = \frac{P_S}{P_E} = \frac{\sigma_S}{\sigma_E} = \frac{Q_S}{Q_E} \quad (3.10)$$

e se define a função de Espat como:

$$Q_E = \frac{Q_A}{Q_S} = \frac{1 - \omega}{\omega} \quad (3.11)$$

Quando a partícula é grande comparada com o comprimento de onda, ou seja, quando o fator de tamanho  $X \ll 1$  e pode ser desconsiderado qualquer tipo de polarização na luz incidente podemos achar aproximações por ótica geométrica usando um modelo de lâmina equivalente.

Neste caso as eficiências de espalhamento e absorção podem se obter pelas seguintes expressões:

$$Q_S = S_e + (1 - S_e) \frac{1 - S_i}{1 - S_i \Theta} \Theta \quad (3.12)$$

$$Q_A = 1 - Q_S = (1 - S_e) \frac{1 - S_i}{1 - S_i \Theta} \Theta \quad (3.13)$$

Sendo

$$S_E \cong \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2} + 0.05 \quad (3.14)$$

Onde  $S_e$  é o fator de reflexão interna para a luz emergente,  $S_i$  o fator de reflexão interna para a luz incidente e  $T$  o fator de transmissão interna. Este resultado se baseia em que em partículas esféricas  $S_e = S_i$ . Nas mesmas condições iniciais o fator de transmissão interna pode ser aproximado a:

$$\Theta \cong e^{-\alpha \langle D \rangle} \quad (3.15)$$

Onde  $D$  é o diametro médio da partícula e  $\alpha$  é o coeficiente de absorção:

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (3.16)$$

### 3.4 Refletância

Geralmente os termos refletância e refletividade se referem a frações de luz espalhada ou refletida em função da luz incidente. Mas algumas vezes o termo refletividade



se refere à reflexão especular enquanto refletância à reflexão difusa. Mas a diferença mais notória é feita quando se toma refletividade como a razão entre as intensidades (amplitudes) do campo refletido em relação ao campo incidente e a refletância como a razão entre as potências. Assim a refletividade torna-se um número complexo segundo as equações de Fresnel, entretanto a refletância sempre será um número real positivo. Assim a refletância é o quadrado da refletividade.

Há vários tipos de refletância dependendo da geometria, do grau de colimação da fonte e do detector: cônica, direcional ou hemisférica. Ignorando os efeitos da polarização, podemos definir a refletância bidirecional de um meio como a razão entre a radiância espalhada na direção do detector e a irradiância incidente. Isto é equivalente à radiância emergindo numa direção dada da superfície iluminada por uma irradiância colimada por unidade de irradiância incidente.

Quando uma radiância é espalhada por uma partícula em alguma direção faz um ângulo  $\Theta$  com a direção de propagação da irradiância incidente.  $\Theta$  é chamado de ângulo de espalhamento e se define  $g = \pi - \Theta$ , que é o ângulo de fase. O ângulo de fase é a grandeza na qual são feitos os cálculos das funções que determinam os valores da refletância bidirecional. Entanto a vantagem da teoria de Mie é que as

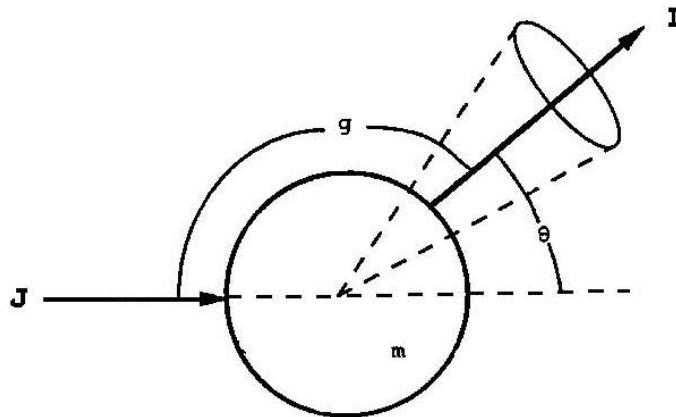


Figura 3.2: Diagrama angular do espalhamento de uma partícula isolada

soluções só dependem do índice de refração  $m = n + ik$  e o raio da partícula a grande limitação está no próprio parâmetro  $r$ .

$$I = J\sigma Q_S \frac{p(g)}{4\pi} \quad (3.17)$$

## 3.5 Espalhamento de aglomerados de partículas

A análise anterior é válida para partículas esféricas e isoladas mas, a difração pode ser associada com o espalhamento porque, por interferência construtiva das ondas de luz que passam através da partícula, são geradas ondas que aparecem como radiação da partícula no cone de sombra.

Suponha-se uma lâmina de esferas não absorventes todas em contato. O espaço entre as partículas gera difração, mas também pode gerar interferência e ambas estão associadas a esses pequenos espaços entre as partículas. Somente a luz que passa por eles contribui para a difração, assim quando há várias camadas de pequenas, a luz que passa por um desses pequenos espaços pode não incidir num outro, então os desvios totais, quando há várias camadas faz com que a difração não seja detectada.

Há uma observação que sustenta que a difração não é aplicável quando há muitas partículas juntas: o brilho da Lua Nova.

O solo lunar contém um grande número de partículas de um tamanho aproximado  $10 \mu\text{m}$ . Se estiverem isoladas cada uma delas teria um padrão de difração da ordem de  $3^\circ$ . Se essa difração ocorresse, ela seria tão importante que a porção de Lua Nova apenas iluminada brilharia mais que a Lua Cheia.

Assim, quando uma partícula está isolada a eficiência de difração  $Q_d$  pode ser assumida como 1, mas quando há um conjunto de partículas agrupadas ou aglomeradas esta eficiência cai para zero.

Esta é uma razão para separar o espalhamento por aquele causado por difração e o causado por outros efeitos.

Assim como é possível sustentar o uso de ótica geométrica para resolver primeiro o problema de esferas grandes onde o fator de tamanho seja muito maior que a unidade, pode ser usada a ótica geométrica para resolver a questão de partículas aglomeradas.

As interações da ótica geométrica podem ser agrupadas em:

1. Reflexões superficiais externas.
2. Raios transmitidos internamente dentro da esfera.
3. Reflexão interna.

Usando a teoria desenvolvida na ótica geométrica, podemos analisar o que acontece com um feixe de luz quando chega a uma superfície composta por aglomerados de partículas. O modelo físico se baseia em diferentes efeitos:

1. **O efeito da disposição geométrica:** Que determina as variações sofridas a causa da disposição geométrica que existe entre a fonte, o objeto e o detector. Este efeito se modela através da função de fase.
2. **O efeito de oposição:** Que considera as variações que acontecem perto do ângulo de fase zero, onde a ausência de sombras cria um aumento repentino de brilho.
3. **O efeito da rugosidade superficial:** Que causa uma diminuição no brilho devido a rugosidade da superfície.

Estes efeitos serão tratados especialmente em seções posteriores.

Para facilitar o estudo, os casos serão classificados em dois tipos. O primeiro, quando a luz incide sobre uma superfície lisa composta de grãos prensados em forma de pastilha. Se esses grãos podem ser considerados como cristais orientados, a superfície pode ser considerada lisa e refletiva, como se constituída por “*pequenos espelhos elementares*”, o que causaria picos de reflexão se o ângulo de observação é igual ao ângulo de incidência. Se mesmo prensada a superfície é rugosa isto não causaria efeitos de picos quando observada próximo do ângulo de incidência, mas haveria efeito de oposição pequeno, devido ao ordenamento próprio das partículas da superfície.

Se pelo contrário a superfície tem uma distribuição de grãos randômica, o termo principal da análise ótica será a reflexão difusa. Neste caso devemos analisar modelos que considerem o empacotamento.

Alem disso nem todos os modelos de solos se comportam igual perante a luz. Um solo fortemente empacotado e um solo com empacotamento mais esponjoso não têm o mesmo comportamento. Por exemplo, solos porosos têm grandes modificações introduzidas no efeito de oposição

Um modelo eficiente para solos também deveria considerar todos os aspectos que poderiam modificar funções como o efeito de oposição. Neste sentido não só o tipo de empacotamento determina as variações a serem contidas em  $B_0(g)$  (a função de fase), como funções de sombras; porém o tamanho de grão que compõe o solo e a distribuição percentual dos tamanhos de grãos.

A relação percentual dos tamanhos das partículas que constituem uma superfície, assim como a capacidade de agregação e a porosidade das mesmas determinam a estrutura das superfícies. A relação granulométrica determina uma classificação em superfícies segundo o tipo predominante de grão: rochosas heterogêneas, rochosas homogêneas, arenosas, siltito e argiloso (Hodgson, 1987).

Entretanto a estruturação em agregados pode levar a outra classificação: cúbica, colunar, em grumos e porosa. A estrutura superficial tem grande importância no

que se refere à função de fase e o fator de oposição – parâmetros determinantes no albedo – será determinante nas propriedades espectrais do corpo. Em nosso caso o asteroíde.

A mineralogia de cada solo deriva-se das transformações das rochas primordiais. Geralmente os minerais são classificados como primários e secundários dependendo da origem. Os minerais primários são incorporados aos solos quando uma rocha sofre degradação física, enquanto os minerais secundários se formam em consequência da alteração química dos minerais primários.

Geralmente os solos são classificados segundo o tamanho principal dos grãos (Hodgson, 1987):

1. Grossos de 2 até 0.2 mm
2. Finos de 0.2 até 0.002 mm
3. Silte se o grão é menor que 0.002 mm
4. Argilas e folhelhos menor que 0.004 mm

### 3.6 Partículas esféricas grandes

Se a partícula é uma esfera muito grande, a parte da superfície onde a luz incide pode ser considerada como uma superfície plana e infinita, e podem ser usadas as equações de Fresnel e trabalhar com ótica geométrica para calcular as porções de luz transmitida e refletida.

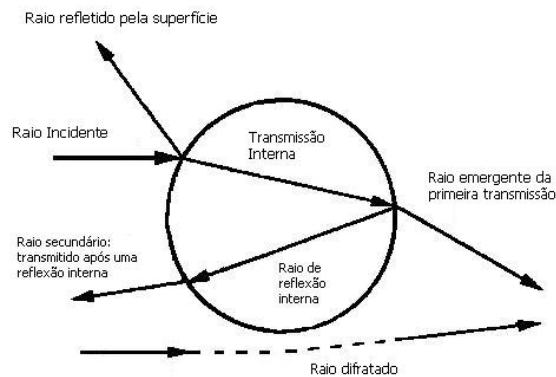


Figura 3.3: Diagrama dos processos numa esfera de parâmetro de tamanho  $X \gg 1$

Seja uma esfera grande de raio  $a$  que é iluminada por uma irradiância  $\mathbf{J}(\mathbf{r}, \Omega)$  polarizada. Os raios incidem num ponto onde o raio-vetor faz um ângulo  $\vartheta$  com a direção de propagação. Os raios refletidos emergem com um ângulo de fase  $g = 2\vartheta$

Se for considerado um segundo raio paralelo ao primeiro, mas incidindo em  $\vartheta + d\vartheta$  então o ângulo de fase será:  $g + dg = \vartheta + 2d\vartheta$ . A área formada pela interseção destes raios com a superfície é:  $dA = 2\pi \cdot a \sin \vartheta \cdot a d\vartheta$ , então a potencia refletida pela área  $dA$  é:

$$dP = J dA \cos \vartheta R(\vartheta) = 2\pi a^2 J R(\vartheta) \sin \vartheta \cos \vartheta d\vartheta \quad (3.18)$$

Onde  $R(\vartheta)$  é o coeficiente de Fresnel, que deve ser usado para a reflexão paralela ou perpendicular segundo o caso. A uma grande distância da esfera a luz passaria por um ângulo sólido:

$$d\Omega = 2\pi \sin(2\vartheta) d(2\vartheta) = 8\pi \sin \vartheta \cos \vartheta d\vartheta \quad (3.19)$$

Então a potência por unidade de ângulo sólido refletida especularmente pela superfície da esfera é:

$$\frac{dP}{d\Omega} = J \sigma \frac{R(g/2)}{4\pi} \quad (3.20)$$

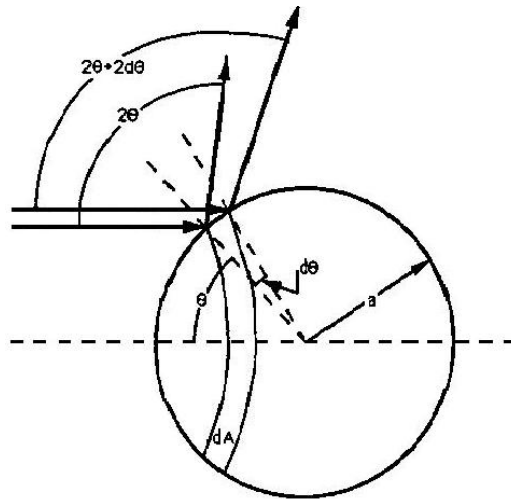


Figura 3.4: Reflexão especular numa esfera grande (Hapke, 1993)

Dependendo da curvatura da esfera, há um efeito desfocalizador fazendo que a radiação incidente num ângulo  $d\vartheta$  seja refletida em  $2d\vartheta$ . A potência total refletida pela superfície é:

$$P = J\pi a^2 \int_0^{\pi/2} R(\vartheta) \sin \vartheta \cos \vartheta d\vartheta \quad (3.21)$$

então

$$Q_{sp}(g) = \frac{[R_{\perp}(g/2) + R_{\parallel}(g/2)]}{2} \quad (3.22)$$

O remanescente da luz espalhada pela esfera consiste de raios refratados dentro da esfera que sofrem às vezes reflexão interna.

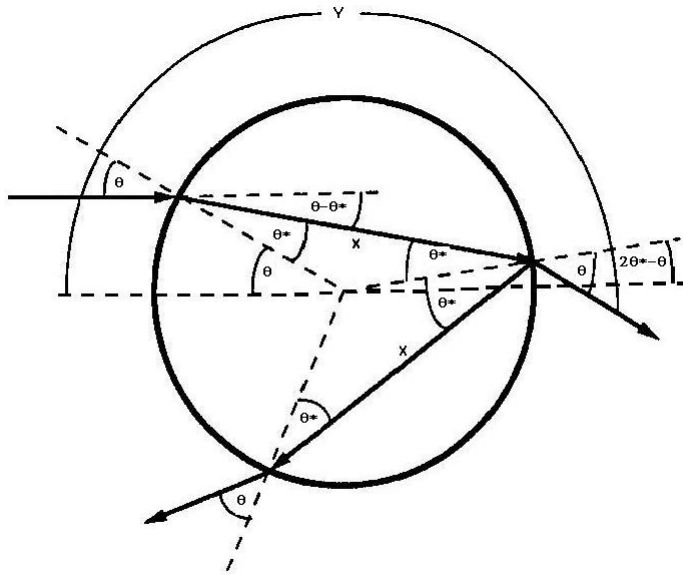


Figura 3.5: Reflexão e refração numa esfera grande (Hapke, 1993)

Considerando que as condições são ideais para aplicar ótica geométrica, podem ser combinadas equações que incluam termos de espalhamento e difração num ângulo sólido dado por uma esfera grande isolada:

$$\frac{dP_{\parallel\perp}}{d\Omega} = \frac{dP_d}{d\Omega} + \frac{dP_{S\parallel\perp}}{d\Omega} + \frac{dP_{r\parallel\perp}}{d\Omega} \quad (3.23)$$

Daí que a eficiência fica determinada pela integral:

$$Q_s = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} [Q_s p(g)]_{\parallel\perp} d\Omega \quad (3.24)$$

Então a função de fase de uma partícula esférica grande é:

$$p_{\parallel\perp}(g) = \frac{Q_s p(g)}{Q_s} \quad (3.25)$$

### 3.7 A equação de transferência radiativa

A equação de transferência radiativa é o formalismo para calcular a intensidade de uma onda eletromagnética que muda por processos de absorção, emissão e espalhamento na passagem por um meio complexo. A suposição principal é que a heterogeneidade do meio causa o espalhamento da radiação.

Este é o caso de moléculas ou partículas discretas randomicamente orientadas. Estas hipóteses não são necessariamente válidas quando se trata de regolitos e aglomerados de regolitos. Este é o caso dos solos. Para eles as expressões que descrevem a refletância podem ser obtidas a partir de soluções da equação de transferência radiativa.

Quando uma radiação passa por um meio sofre processos que alteram a potência do feixe incidente; estes processos podem ser classificados em três tipos: Emissão, Absorção e Espalhamento. Os processos absorção e espalhamento, que subtraem energia da radiação incidente são conhecidos como processos de extinção.

A extinção é definida como a perda de potência quando o feixe se propaga uma distância  $d\vec{s}$ , a partir da definição pode considerar a fração da intensidade que muda como:

$$dI = -Ed\vec{s} \quad (3.26)$$

Então a intensidade pode ser integrada por:

$$I(s) = I(0)e^{-\int_0^s E(z')dz'} \quad (3.27)$$

Sendo  $E(s, \Omega)$  o coeficiente de extinção volumétrico do meio na direção  $\Omega$ . Como já foi indicado, a extinção pode ser considerada como a soma de dois processos: o de absorção ( $K$ ) e o de espalhamento ( $S$ ).

$$E(s, \Omega) = K(s, \Omega) + S(s, \Omega) \quad (3.28)$$

Onde  $K(s\Omega)$  é o coeficiente de absorção e  $S(s, \Omega)$  é o coeficiente volumétrico de espalhamento. Assim, da forma em que foi definida a extinção, o coeficiente de extinção volumétrica pode se relacionar com a variação de potência devido à extinção segundo:

$$\Delta P_E = \frac{\partial I}{\partial s} ds dA d\Omega = -E(s, \Omega) I(s, \Omega) ds dA d\Omega \quad (3.29)$$

E se considerarmos uma lâmina de área  $dA$ , com uma espessura  $ds$  com  $N$  partículas de seção eficaz média  $\sigma$  e eficiência de extinção  $Q_E$ , a potência extinguida é:

$$\Delta P_E = dJ d\Omega ds dA = JN\sigma Q_E ds dA d\Omega \quad (3.30)$$

Obtemos que para qualquer partícula:

$$E = N\sigma Q_E \quad (3.31)$$

Então a lâmina:

$$E = N\langle\sigma Q_E\rangle \quad (3.32)$$

Usando os mesmos argumentos podemos inferir:

$$S = N\langle\sigma Q_S\rangle \quad (3.33)$$

e

$$K = N\langle\sigma Q_A\rangle \quad (3.34)$$

Assim a partir da extinção é definida a profundidade ótica do meio como:

$$\tau = \int_0^\infty \frac{E(s')}{\cos \vartheta} ds' = \int_0^\infty E(z') dz' \quad (3.35)$$

E o albedo de espalhamento simples como:

$$\omega(z) = \frac{S(z)}{E(z)} \quad (3.36)$$

Entanto a emissão pode se dever a várias causas: espalhamento de luz que vem em outra direção, emissão térmica, emissão estimulada, fluorescência e luminescência (as duas últimas não serão consideradas). Como a emissão estimulada vem de gases que



não estão em equilíbrio térmico com o ambiente e é o interesse a análise de refletância em solos, a emissão estimulada será desconsiderada, se obtendo a equação:

$$F(s, \Omega) = F_S(s, \Omega) + F_T(s, \Omega) \quad (3.37)$$

Sendo  $F$  o coeficiente de emissão,  $F_S$  o coeficiente de emissão por mudança de direção e  $F_T$  o coeficiente volumétrico de emissão térmica. Considerando todos os fatores, pode ser modelada uma função que ligue todas as mudanças na intensidade e gerar uma equação para a transferência radiativa, a que é escrita como:

$$-\cos \vartheta \cdot \frac{\partial I(\tau, \Omega)}{\partial \tau} = I(\tau, \Omega) + \frac{w(\tau)}{4\pi} \int_{4\pi} I(\tau, \Omega) p(\tau, \Omega, \Omega') + J \frac{\omega(\tau)}{4\pi} p(\tau, \Omega, \Omega') \quad (3.38)$$

Onde  $\mathcal{F} = \frac{F_T}{E}$  é a função fonte.

No caso dos solos de corpos menores, a função fonte determinante é a emissão térmica do meio, mas no caso dos asteróides pode ser negligenciável, quando a faixa do espectro analisada é o visível.

Evidências experimentais sugerem que a equação de transferência radiativa pode ser aplicada a meios onde existem partículas empacotadas densamente, e que logo de algumas modificações apropriadas os parâmetros individuais de cada partícula podem ser usados para prever comportamentos.

## 3.8 Refletância bidirecional e espalhamento isotrópico

### 3.8.1 Generalidades

A refletância bidirecional de um meio é definida como a razão entre a radiância espalhada no detector e a radiância incidente, isto é equivalente a radiância emergindo de um meio numa direção dada – quando iluminada por irradiância colimada - por unidade de irradiância incidente.

A radiância total que atinge um detector quando só há contribuição da refletância bidirecional de um meio infinito com uma superfície incidente dada, sem fontes térmicas é:

$$I_{Ds} = J \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\mu} \int_0^\infty \omega(\tau) p(\tau, g) e^{-(1/\tau_0 + 1/\tau)\tau} d\tau = J \frac{\omega}{4\pi} \frac{\mu_0}{\mu_0 + \mu} \quad (3.39)$$

Onde, se é considerado que  $p(g) = 1$  (espalhamento isotrópico), se transforma na expressão da lei de Lommel-Seeliger. Então usando o método dos dois-fluxos

poderíamos obter uma solução aproximada para a equação de transferência radiativa, nas mesmas condições que foram descritas no caso de refletância difusa, ou seja:  $\tau = 0$  e  $\mathcal{F} = 0$ , se  $w$  e  $p = 1$  independem do  $\tau$ , como já foi descrito antes para  $N=2$ :

$$\Delta\Omega_1 = \Delta\Omega_2 = 2\pi \quad (3.40)$$

$$\mu_1 = 1/2 \quad (3.41)$$

$$\mu_2 = 1/2 \quad (3.42)$$

$$-\frac{1}{2} \frac{dI_1}{d\tau} = -I_1 + \frac{\omega}{2} [I_1 + I_2] + J \frac{\omega}{4\pi} e^{-\tau/\mu_0} \quad (3.43)$$

$$-\frac{1}{2} \frac{dI_2}{d\tau} = -I_2 + \frac{\omega}{2} [I_1 + I_2] + J \frac{\omega}{4\pi} e^{-\tau/\mu_0} \quad (3.44)$$

Considerando fatores de albedo e operando analiticamente, pode-se chegar a achar uma solução para a equação de transferência radiativa:

$$I(\tau, \Omega) = I(\tau, \cos \vartheta) = \frac{J\omega}{4\pi} \frac{1}{4\gamma^2\mu_0^2 - 1} \left[ -\frac{(1-\gamma)2\mu_0(1+2\mu_0)}{1+2\gamma\cos\vartheta} e^{2\gamma\tau} + \frac{\mu_0}{\mu_0 + \cos\vartheta} (4\mu_0^2 - 1) e^{-\gamma/\mu_0} \right] \quad (3.45)$$

Como a radiância no detector é  $I_d = I(\theta, \mu)$  a refletância bidirecional pode ser expressa como:

$$r(i, e, g) = \left[ \frac{I(0, \mu)}{J} \right] \quad (3.46)$$

E portanto:

$$r(i, e, g) = \left[ \frac{w}{4\pi} \right] \left[ \frac{\mu_0}{\mu_0 + \mu} \right] \left[ \frac{1 + 2\mu_0}{1 + 2\gamma\mu} \right] \left[ \frac{1 + 2\mu}{1 + 2\gamma\mu} \right] \quad (3.47)$$

Usando o principio de *embedded invariance* podem ser achadas expressões da equação de transferência radiativa. A idéia central deste método é que a refletância de um meio semi-infinito não muda se é adicionada uma camada muito fina na superfície do mesmo. Algo bastante semelhante ao feito para refletância difusa.

Ao se assumir que a refletância de um meio é  $r(i, e, g)$  e que cada partícula espalha a mesma fração de luz incidente em todas as direções de azimute  $\psi$  (espalhamento isotrópico), então a expressão  $r(i, e, g) = r(i, e, \psi)$  deve independe do azimute e  $r(i, e, \psi) = r(i, e) = r(\mu, \mu_0)$ .

A lâmina superior poderia causar cinco tipos de mudanças proporcionais à entre a lâmina e o meio:

1) **A luz que atravessa a lâmina e reduzida por um fator de extinção**  $[\frac{-\Delta\tau}{\mu_0}]$  ao incidir e por um fator  $e^{[\frac{-\Delta\mu}{\mu_0}]}$  ao emergir, assim:

$$\Delta I_1 = -J\Delta\tau \left( \frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu} \right) r(i, e) \quad (3.48)$$

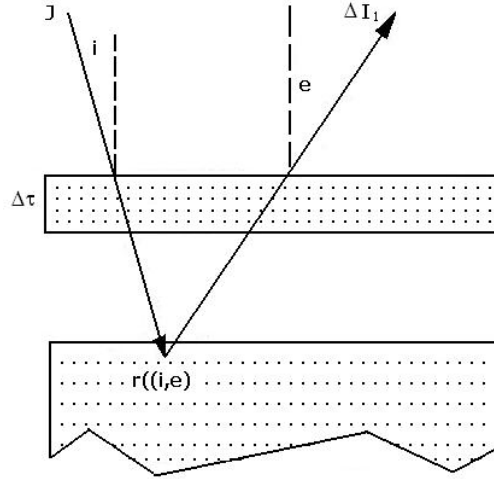


Figura 3.6: Modificação de 1º ordem (Hapke, 1993)

2) **A lâmina adicional espalha uma quantidade de luz para o detector,** que é somada ao espalhamento do meio. Assim, o incremento de radiância seria:

$$\Delta I_2 = J \frac{\omega}{4\pi} \frac{\Delta\tau}{\mu} \quad (3.49)$$

3) **A luz espalhada pela lâmina na direção do meio** atua como uma fonte adicional da irradiância incidente sobre ele, assim certa quantidade adicional de luz incidente é espalhada pelo mesmo, emergindo deste com um ângulo  $e$ , neste caso a variação de intensidade é:

$$\Delta I_3 = J \frac{\omega}{2} \Delta\tau \int_{\mu'=0}^1 r(\mu', \mu) \frac{d\mu'_0}{\mu'_0} \quad (3.50)$$

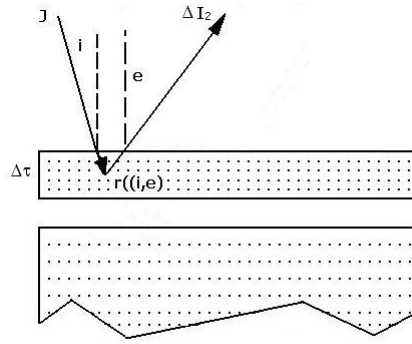


Figura 3.7: Modificação de 2º ordem (Hapke, 1993)

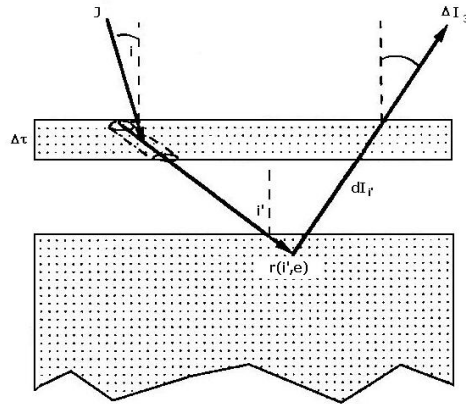


Figura 3.8: Modificação de 3º ordem (Hapke, 1993)

4) **A luz espalhada pelo meio na direção do detector** atua como uma fonte de luz da lâmina, assim, a radiância espalhada pelo meio incrementa a intensidade emergente segundo:

$$\Delta I_4 = J \frac{\omega}{2} \frac{\Delta \tau}{\mu} \int_{\mu'=0}^1 r(\mu'_0, \mu) \frac{d\mu'_0}{\mu'_0} \quad (3.51)$$

5) **A lâmina tem espalhamento tanto para o meio como para o detector**, se constituindo numa fonte tanto para um como para outro, e assim:

$$\Delta I_5 = J \omega \pi \Delta \tau \left[ \int_{\mu''=0}^1 r(\mu''_0, \mu) \frac{d\mu''_0}{\mu''_0} \right] \left[ \int_{\mu''=0}^1 r(\mu_0, \mu'') d\mu'' \right] \quad (3.52)$$

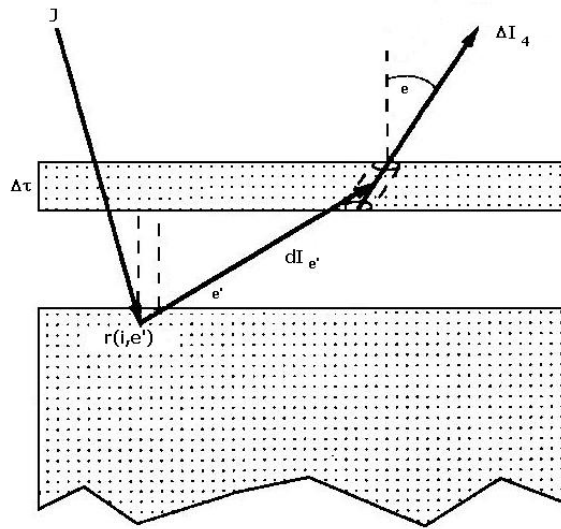


Figura 3.9: Modificação de 4º ordem (Hapke, 1993)

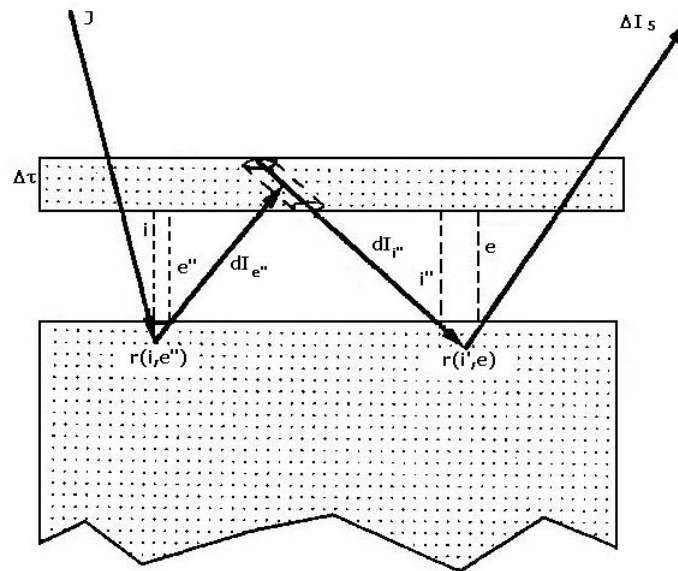


Figura 3.10: Modificação de 5º ordem (Hapke, 1993)

Após a solução da integral, substituindo em 3.46 e criando um artifício se obtém o resultado:

$$r(i, e, g) = \frac{\omega}{4\pi} \frac{\mu}{\mu_0 + \mu} H(\mu_0) H(\mu) \quad (3.53)$$

onde:

$$H(x) = 1 + \frac{\omega}{2} x H(x) \int_0^1 \frac{H(x')}{x + x'} dx' \quad (3.54)$$

onde  $x'$  é uma variável intermediária da resolução da integral.

### 3.8.2 A função H

A expressão 3.53 é uma solução da equação de transferência radiativa para um meio de espalhamento isotrópico e em geral os valores de  $H$ , aparecem tabelados na bibliografia (cf. Chandrasekhar, 1960). Se o albedo é nulo, o valor de  $H$  é 1 para qualquer valor de  $x$ , e nesse caso a equação 2.41 é igual à solução de Lommel-Seeliger, quando  $p(g) = 1$ .

Se  $x = 0$ , ou seja, se  $\mu$  ou  $\mu_0$  são nulos ou quase nulos, o valor de  $H$  também é 1, mostrando que a ângulos de incidência ou emergência coincidentes com a normal de observação só o espalhamento simples é importante na refletância, sem importar o valor do albedo de espalhamento simples.

A função  $H$  pode ser calculada a través de aproximações surgidas do cálculo da integral e da relação de crescimento mono-tônico da função do albedo. Como pode ser definida uma solução em função do momento:

$$H_j = \int_0^1 H(x) x^j dx \quad (3.55)$$

Determinando uma solução para  $H_0$ :

$$\frac{\omega}{2} H_0^2 - 2H_0 + 2 = 0 \quad (3.56)$$

O que tem solução:

$$H_0 = \frac{2(1 + \sqrt{1 - \omega})}{\omega} \quad (3.57)$$

Que pode ser escrita como:

$$H_0 = \frac{2}{1 + \gamma} \quad (3.58)$$

com:

$$\gamma = \text{sqrt}1 - \omega \quad (3.59)$$

Considerando a aproximação de Hapke:

$$\langle H(\omega) \rangle = \frac{2}{1 + \gamma} \quad (3.60)$$

Obtemos uma primeira solução:

$$H(x) \approx \left\{ 1 - \omega x \left[ r_0 + \frac{1 - 2r_0x}{2} \ln \left( \frac{1+x}{x} \right) \right] \right\}^{-1} \quad (3.61)$$

Expressão que pode ser generalizada como:

$$H(x) = \left[ \frac{1 + 2x}{1 + 2\gamma x} \right] \quad (3.62)$$

A equação 3.53 não leva em consideração os efeitos de ocultação por sombra nem os efeitos de oposição, assim como a rugosidade macroscópica. Outros autores como Lucey (1998), Mustard (1997) e Pieters (1984) mostraram que a função  $H$  dada por Hapke era inferior para interpolar valores exactos da função de Chandrasekhar, pois era uma aproximação que logo foi melhorada por Hiroi (1994):

$$H(x) = \left\{ 1 - (1 - \text{sqrt}1 - \omega) x \left[ r_0 + \left( 1 - \frac{r_0}{2} - r_0x \right) \ln \left( \frac{1+x}{x} \right) \right] \right\}^{-1} \quad (3.63)$$

Onde

$$r_0 = \frac{2}{1 + \text{sqrt}(1 - \omega)} - 1 \quad (3.64)$$

### 3.8.3 Espalhamento não isotrópico

Quando há partículas irregulares e muito grandes, a teoria de Mie apresenta só uma idéia aproximada para as propriedades de dispersão e há uma grande diferença de comportamento respeito das partículas esféricas.

Uma razão para essas diferença é que em uma partícula esférica livre o diâmetro é aproximadamente igual ao caminho livre médio, no entanto qualquer mudança na geometria diminui o valor de  $D$  (caminho livre médio).

O problema aumenta quando se trata de partículas aglomeradas, como é o caso dos solos de asteróides, pois, os modelos de partículas isoladas, neste caso, não deviam ser validados quando há um grande número de partículas irregulares.

No caso mais simples as irregularidades superficiais da partícula geram uma série de efeitos que não eram considerados na situação de uma partícula esférica isolada. Assim os modelos usados analisam o problema segundo a difração, o espalhamento superficial, a reflexão e o espalhamento interno ou outros efeitos.

Em geral uma onda espalhada pode ser considerada como a soma de ondas radiadas por todas as partículas, e é assim que modelos como o de Chiapetta (Chiapetta, 1980) usam aproximações segundo a rugosidade da superfície e assumem que algumas bandas largas presentes no “*backscatter*” são causadas por sombras da superfície.

Geralmente a refração de luzes internas é desconsiderada e em soluções como as de Schiffer (Schiffer, 1985) e Schiffer e Thielheim (Schiffer-Thielheim, 1982) são usados modelos de ótica geométrica para o cálculo das sombras causadas pelas asperezas da superfície.

Uma expressão das 3.54:

$$-\frac{1}{2} \frac{d\Delta\varphi}{d\tau} = \gamma^2 \varphi + J \frac{\omega}{4\pi} e^{-\tau/\mu_0} \quad (3.65)$$

Pode ser reduzida para uma função equivalente de espalhamento não isotrópico se é considerado um termo adicional resultante de assumir um fator de assimetria não nulo ( $\beta \neq 0$ ). Mesmo quando há semelhanças que poderiam indicar a existência de resultados satisfatórios, que não são eficientes quando há variações nos ângulos.

Isso se explica pelo fato que nos modelos experimentais há variações nos desvios do espalhamento isotrópico efetivo devido às variações na direção de incidência. Estas diferenças mesmo tomadas numa média integrada têm um efeito maior sobre a distribuição angular da radiância que não seria considerada se omitir os fatores gerados no efeito de oposição e a função de ângulo de fase.

Em 1960 Chandrasekhar detalhou um procedimento para uma solução concreta da refletância bidirecional de um meio anisotrópico infinito com uma fase dada, usando uma extensão dos casos de Rayleigh [ $p(g) = 1 + \cos 2g$ ] e uma função de Legendre de primeiro grau [ $p(g) = 1 + b \cos g$ ].

Entretanto, as soluções apresentadas por Chandrasekhar eram complicadas e inconvenientes (Hapke, 1994) e deviam apresentar-se sob a forma de várias funções de tal modo de satisfazer uma integral não linear.

Uma primeira aproximação pode ser obtida gerando um termo único que incluía todos os efeitos da anisotropia, mas isso pode levar a uma solução sem sentido se o espalhamento for muito anisotrópico.

Como o próprio Chandrasekhar indicou, a maioria das vezes o fóton se dispersa quando emerge da superfície, pelo que não se deveria achar a média dos efeitos da dispersão múltipla produzidos por espalhamentos isotrópicos como a medida de



espalhamento anisotrópico.

Assim, a intensidade relativa do espalhamento anisotrópico como contribuição à refletância bidirecional de um meio anisotrópico pode ser obtido a partir da contribuição do espalhamento simples à radiância usando uma função de fase e dada por:

$$I_{DS} = J \left[ \frac{w}{4\pi} \right] \left[ \frac{\mu_0}{\mu_0 + \mu} \right] p(g) \quad (3.66)$$

O que conduz a que a contribuição do espalhamento múltiplo seja:

$$I_{DS} = J \left[ \frac{w}{4\pi} \right] \left[ \frac{\mu_0}{\mu_0 + \mu} \right] [H(\mu)H(\mu_0) - 1] \quad (3.67)$$

Assim poderemos definir uma função aproximada de espalhamento isotrópico:

$$r(i, e, g) = \frac{\omega}{4\pi} \frac{\mu_0}{\mu_0 + \mu} [p(g) + H(\mu_0)H(\mu) - 1] \quad (3.68)$$

onde o valor de  $H(x)$  depende do grau de precisão necessário.

### 3.8.4 Função de fase

Suponha-se que a potência descrita pela irradiância  $J(r, \Omega)$  esteja se propagando na direção  $\Omega_0$  é espalhada por uma partícula na posição  $r$  num padrão de radiância  $I(r, \Omega)$ . Existe uma função  $p(g)$ , chamada função de fase da partícula, que descreve o padrão angular no qual é espalhada a potencia  $P = J\sigma Q_S$ . Então se

$$\frac{dP_S}{d\Omega}(\Omega_0, \Omega) \quad (3.69)$$

A potência espalhada pela partícula na direção  $\Omega_0$  num ângulo sólido centrado na direção  $\Omega$ , se  $g$  é o ângulo de fase entre  $\Omega_0$  e  $\Omega$ , a função de fase é definida como:

$$\frac{dP_S}{d\Omega}(\Omega_0, \Omega) = J(\Omega_0)\sigma Q_S \frac{p(g)}{4\pi} \quad (3.70)$$

Como a área perpendicular da partícula à radiação incidente é  $\sigma Q_E$ , a radiância espalhada, ou potência por unidade de área por unidade de ângulo sólido é:

$$I(\Omega) = J(\Omega_0) \frac{\sigma Q_S p(g)}{\sigma Q_E 4\pi} = J\omega \frac{p(g)}{4\pi} \quad (3.71)$$

Se a partícula espalha isotropicamente, então  $p(g) = 1$ . Ao assumir que a potência espalhada em todas as direções é igual a  $P_S$ , então há uma normalização que faz:

$$\int_{4\pi} p(g) d\Omega = 4\pi \quad (3.72)$$

Se a partícula tem simetria esférica, a potência espalhada independe do azimute, então a integração pode verificar:

$$\int_{4\pi} p(g) \sin g dg = \frac{1}{2} \int_0^\pi p(\theta) \sin \theta d\theta = 1 \quad (3.73)$$

Quase sempre é conveniente representar a função de fase como a expansão de um polinômio de Legendre:

$$p(g) = \sum_{j=0}^{\infty} b_j P_j(g) \quad (3.74)$$

Onde  $b_j$  são constantes e  $P_j$  termos dos polinômios de ordem  $j$ . Esta representação de  $p(g)$  é a mais usada e geralmente em espalhamento quase isotrópico só são necessários uns poucos termos.

A função de espalhamento de uma partícula é caracterizada por vários parâmetros, chamados de parâmetros ou fatores de assimetria. Um desses parâmetros é o **fator de cosseno assimétrico**  $\xi$  que é o valor médio do cosseno do ângulo de espalhamento  $\theta = \pi - g$ .

A partir deste parâmetro de assimetria, é definido também o **fator de assimetria hemisférica**  $\beta$ , que é usado geralmente para resolver a equação de transferência radiativa. Este fator é definido tal que a fração da potência incidente espalhada para trás no hemisfério no qual a radiação chega é  $\frac{1-\beta}{2}$ , e a fração da potencia que é espalhada para frente é  $\frac{1+\beta}{2}$ .

No caso em que a partícula seja perfeitamente esférica e muito pequena ( $X = 1$ ) não haveria diferença da função de fase entre partículas absorventes e não absorventes. entretanto no caso de partículas com fator de tamanho maior que a unidade há grandes diferenças entre a função de fase de uma partícula absorvente ( $k \neq 0$ ) e uma não absorvente ( $k = 0$ ) (Hapke, 1993).

Uma restrição importante é que o valor da função de fase nunca pode ser negativo. A expansão de primeira ordem de Legendre para  $p(g)$  é:

$$p(g) = 1 + b \cos g \quad (3.75)$$

Mas em geral é usada uma expansão de segunda ordem:

$$p(g) = 1 + b_1 P_1(g) + b_2 P_2(g) \quad (3.76)$$

Heney e Greenstein (1941) introduziram uma função de fase empírica:

$$p(g) = \frac{1 - \xi^2}{(1 - 2\xi \cos g + \xi^2)^{3/2}} \quad (3.77)$$

Onde, novamente,  $\xi$  é o fator do cosseno assimétrico.

Para esta função se o espalhamento é isotrópico  $p(g) = 1$  e a função é monotônica entre 0 e  $\pi$  crescendo, ou decrescendo segundo o sinal de  $\xi$ . A expansão de Henyey-Greenstein em termos do polinômio de Legendre é:

$$p(g) = \sum_{j=0}^{\infty} (2j + 1) (-\xi)^j P_j(g) \quad (3.78)$$

A vantagem dessa função está no fato dela apresentar só um lóbulo, e se for requerida uma função de fase de dois lóbulos são necessárias duas funções simetricamente opostas.

### 3.8.5 Efeito de oposição

Um dos fenômenos categorizados dentro dos produzidos pelo espalhamento da luz, causado pelas partículas e suas separações é o efeito de oposição (*heilighenschein, hot spot ou bright shadow*).

O efeito de oposição é um forte aumento no brilho perto do ângulo de fase nulo, com uma largura variando entre 5° a 10°; e que em alguns casos leva a que seja observado um halo brilhante ao redor das sombras. A explicação dada por Seeliger quando observou pela primeira vez o efeito na luz espalhada pelos anéis de Saturno, foi que em um meio no qual as partículas são grandes comparadas com  $\lambda$ , elas produzem sombras nos grãos profundos. Estas sombras são visíveis a grandes ângulos de fase, mas para a oposição aparecem ocultas pelos próprios grãos que as produzem.

O efeito de oposição é pronunciado na poeira fina onde o tamanho médio das partículas é próximo a 20  $\mu\text{m}$ . Para este tipo de partículas as forças intermoleculares aderentes produzidas entre duas partículas em contato, é quase tão grande quanto à gravitacional. Conseqüentemente, só é necessário um ponto de contato para sustentar a partícula. Devido a isto são formadas microestruturas superficiais que aumentam a porosidade das superfícies chamadas torres de encaixe ou pontes.

Uma boa aproximação do efeito de oposição é:

$$B(g) = (1 + \gamma)^{-1} \quad (3.79)$$

com

$$\gamma = \frac{2 \tan(g/2)}{N \langle \sigma Q_E \rangle \langle Q_E \rangle} \quad (3.80)$$

Então pode ser escrito:

$$B(g) = \left[ 1 + \frac{1}{h} \tan\left(\frac{g}{2}\right) \right]^{-1} \quad (3.81)$$

Onde

$$h = \frac{1}{2} N_E \langle \sigma Q_E \rangle \langle Q_E \rangle = \frac{1}{2} N_E \langle \sigma Q_E \rangle \langle a_E \rangle \frac{\ln(1 - \phi)}{\phi} = \frac{1}{2} E \langle a_E \rangle \quad (3.82)$$

Definindo-se a largura angular média do pico do efeito de oposição como  $2h$ , este parâmetro está relacionado com a densidade do meio e a profundidade ótica e o filling factor  $\phi$ , que é a fração total do volume ocupado pelas partículas. A relação entre a densidade e o filling factor é:

$$\phi = \frac{4\pi N a^3}{3} \quad (3.83)$$

A existência do efeito de oposição depende da presença de partículas porosas e de que a localização da fonte é suficientemente grande como para ser considerada infinita e, portanto, a onda incidente ser considerada plana e a sombra cilíndrica. No entanto como as fontes são finitas, as sombras e penumbras devem ser consideradas cônicas. A equação 3.82 mostra que  $h$  cresce com  $\phi$  e se torna infinito para  $\phi = 1$ , uma superfície regular e maciça não deveria ter efeito de oposição. Se  $\phi$  decresce, a largura angular fica mais estreita tendendo a ser tão fina fazendo com que qualquer sombra fique indetectável. Para uma fonte que tem largura angular da ordem do raio  $r$  da partícula, a sombra tem um volume dado por:

$$V = \frac{2\pi a^3}{3\theta_s} \quad (3.84)$$

Onde  $\theta_s$  é a largura angular da fonte no ponto da partícula e pode ser demonstrado que para uma dada partícula, o efeito de oposição ocorre se  $\phi$  (filling factor) atende a seguinte relação:

$$\phi \geq \frac{\theta_s}{5} \quad (3.85)$$

Quando o tamanho da partícula é maior que o comprimento de onda e a forma das partículas pode ser considerada regular na ordem desse comprimento de onda, o valor de  $h$  para:

$$h \cong -\frac{3}{8} \ln(1 - \phi) \quad (3.86)$$

Onde  $\phi$  é a fração total de volume ocupada por partículas e o complemento  $(1 - \phi)$  é conhecido como porosidade.

Se as partículas ou lâminas consideradas para modelar a transferência não são homogêneas, ou se as partículas empacotadas não são pequenas, devem ser feitas considerações na análise da transmissão de radiação.

A consideração mais simples é a de um meio uniforme formado por um único tipo de partícula de raio  $a = \sqrt{\pi/\sigma}$ , o que supõe um  $N$  constante e com um volume de partícula  $v$  definido por:

$$v = \frac{4}{3}\pi a^3 = \frac{4}{3}\sigma a \quad (3.87)$$

Isto implica que o filling factor será:

$$\phi = Nv = \frac{4}{3}n\sigma a \quad (3.88)$$

Assim se o filling factor é 1, toda a luz é bloqueada e a transmissão é nula. Para modelar esse acontecimento devermos considerar uma lâmina fina de espessura  $\delta z$  maior que qualquer partícula e de extensão lateral suficientemente grande, a lâmina terá um volume total  $V$ , e  $N$  partículas por unidade de volume.

Considere que as partículas podem variar de tamanho, forma e composição, e que estão randomicamente orientadas e posicionadas como a seção eficaz geométrica é definida como a média da projeção da área quando a partícula está randomicamente orientada, a sombra gerada pela seção eficaz deve ser circular, mesmo que a partícula não seja esférica.

Uma definição de transmissão de uma lâmina horizontal é dada pela probabilidade de que um feixe de luz delgado incidente a um ângulo  $\theta$  da vertical em um ponto randômico qualquer penetre e atravesse a lâmina sem achar nenhuma partícula. Assim a transmissão será proporcional a  $e^{-\tau}$ . Com o suficiente número de suposições e aproximações pode ser achado uma função dos coeficientes de extinção volumétricos a partir da seção eficaz e o filling factor. Novamente se o filling factor é 1, a transmissão é nula mesmo que a teoria indique que deveria ser  $t = e^{-3/4}$ .

Para partículas grandes e que estão juntas, Hapke faz várias suposições razoáveis; talvez a mais importante é que um aglomerado de partículas aleatoriamente orientadas e posicionadas quando é randomicamente iluminado, ele vai absorver e espalhar a luz da mesma forma que se fosse iluminado uniformemente. Entretanto

este autor reconhece que sua suposição se torna inválida quando o ângulo de fase é pequeno.

Quando partículas grandes estão juntas e se tocando, possivelmente partes rugosas de uma e de outra estão “*oticamente acopladas*” e isso diminuiria a superfície externa do aglomerado e, portanto modificaria as condições de reflexão e refração interna e múltipla. Assim a densidade do empacotamento poderia dar lugar a diminuições na reflexão ou no espalhamento interno.

Teoricamente o efeito de oposição poderia incrementar o espalhamento da radiância por um fator de 2, próximo a um ângulo de fase zero, isto implica que o valor  $B(g) = 1$ . Mesmo que um modelo considere que um raio só pode ser espalhado uma vez e que o raio da partícula seja negligenciado, o lugar de incidência o raio é diferente do sítio por onde o raio emerge.

Ao considerar uma superfície como um aglomerado infinito de partículas, as pequenas sombras cilíndricas vão ter um grau de penetração que faz que não se possa descartar o efeito de oposição.

Mesmo quando o parâmetro de tamanho for muito menor que 1, os efeitos das sombras não podem ser desconsiderados e assim anular o efeito de oposição. Além disso, quando é considerado o solo como um conjunto muito grande de partículas, não é possível assumir que o efeito total seja a simples soma de  $n$  efeitos de partículas isoladas.

Duas ondas parciais associadas à mesma frente de onda incidente podem viajar pelo mesmo caminho de espalhamento múltiplo, mas em direção opostas, e se os pontos de emergência das ondas não estão separados uma grande distância em relação aos seus comprimentos de onda, ambas componentes podem emergir combinadas de forma coerente. Assim a largura angular do espalhamento coerente vai ser proporcional ao caminho livre do fóton e do comprimento de onda.

Além dos efeitos gerados pela porosidade e pelo empacotamento das partículas na superfície, existem outras contribuições ao efeito de oposição. Uma delas é um efeito de oposição intrínseco das partículas que existe mesmo em partículas menores que o comprimento de onda. Outra contribuição é um efeito chamado de “*gloria*” que é um aumento no espalhamento de partículas esféricas. Além disso, existe também a questão da reflexão interna e a reflexão múltipla que é causada principalmente quando há estruturas minerais cúbicas.

### 3.9 Empacotamento e rugosidade

Como já foi dito, no caso dos solos não é possível usar um modelo de partícula isolada, e portanto devem ser analisados todos os parâmetros que possam influen-

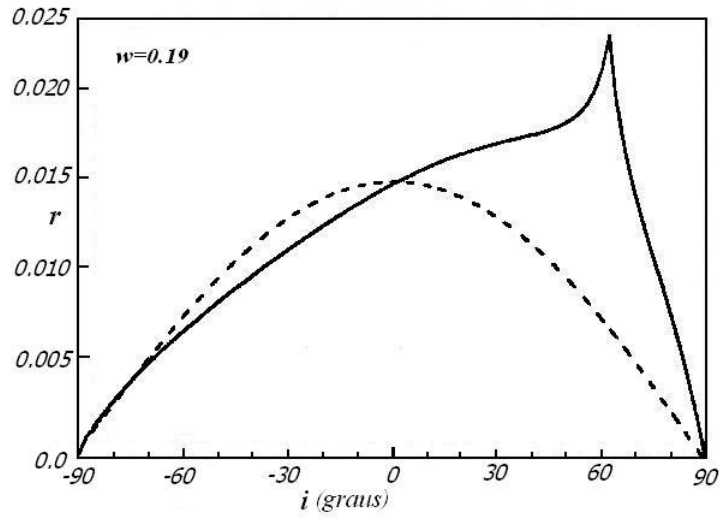


Figura 3.11: Refletância bidirecional no plano principal de um meio com ângulo de emergência  $60^\circ$ ,  $\omega = 0.19$ ,  $p(g) = 1 + 0.5 \cos g$ ,  $B_0 = 1.0$  e  $h = 0.06$ . A linha sólida representa o cálculo final e a linha pontilhada o cálculo pela lei de Lambert (Hapke, 1993)

ciar as funções que determinam a refletância. Tanto na função de fase como na função que define o efeito de oposição há influência da rugosidade das partículas e do empacotamento das mesmas.

Se as partículas são rugosas e de tamanho superior ao comprimento de onda da luz incidente, os modelos descritos apresentam dificuldades de ajuste, mesmo quando é usada ótica geométrica. Isto é devido às dificuldades para computar as leis a este tipo de superfície (Chiappetta, 1980). Outro problema é que o desenvolvimento multipolar do espalhamento não pode ser válido, pois cada coeficiente do multipólo estaria determinado pelas condições de fronteira da superfície e isso é muito difícil de computar.

Mesmo se é aceita uma superfície onde as partículas estiveram randomicamente distribuídas e o espalhamento pudesse ser considerado isotrópico, se só se considera a geometria das partículas, nada permite supor que as superfícies tenham uma distribuição aleatória de absorvidade. Além disso, as diferenças de empacotamento de partículas irregulares caracterizariam diferentes tipos de rugosidade na superfície. A própria irregularidade da partícula e a porosidade constituem um fator gerador de rugosidade e, por outro lado, o agrupamento de partículas em aglomerados constitui

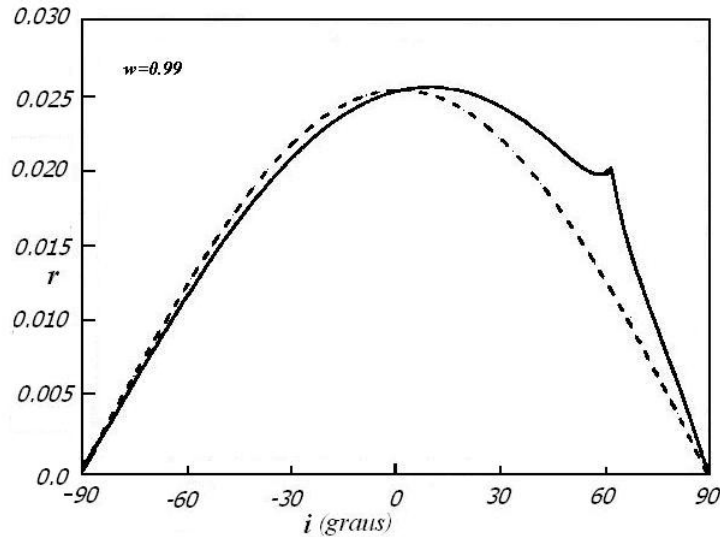


Figura 3.12: Refletância bidirecional no plano principal de um meio com ângulo de emergência  $60^\circ$ ,  $\omega = 0.99$ ,  $p(g) = 1 + 0.5 \cos g$ ,  $B_0 = 1.0$  e  $h = 0.06$ . A linha sólida representa o cálculo final e a pontilhada o cálculo pela lei de Lambert (Hapke, 1993)

outro fator.

Se a partícula é irregular e porosa, terá sombras próprias e, dependendo dessas irregularidades deverão ser ou não considerados modelos de espalhamento diferenciados. Talvez considerando funções eikonais que se correspondam com diferentes tipos de espalhamento esperado para diferentes tipos de porosidades.

Se há aglomerados de partículas, as sombras vão depender do empacotamento das partículas. O trabalho de Chiappetta (1980) considera mudanças acontecidas na refletância e na polarização ajustando as funções a três tipos de empacotamento: compacto denso, compacto leve e solto (*fluffy*).

### 3.10 A função de refletância bidirecional

Alem dos efeitos do espalhamento nos casos anisotrópicos, um outro fator a se considerar é o efeito das sombras que variam com o ângulo de incidência e que não são desprezados no espalhamento múltiplo.

Teoricamente o efeito de oposição pode incrementar a radiância por um fator de 2 se o ângulo de fase é nulo, ou seja,  $B(0) = 1$ . A derivação do efeito de oposição assume por hipótese que um raio é espalhado por um ponto, portanto o tamanho da



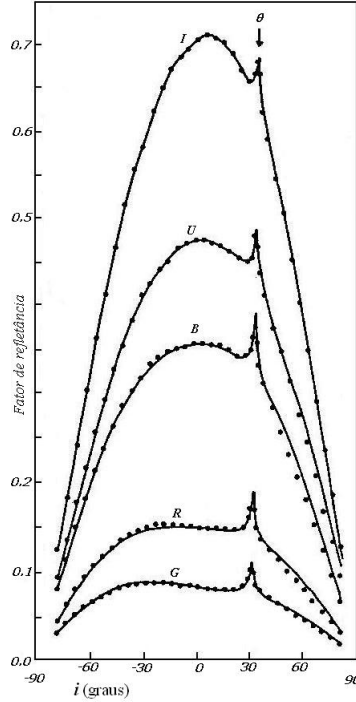


Figura 3.13: Refletância bidirecional em função do ângulo de incidência para poeira de vidro de cobalto de tamanho menor a  $37\mu m$  com ângulo de emergência de  $30^\circ$ , Entretanto o ângulo de incidência permanece constante. Os pontos mostram a medida final e a linha contínua o cálculo final. As medidas foram feitas no Ultravioleta(U), Azul(B), Verde(G), Vermelho(R), e Infravermelho(IR)). Da American Geophysical Union em (Hapke, 1993)

partícula é desprezado.

Segundo as propriedades físicas analisadas o efeito de oposição pode ser descrito como a razão entre a luz espalhada perto da superfície a um ângulo dado e a luz espalhada quando o ângulo de fase é zero.

$$B_0 \cong \frac{S(0)}{\omega p(g)} \quad (3.89)$$

Onde  $S(0)$  é a luz espalhada em, ou perto de, a parte da superfície da fase da partícula que aponta para a fonte e  $\omega p(0)$  é a quantidade total de luz espalhada pela partícula em ângulo de fase zero.

Além das sombras superficiais há fenômenos que incrementam o efeito de oposição.

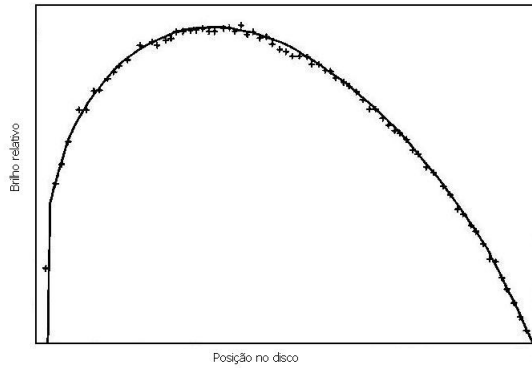


Figura 3.14: Brilho relativo ao longo do Equador de Vênus em função da longitude. As cruzes mostram os dados do Mariner 10 e a linha o cálculo Final. American Physical Union (Hapke, 1993)

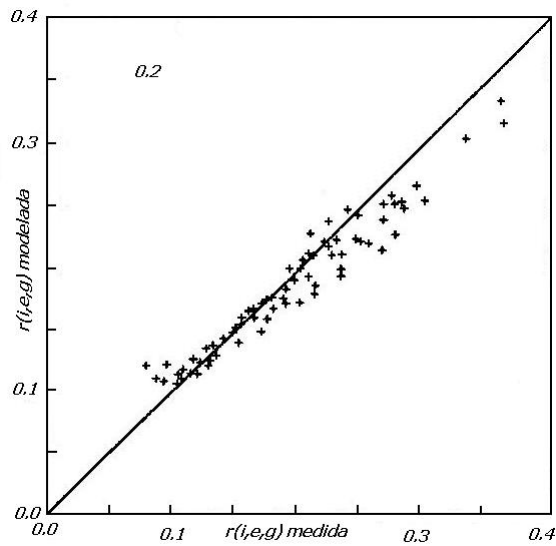


Figura 3.15: Comparação entre (cruzes) as medidas de refletância no visível de um campo arado e o valor calculado(Hapke, 1993)

Esses fenômenos estão relacionados com reflexões internas das partículas e/ou a disposição dos aglomerados de partículas. Estes vários fenômenos que incrementam o efeito da oposição podem ser unificados em só uma função:

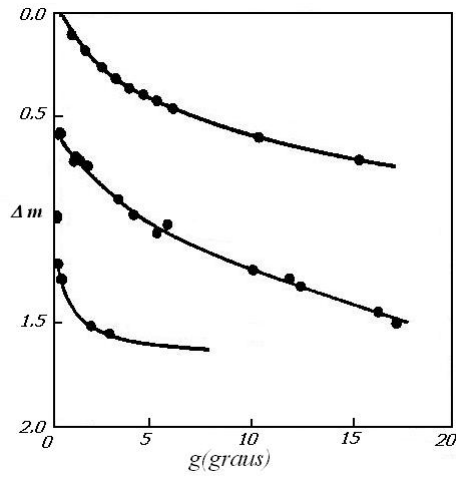


Figura 3.16: Comparação entre medidas (pontos) e o valor da função de refletância bidirecional para vários objetos do sistema Solar (Hapke, 1993)

$$B(g) = \frac{B_0}{1 + \frac{1}{h} \tan(g/2)} \quad (3.90)$$

Substituindo da equação o valor de  $h$  expresso em 3.86 obtemos:

$$r(i, e, g) = \frac{\omega}{4\pi} \frac{\mu_0}{\mu_0 + \mu} \{ [1 + B(g)] p(g) + H(\mu_0) H(\mu) - 1 \} \quad (3.91)$$

Esta é a função de refletância bidirecional não isotrópica para uma partícula em que considera quase todos os fatores analisados.

# Capítulo 4

## Espectroscopia de refletância

A camada superior de vários materiais parece ser suficientemente lisa comparada com o comprimento de onda da luz incidente ou a espalhada quase especularmente da superfície e difusa por baixo da superfície. A componente especular é chamada de reflexão regular. Como a superfície se torna óticamente lisa para ângulos de incidência grandes, a componente regular pode se tornar importante para ângulos de fase grandes.

O exemplo mais comum é a água superficial com componentes sólidos suspensos (rios, lagos e oceanos). Se uma quantidade de água é examinada com supostos da ótica geométrica para a reflexão superficial, pode se observar a existência de um aumento brilhante que resulta ser a imagem do Sol. Se o mesmo curso de água é observado numa configuração não especular, pode-se ver escuro e com coloração dependendo da natureza do sólido suspenso.

Uma expressão de primeira ordem para a refletância bidirecional especular difusa  $r(i, e, \psi)$  é obtida pela combinação das expressões de refletância especular e difusa:

$$r_{sd}(i, e, g) = R(i)\delta(e - i)\delta(\psi - \pi) \quad (4.1)$$

Onde  $R(i)$  é a média do coeficiente de reflexão de Fresnel nas direções de polarização;  $\delta$  corresponde a função delta e  $r(i, e, \psi)$  é a função de refletância bidirecional do meio que espalha a luz.

Esta equação é uma simplificação porque:

1. Assume-se que as componentes regulares permanecem colimadas depois da reflexão e, portanto, é desconsiderada toda influência da rugosidade da superfície.
2. Numa superfície rugosa para ângulos pequenos a radiância refletida é máxima para o ângulo especular, mas, para ângulos maiores o máximo de intensidade se

acha levemente afastado do ângulo de fase. Isto acontece porque o coeficiente de Fresnel aumenta rapidamente e não linearmente para ângulos grandes.

3. Essa equação, também, desestima qualquer difusão interna causada por partículas interiores.

Como geralmente a rugosidade é pouca e randômica, os efeitos podem ser desprezados ou avaliados dentro de outras funções, mas, às vezes acontece que há partículas orientadas, principalmente em grandes corpos devido a sedimentação ou a outros efeitos da atmosfera do objeto.

Também pode acontecer que cristais que foram expostos a altas pressões geram grãos reorientados ou deformados. Esta orientação dos grãos modifica completamente o padrão de espalhamento simples, e aí o padrão de espalhamento não preserva fielmente as propriedades do espalhamento das partículas espalhadoras.

A refletância em lâminas isoladas ou que estão apoiadas em suporte de baixo albedo pode ser calculada por:

$$r_0 = r_U \frac{1 - \exp(-4\gamma r_0)}{1 - r_0^2 \exp(-4\gamma r_0)} \quad (4.2)$$

e a transmitância:

$$t_0 = \frac{(1 - r_U^2) \exp(-2\gamma r_0)}{1 - r_0^2 \exp(-4\gamma r_0)} \quad (4.3)$$

Há diferentes formas de se expressar a medida da refletância e cada uma delas implica em si uma relação entre a potência ou a irradiância espalhada e incidente. Esta relação de medidas não é um simples arranjo teórico, porém, é necessário conhecer as funções que identificam cada uma das medidas.

A **função de distribuição de refletância bidirecional** (BRDF) é a razão da radiância espalhada de uma luz colimada por uma superfície numa direção dada por unidade de superfície. A potência incidente por unidade de área é  $Jr(i, e, g)$ , onde  $r(i, e, g)$  é a refletância bidirecional, então:

$$BRDF(i, e, g) = \frac{r(i, e, g)}{\mu_0} \quad (4.4)$$

Substituindo em 2.93:

$$BRDF(i, e, g) = \frac{\omega}{4\pi} \frac{1}{\mu_0 + \mu} \{ [1 + B(g)] p(g) + H(\mu)H(\mu_0) - 1 \} \quad (4.5)$$

O fator de refletância (REFF) de uma superfície se define como a razão da refletância de uma superfície em função da refletância de outra superfície lambertiana nas mesmas condições de iluminação e técnica de medida. Em geral isto é chamado de **coeficiente de refletância**. Como a refletância bidirecional de uma superfície lambertiana é  $r_L = r(i, e, g)/\pi$  o fator de refletância é:

$$REFF(i, e, g) = \frac{\omega}{4\mu_0 + \mu} \{[1 + B(g)]p(g) + H(\mu)H(\mu_0) - 1\} \quad (4.6)$$

O **fator de refletância** (RADF) é semelhante ao fator de refletância, sendo definido em função de uma superfície perfeitamente difusa iluminada a  $i = 0$ , e é dado por:

$$RADFF(i, e, g) = \frac{\omega\mu_0}{4\mu_0 + \mu} \{[1 + B(g)]p(g) + H(\mu)H(\mu_0) - 1\} \quad (4.7)$$

A **refletância relativa** ( $\Gamma$ ) de uma amostra é definida como a refletância relativa a uma amostra padrão de espessura infinita, não absorvente e que espalha isotropicamente e que tem efeito de oposição desprezível, quando é iluminada e vista com a mesma geometria que a amostra.

$$\Gamma(i, e, g) = \frac{\omega}{H(\mu_0, \omega = 1)H(\mu, \omega = 1)} \{[1 + B(g)]p(g) + H(\mu)H(\mu_0) - 1\} \quad (4.8)$$

Para uma amostra que se considera que se considera que espalha isotropicamente este valor pode ser aproximado a:

$$\Gamma(i, e, g) = \frac{\omega}{(1 + 2\gamma\mu)(1 + 2\gamma\mu_0)} \quad (4.9)$$

#### 4.0.1 Teorema da reciprocidade

Foi enunciado por Hermann Von Helmholtz e indica que se uma superfície uniforme é iluminada por luz colimada com um ângulo de incidência  $i$  e observado num ângulo de emergência  $e$ :

$$r(i, e, g) \cos e = r(e, i, g) \cos i \quad (4.10)$$

Podem-se deduzir pela aplicação deste teorema e as definições anteriores de refletância que:

$$BRDF(i, e, g) = BRDF(e, i, g) \quad (4.11)$$

$$REFF(i, e, g) = REFF(e, i, g) \quad (4.12)$$

No laboratório o teorema da reciprocidade é usado para testar as leis, se elas não cumprem o teorema da reciprocidade, então não são válidas.

## 4.0.2 Fotometria de corpos opacos

Geralmente os estudos tentam descrever as propriedades fotométricas dos corpos do sistema solar usando diferentes medidas de refletância para conhecer o albedo e as funções fotométricas. Há tantos tipos de albedo (provem do latino = brancura) como de refletâncias dependendo da geometria do sistema.

A relação entre as medidas de refletância permite definir várias funções fotométricas e albedos. Neste capítulo analisaremos alguns deles.

### Albedo normal

É a razão entre o brilho de uma superfície observada a ângulo de fase zero e o brilho de uma superfície perfeitamente difusa colocada na mesma posição iluminada e observada perpendicularmente. O albedo normal é o fator de radiância da superfície a ângulo de fase zero:

$$A_n = \frac{Jr(i, e, o)}{J/\pi} = \pi r(e, e, o) \quad (4.13)$$

O que equivale a:

$$A_n = \frac{\omega}{8} [(1 + B_0)p(0) + H^2(\mu) - 1] \quad (4.14)$$

E como para corpos muito escuros  $[H^2(\mu)] \ll 1$ , podemos escrever que:

$$A_n \cong \frac{\omega}{8}(1 + B_0)p(0) \quad (4.15)$$

Que é uma forma de medir um albedo que seja independente do ângulo sob o qual é observado o corpo.

### Função fotométrica

É a razão entre o brilho de uma superfície observada a um ângulo fixo  $e$ , mas, variando  $i$  e  $g$ , relativa a o valor a  $g = 0$ :

$$f(i, e, g) = \frac{r(i, e, g)}{r(e, e, g)} \quad (4.16)$$

Esta função pode ser escrita como:

$$f(i, e, g) \cong 2 \frac{\mu_0}{\mu_0 + \mu} \frac{1 + B(g)p(g)}{1 + B_0p(0)} \quad (4.17)$$

Chama-se **albedo hemisférico** ( $A_h$ ), à fração total de irradiância colimada incidente por unidade de superfície, se ela fosse espalhada só num hemisfério.

Chama-se **albedo físico** ou **albedo geométrico**, à razão entre o brilho de um corpo a  $g = 0$  e o brilho de uma superfície circular perfeitamente lambertiana do mesmo raio e a mesma distância quando iluminada e observada perpendicularmente.

$$A_{pi} = \frac{\omega}{4} \int_0^1 H^2(\mu) \mu d\mu \quad (4.18)$$

O que pode ser aproximado para:

$$A_{pi} \cong 0.49r_0 + 0.196r_0^2 \quad (4.19)$$

### 4.0.3 Espectroscopia de refletância

Um dos objetivos, quando se faz análise espectroscópica, é inferir algumas das propriedades características das superfícies. Isto pode ser composição, rugosidade, porosidade, empacotamento, etc., por meio de medições remotas.

Há varias razões para usar a espectroscopia de refletância como uma técnica poderosa na análise material. A primeira é que a faixa dinâmica de medidas é muito grande, além disso, se é considerado o espalhamento múltiple e a amplificação de contrastes podem ser detectadas bandas fracas de absorção ou anomalias na dispersão da radiação refletida pelas partículas.

Outra razão é que a preparação da amostra é simples e a análise total não é destrutiva. Por último às vezes é muito difícil medir transmitância e, portanto, fica difícil estimar valores de  $\alpha(\lambda)$  e conseqüentemente a determinação de  $k(\lambda)$ . No entanto, com o uso de funções adequadas os valores dos coeficientes de absorção podem ser determinados com medidas de refletância.

Para medir refletância deve-se medir a radiância espalhada e a incidente, o que pode ser feito com um único detector se ele pode ser mudado de posição. Mas isto pode ser inconveniente experimentalmente, pois muitas vezes há uma perda de calibração do detector.

Geralmente o detector é calibrado com uma amostra padrão e a refletância seria dada por:

$$r_{amostra}(i, e, g) = \frac{I_{amostra}}{I_{padrão}} r_{padrão}(i, e, g) \quad (4.20)$$



As medidas da refletância obtidas nos laboratórios dependem tanto do instrumental como da técnica usada para obter essa medida. Em geral é medida a intensidade da radiância espalhada assim como a intensidade da radiância incidente.

Isto pode ser feito medindo a radiância espalhada e logo girando o detector para fazer a medida da irradiância incidente. No entanto isso é, às vezes, um pouco inconveniente e assim, geralmente se calibra o detector com a medida da intensidade refletida de uma superfície de material padrão de propriedades de espalhamento conhecidas.

O que se deseja é que o padrão usado seja altamente estável e refletor. Por exemplo, o óxido de magnésio ( $MgO$ ) ou o Sulfeto de Bário ( $BaSO_4$ ) ou o Politetra fluoroetileno (PTFE). Cada grandeza tem uma técnica de medida específica e é necessário conhecer estas técnicas para poder interpretar logo os resultados.

A **refletância bidirecional** pode ser medida iluminando o material com luz de uma fonte de abertura angular pequena e observando o espalhamento com um detector que também subtenda um pequeno ângulo da superfície. Geralmente é medida para vários valores de  $i$ ,  $e$ , e  $g$ , para padronizar e logo é medida a refletância para varias frequências com os valores de  $i$ ,  $e$  e  $g$  fixos.

Já a **refletância direcional** (hemisférica), é medida usando um integrador esférico que consiste numa cavidade recoberta de um material altamente refletor no qual é depositada a amostra. A cavidade tem duas perfurações uma para a radiância incidente e outra para a emergente. O detector pode “*ver*” a esfera mais não à amostra. É necessário conhecer o instrumental e a técnica de medida para entender qual é a função que deve ser usada para o cálculo da refletância.

Para determinar os parâmetros de espalhamento por meio das medidas de refletância é preciso, uma vez realizadas as medidas, inverter a função de refletância. Em principio isto pode ser feito mesmo que a função não seja linear e que os parâmetros sejam conjugados nas funções que compõem a função de refletância. Entretanto isso condiciona que os métodos de inversão diretos não sejam analíticos.

Há vários métodos de inversão da função de refletância:

**Métodos de ensaio e erro:** Estes métodos consistem em tentar chutar valores apropriados de albedo ( $\omega$ ) ou fator de albedo ( $\gamma$ ) e analisar o comportamento da função. Logo são lançados outros valores ate obter os valores que determinam as variações da amplitude de refletância relativas às mudanças de ângulos de fase, rugosidade, efeito de oposição etc.

A maior crítica é que o efeito nas mudanças se torna intuitivo e mesmo quando os ajustes são satisfatórios nem sempre são justificados fisicamente.

**Método de ajuste de rotinas computacionais:** São também chamados de métodos de ajuste de resíduos e consistem simplesmente em criar rotinas num espaço

multidimensional que procure os parâmetros que em forma coordenada ajustem em todas as funções com o maior fator de confiança estatístico.

Outro método consiste em ajustar uma série de parâmetros e analisar o ajuste tentando limitar a seqüência de variação, algo muito parecido a um ajuste por recorrência. O ajuste feito pela rotina **EO4JAF** do grupo de algoritmos numéricos (**NAG**) foi usado nos trabalhos de Veverka (Veverka, 1978b), Pinty e outros autores.

Existem, porém, métodos de inversão analíticos, mas a confiança estatística deles está determinada pela validade e o número de hipóteses feitas para determinar a solução.

### Soluções analíticas

As soluções analíticas surgem de realizar diversas hipóteses a respeito das medidas quando feitas em condições controladas. Por exemplo, se é possível obter medidas para ângulos de fase grande, podemos supor que o efeito de oposição é desprezível e, portanto, obtemos uma simplificação da função original. Outra simplificação consiste em supor que o espalhamento é isotrópico e assim a função de fase tem valor  $p(g) = 1$ .

Como o albedo é uma quantidade primaria, ele poderia ser calculado a partir de medidas de refletância. Geralmente as refletâncias – tanto da amostra como do padrão – são medidas numa configuração geométrica conhecida. Neste caso o albedo passa a ser um parâmetro e, se as medidas são feitas num ângulo o suficientemente grande para supor que a configuração geométrica afasta as medidas do pico do efeito de oposição. A hipótese mais simplificadora é que a partícula espalha isotropicamente e que portanto, a função de fase é  $p(g) = 1$  e o efeito de oposição pode ser ignorado, ou seja,  $B(g) = 0$ .

A maioria das vezes é medida a intensidade da luz espalhada pela amostra ao mesmo tempo em que é medida a intensidade da luz espalhada pelo padrão, assumindo que esse padrão espalha como uma superfície perfeitamente difusa. Se for informada a razão entre estas medidas, deve-se que interpretar a medida como um fator de refletância (REFF), mas não há uma justificativa física para essa suposição.

Talvez possa ser assumido com maior consistência física que o padrão espalha com  $\omega = 1$ ,  $B(g) = 0$  e  $p(g) = 1$  e portanto a medida pode ser interpretada como uma refletância relativa  $\Gamma$ . Para o caso particular podemos assumir que a intensidade é medida a um ângulo de fase grande e, portanto, pode ser ignorado qualquer efeito de oposição e, assim a refletância bidirecional relativa estaria dada por:

$$\Gamma = \frac{1 - \gamma^2}{(1 + 2\gamma\mu)(1 + 2\gamma\mu_0)} \quad (4.21)$$

assim pode ser calculado o albedo que:

$$\gamma(\Gamma) = \frac{|(\mu + \mu_0)^2 \Gamma^2 + (1 - 4\mu\mu_0\Gamma)\sqrt{1 - \Gamma} - (\mu + \mu_0)\Gamma|}{1 + 4\mu\mu_0\Gamma} \quad (4.22)$$

#### 4.0.4 Estimativa do coeficiente de absorção

Para determinar o coeficiente de absorção  $\alpha$ , ou seu equivalente  $k$ , primeiro é necessário calcular  $\omega$  por algum dos métodos descritos. No caso em que a amostra seja uma mistura deverá ser usado um método de deconvolução. Deve-se escolher logo um modelo que relacione o albedo com a eficiência e as propriedades do espalhamento. Para a solução final é preciso conhecer – ou pelo menos ter uma estimativa séria – do tamanho da partícula e a forma.

No trabalho de laboratório é possível determinar os valores da maioria dos parâmetros exceto o valor de  $k$  que deve ser calculado. O tamanho e forma da partícula podem ser estimados por observação microscópica ou por barredura eletrônica. A parte real da constante pode ser obtida por métodos mais simples como a determinação do ângulo de Brewster.

Para partículas compostas de um único material e em condições de geometria ótica, existe uma série de relações entre o coeficiente de absorção e a refletância que estão dados pela relação entre o albedo e as eficiências de espalhamento, absorção e extinção:

$$\omega = \frac{N_E \sigma Q_S}{N_E \sigma Q_E} = \frac{Q_S}{Q_E} = Q_s \quad (4.23)$$

Como para partículas grandes em contato íntimo podemos supor que  $Q_E = 1$ , se deduz que  $Q_S = Q_s$ , então:

$$\gamma^2 = 1 - \omega = \frac{N_E \sigma Q_E - N_E \sigma Q_s}{N_E \sigma Q_E} = \frac{Q_A}{Q_E} = Q_A \quad (4.24)$$

De acordo com a definição de eficiência de espalhamento de uma partícula equante:

$$\omega = Q_s = S_e + (1 - S_e) \frac{1 - S_i}{1 - S_i \Theta} \Theta \quad (4.25)$$

Onde

$$\Theta = \frac{r_i + \exp\left(\sqrt{\alpha(\alpha + s)}\langle D \rangle\right)}{1 + r_i \exp\left(\sqrt{\alpha(\alpha + s)}\langle D \rangle\right)} \quad (4.26)$$

Onde  $f$  é o coeficiente de espalhamento interno dentro da partícula e:

$$r_i = \frac{1 - \sqrt{\alpha(\alpha + s)}}{1 + \sqrt{\alpha(\alpha + s)}} \quad (4.27)$$

Se a partícula é considerada sem espalhamento interno  $s = 0$ , então:

$$\Theta = e^{-\alpha\langle D \rangle} \quad (4.28)$$

Um problema importante na estimação de  $\alpha$  por  $\Theta$  é o significado do caminho ótico  $\langle D \rangle$ . Uma aproximação vem dada por  $\langle D \rangle = 0.9D$ , mas, isto é só uma aproximação para uma distribuição de partículas esféricas homogêneas. O esperado é que  $\langle D \rangle$  seja da mesma ordem embora menor que  $D$ . Há três problemas:

1. Quase qualquer afastamento da esfericidade leva a uma diminuição de  $\langle D \rangle$ .
2. A medida mais natural de  $\langle D \rangle$  consiste numa distribuição ponderada da distribuição de partículas.
3. O cálculo deveria ponderar mais as partículas pequenas se elas não são opacas.

As figuras mostram a dependência do albedo e a refletância com a absorção.

Em ambos os gráficos se assume que  $\alpha\langle D \rangle = 4kX$ . Em geral pode-se assumir que há três diferentes tipos de regiões diferentes:

1.  $\alpha\langle D \rangle \ll 1$  e, portanto, tanto  $\omega$  e  $r_0$  são próximos a 1.
2. Para partículas compostas de um único material e em condições de geometria ótica, existe uma série de relações entre o coeficiente de absorção e a refletância que estão dados pela relação entre o albedo e as eficiências de espalhamento, absorção e extinção:
3. a região onde  $k \geq 0.1$ , ou seja regiões onde tanto  $\omega$  como  $r_0$  aumentam com o aumento do valor de  $k$ .

Na primeira região onde  $k \sim 10^{-7}$ , para partículas com tamanho aproximado de  $500 \mu\text{m}$  e  $\alpha\langle D \rangle \sim 10^{-3}$ . Há medidas razoavelmente diferentes entre  $r_0$  e 1. Portanto há uma relativa sensibilidade de  $k$  para valores de  $\alpha$  pequenos. Se  $\alpha\langle D \rangle \leq 3$  a refletância é dominada pela luz refletida, transmitida ou espalhada dentro do volume da partícula, por isso esta região é chamada de **região de espalhamento**

**volumétrico.** Se  $\alpha\langle D \rangle \leq 1$ , então tanto o albedo como a refletância decrescem suavemente com o aumento de  $k$ .

Na região seguinte, chamada de **região de espalhamento superficial fraco**,  $f = 0$  e  $\alpha\langle D \rangle \geq 3$ , as partículas são consideradas opacas e todo o espalhamento ocorre por reflexão da superfície das partículas e nessa região  $\omega = S_e$ . Em este caso:

$$S_e \propto \frac{(1-n)^2 + k^2}{(1+n)^2 + k^2} \quad (4.29)$$

Se  $k \leq 0.1$ ,  $S_e$  está completamente determinada por  $n$ . Se  $\alpha\langle D \rangle \geq 3$  as curvas de  $\omega$  e  $r_0$  são muito planas e, portanto só podem ser colocados limites superiores e inferiores.

A última é a **região de espalhamento superficial forte**. Nesta região  $k \geq 0.1$ ,  $S_e$  é sensível a  $k$  e tanto  $\omega$  como  $r_0$  crescem com o incremento de  $k$ . O importante nesta região é que se a partícula é suficientemente lisa a refletância pode ser considerada independente do tamanho de partícula. Mas nesta região toda borda, aspereza e rachadura podem atuar como absorvedores e a refletância diminuir bastante. Nesta região é onde a função de rugosidade se torna importante.

Se  $s$  não for desprezível,  $\alpha$  e  $s$  podem ser calculadas a partir de medidas de refletância do mesmo material, mas usando grãos de diferente tamanho. Medindo o  $\omega$  de partículas grandes e pequenas, pode ser calculado o valor de  $\Theta$ , e desse valor derivado os valores de  $\alpha$  e  $f$ .

### A função de espat e o MOPL

Se for feito um gráfico da eficiência de absorção em função de  $\alpha\langle D \rangle$  pode-se ver que há uma proporcionalidade para  $\alpha < D \rangle \leq 1$ , como a função de espat indica que:

$$W = \frac{Q_A}{Q_S} = \frac{1-\omega}{\omega} \quad (4.30)$$

Pode-se demonstrar que para uma grande faixa de valores de  $\alpha\langle D \rangle$ , onde há uma relação linear:

$$W \cong \alpha D_e \quad (4.31)$$

Onde  $D_e$  é o tamanho efetivo da partícula que é aproximadamente o dobro do tamanho da partícula. Por combinação das equações 6.30 e 6.31:

$$\omega = \frac{1}{1+W} \cong \frac{1}{1+\alpha D_e} \quad (4.32)$$

Quando o objeto da análise é um meio composto de um único mineral em partículas pequenas, pode ser validada a aproximação  $W \approx \alpha D_e$ . Se há condições de medir  $W(\lambda)$  pode ser obtido o valor de  $\alpha(\lambda)$  pela medida da refletância na banda de comprimentos de onda onde as partículas espalham.

As limitações mais importantes são duas:

1. Estas aproximações são válidas só se nem  $\alpha\langle D \rangle$  ou  $f\langle D \rangle$  são grandes. Isto indica que as aproximações são válidas só no caso em que as partículas não sejam ópticamente densas. No caso do quartzo isto é válido, pois segundo os valores de bibliografia ele é transparente.
2. O meio deve ter uma única componente mineral e deve ter uma baixa variabilidade de tamanho.

Assim como a lei de Beer estabelece uma relação linear para a transmitância e a absorbância se é definido o caminho ótico mais significativo MOPL (Mean Optical Path Length) pode ser usada uma relação linear dada pela absorbância efetiva.

$$A_e = -\ln r \quad (4.33)$$

Vários autores entre eles Ted Roush, definem a relação:

$$MOPL = \frac{A_e}{\alpha} \quad (4.34)$$

O que leva a:

$$MOPL = -\frac{1}{\alpha} \ln r \quad (4.35)$$

Como  $\alpha \propto \ln r$  o valor do MOPL pode permanecer constante para uma série de materiais entre eles o quartzo, inclusive quando há variações de  $\alpha$ . No caso do presente trabalho com a medida de refletância se calculará o albedo e com este se realizara uma estimação do coeficiente de absorção ( $\alpha$ ). Com o valor assim determinado se verificará se a equação 4.35 é válida para os valores constantes de MOPL.

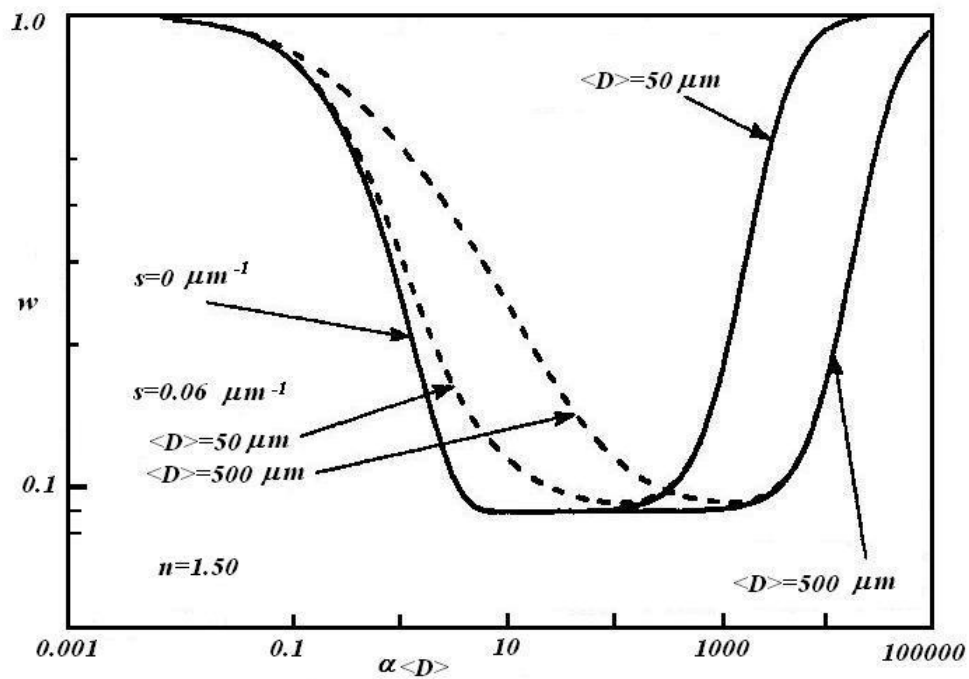
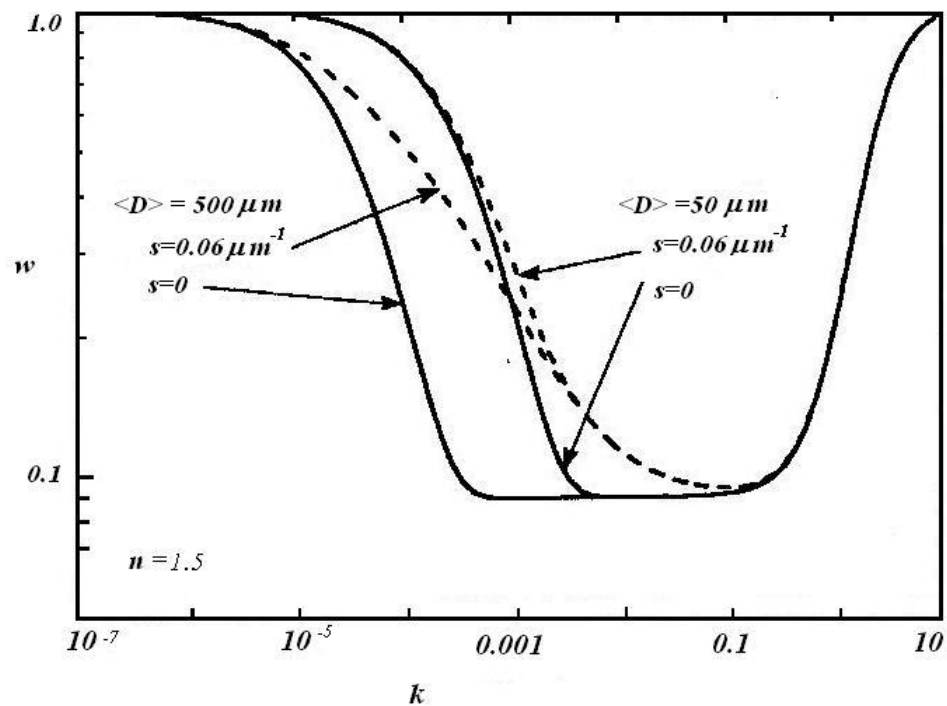


Figura 4.1: Albedo de espalhamento simples  $\omega = Q_S$  para partículas de tamanho e coeficientes de espalhamento interno indicado. O índice de refração real é 1.50. No gráfico superior  $\omega$  em função de  $k$  e no gráfico inferior  $\omega$  em função de  $\alpha \langle D \rangle$  (Hapke, 1993)

# Capítulo 5

## Constantes óticas

### 5.1 Introdução

Os cálculos teóricos de absorção, transmissão, reflexão, emissão e espalhamento da radiação eletromagnética de um grão estão baseados no conhecimento implícito do índice de refração complexo, o que exige o conhecimento das constantes óticas. As medidas das constantes são feitas em laboratório e dependem do comprimento de onda, a composição química, a estrutura cristalina e a temperatura.

O índice de refração geralmente é expresso como:

$$m(\lambda) = n(\lambda) + ik(\lambda) \quad (5.1)$$

Sendo  $m$  o valor do índice de refração complexo com  $n$  e  $k$  valores reais que simbolizam a constante ótica real e imaginária respectivamente, onde  $\lambda$  é o comprimento de onda,  $n$  representa o índice de refração usual que determina a velocidade de fase e  $k$  está relacionado com o coeficiente de absorção.

Nas microondas e nos comprimentos correspondentes ao comprimentos do rádio é comum que  $m$  seja expresso em função da permissividade elétrica, existindo uma permissividade real e outra imaginária e se cumpre que em materiais não magnéticos, o índice de refração complexo seja  $m^2 = \epsilon$ .

A expressão do índice de refração complexo corresponde a que nem sempre a polarização do material responde instantaneamente aos campos aplicados o que provoca uma perda dielétrica. Próximo dos picos de absorção é onde se percebe a necessidade de usar o índice de refração complexo e é ai onde os métodos de cálculo como Kramers-Kronig podem ser aplicados. Isto vai gerar que nas resoluções de  $n$  e  $k$  uma sempre dependa da outra.



Estas constantes variam com o comprimento de onda e a temperatura. Essa variação geralmente é pequena mas, quando perto do comprimento de onda da absorção a variação é muito grande e não pode ser desprezada. Para entendermos os objetivos deste trabalho, um passo importante é compreender a teoria e os modelos que explicam as variações de  $n$  e  $k$ .

### 5.1.1 O método de Kramers-Kronig

Em condições em que o material tem um comportamento próximo à transparência pura, métodos como a equação de Sellmeier podem ser usados para determinar o valor de  $n$ , supondo que  $k$  é tão pequeno que pode ser ignorado.

A equação de Sellmeier (Vargas, 2005) é uma relação empírica que indica:

$$n^2(\lambda) = 1 + \frac{B_1\lambda^2}{\lambda^2 - C_1} + \frac{B_2\lambda^2}{\lambda^2 - C_2} + \frac{B_3\lambda^2}{\lambda^2 - C_3} + \dots \quad (5.2)$$

Que pode ser expressa como:

$$n^2 = 1 + \sum_j \frac{B_j}{\lambda^2 - C_j} \quad (5.3)$$

Onde cada um dos termos do somatório representa um termo da ressonância.

Isso só pode ser aplicado nas condições de transparência pura, em outras condições deve ser determinado o termo que representa a absorção. A série de Kramers – Kronig surge de uma propriedade matemática que conecta a parte imaginária com a parte real de qualquer função complexa. Esta série é usada geralmente para ligar as partes imaginárias e reais de funções que descrevem sistemas físicos. A relação se baseia no princípio de que a causalidade implica a condição de analiticidade e a inversa à analiticidade leva implicitamente a causalidade.

Dada uma função complexa podem ser estabelecidas as seguintes relações entre ambas as funções devido às mudanças que sofre a representação analítica do versor  $\omega$  nos diferentes quadrantes.

$$f_1(\varpi) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f_2(\varpi')}{(\varpi' - \varpi)} d\varpi' \quad (5.4)$$

e

$$f_2(\varpi) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f_1(\varpi')}{(\varpi' - \varpi)} d\varpi' \quad (5.5)$$

No caso da aplicação à refletância se sabe que a  $g = 0$ , a amplitude da refletividade complexa para as duas direções de propagação são iguais:

$$\hat{r}(0) = \hat{r}_\perp(0) = \hat{r}_\parallel(0) = \frac{n - 1 + ik}{n + 1 - ik} = \eta e^{i\phi} \quad (5.6)$$

Onde  $\eta$  é a amplitude de  $r(0)$  e  $\phi$  é o ângulo de fase.

Então como  $n$  e  $k$  são função da frequência, a equação 5.5 indica que  $\eta$  e  $\phi$  também serão funções de  $\nu$ . Isto pode ser escrito como:

$$\hat{r}(0, \nu) = \eta(\nu) e^{i\phi(\nu)} \quad (5.7)$$

ou como:

$$\ln[\eta(\nu)] = \ln[\eta(\nu)] + i\phi(\nu) \quad (5.8)$$

Assim como a refletividade obedece às condições da causalidade e como  $r(0, -\nu) = r^*(0, \nu)$  é simétrica; nas condições de Cauchy-Riemann, quando aplicadas para as relações de Kramers-Kronig se obtém:

$$\ln[\eta(\nu)] = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\nu' \phi(\nu')}{\nu'^2 - \nu^2} d\nu' \quad (5.9)$$

$$\phi(\nu) = -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\ln[\eta(\nu')]}{\nu'^2 - \nu^2} d\nu' \quad (5.10)$$

Estas equações podem ser usadas para calcular os valores de  $n(\nu)$  e  $k(\nu)$  em medidas de refletância normal medida ao longo de uma banda de frequências.

Usando, a seguir, o modelo de Drude podem ser extrapolados os valores das medidas para  $\nu = 0 \text{ e } \nu \rightarrow \infty$  e estes valores podem ser colocados nas equações 5.7 e 5.8 cuja solução é:

$$n = \frac{1 - \eta^2}{1 - 2\eta \cos \phi + \eta^2} \quad (5.11)$$

e

$$k = \frac{2\eta \sin \phi}{1 - 2\eta \cos \phi + \eta^2} \quad (5.12)$$

Estas equações são aplicadas para calcular  $k$  de materiais absorventes.

O que fica claro, que com este ou outro método, é a existência de uma dependência implícita entre os valores calculados das constantes óticas, ou seja, para o cálculo de  $k$  é necessário o valor de  $n$  e, ao contrario, para o cálculo de  $n$  é necessário o valor

de  $k$ . Isto obriga a que as hipóteses feitas para qualquer dos cálculos sejam válidas para ambos os casos, pois se for o contrario a determinação não seria válida.

## 5.2 Medições em laboratórios

Imagine-se uma placa de material sobre a qual incide uma luz colimada que forma um ângulo  $\theta$  com a normal da superfície. Parte da luz é transmitida e parte é refletida. Se a placa é uma lâmina e tem duas superfícies, pode acontecer que aconteça uma reflexão interna e logo uma nova transmissão para o meio. Geralmente os valores de  $n$  são obtidos nos laboratórios, da interferência das ondas que provêm da primeira reflexão e da reflexão interna e que se acham numa fase  $\varphi$ , pelo cálculo:

$$\vartheta = \frac{4\pi}{\lambda}nd \cos \theta \quad (5.13)$$

O coeficiente de absorção é muito pequeno e, como as amplitudes das ondas decrescem em razão geométrica, a análise só pode considerar a primeira reflexão interna quando se quer determinar só com uma medida as duas constantes óticas.

Os métodos usados nos laboratórios de mineralogia para a determinação direta de  $n$  e  $k$  são, em geral, de vários tipos.

O primeiro tipo de método determinam simultaneamente as constantes e a espessura da lâmina. Estes métodos usam o incremento do coeficiente de absorção a com o aumento da espessura, por aplicação da lei de Beer-Lambert, pois este coeficiente é proporcional ao comprimento do caminho ótico do feixe de luz. Como estes métodos devem determinar ao mesmo tempo as constantes óticas e a espessura da lâmina, geralmente há uma grande propagação dos erros (Mastrapa, 1999).

Um segundo tipo de método está relacionado à variação da refletância quando há variações do meio fundamental. Tal metodologia é denominada microscopia quantitativa de reflexão e pode medir as constantes óticas de um mineral, medindo a refletância em dois meios distintos de índice de refração bem determinados. Geralmente são usados ar, água e óleos como meios fundamentais.

Aplicando:

$$R_{ar} = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2} \quad (5.14)$$

$$R_{oleo} = \frac{(n - N)^2 + k^2}{(n + N)^2 + k^2} \quad (5.15)$$

O que leva a:

$$n = \frac{1}{2} \frac{(N^2 - 1)(1 - R_{ar})(1 - R_{oleo})}{N(1 - R_{ar})(1 + R_{oleo}) - (1 + R_{ar})(1 - R_{oleo})} \quad (5.16)$$

$$k = \frac{(n + 1)^2 R_{ar} - (n - 1)^2}{1 - R_{ar}} \quad (5.17)$$

Entretanto, este método aparece como muito complicado, pois o cálculo deve ser realizado em todo o espectro a intervalos de 10 nm. Se o material é anisotrópico deve ser feito o estudo em seções orientadas. Se o material é uniaxial as medidas são dobradas e se é biaxial elas são triplicadas, pois cada uma deve ser feita segundo cada vibração principal. E como estes métodos têm vários passos experimentais os critérios estatísticos para estabelecer o número de amostra são fundamentais.

Uma terceira metodologia é usada por Lucey e por Roush já foi abordada no capítulo 2.

Tanto a reflexão diferencial como o espalhamento são funções do comprimento de onda  $\lambda$ . Há vários modelos desenvolvidos para o cálculo das funções de absorção e dispersão da luz por sólidos. Dois desses modelos são clássicos: o modelo de Drude e o modelo de Lorentz. A partir da análise destes modelos são determinadas as funções para o cálculo das constantes óticas.

O modelo de Drude assume simplesmente que há elétrons que podem se mover na rede, entanto os íons permanecem fixos. Como a média da densidade eletrônica associada aos elétrons é igual e oposta à média eletrônica associada aos íons da rede, a densidade eletrônica total deve ser zero.

Como a função de onda quanto-mecânica dos elétrons de condução não está localizada na rede, o campo elétrico local percebido pelos elétrons é igual ao campo elétrico macroscópico. Assim, os elétrons reagem a presença do campo elétrico e às colisões dos mesmos com a rede. Isto resulta numa queda de energia não radiativa.

A reação dos elétrons da rede à presença do campo elétrico e as colisões que são proporcionais a velocidade geram uma onda periódica de frequência  $\nu$  que é descrita por:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-2i\pi\nu t} \quad (5.18)$$

Logo, o deslocamento do elétron da rede, induz um momento dipolar:

$$\vec{p} = e\vec{x} = \alpha_e \epsilon_{e0} \vec{E} \quad (5.19)$$

Onde  $\alpha_e$  é a polarizabilidade elétrica e  $\epsilon_{e0}$  é a permeabilidade elétrica. Como a susceptibilidade elétrica  $\chi_e$ , está relacionada com a densidade elétrica dos elétrons livres ( $\chi_e = \alpha_e N_e$ ), pode ser calculada a constante dielétrica do meio como:

$$K_e = 1 + \chi_e \quad (5.20)$$

Pode-se demonstrar, também, que as expressões reais e imaginárias da constante dielétrica são respectivamente:

$$K_e = n^2 - k^2 \quad (5.21)$$

e

$$K_{ei} = 2nk \quad (5.22)$$

Além disso demonstra-se que a constante dielétrica está associada à frequência de oscilação  $\nu$  causada pelo campo e a frequência de colisões dos elétrons livres  $\Xi$ . Isto determina a dependência da constante elétrica da frequência do campo:

$$K_e = 1 - \frac{\nu_p^2}{\nu^2 - \Xi^2} \quad (5.23)$$

$$K_i = \frac{\nu_p^2}{\nu^2 - \Xi^2} \frac{\Xi}{\nu} \quad (5.24)$$

O modelo de Lorentz é uma variação do modelo de Drude sobre sólidos não condutores e nos quais os elétrons não podem se movimentar tão facilmente pela rede, pois as forças de ligação da rede são maiores. Então os elétrons ficam em locais isolados. Do mesmo jeito que no modelo de Drude, os elétrons são deslocados pelo campo local e pelas colisões, só que as condições iniciais do modelo de Lorentz fazem com que a susceptibilidade elétrica seja diferente, pois há grande variação no valor de  $N_e$ . Isso leva expressões muito semelhantes aquelas de  $K_{er}$  e  $K_{ei}$  obtidas por Drude, que em geral, mostram o mesmo comportamento.

Os gráficos 5.1 e 5.2 mostram o comportamento dos valores de  $K_{er}$  e  $K_{ei}$  assim como o comportamento de  $n$  e  $k$  para os modelos de Lorentz.

Pode-se observar que tanto as constantes dielétricas como as constantes óticas têm uma ressonância em  $\nu = \nu_0$ . Na maior parte da faixa de frequências  $K_{er}$  cresce assim que a frequência  $\nu$  cresce. Isso é chamado de **dispersão normal**. Próximo a  $\nu = \nu_0$   $K_{er}$  diminui quando  $\nu$  cresce isto é chamado de **dispersão anômala**. Deve ser notado que o valor de  $K_{er}$  pode ser negativo, mas  $n$  sempre é positivo.

A largura da região anômala pode ser determinada pela resolução da derivada:

$$\frac{dK_{er}}{d(\nu^2)} = 0 \quad (5.25)$$

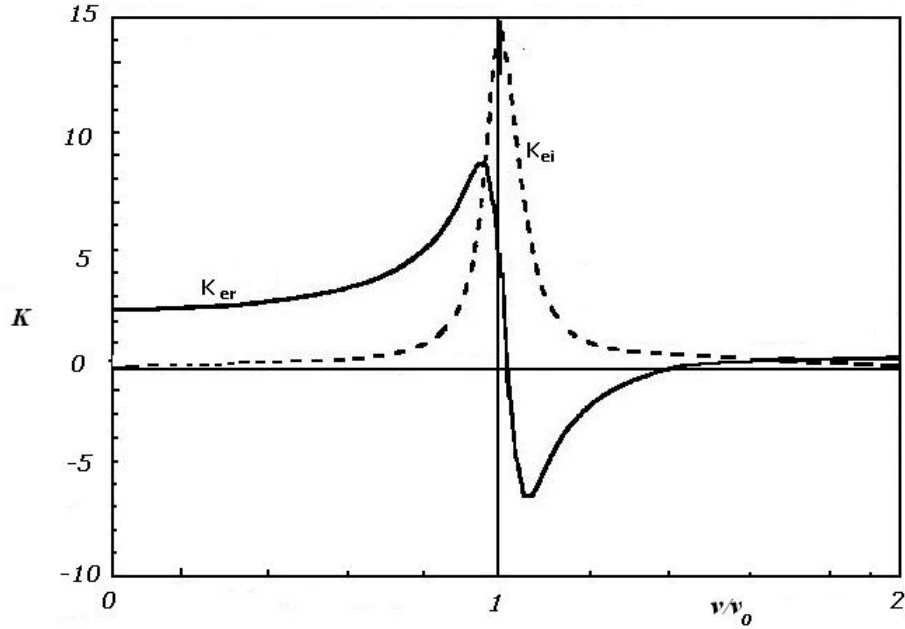


Figura 5.1: Parte real e imaginária da constante dielétrica na vizinhança de uma banda de absorção de acordo com o modelo de Lorentz (Hapke, 1993)

Desta equação se obtém o valor da frequência  $\nu_m$  onde o valor de  $K_{er}$  é máximo. Esta equação resolvida para as condições de Lorentz indica a relação entre  $\nu_0$  e  $\nu_m$  em função de  $\Xi$ . Note também que  $K_{er}$  e  $K_{ei}$  tem um máximo, quando  $\nu$  é próximo a  $\nu_0$ .

Independente do modelo usado, para frequências altas, quase todos eles coincidem. Isto indica que a essas frequências os elétrons, mesmo em substâncias pouco condutoras, estão excitados em estados onde não parecem estar ligados a um átomo em particular e se comportam, na rede, como elétrons livres.

Na maioria das substâncias existem vários lugares onde a rede muda internamente. Estas variações criam diferentes interações elétricas que caracterizam as diversas frequências de ressonâncias  $\nu_j$  e, também diferentes frequências de colisões  $\Xi_j$ .

Como estas regiões podem ter diferentes estruturas, também, podem ter uma diferente quantidade de elétrons por unidade de volume no entorno associados a  $j$ -ésima ressonância. Assim poderia se escrever uma expressão que compreenda os aportes de cada um desses elétrons.

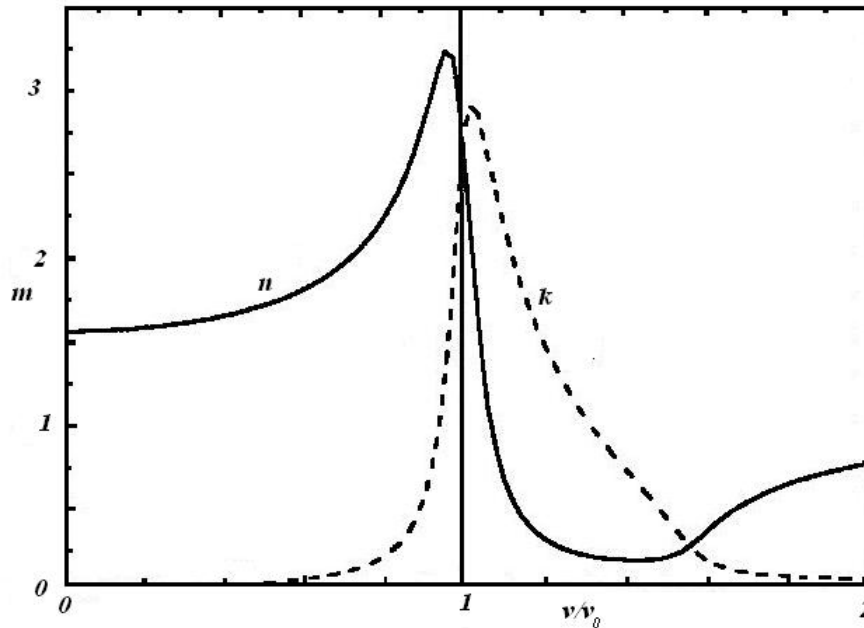


Figura 5.2: Parte real e imaginária do índice de refração do mesmo material na vizinhança de uma absorção (Hapke, 1993)

### 5.3 Determinação das constantes óticas por espectrometria

Toda a teoria desenvolvida por Hapke pode ser aplicada ao cálculo das constantes óticas. Assim, a partir dos espectros de refletância, podem ser derivados os valores de  $n$  e  $k$ .

O espectro de refletância é uma função da composição, do tipo de cristal, do tamanho de grão, da textura da superfície e do ângulo de fase. Nesse sentido a determinação das constantes pode ser feita de duas formas diferentes:

a) **parametrizando as propriedades espectrais** e estimando valores para conseguir que os resultados sejam independentes de alguns dos parâmetros como fazem Lucey e Shkuratov ou,

b) **por combinação dos dois modelos** como faz Ted Roush.

As constantes óticas podem ser obtidas experimentalmente dos espectros de absorbância e refletância que no caso de alguns minerais, como os máficos, são dominados por  $k$ .

A determinação se faz pela aplicação das equações de Maxwell com condições

de contorno apropriadas, que possam descrever a propagação da luz em meios absorventes.

Como as constantes são propriedades fundamentais da matéria, o valor independe do tamanho da partícula e da forma da mesma. Isso só ocorre quando o material se acha empacotado a granel. Assim, na realidade, estas constantes deveriam ser calculadas com teorias mais complexas.

A medida das constantes nos laboratórios se faz usando pó de padrões no qual pode ser aplicada a teoria de Hapke. Muita informação do comportamento não ideal é perdida, mas mesmo assim a aproximação obtida pode ser usada para gerar modelos computacionais de misturas minerais.

O método se baseia na aplicação das equações que relacionam a refletância e o albedo de dispersão simples e este com os índices complexos de refração. A determinação das constantes óticas e feita em duas etapas:

1. 1º uma conversão do espectro de refletância em albedo de dispersão simples, e
2. 2º através do albedo calculado, determinam-se as constantes óticas.

O problema no primeiro passo da seqüência é que se supõe que no passo seguinte é liberada a dependência da medida do tamanho da partícula. Na realidade se, se partir de uma função que depende do tamanho da partícula, ele deveria, pelo menos, verificar a coerência desta hipótese, o que não parece ser feito no trabalho de Lucey.

Da análise do efeito de oposição e a função de fase se obtém uma função que representa a refletância bidirecional:

$$r(i, e, g) = \frac{\omega}{4\pi} \frac{\mu_0}{\mu_0 + \mu} \{ [1 + B(g)] p(g) + H(\mu_0)H(\mu) - 1 \} \quad (5.26)$$

Esta função que define a refletância bidirecional é dada por Hapke para a relação entre a irradiância incidente sobre a superfície e a radiação refletida pela mesma numa direção dada.

A grandeza medida no laboratório é, geralmente, o brilho de uma superfície irradiada em comparação com o que sucederia com uma superfície lambertiana. Por isso no primeiro caso analisado, Lucey opta por outro modelo também discutido por Hapke e que é deduzido a partir da **função de distribuição de refletância bidirecional** (BRDF) e/ou a **função fator de refletância** (REFF), podendo ser definido por:

$$r_c = \frac{\pi r(i, e, g)}{\mu_0} \quad (5.27)$$



De onde se obtém

$$r_c = \frac{\omega}{4} \frac{1}{\mu + \mu_0} \{ [1 + B(0)] [p(g) + H(\mu)H(\mu_0) - 1] \} \quad (5.28)$$

No passo da conversão de espectro de refletância para espectro de albedo, devem-se tomar certas decisões a respeito dos valores da função de fase e o efeito de oposição. O caso mais simples é supor que o efeito de oposição é nulo e que a função de fase é unitária. Isto implica que não há condições de superfície que modifiquem o brilho e que o espalhamento é isotrópico.

Portanto:

$$r_c = \frac{B(0)}{1 + \frac{1}{h} \tan\left(\frac{1}{g}\right)} \quad (5.29)$$

Com  $h$  definido como:

$$h = -\frac{1}{2} N \langle \sigma Q_e \rangle \langle a_e \rangle \frac{\ln(1 - \phi)}{\phi} \quad (5.30)$$

Se não é suposta a isotropia, deve-se escolher uma função de fase que pode ser obtida por uma expansão de Legendre:

$$p(g) = 1 + b \cos(g) + c(1.5 \cos^2 g - 0.5) \quad (5.31)$$

No caso particular de Lucey são escolhidos os valores 1.5 e 0.25 para  $b$  e  $c$ , respectivamente, sem justificar a escolha.

Outro passo no trabalho consiste em aprimorar o valor da função de Chandrasekhar. Assim, a cada vez que são supostos valores das constantes geradas na expansão de Legendre para a função de fase, também são modificados os valores da função  $H(\mu)$ :

$$H(\mu) = \left\{ 1 - \left( 1 - \sqrt{1 - \gamma} \right) \mu \left[ r_0 + \left( 1 - \frac{r_0}{2} - r_0 \mu \right) \ln \left( \frac{1 + \mu}{\mu} \right) \right] \right\}^{-1} \quad (5.32)$$

Com  $r$ :

$$r_0 = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \omega}} - 1 \quad (5.33)$$

Como o albedo pode ser relacionado com as eficiências:

$$\omega = \frac{Q_S}{Q_E} \quad (5.34)$$

A eficiência de espalhamento se define a través dos coeficientes de reflexão superficial de Fresnel e, como trata-se de partículas muito juntas pode ser considerado que  $Q_E = 1$  e  $\omega = Q_S$ :

$$Q_S = S_E + \frac{(1 - S_E)(1 - S_I) \left[ r_i + \exp -2(\alpha(\alpha + s))^{1/2} D/3 \right]}{1 - r_i S_I + (r_i - S_I) \exp -2(\alpha(\alpha + s))^{1/2} D/3} \quad (5.35)$$

Considerando  $S_E$  o coeficiente de reflexão externa para a luz incidente e  $S_i$  o coeficiente de reflexão interna para a luz espalhada.

$$S_E = \frac{(n - 1)^2}{(n + 1)^2} + 0.05 \quad (5.36)$$

$$S_I = 1.014 - \frac{4}{n(n - 1)^2} \quad (5.37)$$

$$r_i = \frac{1 - \left[ \frac{\alpha}{\alpha + s} \right]^{1/2}}{1 + \left[ \frac{\alpha}{\alpha + s} \right]^{1/2}} \quad (5.38)$$

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (5.39)$$

Podem ser obtidos os valores de  $k$ , onde  $\alpha$  o coeficiente de absorção interna,  $f$  o coeficiente de dispersão interna do cristal e  $D$  o tamanho dos grãos expressados em diâmetro de peneirado, e  $r_i$  é a refletância bi-hemisférica. Para salvar o fato de que há duas incógnitas e só um sistema é necessário supor o valor inicial de  $n$ .

Um caso diferente é a combinação de aplicação da serie de Kramer – Kronig na teoria de Hapke. A aproximação analítica combina técnicas em dois passos:

**O primeiro** consiste em aplicar a teoria descrita por Hapke para descrever a refletância na superfície de partículas. Isto foi aplicado em trabalhos de Hapke e Wells em 1981 e por Clark e Roush em 1984.

**A segunda** assumindo um  $n_0$  inicial que não varia, se calcula o  $k_0$  a partir do espectro de refletância transformado em espectro de albedo, aplicando Kramers-Kronig:

$$n(\lambda_0) = n(\lambda_1) + \frac{2(\lambda_1^2 - \lambda_0^2)}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\lambda^2 k(\lambda)}{(\lambda_0^2 - \lambda_1^2)(\lambda_1^2 - \lambda^2)} d \ln \lambda \quad (5.40)$$

Onde  $P$  indica que será avaliado o valor principal de Cauchy para a integral.

O valor assim obtido entra num ciclo de interação até que a diferença entre valores consecutivos de  $n$  é menor que  $10^{-6}$ .

## 5.4 Crítica aos trabalhos analisados

### 5.4.1 Lucey (1998)

Para os cálculos das constantes óticas, com o modelo de Hapke, Lucey segue a seqüência de equações de 5.28 a 5.39 e logo supõe valores de  $n$  compreendidos entre 1.5 e 2.0 usando uma curva de calibração do índice de refração real, obtida a partir de cristais padronizados dos minerais estudados.

Por exemplo, para o orto-piroxênio e a olivina:

$$n_{opx} = 1.768 - \{0.118[Mg]\} \quad (5.41)$$

$$n_{ol} = 1.827 - \{0.192[Mg]\} \quad (5.42)$$

Onde  $[Mg]$  é a fração molar do magnésio em função dos metais existentes no mineral analisado.

Inicialmente Lucey tenta mostrar que as variações na refletância depende mais da estrutura química da substância que de outros fatores. Por exemplo, usando as medidas de refletância para distintos tipos de geometria de grão de uma mesma diopsidiana pode-se observar que a localização dos picos de absorção não mudam muito.

Logo após são feitos os gráficos dos valores de  $k$  em função do comprimento de onda. Observa-se que há poucas variações nos valores para os diferentes tamanhos de grãos.

A questão essencial no seu trabalho é mostrar que realmente através da medida da refletância, uma grandeza que depende do tamanho de grão, podem ser obtidos os valores das constantes óticas, que independem do tamanho de grão.

Como não há teoria que permita um cálculo quantitativo das constantes óticas de minerais, o autor usa o espectro de dois lotes de amostras de três minerais (olivina, clino-piroxênio e orto-piroxênio). Um lote que abrange 63 amostras de piroxênio feito por Cloutis (55 clino-piroxênios e 8 orto-piroxênios) e um outro lote de amostras de olivinas de diferentes concentrações de Ferro (Fo11 ate Fo95) de um trabalho de King e Ridley.

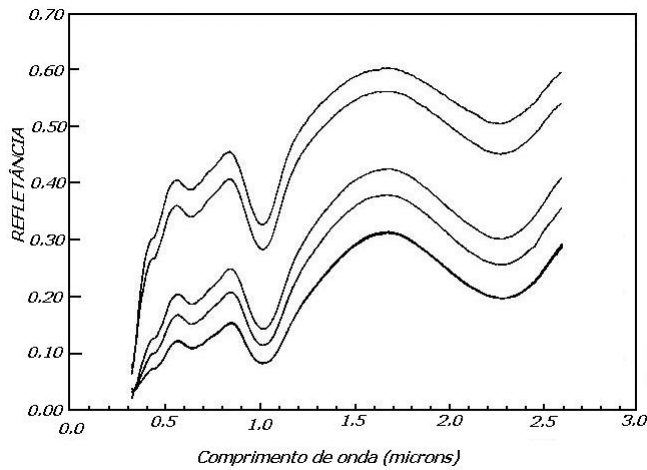


Figura 5.3: Espectro de refletância de cinco diferentes tamanhos de grãos de diopside do trabalho de Sunshine usados pelo Hapke (Lucey, 1998)

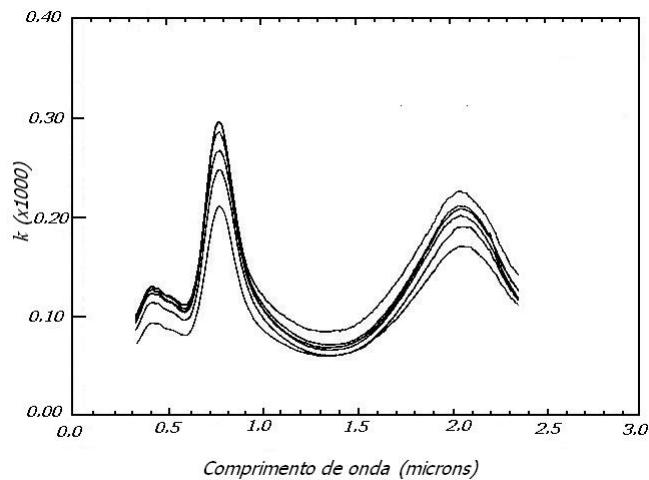


Figura 5.4: Espectro de  $k$  derivados dos dados do Sunshine para grãos de 12, 22, 44, 60, 94 e  $100\mu\text{m}$ (Lucey, 1998)

Para cada amostra se calcularam os valores de  $k$  usando as equações 5.28 a 5.41 relacionando os valores obtidos com a concentração de Ferro expressada em número de magnésio (eq. 5.40 e 5.41).

No caso das olivinas, parece que a grande dependência do espectro é com a composição e não com o tamanho de grão. O tamanho de grão só teria influência na

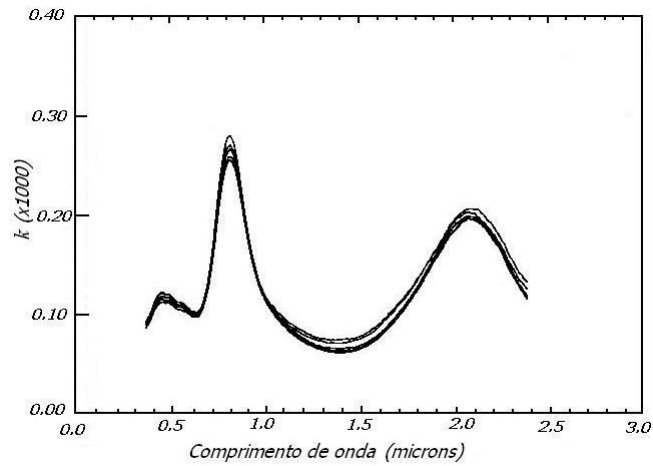


Figura 5.5: Espectro de  $k$  otimizado derivado dos dados de Sunshine para grãos de 13.2, 18.0, 46.2, 63.0 e  $95\mu\text{m}$  (Lucey, 1998)

largura da banda e não na posição.

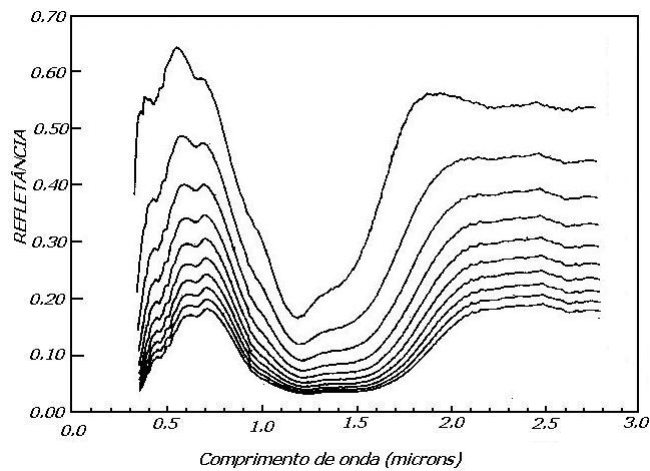


Figura 5.6: Espectro de refletância da Olivina para grãos de  $10\mu\text{m}$  com conteúdo de  $Mg$  incremental para acima. (Lucey, 1998)

Segundo o autor a constante imaginária derivada do espectro de refletância pode ser usada para calcular o espectro de cada mineral. Como é mostrado graficamente o tamanho de grão gera modificações na largura e o perfil do pico, as grandes diferenças

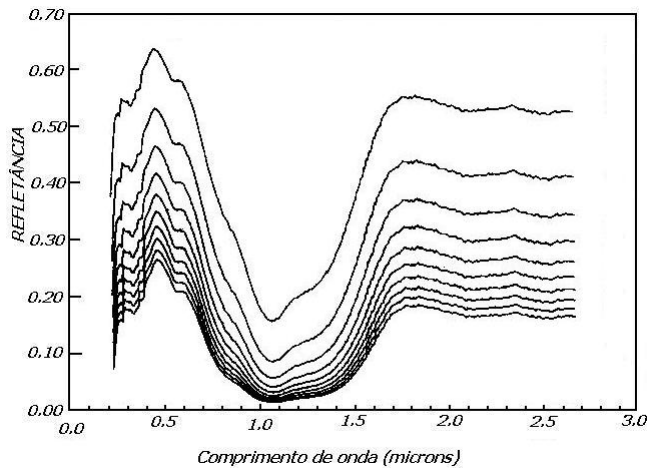


Figura 5.7: Espectro de refletância de Olivina com tamanho de grãos de 10 a 100 $\mu\text{m}$  incrementando para acima(Lucey, 1998)

vêm:

1. da estrutura cristalina como pode ser visto na comparação de orto-piroxênios e clino-piroxênios da mesma estequiometria e
2. da composição, tal como é mostrado pelas diferenças entre olivinas e piroxênios.

O autor reconhece que:

1. Devem ser ajustadas as condições para estreitar o valor do parâmetro  $f$ .
2. É necessário produzir certa quantidade de amostras de alta qualidade para verificar a precisão na determinação de  $k$ , possivelmente com raios X.
3. É preciso uma teoria ajustada que permita o cálculo das constantes óticas em função da estrutura e a composição química dos minerais.

No início da seqüência do desenvolvimento teórico, é usada uma função para calcular o albedo cujo valor depende de condições das partículas como o efeito de oposição  $B(g)$  e a função de fase  $p(g)$ .

Após disso, estas funções são usadas para calcular as constantes óticas  $k$  e  $n$  que, teoricamente, por definição, deveriam independer do tamanho do grão.

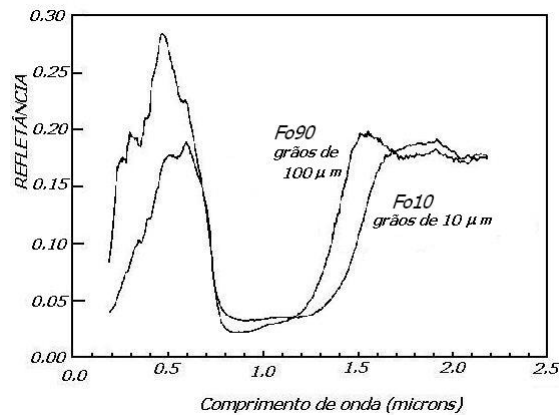


Figura 5.8: Modelo de espectro de refletância para grãos de baixo conteúdo de Ferro em Olivina e alto conteúdo de Ferro em Piroxênio. Observar que mesmo quando as bandas coincidem tanto a profundidade como a forma podem ser diferentes (Lucey, 1998)

Existe também um problema com a parametrização das funções, pois, na ausência de valores tabulados em laboratórios, são feitas estimativas de  $f$  (coeficiente de dispersão interna), o qual é usado para computar a dependência do albedo de dispersão simples e o próprio  $f$ , é fixado assim como o resto dos parâmetros.

O objetivo do trabalho de Lucey é analisar a influência da concentração de Ferro nos valores de  $k$  usando o espectro de emissão de diferentes membros da serie da olivina e, para isso, são fixados os valores de diversos parâmetros com base em dados de minerais onde o Ferro não está presente na mesma concentração.

Também se assume que o valor médio de  $n$  no visível é o mesmo que no IR mas, a teoria de Hapke que é a base, mostra que os valores das constantes óticas dependem da frequência da radiação.

Um grande problema parece ser a escolha dos valores dos parâmetros para cada variação de tamanho de partícula. Parece estar claro que a questão fundamental é achar um método mais sistemático de escolher esses parâmetros. Com medidas de refletância para grãos de diferente diâmetro da mesma substância, pode ser estimado um valor de  $f$ . O importante é achar procedimentos que assegurem que realmente estão se obtendo constantes imaginárias que independem do tamanho de grão.

Outra questão estaria no fato de usar uma função que depende diretamente de outras funções ligadas ao tamanho e forma das partículas para o cálculo das constantes óticas, as quais, por definição, independem disto.

No cálculo do albedo se parte do espectro de refletância, função que depende da forma e tamanho da partícula. Mesmo que os gráficos mostrem a independência, isto não parece totalmente correto.

### 5.4.2 Roush (2003)

Roush impõe certas condições para poder ajustar a teoria de Hapke e validar assim o seu trabalho:

1. O coeficiente de refletância relativa de Fresnell ( $\beta$ ) deve ter um valor unitário, o que indica que os cristais devem ser euhedrais (Perfeitamente rodeado por fases planas, bem definidas e lisas, e o desenvolvimento durante a cristalização não foi restringido pelos cristais vizinhos).
2. Assume-se o valor de 0.05 para o parâmetro de sombra de Hapke (o  $h$  da função que descreve o efeito de oposição). Este valor surge da caracterização microscópica da amostra.
3. Devem ser presumidos ou estimados os valores iniciais de  $n$  e  $k$  seguindo indicações bibliográficas.
4. Devem-se estabelecer as condições para que o valor dos coeficientes do polinômio de Legendre da função de fase sejam nulos, o que indica que o meio é isotrópico e que  $p(g) = 1$ .

Em seu trabalho, Roush compara seus valores com outros obtidos por Gillespe (1997), quem calculou os valores de  $\alpha$  pelo método de Kubelka-Munk e logo determinou os valores de  $k_0$  a partir dos dados do coeficiente de absorção  $\alpha$  por méio de:

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (5.43)$$

Pode-se verificar tal como são mostrados na figura 5.9, que a forma dos gráficos é semelhante, mas há uma variação dos valores do coeficiente de absorção.

Essa diferenças podem se dever às variações da resolução espectral, do método e do instrumental usado por Gillespe e seus colaboradores. Também pode haver variações devidas a diferenças intrínsecas da amostra como a hidratação, a presença de cátions sobre a posição das bandas e dos máximos ou a problemas da calibração do instrumental.

O modelo usado permite estimar valores das constantes óticas, isto possibilita avaliar os espectros de refletância dos objetos opacos do Sistema Solar. Além disso,



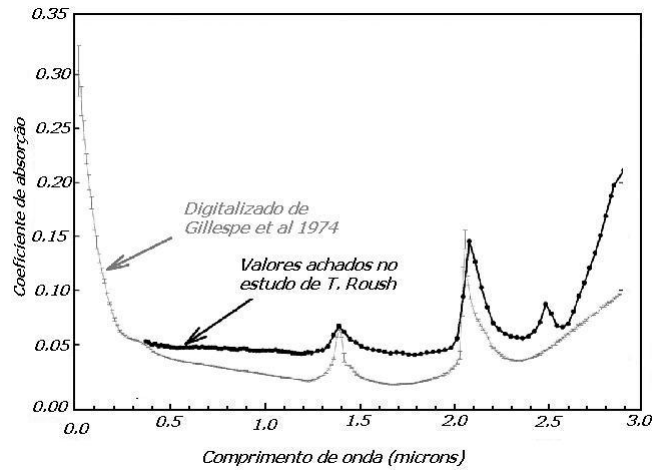


Figura 5.9: Comparação dos valores do coeficiente de absorção para Gillespe (1997) e para Roush (2003). As diferenças podem se dever às variações instrumentais

a determinação da mineralogia dos meteoritos permitiria realizar especulações mais fortes sobre a composição mineral dos objetos do Sistema Solar inclusive o exterior.

A modelação da mineralogia do Sistema Solar exterior permitiria realizar especulações sobre a matéria primitiva do Sistema Solar, pois os objetos formados para uma distância heliocêntrica maior a 40 AU (como o caso dos TNO's) foram objetos que escaparam a acreção dos planetas gigantes, a determinação da mineralogia permitiria achar uma ferramenta para modelar o estágio primitivo e a transição do meio interestelar para a mineralogia dos grãos e planetas interiores.

A diferença dos modelos de Lucey e Shkuratov-Starukina, o modelo de Roush não supõe invariante o valor de  $n$ . Porém ele usa um valor inicial de bibliografia que logo é variado pelas sucessivas iterações, obtendo assim, na realidade, uma serie de valores de  $n$  e  $k$  tais que podem ser agrupados para obter uma função  $n(\lambda)$  e assim obter os valores das constantes óticas em função do comprimento de onda.

# Capítulo 6

## O trabalho realizado

A análise dos trabalhos de Lucey, Shkuratov e Roush, mostrava que as propriedades óticas de series minerais eram muito complexas e, portanto, decidiu-se analisar um mineral simples e que permitisse medidas de transmitância no caso de ser necessário. Por esse motivo escolheu-se o quartzo, da região do visível ao infravermelho térmico.

### 6.1 O espectro do Quartzo

A aparência característica do espectro térmico de um mineral no infravermelho é governada pelas vibrações moleculares que acontecem dentro do cristal e que ocorrem para compensar a variação da posição de equilíbrio dos dipolos. Em geral as vibrações que acontecem no MIR são usadas para identificar de uma forma bastante eficiente a composição mineral do meio. (Kahle e Goetz, 1983; Crisp et al, 1990; Christensen e Harrison 1993)

A análise do espectro pode ser simples quando considerado grãos suficientemente grandes (a partir de  $125\mu m$ ) porque o comprimento de onda da energia radiante é menor que o diâmetro da partícula e assim a superfície pode ser considerada plana.

O efeito do tamanho da partícula já foi analisado. O importante a destacar é que  $n$  e  $k$  são parâmetros essenciais para o modelo de transferência radiativa. Estes valores poderiam ser derivados do espectro de lâminas polidas onde poderia ser desprezado o espalhamento e só considerar as leis de reflexão de Fresnel. Assim como estas são propriedades intrínsecas do material não são afetadas pelo tamanho do grão.

### 6.1.1 Estrutura mineral e vibrações cristalinas do quartzo

Se uma fonte é considerada um corpo negro, o fluxo de energia radiativa para cada frequência está descrito pela equação de Planck:

$$S(\nu) = \frac{2\pi h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (6.1)$$

Quando a energia se propaga num meio denso não ideal, como um mineral, a emissão de energia dificilmente será descrita pela equação 6.1. Pois, a estrutura molecular do mineral vai interagir com os campos componentes da onda que são alterados.

Na simplificação mais elementar, os minerais podem ser modelados como seqüências de ânions e cátions sustentados numa rede cristalina. No caso do quartzo ( $SiO_2$ ), os átomos de silício e oxigênio estão arranjados numa estrutura molecular ordenada como tetraedros. Dependendo da estrutura cada molécula tem uma frequência específica de excitação na qual vibra e no caso dos gases na qual pode sofrer rotação (nos cristais as rotações são proibidas).

O número de graus de liberdade para os movimentos é  $3N - 3$ , onde  $N$  é o número de átomos contidos na célula (unidade de rede). As vibrações moleculares ocorrem preferencialmente nas frequências relacionadas com o tipo de ligação, pois isso determina a força e distância entre os átomos da molécula.

As vibrações moleculares geram deslocamentos dos átomos na rede e, portanto, modifica a associação dos elétrons com suas posições de equilíbrio, gerando assim dipolos oscilantes. Desta forma, todas as moléculas de um meio dielétrico se tornam dipolos elétricos na presença de um campo elétrico. A força do momento dipolar está relacionada com o grau de separação da posição de equilíbrio.

A radiação térmica emitida por um mineral contém informações sobre as vibrações moleculares que aparecem como absorções características no espectro de emissão, indicando os deslocamentos dos momentos dipolares elétricos. Se não tem movimentos dos dipolos, como é o caso de algumas moléculas diatômicas, a ressonância no IR não existe e não há, portanto, absorção característica.

Como cada mineral tem uma composição química e uma estrutura dada, as frequências e forças das vibrações moleculares e os deslocamentos dos elétrons são únicos.

Geralmente no estado sólido as vibrações moleculares incluem um movimento de flexão “*in and out*” do plano assim como estiramento simétrico e anti-simétrico das ligações. No caso do quartzo os estiramentos simétricos da ligação Si-O são a característica dominante do espectro de absorção.

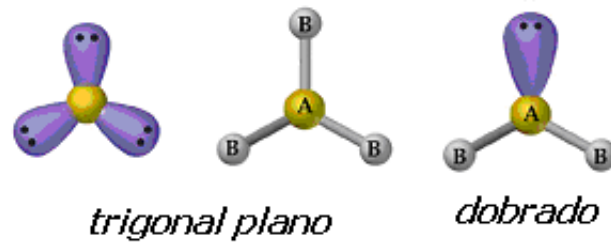


Figura 6.1: Modelo da estrutura unitária do óxido de silício  $SiO_2$

O quartzo é um mineral hexagonal uniaxial, cujo eixo corresponde ao eixo cristalográfico  $c$ . Perpendicular ao eixo  $c$  há três eixos radiais chamados de  $a$  com ângulos de interseção de  $120^\circ$  que determinam a simetria trigonal do quartzo. Quando uma onda eletromagnética se propaga em qualquer direção não paralela a  $c$ , ela pode ser dividida em dois raios polarizados, **O** (ordinário) e **E** (extra-ordinário) que atravessam o mineral com diferentes velocidades.

O espectro ordinário e extraordinário contém características espectrais diferentes. Essa diferença são resultantes das vibrações nos diferentes planos e, portanto, a direção de propagação de cada raio diz respeito com a orientação do cristal poderá ou não excitar um modo específico de vibração.

Quando a direção e frequência do modo vibracional da molécula concordam com a frequência e direção de propagação da onda, a energia da onda é convertida em energia vibracional da molécula resultando numa variação da emissividade nessa frequência. Assim a través de medidas de emitância podem ser determinados os valores de  $n$  e  $k$ .

## 6.2 A obtenção de dados

### 6.2.1 As bases de dados

#### Os dados das constantes óticas no JPDOC

O JPDOC é uma base de dados que contém referências, arquivos de dados e links aos recursos da Internet relacionados com as medições e cálculos das constantes óticas no intervalo de comprimentos de onda desde os raios X até as ondas de rádio.

Os materiais considerados em geral são silicatos amorfos e cristalinos de diferentes tipos, gelos diversos, óxidos, sulfetos, carburetos e espécies de carbono (grafite e diamante) assim como outros materiais de interesse que estão presentes em atmosferas e meios interestelares.

A base tem aproximadamente 700 referências, entre documentos, livros e teses, onde foram obtidas as constantes óticas por diferentes métodos entre 1960 até 2000.

Como é impossível citar todas as constantes óticas, a base de dados dá particular importância para minerais como silicatos, gelos, quartzo, óxido de magnésio, de carbono e outras substâncias de importância em Astronomia.

A maioria dos dados foram originados na base de dados do Laboratório do Instituto de Astrofísica da Universidade de Friedrich Schiller (Jena) e dados provenientes da antiga União Soviética que foram colocados na base entre 1974 e 1990 até o surgimento da nova República Russa. Hoje esses dados são administrados pela Universidade de São Petersburgo sendo de livre acesso.

Os dados se apresentam em formato de tabela parcelados por comprimento de onda, constante dielétrica e/ou permissividade. O interessante é que também é indicado, às vezes, como foi obtido, a equipe usada e as condições da amostra. Os códigos de serviço permitem transferir dados de um formato a outro.

A página central contém os enlaces para as bases de dados que estão classificadas por materiais (silicatos, óxidos, etc.) e uma descrição dos temas relacionados (recursos, livros, referências). Cada grupo de materiais tem a própria base de dados, que inclui tabelas onde o material aparece em cada estado alotrópico (amorfo, tipo cristalino etc.), a grandeza medida (índice de refração, coeficiente de extinção etc.), a faixa de comprimentos de onda ou frequência e as referências bibliográficas. Às vezes, os arquivos de dados são referidos a um link HTML que subministra à tabela geral e, também, podem conter gráficos e outros dados.

Outra questão que deve ser considerada é que a base de dados está sendo continuamente incrementada com novas informações de trabalhos atuais, mas, isso pode ser um problema, pois há muitos dados incrementando as bases e nem todos eles foram submetidos a uma análise. Contudo, esses dados estão sempre bem identificados.

Material	Dado	Banda( $\mu\text{m}$ )	Autor
<b>Quartzo</b>	<i>n,k</i>	0.19-0.49	Voronkova (1965)
<b>Quartzo</b>	<i>n,k</i>	0.19-2.5	Voronkova (1965)
<i>SiO<sub>2</sub></i>	<i>n,k</i>	7.1-5.0	Popova (1972)
<i>SiO<sub>2</sub></i>	<i>n,k</i>	7.1-11.0	Zolotarev (1970)
<i>SiO<sub>2</sub></i>	<i>n,k</i>	6.5-500	Hanning/Mutschke (1997)
<b>Quartzo</b>	<i>n,k</i>	7.0-25.0	Steyer et al. (1974)
<b>Quartzo</b>	<i>n,k</i>	6.5-25.0	Wrinch/Christensen (1996)
<b>Quartzo</b>	<i>n,k</i>	7.0-13.0	Wald/Salsbury (1995)

Tabela 6.1: Autores dos dados seleccionados no JPDOC, os dados dos trabalhos são colocados no Apêndice e se acham disponíveis no site: <http://www.astro.spbu.ru/JPDOC/f-dbase.html>

Este programa é sustentado pela Volkswagen Foundation de Alemanha, o Programa de Universidades da Federação Russa e a International Association for the Promotion for Cooperation INTAS dos Estados Independentes da ex- União Soviética.

Da base de dados de JPDOC foram obtidos os dados das constantes óticas dos seguintes autores:

## RELAB (Reflectance Experiment Laboratory)

A RELAB é uma base de dados espectroscópicos adquiridos em laboratórios gerados em programas financiados pela NASA e que se acham a disposição sem custo. O Keck/NASA RELAB é apoiado pela NASA e equivale a um usuário de tempos e dados de laboratórios de espectroscopia. Também há dados de espectroscopia de refletância remota obtidos por programas de ESO.

O RELAB tem dois espectrômetros em operação: um para a faixa do UV, V e NIR bidirecional e outro para o NIR ate FIR. Isto permite obter uma alta precisão na resolução dos espectros de refletância de sensores remotos, ou seja, podem ser obtidos espectros de refletância de boa qualidade de asteróides e planetas. Uma das vantagens do programa é que está desenhado para medir amostras usando diferentes geometrias de incidência do feixe e, portanto, isso permite obter simulações das condições naturais de observação. Há um conselho consultivo de quatro membros que supervisiona o programa.

Modo	Banda( $\mu\text{m}$ )	Resolução(nm)	Fenda	Detector
<b>A</b>	0.3-0.85	< 1.7	1800	Fotomultiplicador
<b>B</b>	0.6-1.8	< 3.4	590	InSb
<b>C</b>	1.7-2.6	< 6.8	295	InSb
<b>D</b>	2.0-3.6	< 13	147	InSb

Tabela 6.2: características do Espectrofotômetro

### 6.2.2 Especificações dos instrumentos usados no RELAB.

Espectrômetro bidirecional UV-Vis-NIR que opera entre 0.32 e 2.55 $\mu\text{m}$ .



Figura 6.2: Espectrômetro bidirecional UV-V-NIR(Catálogo)

1. **Intervalo de amostragem:** 5 ou 10 nm, 1 nm mínimo
2. **Precisão:** O erro instrumental é menor que 0.25% em refletância
3. **Geometria:** Refletância bidirecional, Goniometria espectral. O feixe incidente e o refletido podem ser variados de 90° para 70°.
4. **Amostra:**
  - (a) Partículas ou solos (refletância)
  - (b) Chips de rochas
  - (c) Lâminas finas
    - i. Se requer aproximadamente 500 mg de amostra (não menor a 20 mg nem mais de 10 g)
    - ii. O tamanho da amostra não deve ser menor que 1.5 mm.

- iii. A superfície deve ser limpa e polida.
- 5. **Fonte de Luz:** Lâmpara halógena de Quartzo, Monocromador de Jarrel
- 6. **Ótica:** filtros classificadores, espelhos frontais, polarizadores e fendas.
- 7. **Tempo de exposição:**  $\sim 2$  horas por amostra
- 8. **Estândar:** Halon de superfície lambertiana com refletancia  $10.97$

### **Espectrômetro Thermo-Nexus 870 FT-IR**



Figura 6.3: Espectrômetro Thermo Nexus 870 FT-IR

1. **Intervalo de amostragem:** 16, 8, 4, 2, 1 e  $0.5\text{ cm}^{-1}$
2. **Precisão:** O erro instrumental é menor que 0.25% em refletância
3. **Geometria:** Refletância bi-cônica axial para titulação múltipla.
4. **Amostra**
  - (a) Partículas ou solos (refletância)
  - (b) Chips de rochas
  - (c) Lâminas de cristais simples
    - i. Se requer aproximadamente 500 mg de amostra (não menor a 20 mg nem mais de 1 g)
    - ii. O tamanho da amostra não deve ser menor que 1.5 mm.



Modo	Banda( $\mu\text{m}$ )	Fonte	Divisor/feixe	Detector
<b>A</b>	1.0-4.7	Quartzo	$Si/CaF_2$	TE cooled DTGS
<b>A*</b>	0.9-4.5	Quartzo	$Si/CaF_2$	LN2 cooled InSb
<b>B</b>	1.3-4.8	Quartzo	Ge/KBr	TE cooled DTGS
<b>C</b>	14.3-200	Quartzo	Subst.(s)	DTGS

Tabela 6.3: características do Thermo Nexus 870 FT-IR

iii. A superfície deve ser limpa e polida.

### 5. Softwarwe: OMNIC

Da base de dados do RELAB foram obtidos os espectros de refletância que se indicam no ap?ndice 1. Desses espectros foram selecionados aqueles realizados com o espectrômetro bidirecional UV-V-IR na banda compreendida entre  $0.350\mu\text{m}$  e  $1.750\mu\text{m}$ .

## 6.3 As funções usadas

Como justificar que a função usada é a refletância relativa e não o fator de refletância?

Como a maioria das medidas foi feita sobre partículas consideradas isoladas e de  $X \ll 1$ , parece razoável, em princípio, desprezar os aportes feitos pela rugosidade, mas, não é descartado, no futuro, retornar sobre o trabalho, incluindo novos cálculos com este fator.

As medidas obtidas do RELAB tinham sido feitas numa geometria onde o ângulo de incidência era  $30^\circ$ , o de emergência  $0^\circ$  e o ângulo de fase  $30^\circ$ . Isto indicava que os dados obtidos de refletância foram adquiridos numa disposição geométrica na qual poderia ser ignorado qualquer efeito de oposição. Como os efeitos da oposição são considerados, na bibliografia, até ângulos de  $10^\circ$ , é possível supor que para um ângulo de fase de  $30^\circ$  o valor da função  $B(g) = 0$ .

Assim o termo  $[1 + B(g)]$  é reduzido a um e pode ser desconsiderado da função de refletância relativa. Assim com as duas suposições anteriores se tem que a função de refletância escolhida é:

$$\Gamma(i, e, g) = \frac{\omega [p(g) + H(\mu_0)H(\mu) - 1]}{H(\mu_0, \omega = 1)H(\mu, \omega = 1)} \quad (6.2)$$

Onde as funções envolvidas já foram analisadas nos capítulos anteriores.

A função de fase escolhida foi a função de fase de Henyey-Greenstein por ser uma função empírica. Nela o objetivo é ajustar as condições para determinar um valor de  $p(g)$  que independa do comprimento de onda. Assim poderia se ajustar o valor do cosseno assimétrico ( $\xi$ ) que gera a simetria na função de fase.

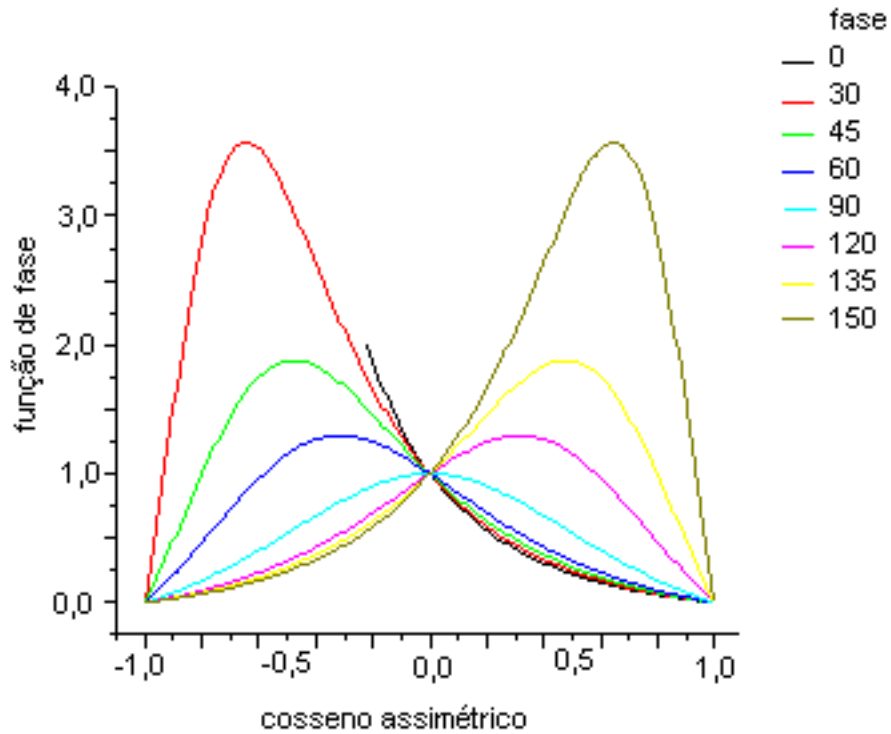


Figura 6.4: Valor de  $p(g)$  em função do valor do cosseno assimétrico

Na primeira fase de cálculos foram supostos como válidos os valores de  $n$  e  $k$  da base de dados do Voronkova no visível e tentou-se reconstruir a refletância. Também foi escolhido um grupo espectros do RELAB no qual eram usados grãos de tamanho entre 350 e 500  $\mu m$ .

Os espectros escolhidos tinham sido informados pelo mesmo operador, o que permitia supor que tinham sido adquiridos com o mesmo instrumental e assim se evitava incrementar o número de variáveis na análise da incerteza operacional.

Os arquivos escolhidos eram os de refletância de uma amostra de quartzo em partículas que provinham de JB-CMP e estavam numeradas entre 149 e 152. Todas

elas tinham sido adquiridas com a mesma disposição geométrica e supostamente nas mesmas condições. Portanto, estes valores foram tomados como confiáveis.

Tinha-se assim como determinar um valor de  $p(g)$ , simplesmente partindo dos valores de  $n$  e  $k$  do trabalho de Voronkova e supondo que os dados de refletância para o visível eram corretos. Com estes dados foi calculado o valor de  $p(g)$  para distintos comprimentos de onda mostrados no quadro colocado no apêndice.

Com os valores obtidos para a função de fase e levando em conta que o ângulo de fase estava fixado em  $30^\circ$ , estimaram-se valores mínimos do cosseno assimétrico ( $\xi$ ), sabendo que o valor máximo já estava determinado pela própria função. Assim se obteve que:  $-0.82 < \xi < -0.65$ , aproximadamente.

No caso da análise da função para o cálculo do albedo a partir da equação 5.25 e as condições que levaram a essa equação, podemos ver que o valor de  $\theta$  está condicionado ao valor de  $s$ , o coeficiente de espalhamento superficial interno médio. Se for analisada a influência deste coeficiente na determinação do valor do albedo nas condições do visível, vemos que os valores para  $\alpha$  e  $k$  satisfazem as condições próprias da região de espalhamento volumétrico.

Assim, longe das bandas de absorção pode ser apreciada a pouca influência do valor de  $s$  no cálculo do valor do albedo. Contudo, já nas regiões onde existe a simples possibilidade de existência de banda, o valor do coeficiente não pode ser ignorado. O que pode acontecer na região de  $0.78$  a  $0.80 \mu\text{m}$  para o espectro do quartzo.

Como a função de Chandrasekhar, que geralmente se escreve  $H(\mu)$  na realidade é uma função  $H(\mu, \omega)$ , o valor de albedo determina o valor subsequente desta função, existindo então, uma dependência direta da função em relação a  $\omega$ .

Para a região onde pode ser negligenciado o valor de  $k$  para o cálculo do albedo, o valor de  $s$  tem pouca influência tanto no valor de albedo como no valor de  $H$ . Mesmo para valores pequenos de albedo, a influência de  $s$ , aumenta para valores de  $\alpha \langle D \rangle \geq 0.2$ .

As variações no valor de albedo causadas pelas variações no valor da refletância difusa interna que ocorre dentro da partícula são causadas pelas variações no valor de  $s$ . Assim estas variações são mais fortes quanto maior valor de albedo e maior para as regiões onde prevalece o espalhamento volumétrico, o que ocorre a partir de  $\alpha \langle D \rangle \geq 0.2$ , mesmo quando os valores de  $s$  não são muito grandes.

A determinação de  $s$  deveria ser feita a partir de medidas de refletâncias para diferentes tamanhos de grão, obtendo assim um valor do coeficiente de espalhamento interno médio, que é propriedade independente do tamanho da partícula.

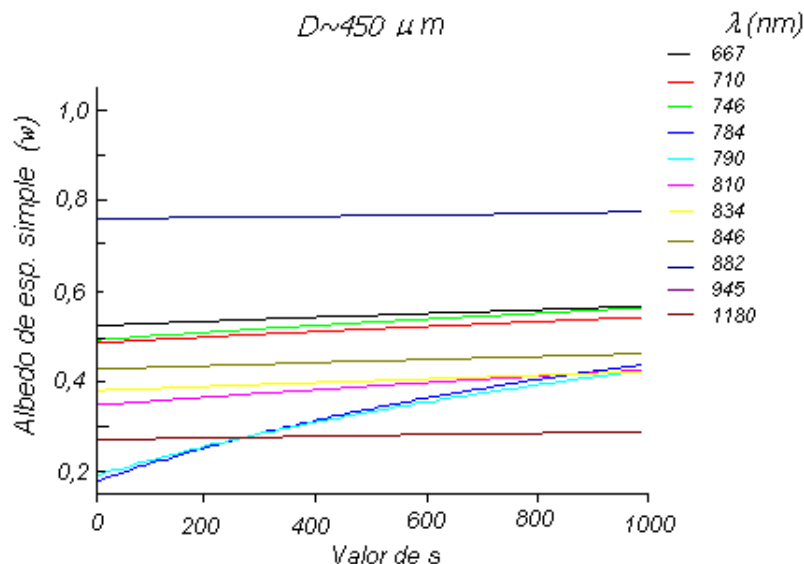


Figura 6.5: Cálculo do albedo de espalhamento simples em função do valor do coeficiente de espalhamento interno superficial. Próximo das o valor calculado varia muito com a variação de  $s$

### 6.3.1 Comparação de valores das constantes óticas encontradas na bibliografia.

Os dados usados são de dois tipos e provém de duas fontes distintas:

1. Dados de constantes óticas do JPDOC
2. Dados de refletância do RELAB

Dos arquivos sugeridos pelo JPDOC, usaram-se os dados dos trabalhos indicados na seção anterior. Para o cálculo das eficiências de espalhamento, foi usado inicialmente o próprio programa de cálculo existente na base de dados de JPDOC. A seguir, lançou-se mão de programas próprios com os quais era possível ajustar valores de parâmetros adicionais das constantes óticas, tais como o coeficiente de espalhamento interno da partícula.

Neste ponto do trabalho se percebe a grande diferença entre os valores das constantes óticas, como mostrado no apêndice 3, destacando-se que em alguns casos

tais diferenças são extremas. As maiores discrepâncias aparecem entre os valores de Henning e Popova.

É possível apreciar que, às vezes, parece em determinados comprimentos de onda Popova observa uma banda de absorção enquanto Henning não a detecta. O Mesmo ocorre com comparações quais quer entre dois autores.

A maior diferença notada aparece entre Henning e Popova para um comprimento de onda de  $11.13\mu m$  a diferença relativa entre os valores de  $n$  é de 91.5 e a de  $k$  é de 21580. Entretanto a menor diferença aparece para  $7.99\mu m$  onde a diferença entre os valores de  $n$  é de 11.5 e de 6.5 entre os valores de  $k$ .

Já entre Popova e Steyer as diferenças são um pouco menores, mas não inferiores a 17 entre os valores de  $n$  e de 110 entre os valores de  $k$ .

A diferença relativa entre os valores de Henning e Steyer, mesmo sendo sempre menor, também é notória, pois a menor diferença entre os valores de  $n$  é de 0.7 e 1.4 entre os valores de  $k$ . Mesmo assim existem variações de até 43 entre os valores de  $n$  e de 1875 entre os valores de  $k$ .

Pode-se seguir detalhando diferenças entre os valores obtidos por outros autores como Melissa Wenrich ou por Andrew Wald, mas, esses detalhes só aportariam dados sobre a incongruência entre valores e não soluções ao problema.

# Capítulo 7

## Conclusões e sugestões

### 7.1 Análise dos dados bibliográficos

A análise dos dados mostrou a variação entre os valores que podem ser encontrados para as constantes óticas na bibliografia. Esta diferença de valores não pode responder à diversidade metodológica pois, sendo as constantes óticas propriedades físicas, seus valores devem independender da metodologia e o instrumental no qual são determinados.

A variação corresponde à diversidade das hipóteses feitas para estimar os valores dos parâmetros incidentes nas funções usadas nos cálculos das mesmas. Uma variável a se ajustar deveria ser o coeficiente de espalhamento interno no interior da partícula s, o qual Hapke indica que poderia ser feito simplesmente analisando espectros de refletância de uma mesma substância usando amostras de diferentes tamanhos de partículas.

Dos arquivos sugeridos pelo JPDOC, usaram-se os dados dos trabalhos indicados no capítulo 6. Para o cálculo das eficiências de espalhamento, foi usado inicialmente o próprio programa de cálculo existente na base de dados de JPDOC e programas próprios com os quais era possível ajustar os valores de parâmetros adicionais nas constantes óticas, tais como o coeficiente de espalhamento interno da partícula.

Neste ponto do trabalho evidenciou-se a questão da grande discrepância entre os valores das constantes que pode ser apreciado no apêndice 3. Frente ao problema da diferença entre os dados não existe, em princípio, um critério específico para determinar quais dados são válidos e quais não.

Para o IR, as maiores diferenças apareceram entre os valores de Henning e Popova. È possível apreciar que às vezes parece que em determinados comprimentos de onda Popova observa uma banda de absorção enquanto Henning não a detecta. O mesmo

ocorre com quaisquer comparações entre dois autores.

A maior diferença é entre Henning e Popova que para um comprimento de onda de  $11.13\mu m$  a diferença relativa entre os valores de  $n$  é de 91.5 e a de  $k$  é de 21580. Entretanto a menor diferença aparece para  $7.99\mu m$  onde, sendo 11.5 para valores de  $n$  é de e de 6.5 para os valores de  $k$ .

Já entre Popova e Steyer as diferenças são um pouco menores, mas, não inferiores de 17 entre os valores de  $n$  e de 110 entre os valores de  $k$ . A diferença relativa entre os valores de Henning e Steyer, mesmo sendo sempre menores, também são notórias, pois a menor diferença entre os valores de  $n$  é de 0.7 e 1.4 entre os valores de  $k$ . Mesmo assim existem variações de até 43 entre os valores de  $n$  e de 1875 entre os valores de  $k$ .

Pode-se seguir detalhando diferenças entre os valores obtidos por outros autores como Melissa Wenrich ou por Andrew Wald mas, tal detalhamento só aportaria dados para a incongruência entre valores informados e não uma solução para a questão.

Na estimativa dos valores de parâmetros usados no ajuste das funções deve ser levado em conta que nem todas as hipóteses podem ser usadas em todo o espectro. Por exemplo, a hipótese de Lucey sobre a constância dos valores de  $n$ , não pode ser estendida para toda a banda analisada do espectro, pelo menos por duas razões importantes.

A primeira porque mesmo com pequenas variações de valores, a constância de  $n$  é só aparente e ela varia com o comprimento de onda.

A segunda porque perto das bandas de absorção a variação de  $n$  é muito grande e, portanto, a suposição contradiz o próprio fato observado no espectro.

## 7.2 Sugestões

A prioridade é obter uma base de dados coerentes de  $n$  e  $k$ , isso indica que devem se encontrar dados (ou produzir arquivos de comparação) onde as diferenças entre os valores das constantes óticas sejam consistentes em pelo menos 97.5. Esta base de dados deveria servir como referência para o ajuste do modelo.

O trabalho proposto para a segunda etapa consiste em determinar os valores de  $n$  e  $k$  para o visível, ajustando os parâmetros da função de fase. Desta forma poderiam se determinar os valores de  $n$  e  $k$  no IR.

O procedimento poderia ser resumido em:

1. Supor que os dados de espectros de refletância de RELAB são confiáveis.
2. Inverter a função para calcular albedo a partir do dado de refletância.

3. Supor inicialmente que o valor de  $\mathbf{k}$  no visível é desprezível frente à  $\mathbf{n}$  para os cálculos de  $S_e$  e  $S_i$ .
4. A partir destes valores, poderia se calcular a eficiência do espalhamento e supor-se que o valor de  $s$  fora das bandas de absorção não modifica os valores obtidos.
5. Calcular o valor de  $k$  e  $\alpha$ .
6. Estimar os valores de  $\xi$  sabendo que o valor de  $p(g)$  não deveria mudar para diferentes comprimentos de onda.
7. Aplicando a teoria de Hapke e o método somatório de Kramers-Kronig calcular os valores de  $n$ ,  $k$  e  $s$  para diferentes comprimentos de onda.

As medidas e a seqüência dependem do instrumental.

A eleição da função entre fator de refletância e refletância relativa depende da técnica de medida, do detector e da possibilidade de obter uma amostra padrão de quartzo.

No caso de contar com um padrão poderia se usar um protocolo de laboratório que venha permitir o uso da função de refletância relativa. No caso de não ser possível o uso de um padrão, deveria ser usada a função de fator de refletância, supondo que o suporte posterior da câmera de recepção é a superfície lambertiana de referência.

Se o sistema de detecção permite medir com diferentes disposições geométricas, serão usadas geometrias que impliquem ângulos de fase suficientemente grandes para supor que o efeito de oposição é suficientemente pequeno como para ser desprezado.

Finalmente, e não menos importante, é a comparação dos valores obtidos. Como as constantes óticas são propriedades características do sólido, o valor delas deve independer do método pelo qual foram medidas. Seria bom encontrar autores que tenham determinado os valores medindo o ângulo de Brewster ou por métodos polarimétricos.



## **Lista de imagens**

### **Capítulo 1**

Sem figuras

### **Capítulo 2**

Fig. 2.1: Variação dos valores das constantes dielétricas (Hapke, 1993).

Fig. 2.2: Medidas de absorção vibracional no espectro do quartzo (Hapke, 1993)

Fig. 2.3: Diagrama de bandas em rede sólida (Hapke, 1993)

Fig. 2.4: Bandas de absorção de silicato (Hapke, 1993)

Fig. 2.5: Espectro de enstatita (Hapke, 1993)

Fig. 2.6: Espectro de poeira de vidro (Hapke, 1993)

Fig. 2.7 Gráfico das constantes óticas da fosterita. (Hapke, 1993)

### **Capítulo 3**

Fig. 3.1 Diagrama de irradiância e radiância: Hapke, 1993, p. 64

Fig. 3.2 Diagrama angular: Hapke, 1993, p 65

Fig. 3.3 Modelos de superfície com partículas aglomeradas: composição

Fig. 3.4 Diagrama esquemático dos processos numa esfera de  $X_{ij}$ : Hapke, 1993, p 87

Fig. 3.5 Reflexão especular numa esfera grande: Hapke, 1993, p.88

Fig. 3.6 Reflexão e refração interna numa esfera grande: Hapke, 1993, p. 90

Fig. 3.7 a 3.11 Modificação da 1ra até 5ta ordem: Hapke, 1993, p. 204-206

Fig. 3.12 a 3.14: Refletância bidirecional em função do ângulo de incidência. Hapke, 1993, p. 231 a 232

Fig. 3.15 Brilho relativo em função da latitude: Hapke, 1993, p. 233.

Fig. 3.16. Comparação entre as medidas de refletâncias no visível calculado. Hapke, 1993, p. 234

Fig. 3.17. Comparação entre medidas e o valor da função de refletância bidirecional: Hapke, 1993, p. 234.

### **Capítulo 4**

Fig. 4.1: Albedo de espalhamento em função do tamanho das partículas. (Hapke, 1993)

### **Capítulo 5**

Fig. 5.1; Parte real e imaginária da constante dielétrica na vizinhança de uma banda de absorção de acordo com o modelo de Lorentz. (Hapke – 1993, pag, 28)

Fig. 5.2: Parte real e imaginária da constante ótica do mesmo material da figura 5.1, na vizinhança da uma absorção. (Hapke-1993, pag, 29)

Fig. 5.3: Espectro de refletância de cinco diferentes tamanhos de grãos de diopsidiana do trabalho de Sunshine e usado por Hapke. (Lucey 1998 JGR..103.1703L)

Fig. 5.4: Espectro de k derivado dos dados de Sunshine para grãos de 12, 22, 44, 60, 94 e 100  $\mu\text{m}$ . (Lucey, 1998)

Fig. 5.5: Espectro de k otimizado derivado dos dados de Sunshine para grãos de 13.2, 18.0, 46.2, 63.0 94.0 e 95.0  $\mu\text{m}$ . (Lucey, 1998)

Fig. 5.6: Espectro de refletância de Olivina para grãos de 10  $\mu\text{m}$  com conteúdo de Mg incremental (para acima) 5.5b. Espectro de refletância de Olivina com tamanho de grãos 10 a 100  $\mu\text{m}$  (incrementa para acima) (Lucey 1998 JGR..103.1703L)

Fig. 5.7: Modelo de espectro de refletância para grãos de baixo conteúdo de Ferro em olivina e alto conteúdo de ferro em piroxênio. Observar que mesmo quando as bandas coincidem tanto a profundidade como a forma podem ser diferentes. (Lucey 1998 JGR..103.1703L)

Fig. 5.8: Comparação dos valores do coeficiente de absorção para Guillespe e para Roush.

## **Capítulo 6**

Fig. 6.1: Modelo da estrutura de SiO<sub>2</sub> (Cotton, 1986)

Fig. 6.2: Espectrômetro UV-V-NIR (Catálogo Instru-Lab de RA FER)

Fig. 6.3: Espectrômetro Thermo Nexus 870 FT-IR (Catálogo comercial)

Fig. 6.4: Gráfico próprio.

Fig. 6.5: Gráfico próprio.

## **Capítulo 7**

Sem figuras



# Bibliografía

ALLAM, D.: "A simple specular reflectance attachment for infra-red spectrometers" 1966, *Journal Sci. Instrument*, p. 834-835.

BELL, J.F., DAVIS, D.R., HARTMANN, W.K., AND GAFFEY, M.J. "Asteroids: The Big Picture, Asteroids II, Binzel, R.P., Gehrels, T., and Matthews, M.S., Eds., Tucson: Univ. Arizona Press, 1989, pp. 921-945.

BESTEIRO, J.; LACASTA, A.: "Programa de cálculo de las constantes ópticas de materiales opacos en Fortran" 1992, *Acta Geológica Hispana* 5, 154-157.

BOWELL, E.; LUMME, K. "Colorimetry and magnitudes of Asteroids" 1979 in *Asterbook*. 132-169 in *Asteroids* Univ. Of Arizona Press. Arizona.

BROWN, P.G., HILDEBRAND, A.R., ZOLENSKY, M.E.: "The Fall, Recovery, Orbit, and Composition of the Tagish Lake Meteorite: A New Type of Carbonaceous Chondrite" 2000, *Science*, vol. 290. P. 320-325.

CARVANO, J.: ET AL: "Constraining the surface properties of Saturn's icy moons, using Cassini/CIRS emissivity spectra" 2007 – *Icarus*, 187, 574-583.

CARVANO, J.: "Compositional interpretation of the geometric albedo of asteroids. I-solar phase effects" 2008 - *AA* 486, 1031-1038.

CEDIEL, G.; ROJAS, H.: "Determinación de constantes ópticas y simulación teórica del espectro de transmitancia de películas delgadas depositadas por evaporación" 2002, *Revista Colombiana de Física* V32 N1 48-51

CHAPMAN, C.; MORRISON, B.: "Surface properties of asteroids: A synthesis of polarimetry, radiometry, and spectrophotometry", 1975, *Icarus* V25, p. 104-130

CHAPMAN, R.: "Asteroids as meteorites parents bodies: The astronomical perspectives" 1975, *Geochem Cosmochem acta*, 701-719.

CHAPMAN, R.: "S-Type asteroids, ordinary chondrites, space weathering: The evidence from Galileo's fly-bys of Gaspra and Ida", 1996, *Meteoritics and Planets Science* 31, 699-725.

CHIAPPETTA, P.: "A new Model for Scattering by Irregular Absorbing Particles" 1980, *Astronomy and Astrophysics* 83, 348 – 353.

CLARK, R.; LUCEY, P.: "Spectral properties of ice-particulate mixtures and implications for remote sensing. I - Intimate mixtures" 1984, *Journal of Geophysical Research*, V 89, p. 6341-6348

CLARK, R.; ROUSH T.: "Reflectance spectroscopy - Quantitative analysis techniques for remote sensing applications" 1984, *Journal of Geophysical Research*, V 89, p. 6329-6340

CLOUTIS, E.; GAFEY, M.: "Calibrations of Phase Abundance, Composition, and particle Size Distribution for Olivine-Orthopyroxene Mixtures from Reflectance Spectra", 1986, *Journal of Geophysical Research*, V. 91/B11, p. 11641-11653

CLOUTIS, E.; GAFEY, M. et al.: "Reflectance Spectra of Mafic Silicate-Opaque Assemblages with application to Meteorite Spectra's", 1990, *Icarus* 84, p. 315-333

CLOUTIS et al.: "Reflectance Spectra of Glass-Bearing Mafic Silicate Mixtures and Spectral Deconvolution Procedures" 1990, *Icarus* 86, p. 383-401

CLOUTIS et al.: "Metal Silicate Mixtures: Spectral Properties and Application to Asteroid Taxonomy", 1990, *Journal of Geophysical Research*, V95/B6, p. 8323-8338

CLOUTIS, E.; GAFEY, M.: "Spectral-Compositional Variations in the Constituent of Mafic and Ultramafic Assemblages and Remote Sensing Implication", 1991, *Earth, Moon and Planets* 53, p. 11-53

CLOUTIS, E.; GAFEY, M.: "Pyroxene Spectroscopy Revisited: Spectral-Compositional Correlations and Relationship to Geothermometry", 1991, *Journal of Geophysical Research*, V96/E5, p. 22809-22826

CLOUTIS, E.; GAFEY, M.: "Spectral Reflectance Properties of Carbon-Bearing Materials", 1994, *Icarus* 107, p. 276-287

COTTON, F.; WILKINSON, G.: "Química Inorgánica Avanzada" 1986, Limusa, México, 4 edición.

DENEVI, B., et al.: "Near-infrared optical constants of pyroxene as a function of iron and calcium content", 2007, *Journal of Geophysical Research*, V. 112/E5, p. 1-13

ESPOSITO, F.: "Infrared reflectance spectroscopy in Martian analogues", 2000, *Journal of Geophysical Research*, V105.E7 p. 17643-17654.

GIESE, R.: "Interpretation of the Optical Properties of Interplanetary Dust" 1977, *Journal of Geophysics* 42, 705 – 716

HAPKE, B.; WELL, E.: "Bidirectional reflectance spectroscopy. II-Experiments and observations", 1981, *Journal of Geophysical Research*, vol. 86, Apr. 10, p. 3055-3060.

HAPKE, B.: "Bidirectional reflectance spectroscopy. III-Correction for macroscopic roughness", 1984, *Icarus*, vol. 59, p. 41-59.

HAPKE, B.: “Bidirectional reflectance spectroscopy. 4. The extinction coefficient and the opposition effect”, 1986, *Icarus* 67, p. 264-280

HAPKE, B.: “Theory of reflectance and Emittance Spectroscopy” 1994, Cambridge Ed. UK.

HAPKE et. al: “Bidirectional Reflectances Of Regoliths With Grain Sizes Of The Order Of The Wavelength” 1994, *Lunar and planetary Science XXVIII*, p. 1214-1215

HAPKE et al.: “Bidirectional reflectance spectroscopy. 5. The Coherent Backscatter Opposition Effect and Anisotropic Scattering”, 2002, *Icarus* 157, 523 – 534.

HAPKE et al.: “Comparison of the bidirectional reflectance of a well-characterized powder with predictions of models based on the equation of radiative transfer.” 2007, *Lunar and Planetary Science XXXVIII*, 1321-1323

HAPKE et al.: “Bidirectional reflectance spectroscopy 6. Effects of porosity”, 2008, *Icarus* 195, p. 918-926

HAPKE et al.: “A quantitative test of the ability of models based on the equation of radiative transfer to predict the bidirectional reflectance of a well-characterized medium”, 2009, *Icarus* 199, p. 210 – 218.

HELFENSTEIN, P. Et al: “Galileo Photometry of Asteroid 243 Ida”. 1996 *Icarus*, Volume 120, Issue 1, pp. 48-65.

HENNING, T.; MUTSCHKE, H.: “Low-temperature infrared properties of cosmic dust analogues” 1997, *Astronomy and Astrophysics*, 327, 743 – 754

HENYEY, L.; GREENSTEIN, J.: “Diffuse radiation in the Galaxy ”, 1941, *Astrophys. J*, vol. 93, p. 70-83.

HENYEY, L.; GREENSTEIN, J.: “The Ratio of Interstellar Absorption to Reddening”, 1941, *Astrophysical Journal*, vol. 93, p.327-333.

HIROI, T.: “Recalculation of the Isotropic H Functions”, 1994, *Icarus* 109/ 2, p. 313-317.

HODGSON, J.: “Muestreo y descripción de suelos”, 1987, /Trad. Juan Puig de Fábregas. Ed. Reverté. Espanha.

KELKER, M.: “The scattering of light and other electromagnetic radiation ”. New York, Academic, 1969.

LUCEY, P.: “Model near-infrared optical constants of olivine and pyroxene as a function of iron content” 1998, *Journal of geophysical Research*, V 103, p. 1703-1713.

LUMME, K.; BOWELL, E.: “Radiative transfer in the surfaces of atmospheres bodies. I Theory”, 1981, *Astronomy Journal* 86, p 1694 - 1704. p. 313-317  
MSTRAPA, R. et al. “Optical constants of amorphous and crystalline H<sub>2</sub>O-ice in the near infrared from 1.1 to 2.6 m”, 2008, *Icarus* 197, p. 307 a 320

Mc CORD, T.; CHAPMAN, C.: “Asteroids: Reflectance and Color Characteristics”, 1975, *Astrophysical Journal*, 195, 553 – 562

MIE, G. “Beitrage zur optik truber medien, speziell kolloidaler metallosungen” (Contribuicoes à optica dos meios turbidos, soluções coloidais de metais) - tradução ão ingles de Barbara Crossland – Royal Aircraft Establishment – UK, 1908.

MOERSCH, J.; CHRISTENSEN, P.: “Thermal emission from particles surfaces: A comparison of scattering models with measured spectra”, 1995, *Journal of Geophysical Research*, V. 100/E4, p. 7465-7477

MUSTARD, J.; MILLIKEN, R.: “Effects of Hyperfine Particles on Reflectance Spectra from 0.3 to 25  $\mu\text{m}$ ”, (1997) *Icarus* 125/1, p. 145-163.

OLSEN, E.: “Métodos ópticos de análise”, 1995, Trad. Esp. Bosch-Galcerán, Ed Reverté, Barcelona-Espanha

PIETERS, C. M.: “Asteroid-Meteorite Connection: Regolith Effects Implied by Lunar Reflectance Spectra”, 1984, *Meteoritics* V19, p. 290.

PITMAN K. et al.: “Optical properties of silicon carbide for astrophysical application. New laboratory infrared reflectance spectra and optical constant” 2008, *Astronomy Astrophysics* 483, 661-672

ROUSH, T.: “Charon: More than Water Ice?”, 1994, *Icarus* 108, p. 243-254.

ROUSH, T.: “Estimated optical constant of the Tagish Lake meteorite” 2003, *Meteoritic Planetary Science* 38, N3, 419-426.

ROUSH, T.; ESPOSITO, F. et al.: “Estimated optical constants of gypsum in the region of weak absorption: Application of scattering theories and comparison to independent measurements”, 2007, *Journal of Geophysical Research*, V112/E10003, p. 1-17

SCHIFFER, R.: “The effect of surface roughness on the spectral reflectance of dielectric particles - Application to the zodiacal light”, 1985, *Astronomy and Astrophysics* (ISSN 0004-6361), vol. 148, no. 2, July 1985, p. 347-358.

SCHIFFER, R.; THIELHEIM, K.: “Light reflection from randomly oriented convex particles with rough surfaces”, 1982, *J. Appl Phys.* 53, p 2825-2830.

SHESTOPALOV, D.; SHUSTAREV, P. - “The material of interstellar dust and the surface of Asteroids: A comparison of the spectral properties on the 0.3-1,1  $\mu\text{m}$  range” Original Russian Text D.I. Shestopalov, P.N. Shustarev, 2008, published in *Astronomicheskii Vestnik*, 2008, Vol. 42, No. 5, pp. 387–396.

SHKURATOV, Y.; STARUKHINA, L.: “A Model of Spectral Albedo of Particulate Surfaces: Implications for Optical Properties of the Moon” 1999 *Icarus* 137, 235-246.

SHKURATOV, Y.; GRYNKO, Y.: “Estimates of the albedo of powderlike surfaces in the geometrical optics approximation”, 2003, *Optics and Spectroscopy*, V 95, Issue 6, p. 938-943

SHKURATOV, Y.; GRYNKO, Y.: Light scattering by media composed of semi-transparent particles of different shapes in ray optics approximation: consequences for spectroscopy, photometry and polarimetry of planetary regoliths”, 2005, *Icarus* 173, p. 16-28.

SIMMONS, E.: “Diffuse reflectance spectroscopy, a comparison of the theories”, 1975, *Applied Optics*, V14.6, p. 1380-1386

STEYER, T.; DAY, K.; HUFFMAN, D.: “Infrared Absorption by Small Amorphous Quartz Spheres”, 1974, *Applied Optics*, V 13/7, p. 1586 – 1590.

STRATTON, J.A.: “Electromagnetic Theory”, Ed. McGraw-Hill, New York, 1941.

VAN DE HULST, H. C.: “Light scattering by small particles” New York, Dover, 1981.

VARGAS, C.: “Interacciones fotónicas en películas semiconductoras y su caracterización”, 2005, Press Universidad de Colombia, Colombia

VEVERKA, J. et al: “How to compare the surface of Io to laboratory samples”, 1978, *Icarus* 34, p. 63-67.

VEVERKA, J. et al: “Scattering of light from particulate surfaces. 1 A laboratory assesment of multiple scattering effect”, 1978, *Icarus* 34, p. 406-414.

VEVERKA, J. et al: “Photometry and polarimetry of Mercury” In *Mercury* University of Arizona press, USA

VORONKOVA E.M., et al.: “Optical materials for infrared techniques”, 1965, JPDOC, Nauka, Moscow.

WALD, A.; SALISBURY, J.: “Thermal infrared directional emissivity of powdered quartz”, 1995, *Journal Geophysical Research*, 100.10B12, 24665-24675.

WENRICH, M.; CHRISTENSEN, P.: “Optical constants of mineral derived from emission spectroscopy: Application to quartz”, 1996, *Journal Geophysical Research*, 101.10B7, 15921-15931.

N/I/A “Laboratory manual: Fabrication and preparation of micro and nano particles” 2006, Clark Laboratories, USA.



# Livros Grátis

( <http://www.livrosgratis.com.br> )

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)  
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)  
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)  
[Baixar livros de Matemática](#)  
[Baixar livros de Medicina](#)  
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)  
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)  
[Baixar livros de Meteorologia](#)  
[Baixar Monografias e TCC](#)  
[Baixar livros Multidisciplinar](#)  
[Baixar livros de Música](#)  
[Baixar livros de Psicologia](#)  
[Baixar livros de Química](#)  
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)  
[Baixar livros de Serviço Social](#)  
[Baixar livros de Sociologia](#)  
[Baixar livros de Teologia](#)  
[Baixar livros de Trabalho](#)  
[Baixar livros de Turismo](#)