



**ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΥΛΙΚΩΝ
ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
«ΠΡΟΗΓΜΕΝΑ ΥΛΙΚΑ»**

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

Μαρία Μύρου

**ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΔΙΑΧΥΣΗΣ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ
ΚΑΤΑ ΤΗΝ ΑΝΟΠΤΗΣΗ ΥΛΙΚΩΝ ΜΕ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΗΣΗ LASER**

**Theoretical study of heat diffusion during material annealing under laser
illumination**

ΙΩΑΝΝΙΝΑ, 2020

Η παρούσα Μεταπτυχιακή Διατριβή εκπονήθηκε στο πλαίσιο των σπουδών για την απόκτηση του Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης στην εξειδίκευση:

που απονέμει το Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

Εγκρίθηκε τηναπό την εξεταστική επιτροπή:

ΟΝΟΜΑΤΕΠΩΝΥΜΟ

ΒΑΘΜΙΑ

- 1. Ελευθέριος Λοιδωρικής** , Καθηγητής του ΤΜΕΥ της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων, **Επιβλέπων**
- 2. Δημήτριος Παπαγεωργίου**, Αν. Καθηγητής του ΤΜΕΥ της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.
- 3. Χριστίνα Λέκκα**, Αν. Καθηγήτρια του ΤΜΕΥ της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων

ΥΠΕΥΘΥΝΗ ΔΗΛΩΣΗ

"Δηλώνω υπεύθυνα ότι η παρούσα διατριβή εκπονήθηκε κάτω από τους διεθνείς ηθικούς και ακαδημαϊκούς κανόνες δεοντολογίας και προστασίας της πνευματικής ιδιοκτησίας. Σύμφωνα με τους κανόνες αυτούς, δεν έχω προβεί σε ιδιοποίηση ξένου επιστημονικού έργου και έχω πλήρως αναφέρει τις πηγές που χρησιμοποίησα στην εργασία αυτή."

(Υπογραφή υποψηφίου)

Μπύρου Μαρία

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Σε ένα περιβάλλον που εμβρίθει δραστηριότητας σε σύγχρονους τομείς Έρευνας και Επιστήμης, όπως είναι το τμήμα Μηχανικών της Επιστήμης των Υλικών, του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων, θα ήταν άδικο για τον εαυτό μου να μην συμμετέχω με ότι δυνάμεις διαθέτω σε αυτή την προσπάθεια και να προσφέρω από τη μεριά μου ότι καλύτερο μπορώ. Πιο άδικο όμως θα ήταν να μην αξιοποιήσω την ανεκτίμητη συνεργασία και βοήθεια του καταξιωμένου Επιστήμονα και Ερευνητή που είχα την τύχη να έχω ως Επιβλέποντα σε αυτή την μελέτη, του κ. Λοιδωρίκη Λευτέρη, ο οποίος πέρα από οτιδήποτε άλλο έδειξε ανεξάντλητη υπομονή και κατανόηση σε οτιδήποτε είχα κάθε φορά αναλάβει να διεκπεραιώσω, ενώ ταυτόχρονα με ενθάρρυνε σε κάθε απογοήτευση από τυχόν δυσκολίες συναντούσα. Θα ήθελα να αναγνωρίσω και τη μεγάλη συνεισφορά, στην προσπάθειά μου για την ολοκλήρωση της παρούσας μελέτης, του Μεταδιδακτορικού Ερευνητή κου Μπελά Δημήτρη, χωρίς τη βοήθεια του οποίου θα είχα δυσκολευθεί σε μεγάλο βαθμό να «προσανατολιστώ» σε κατάλληλα ερευνητικά «μονοπάτια».

Στην παρούσα μελέτη γίνεται προσπάθεια να περιγραφεί για ορισμένες περιπτώσεις, με αναλυτικές μορφές, η κατανομή θερμοκρασίας σε δομές υλικών που χρησιμοποιούν λεπτά στρώματα διηλεκτρικού – μετάλλου με σκοπό την ανόπτησή τους, αφού επιδράσει ακτινοβολήση με φώς Laser. Η μελέτη γίνεται στα πλαίσια της Μεταπτυχιακής Εργασίας για την ολοκλήρωση των σπουδών επιπέδου Μάστερ στο αναφερθέν Πανεπιστήμιο και Τμήμα. Η φιλοδοξία που κατεύθυνε αυτή την προσπάθεια είναι να μπορεί ο αναγνώστης να χρησιμοποιήσει τα περιγραφόμενα στην μελέτη ως ένα οδηγό ή μια βάση σε ανάλογες ερευνητικές και τεχνολογικές δράσεις. Τα φαινόμενα της θέρμανσης τέτοιων δομών με λεπτές στρώσεις υλικών με Laser, για δημιουργία πρωτοποριακών νανοδιατάξεων, είναι ένα πεδίο που συνεχώς εμπλουτίζεται με νέες γνώσεις και τεχνικές και θα είναι ανάμεσα στα Τεχνολογικά πεδία που στα επόμενα χρόνια, με τα νέα υλικά που κατασκευάζονται και τις δυνατότητές που προσφέρουν θα παίζουν καθοριστικό ρόλο στην εξέλιξη των Ανθρώπινων Κοινωνιών. Εύχομαι έως τότε η μικρή μου κόρη που κλείνει τα πρώτα χρόνια της ζωής της να μπορεί κάποια στιγμή στο μέλλον να πει στους φίλους της «ξέρετε, κάποτε και η μητέρα μου είχε ασχοληθεί και με τις μαθηματικές εξισώσεις για μελέτες σε πρωτοπόρα νανοϋλικά». Ας υπάρχει πάντα ζωντανή η ελπίδα μας για ότι καλύτερο έρχεται στο μέλλον.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Τα τελευταία χρόνια έχουν γίνει σημαντικά άλματα στις Τεχνολογικές Επιστήμες. Ειδικά στην σημερινή εποχή, η Επιστήμη των Υλικών, με τον τομέα της Νανοτεχνολογίας, έχει μεγάλο μερίδιο στην πρωτοποριακή έρευνα και σε Τεχνολογικές εφαρμογές. Ήδη, τέτοιες Τεχνολογίες βρίσκουν σήμερα εφαρμογές που κυμαίνονται από υψηλής απόδοσης φωτοβολταϊκά στοιχεία μέχρι και διατάξεις για οπτική αποθήκευση και οπτική επεξεργασία πληροφοριών (optical storage memories, all optical processing) κ.α. Σε πολλές περιπτώσεις, τέτοιες πρωτοπόρες διατάξεις αναπτύσσονται στο Εργαστήριο με χρήση οπτικών πηγών υψηλής ενέργειας όπως τα Lasers. Έτσι, εφαρμογές των πηγών Laser για λιώσιμο «σκληρών» υλικών ή για κοπή ανθεκτικών μετάλλων αλλά για το «ελεγχόμενο λιώσιμο» (Laser annealing) σε διαστρώσεις υλικών μικρού πάχους σε ανάλογες διατάξεις, αρχίζουν πλέον να γίνονται ευρύτερα εφαρμόσιμες. Στην περίπτωση ειδικά για το «ελεγχόμενο λιώσιμο», ο έλεγχος της «εσωτερικής» σύνθεσης των πολλαπλών στρωμάτων γίνεται με έλεγχο της παρεχόμενης οπτικής ενέργειας, που στα υλικά αυτά γίνεται πλέον θερμική ενέργεια, και επιφέρει έτσι τις απαραίτητες «τροποποιήσεις» για τις επιθυμητές κατασκευές.

Στα πλαίσια της χρήσης των πηγών Laser για την ελεγχόμενη ανάπτυξη τέτοιων Νανοδιατάξεων, η παρούσα μελέτη εστιάζει στην ανάπτυξη μιας βασικής μεθοδολογίας στην ανάλυση της κατανομής της θερμοκρασίας, σε τέτοιες ή παρόμοιες διατάξεις, με σκοπό να παρέχει μια βάση προσέγγισης, ως πρότυπο, για περισσότερη και λεπτομερέστερη ανάλυση και περιγραφή της διάχυσης της παραγόμενης θερμότητας στο εσωτερικό των υλικών τέτοιων συναφών διατάξεων.

Έτσι, αρχικά, στο πρώτο κεφάλαιο (ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1.) της μελέτης αυτής, γίνεται αναφορά σε έννοιες και στοιχεία για τη Θερμότητα, τις εξισώσεις της διάχυσης και στα Μαθηματικά εργαλεία που χρησιμοποιούνται περαιτέρω στη μελέτη (μετασχηματισμός Laplace). Στο δεύτερο κεφάλαιο (ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2.) γίνεται αναφορά σε στοιχεία για τη λειτουργία του Laser και τους μηχανισμούς απορρόφησης της οπτικής ενέργειας από τα υλικά. Στη συνέχεια, περιγράφεται το μοντέλο της απόπτωσης των υλικών που χρησιμοποιείται ως πρότυπο – οδηγός στις αναλύσεις που ακολουθούν για τις κατανομές της Θερμοκρασίας. Έτσι, στο τρίτο κεφάλαιο (ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3.) ακολουθείται μια σταδιακή σειρά «σεναρίων» αυξανόμενης πολυπλοκότητας, για την ανάλυση του θερμικού προφίλ στα υλικά και με βάση τη γεωμετρία του μοντέλου των πολλαπλών στρωμάτων

που υιοθετήθηκε ως βάση περιγραφής. Ειδικά, στο τελευταίο «Σενάριο - Γ» γίνεται αναλυτικός υπολογισμός της κατανομής της θερμοκρασίας στην περίπτωση δύο στρωμάτων όπου το δεύτερο στρώμα θεωρείται ως υπόβαθρο (substrate) κυρίως για την απαγωγή της θερμότητας.

Στο επόμενο κεφάλαιο (ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4.) γίνονται οι αντίστοιχες γραφικές απεικονίσεις των κατανομών της Θερμοκρασίας, για τα «Σενάρια A1, A2, B1, B2», όπως υπολογίστηκαν αναλυτικά και σε αντιπαράθεση με τις κατανομές με βάση τις προσομοιώσεις με το Λογισμικό ComSol-MultiPhysics (v3.5).

Τέλος, στο τελευταίο κεφάλαιο (ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5.) γίνεται μια συνολική αξιολόγηση για το εύρος εφαρμογής των εξαχθέντων αναλυτικών μορφών για τις κατανομές της θερμοκρασίας, τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων με το Λογισμικό ComSol-MultiPhysics, και διατυπώνονται συγκεντρωτικά οι επιδράσεις των θερμικών παραμέτρων στις θερμοκρασιακές κατανομές, ως διαπιστώσεις τόσο από τις αναλυτικές μορφές που εξήχθησαν όσο και από τις προσομοιώσεις που διεκπεραιώθηκαν. Επίσης, στον ΕΠΙΛΟΓΟ, παρατίθενται ορισμένες κατευθύνσεις για την «επέκταση» του μοντέλου για αναλυτικές λύσεις και σε πάνω από 1D με άμεση διεύρυνση του πεδίου εφαρμογών τέτοιων σχετικών αναλυτικών μεθόδων.

Σε σχέση με όλα όσα αναφέρθηκαν, η παρούσα μελέτη δεν έχει σκοπό να αντικαταστήσει άλλες εξίσου σημαντικές θεωρητικές ή πειραματικές τεχνικές, αλλά ο σκοπός της είναι να δώσει ένα πρότυπο ανάλυσης ως βάση ή οδηγό για σχετικές τέτοιες μελέτες, αναδείχνοντας την αρμονική σχέση του φυσικών μεγεθών του «πραγματικού» κόσμου με τον «ιδεατό» κόσμο των Μαθηματικών εννοιών, ως ένα από τα θεμελιώδη στοιχεία που προάγουν την καινοτομία στα Επιστημονικά και Τεχνολογικά επιτεύγματα.

SUMMARY

During the last years, Science and Technology have made substantial advances, especially in the field of new material innovations such as Nanostructures and devices. Applications of the new technologies span from industrial photocell installations to novel optical computing storage and processing devices. Such promising material structures are usually fabricated in specialized Labs with excessive control of the fabrication conditions. One technique that is applied in that area, for controlling the development and fabrication of such devices, is by using Laser illumination to produce controllable temperature variations inside the body of the materials.

These applications cover areas for industrial metal melting needs or precise material cutting, by using high power Lasers and, among the most common processes, the one known as Laser annealing, has been proven to offer substantial control of the nanostructure formations and all these by mostly controlling the induced temperature variations inside the material interlayer structures.

In that framework, of these new technological advances in the area of Nanodevices, this study has been conducted on the direction to formulate a basic set of the necessary steps as a basic methodology to describe the temperature distributions in such nanostructure formations under the illumination of optical Laser power and in specific most common geometries of such formations.

Thus, in the first chapter of the present work (Chapter 1.), presented are the necessary for the reader concepts in thermal diffusion and transport, the temperature distribution governing differential equations and the basic mathematical tool, i.e. the Laplace transforms, that is being used for finding analytical solutions to the heat diffusion differential equation. In the second chapter (Chapter 2.) a description of Lasers as sources of light is attempted together with some basic description of light absorption mechanisms by the materials, such as dielectrics, metals, and semiconductors. The effect of Laser heating is treated in one dimensional geometry of multilayer structures the implement thin layers of dielectric and metal in an alternating sequence. Thus, in the next chapter (Chapter 3.) a series of «Scenarios» is being used, with increasing complexity, as a guide to describe heat diffusion and end up with analytic mathematical forms of solutions for the temperature distribution $T(x,t)$. In the next chapter (Chapter 4.) relative simulation results are obtained by using the ComSol-MultiPhysics Software (v3.5) and graphical depictions

are presented for the «Scenarios A1, A2, B1, B2», for both the analytical calculation results and the predictions of the Software simulations. At the next chapter, (Chapter 5.), an overall evaluation of the results is made and new directions for research actions on the subject are being proposed. Finally, at Conclusion the basic points of the study are summarized and the overall estimation of the importance of the results obtained is discussed. At a further step, new ideas are cited on how to extend the analytical mathematical methods of obtaining solutions to heat distributions for other various cases, which are more realistic approaches to the «real» experimental configurations.

Nevertheless, the main ambition of this study is not to substitute other important Scientific methods and techniques in these areas, but to form a basic guide for the reader to extend the cases of descriptions with analytical mathematical solutions by gaining more insight in the physical underlying processes in these areas. At the same time a natural bonding of the real world of physical quantities with the abstract world of Mathematical concepts is given rise as necessary fundamental block in building up any novel Scientific and Technological advances.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΡΟΛΟΓΟΣ	5
ΠΕΡΙΛΗΨΗ	6
SUMMARY	8
ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ	10
ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΣΧΗΜΑΤΩΝ.....	12
ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ.....	14
ΣΥΝΤΟΜΟΓΡΑΦΙΕΣ	15
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ (Θερμότητα – μαθηματική περιγραφή)	16
1.1 ΓΕΝΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ.....	16
1.2 Η ΘΕΡΜΟΤΗΤΑ	17
1.3 ΜΕΤΑΦΟΡΑ ΚΑΙ ΑΓΩΓΗ ΤΗΣ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ.....	18
1.3.1 Θερμική αγωγή:	19
1.3.2 Συναγωγή (Convection)	20
1.3.3 Η μεταφορά θερμότητας με ακτινοβολία.....	21
1.3.4 Η μέτρηση της Θερμοκρασίας	22
1.4 Η ΕΞΙΣΩΣΗ ΤΗΣ ΑΓΩΓΗΣ ΤΗΣ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ	22
1.5 ΒΑΣΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΤΟΥ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΥ LAPLACE	27
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2. ΘΕΡΜΑΝΣΗ ΥΛΙΚΩΝ ΜΕ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΗΣΗ ΜΕ LASER	34
2.1 ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗ ΦΩΤΟΣ - ΥΛΗΣ	34
2.1.1 Οπτική απορρόφηση στα υλικά	34
2.1.2 Το Μοντέλο που υιοθετήθηκε.....	41
2.1.3 Το Laser ως πηγή οπτικής ακτινοβολίας.....	43
2.2 ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΗΣΗ ΜΕ LASER	44
2.2.1 Μηχανισμός παραγωγής φωτός Laser.....	45
2.2.2 Βασικά είδη Laser ως πηγές ακτινοβολίας (refL1).....	46
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3. ΑΝΑΛΥΤΙΚΕΣ ΛΥΣΕΙΣ ΓΙΑ ΤΗ ΔΙΑΔΟΣΗ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ.....	49
3.1 ΑΝΟΠΤΗΣΗ ΥΛΙΚΩΝ ΚΑΙ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΗΣΗ ΜΕ LASER	49
3.2 ΑΝΑΛΥΤΙΚΕΣ ΛΥΣΕΙΣ ΚΑΤΑ ΜΗΚΟΣ (1D) ΤΗΣ ΑΝΟΠΤΗΣΗΣ ΠΟΛΛΑΠΛΩΝ ΣΤΡΩΜΑΤΩΝ ΕΝΑΛΛΑΞ ΥΛΙΚΩΝ (ΑΙΝ,Ag)	49
3.2.1 Με συνεχόμενη ακτινοβολία με Laser.....	49
3.2.2 ΣΕΝΑΡΙΟ – Α:.....	52
1η περίπτωση: Συνεχόμενη σταθερή οπτική μετάδοση ενέργειας στη θέση $x=0$, χωρίς οπτική διείσδυση για $x>0$	52

3.2.3 ΣΕΝΑΡΙΟ - Α.....	59
2 ^η Περίπτωση: Οπτική μετάδοση θερμότητας με απλή ριπή του Laser διάρκειας τ_0	59
3.2.4 ΣΕΝΑΡΙΟ - Β:.....	60
1 ^η Περίπτωση: Η προσπίπτουσα συνεχόμενη σταθερή ακτινοβολία απορροφάται σε βάθος x , με συντελεστή απορρόφησης δ	60
Β-2 ^η Περίπτωση: Με ένα παλμό Laser, διάρκειας τ_0	69
3.3 ΣΕΝΑΡΙΟ – Γ:	69
Θέρμανση, με Laser, δύο διαδοχικών στρωμάτων με απορρόφηση οπτικής ενέργειας κατά μήκος των στρωμάτων.	69
3.3.1 Περίπτωση 1 ^η :-2 ^η Κατανομή $T(x,t)$ για $x \ll L$	71
3.3.2 Περίπτωση 3:Κατανομή $T(x,t)$ για $X \geq L$	71
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4. ΓΡΑΦΙΚΕΣ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΕΙΣ ΑΝΑΛΥΤΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΩΝ ΚΑΙ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΜΕ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟ COMSOL-MULTIPHYSICS	82
4.1 ΤΟ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟ COMSOL-MULTIPHYSICS ®	82
4.2 ΓΡΑΦΙΚΕΣ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΕΙΣ ΤΩΝ «ΣΕΝΑΡΙΩΝ Α1, Α2, Β1, Β2»	84
4.2.1 Γενικές ρυθμίσεις στο Λογισμικό ComSol MultiPhysics.	84
4.3 Γραφικές απεικονίσεις για «Σενάριο Α1».....	87
4.4 Γραφικές απεικονίσεις για «Σενάριο Α2».....	88
4.5 Γραφικές απεικονίσεις για «Σενάριο Β1»	92
4.6 Γραφικές απεικονίσεις για «Σενάριο Β2»	95
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ	97
ΕΠΙΛΟΓΟΣ.....	99
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	101
Αναφορές σε Δημοσιεύσεις (References on Publications)	101
Αναφορές σε Βιβλία (Book references)	103
Αναφορές σε Ιστότοπους (Web references).....	104
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ	105

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΣΧΗΜΑΤΩΝ

Σχήμα 1.1 Τρόποι μεταφοράς θερμότητας.....	19
Σχήμα 1.3 Γράφημα για τη μοναδιαία βηματική συνάρτηση $u(t)$	31
Σχήμα 1.4 Γραφική απεικόνιση της συνάρτησης $\delta(t)$	32
Σχήμα 2.1 Σχηματικά η αύξηση της ενέργειας ηλεκτρονίου από απορρόφηση φωτονίου	36
Σχήμα 2.2 Ποιοτικό διάγραμμα ενεργειών ελευθέρων ηλεκτρονίων σε μέταλλα.	37
Σχήμα 2.3 Ενεργειακές «μεταβάσεις» φωτονίων.....	39
Σχήμα 2.4 Διάγραμμα ενεργειακών ζωνών σε διηλεκτρικά ή μονωτές (ποιοτικά).....	40
Σχήμα 2.5 Ενεργειακές μεταβάσεις σε ημιαγωγούς.....	41
Σχήμα 2.6 Πολλαπλά εναλλάξ στρώματα διηλεκτρικού – μέταλλου	42
Σχήμα 2.7 Θέρμανση του υλικού με ακτινοβολία φωτός Laser	44
Σχήμα 2.8 Τρόπος δημιουργίας της εκπομπής φωτός Laser	46
Σχήμα 2.9 Οι τέσσερις βασικές ενεργειακές στάθμες του Nd:YAG Laser.....	48

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΕΙΚΟΝΩΝ

Εικόνα 2.1 Στρώμα διηλεκτρικού ακολουθούμενο από στρώμα μετάλλου με NP.....	38
Εικόνα 3.1 Γεωμετρία 1D για ακτινοβολήση με Laser και διάχυση της Θερμότητας.....	50
Εικόνα 3.2 Δύο διαδοχικά στρώματα υλικών	69
Εικόνα 4.1 Το Λογισμικό ComSol-MultiPhysics - αρχική «φόρτωση» του Λογισμικού.....	83
Εικόνα 4.2 Το «περιβάλλον εργασίας» της προσομοίωσης που χρησιμοποιήθηκε.....	83
Εικόνα 4.3 Το 1Δ γεωμετρικό μοντέλο στο ComSol για την προσομοίωση της «ημιάπειρης» ράβδου για διάδοση θερμότητας.	85
Εικόνα 4.4a Παράμετροι του Λογισμικού ComSol για την επίλυση της Διαφορικής εξίσωσης της διάδοσης θερμότητας κατά μήκος x, και χρόνους t	85
Εικόνα 4.4b Το σχήμα υποδιαίρεσης διαστημάτων (mesh size) του Λογισμικού ComSol για την επίλυση της Διαφορικής εξίσωσης της διάδοσης θερμότητας κατά μήκος x, και χρόνους t.....	86
Εικόνα 4.5 Ρύθμιση στο Λογισμικό ComSol της συνοριακής συνθήκης του σημείου 2.....	86
Εικόνα 4.6 Κατανομή θερμοκρασίας T(t) στη θέση x=0 nm (επιφάνεια) για συνεχόμενη επιφανειακή οπτική ροή χωρίς εισχώρηση στο υλικό.....	87
Εικόνα 4.7 Κατανομή θερμοκρασίας T(t) σε «βάθος» x=0, 200, 400, 800, 1600 nm και 2 μm, για συνεχόμενη επιφανειακή οπτική ροή χωρίς εισχώρηση στο υλικό(KAIN=20W/mK, συντ.απορρόφησης = $3.31 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$).....	88
Εικόνα 4.8 Η οριζόμενη συνάρτηση step1 για τη χρήση στην προσομοίωση του «flat» σχήματος του οπτικού παλμού διάρκειας το.	89
Εικόνα 4.9 Κατανομή θερμοκρασίας T(t) στην επιφάνεια (x=0 nm) για οπτικό παλμό διάρκειας 25 nsec χωρίς εισχώρηση στο υλικό	90
Εικόνα 4.10 Κατανομή θερμοκρασίας T(t) σε θέσεις x=0,200,400,800,1600 nm και 2μm, για οπτικό παλμό διάρκειας 25 nsec χωρίς εισχώρηση στο υλικό	91
Εικόνα 4.11 Κατανομή θερμοκρασίας T(t) στην επιφάνεια (x=0 nm) για συνεχόμενη επιφανειακή οπτική ροή με εισχώρηση στο υλικό.....	93
Εικόνα 4.12 Κατανομή θερμοκρασίας T(t) στις θέσεις x=0, 200, 800, 1600 nm και 2 μm για συνεχόμενη οπτική ροή στην επιφάνεια με εισχώρηση στο υλικό	94
Εικόνα 4.13 Κατανομή θερμοκρασίας T(t) στην επιφάνεια (x=0 nm) για οπτικό παλμό διάρκειας 25 nsec με εισχώρηση στο υλικό	95
Εικόνα 4.14 Κατανομή θερμοκρασίας T(t) στις θέσεις x=0, 200, 800, 1600 nm, 2 μm για οπτικό παλμό διάρκειας 25 nsec με εισχώρηση στο υλικό.....	96

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

Πίνακας 2.1 Συντελεστής εξασθένησης ορισμένων υλικών (m^{-1})	35
Πίνακας 3.1: Τιμές των φυσικών θερμικών παραμέτρων	51

ΣΥΝΤΟΜΟΓΡΑΦΙΕΣ

Δ.Ε.	Διαφορική εξίσωση
Μ.Λ.	Μετασχηματισμός Laplace
Ε.Μ.	Ηλεκτρομαγνητικό πεδίο
Λ.Α. :	Laser Annealing
κ.α.	και άλλα
κ.ο.κ	και ούτω καθεξής.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ (Θερμότητα – μαθηματική περιγραφή)

1.1 ΓΕΝΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ

Οι διατάξεις των νανοϋλικών, ως σύγχρονες νανοδομές, παρουσιάζοντας καθοριστική διαμόρφωση των οπτικών κυρίως ιδιοτήτων τους, προσφέρουν τρόπους για άμεσο έλεγχο σε τέτοιες ιδιότητες όπως η ανάκλαση, η επιλεκτική απορρόφηση κ.α. με προσπίπτουσες οπτικές δέσμες Laser, καθιστώντας τέτοιες δομές ιδανικές σε τομείς όπως η Φωτονική αλλά και σε Φωτοβολταϊκές Τεχνολογίες (E.Loidrikis, A.C. Ferrari, 2009), (N.Lagos, M.M. Sigalas, E.Lidorikis, 2011). Έτσι, η ελεγχόμενη ανάπτυξη νανοδομών, έχοντας ως δομικά υλικά λεπτές στρώσεις μετάλλων και διηλεκτρικών, είναι πλέον ένας καθοριστικός και μελλοντικά υποσχόμενος τομέας σε σχεδίαση και υλοποίηση πρωτοποριακών πλασμονικών και φωτονικών διατάξεων (D.V. Bellas, et al., 2017), (N.J. Halas, 2010).

Οι πλασμονικές διατάξεις ως νανοδομές βασίζουν τη λειτουργία τους κυρίως στην δια-επιφανειακή πλασμονική συμπεριφορά των ηλεκτρονίων σε προσπίπτουσα οπτική δέσμη, τόσο στο ορατό αλλά και στο υπεριώδες οπτικό φάσμα. Τα «πλασμόνια» που δημιουργούνται στις διαχωριστικές επιφάνειες μετάλλου – διηλεκτρικού, παρουσιάζουν επιλεκτικότητα στην απορρόφηση της οπτικής ενέργειας με αποτέλεσμα να προσφέρουν εν δυνάμει τρόπους ελεγχόμενης ανάκλασης και απορρόφησης. (G.Walters, I.P.Parkin, 2009), (M.M. Miller, A.A. Lazarides, 2005).

Σε τέτοιες δομές, ο καθορισμός ως ένα εύρος των οπτικών τους ιδιοτήτων καθορίζεται από την συγκρότηση της δομής (υλικά, γεωμετρία) με αποτέλεσμα να είναι εξίσου σημαντικό να αναπτύσσονται Εργαστηριακά τέτοιες δομές με προσχεδιασμένη την επίδοσή τους εφόσον υπάρχει ευελιξία στον σχεδιασμό και ανάπτυξη της ίδιας της δομής. Κάτι τέτοιο γίνεται εφικτό τα τελευταία χρόνια, ως βασική και εξελισσόμενη Εργαστηριακή μέθοδος με ακτινοβολήση με Laser στην ανόπτηση των υλικών για τέτοιες δομές.(M.J. Beliatis, et al., 2013), (C.Bazioti, et al., 2014), (A.Siozios, et al., 2015), (P.Nikolaou, et al., 2015).

Κατά τις διαδικασίες αυτές, δημιουργείται η αρχική νανοδομή με τη δημιουργία νανοσωματιδίων (NP), από τα στρώματα του μετάλλου που δέχονται μια ριπή φωτός Laser συνήθως στο υπεριώδες. Η ριπή της δέσμης Laser προκαλεί μία θερμοκρασιακή κατανομή κατά μήκος των στρωμάτων των υλικών (διηλεκτρικό – μέταλλο) ώστε να γίνει εφικτή η δημιουργία αρχικών νανοσωματιδίων του μετάλλου. Ελέγχοντας την θερμοκρασιακή κατανομή μπορεί άμεσα να ελεγχθεί και η συγκρότηση των νανοσωματιδίων δηλαδή τελικά η σύνδεση της νανοδιάταξης. Είναι έτσι σημαντικός ο ρόλος της κατανομής της

θερμοκρασίας στο αρχικό αυτό στάδιο, και πιο σημαντικό ρόλο θα έχει η a - priori πρόβλεψη αυτής της κατανομής ώστε να λαμβάνεται σε «πραγματικό χρόνο» μέριμνα στη ρύθμιση άλλων εμπλεκόμενων παραμέτρων στην ελεγχόμενη ανάπτυξη της νανοδιάταξης.(S. Joshi, et al., 1998).

Στην παρούσα μελέτη γίνεται χρήση ενός εξιδανικευμένου μοντέλου περιγραφής της κατανομής της θερμοκρασίας σε μία διάσταση αλλά η μεθοδολογία που περιγράφεται και οδηγεί σε αναλυτικές μορφές θα μπορούσε να επεκταθεί εξίσου και σε 2Δ και 3Δ γεωμετρικές διευθετήσεις. Μία βασική παραδοχή στις περιγραφές και στη διατύπωση και λύση των εμπλεκόμενων μαθηματικών σχέσεων είναι ότι οι φυσικές θερμικές σταθερές όπως ο συντελεστής θερμικής διάχυσης, ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας όπως και ο συντελεστής της οπτικής απορρόφησης παραμένουν σταθεροί κατά το μήκος της διαστρωμάτωσης και σε πρώτη προσέγγιση δεν εξαρτώνται από τη θερμοκρασία.

1.2 Η ΘΕΡΜΟΤΗΤΑ

Η «Θερμότητα», ως μορφή ενέργειας, είναι ένας αναπόσπαστος παράγοντας στις αλληλεπιδράσεις των σωμάτων μεταξύ τους αλλά και με το φυσικό περιβάλλον. Προέρχεται από μετασχηματισμό άλλων μορφών ενέργειας όπως μηχανικής, ηλεκτρικής ή οπτικής. Σε πολλές περιπτώσεις η εμφάνιση θερμότητας είναι ένας επιθυμητός παράγοντας σε άλλες όμως όχι. Έτσι, η θέρμανση ενός χώρου με ηλεκτρική θερμάστρα είναι επιθυμητή αλλά όταν θερμαίνεται υπερβολικά μία ηλεκτρική συσκευή στο χώρο, μετά από αρκετές ώρες λειτουργίας, για παράδειγμα μια τηλεόραση, τότε η συσκευή παρουσιάζει δυσλειτουργία με αποτέλεσμα την εμφάνιση βλαβών προσωρινών ή μόνιμων. Η καλύτερη «διαχείριση» της Θερμότητας, ως μορφή ενέργειας, γίνεται όταν υπάρχει ο έλεγχος στην «παραγωγή» ή τη «ροή» της, μιάς και η Θερμότητα μεταβιβάζεται (ρέει) από «θερμά» σημεία σε «ψυχρά» σημεία στο χώρο. Το «θερμό» ή «ψυχρό» αναφέρεται στο μέγεθος της Θερμοκρασίας, ως ένας στατιστικός μέσος ενεργειακός όρος σε σχέση με την κινητική ενέργεια των μορίων ή των μικρότερων «σωματιδίων» που απαρτίζουν το σώμα. Η κινητική ενέργεια αναφέρεται σε κίνηση των μορίων γύρω από θέσεις ισορροπίας (ταλαντώσεις) ή σε περιστροφική ή και σε σχετική μεταφορική κίνηση. Για παράδειγμα, ένα στερεό κομμάτι από μέταλλο «θερμαίνεται» όταν με προσφερόμενη ροή θερμότητας, τα μόριά του ταλαντώνονται πιο γρήγορα, ενώ με συνεχόμενη προσφερόμενη θερμότητα, η άνοδος της «μέσης ενεργειακής κινητικότητας» των μορίων μπορεί να προκαλέσει απώλεια των θέσεων ισορροπίας των ατόμων του μετάλλου στο κρυσταλλικό πλέγμα ,

όπου συγκρατούνται, με αποτέλεσμα το στερεό κομμάτι να γίνεται σταδιακά υγρό, δηλαδή να «λιώνει» με τη ταυτόχρονα συνεχή άνοδο της «Θερμοκρασίας» του.

Ακόμη, σε πολλές διατάξεις και συσκευές, στην Επιστήμη και τεχνολογία, ο έλεγχος της Θερμότητας, που δημιουργούν, αποδέχονται ή μεταβιβάζουν οι συσκευές αυτές, είναι ένα σημαντικό στοιχείο στην κατασκευή ή λειτουργία των συσκευών, και των εξαρτημάτων τους, μιας και κάθε αντικείμενο φυσικό ή τεχνητό σε ένα χώρο, αλληλεπιδρά συνεχώς με το περιβάλλον μέσω διαφόρων φυσικών του μεγεθών, και κυρίως μέσω «ενεργειακού περιεχομένου» αλληλεπιδράσεις. (G.Kenanakis, et al., 2017).

Για να δοθεί μία πιο συγκεκριμένη περιγραφή της σημασίας και το ρόλου της «Θερμότητας», περιγράφονται παρακάτω τα βασικά στοιχεία για την «ροή» της ως μια αιτιατή σχέση με το φυσικό μέγεθος της Θερμοκρασίας. Επίσης, περιγράφονται ορισμένα στοιχεία από τα μαθηματικά εργαλεία που εμπλέκονται στην περιγραφή των φυσικών αυτών μεγεθών ώστε με παρεχόμενη πλέον τη δυνατότητα χρήσης αριθμητικών τιμών να μπορούν να χαρακτηριστούν ή προβλεφθούν οι συμπεριφορές των συσκευών και διατάξεων, τόσο σε Εργαστηριακό περιβάλλον αλλά και σε περιπτώσεις που η τυπική χρήση ή λειτουργία τους είναι στενά συνδεδεμένη με «Θερμικά» φυσικά μεγέθη και επηρεάζεται άμεσα από τις πιθανές μεταβολές των τιμών των μεγεθών αυτών.

1.3 ΜΕΤΑΦΟΡΑ ΚΑΙ ΑΓΩΓΗ ΤΗΣ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ

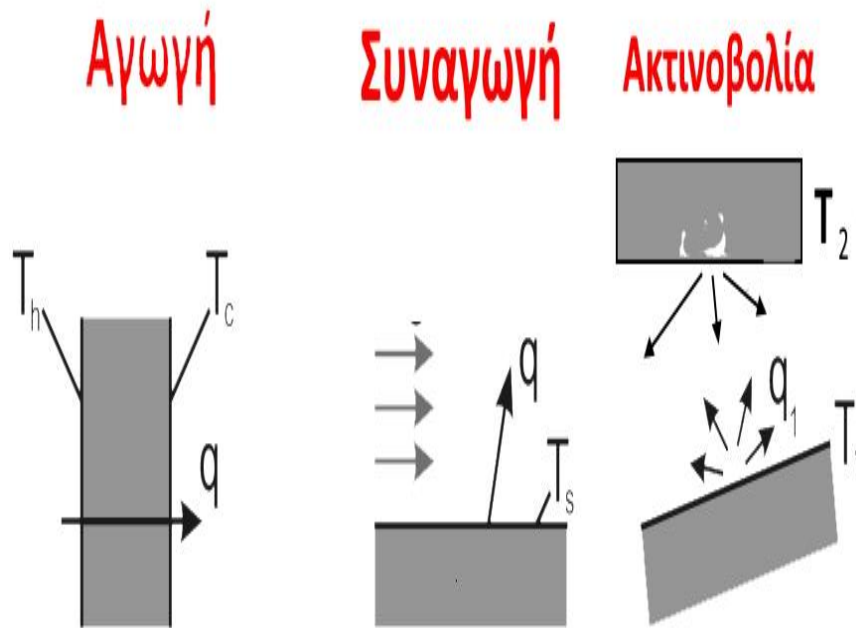
Η μετάδοση της θερμότητας μπορεί να περιγραφεί με βάση τρία είδη μετάδοσης ή μεταφοράς :

A) Με θερμική αγωγή (διάχυση) (diffusion)

B) Με συναγωγή (convection)

Γ) Με εκπομπή ακτινοβολίας μέλανος σώματος (black body radiation).

Σχηματικά:



Σχήμα 1.1 Τρόποι μεταφοράς θερμότητας

- A) Στη θερμική αγωγή η ενέργεια μεταφέρεται μόνο σαν θερμική ενέργεια (όχι μεταφορά μάζας κλπ)
- B) Στην συναγωγή η μεταφορά μάζας συνδέεται άμεσα με τη μεταφορά θερμότητας.
- Γ) Στην μεταφορά με ακτινοβολία, η εκπομπή ενέργειας γίνεται μέσω της εκπομπής ακτινοβολίας ενός σώματος λόγω της ίδιας θερμοκρασίας του.

1.3.1 Θερμική αγωγή:

Η θερμική αγωγή περιγράφεται από την παρακάτω Διαφορική Εξίσωση (Δ.Ε.):

$$C_p \rho \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = K t h \nabla^2 T(x,t) + \frac{dQ_{εξ}(x,t)}{dt} \quad (1.1)$$

όπου είναι:

T: η τοπική και στιγμιαία θερμοκρασία (μονάδες K ή °C)

α : ο συντελεστής διάχυσης της θερμότητας

$Q_{εξ}$: Η εξωτερική θερμικής ενέργεια ανά μονάδα όγκου

Ο συντελεστής διάχυσης θερμότητας α μπορεί να εκφραστεί σε σχέση με τον συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας K_{th} , την πυκνότητα ρ του σώματος και την ειδική θερμότητα σε σταθερή πίεση, την C_p , ως εξής:

$$\alpha = \frac{k_{th}}{C_p \rho} \quad (1.2)$$

Η επίλυση της τελευταίας Δ.Ε. μπορεί να δώσει την κατανομή της θερμοκρασίας στο χώρο σε σχέση με τον χρόνο, $T(\vec{r}, t)$. Σε πολλές περιπτώσεις η εύρεση αναλυτικής λύσης της Δ.Ε δεν είναι εφικτή, οπότε εφαρμόζονται αριθμητικές μέθοδοι όπως των «πεπερασμένων στοιχείων» (finite elements), προσομοιώσεις κ.α. (rep...)

1.3.2 Συναγωγή (Convection)

Σε αυτή την περίπτωση η κίνηση των μορίων στο υγρό σώμα ή στο αέριο καθορίζει το ρυθμό μεταφοράς της θερμότητας. Μπορούν να διακριθούν δύο βασικά είδη κινήσεων: i) Οι κινήσεις διάχυσης τύπου κίνησης Brown, και ii) Οι κινήσεις «μακροσκοπικής ροής». Οι κινήσεις διάχυσης μπορούν να περιγραφούν από τη σχέση:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D \nabla^2 c_i \quad (1.3)$$

όπου είναι:

c_i : Η συγκέντρωση των μορίων που διαχέονται

D: Ο συντελεστής διάχυσης των μορίων που διαχέονται

Η θερμότητα, στην περίπτωση της convection μεταφέρεται μέσω της αλλαγής στη συγκέντρωση των μορίων.

Για το δεύτερο είδος κίνησης, η «μακροσκοπική ροή» περιγράφει μία συλλογική κίνηση μεγάλου πλήθους μορίων. Η κίνησή τους για ορισμένες γεωμετρίες μπορεί να περιγραφεί πολύ δύσκολα με μία αναλυτική λύση. Έτσι, οι αριθμητικές μέθοδοι προτιμώνται όλο και περισσότερο για τους σχετικούς υπολογισμούς. Πιο συχνά, χρησιμοποιείται, για τη ροή θερμότητας με convection, το μοντέλο της ροής θερμότητας από επιφάνεια σε ένα ρευστό (υγρό ή αέριο), που περιγράφεται από την εξίσωση:

$$Q_{conv} = h_c(T_s - T_a) \quad (1.4)$$

όπου είναι:

h_c : ο συντελεστής «μεταφοράς» της θερμότητας

T_s : η θερμοκρασία της επιφάνειας

T_a : η θερμοκρασία του ρευστού σε μεγάλη απόσταση από την επιφάνεια.

1.3.3 Η μεταφορά θερμότητας με ακτινοβολία

Σύμφωνα με την αρχή του Planck, κάθε σώμα με μη μηδενική θερμοκρασία T εκπέμπει ακτινοβολία μέσω φωτονίων σε φάσμα μηκών κύματος $\Delta\lambda$, με μήκος κύματος μέγιστης εκπομπής ισχύος το λ_{max} τέτοιο ώστε να ισχύει:

$$\lambda_{max} * T = (\text{σταθερή τιμή}) \quad (\text{Νόμος του Wien}) \quad (1.5)$$

Στο εύρος μηκών κύματος $\Delta\lambda$, η θερμική ενέργεια που εκπέμπεται με μορφή ακτινοβολίας «μαύρου σώματος» (black body radiation) είναι:

$$Q_{bb} = \varepsilon\sigma T^4 \quad (1.6)$$

όπου είναι:

Q_{bb} : Η θερμική ενέργεια που εκπέμπεται με μορφή ακτινοβολίας

ε : ο συντελεστής θερμικής εκπομπής ακτινοβολίας

σ : Η σταθερά Stefan - Boltzmann , με $\sigma=5.67 \times 10^8 \text{ W/m}^2\text{K}^4$

Η εκπομπή θερμικής ενέργειας με ακτινοβολία δεν απαιτεί την ύπαρξη κάποιου υλικού ως μέσο μετάδοσης μιας και ως ηλεκτρομαγνητικό κύμα μπορεί να μεταδίδεται και στο κενό. Έτσι, για παράδειγμα, ανάμεσα σε δύο επιφάνειες με κενό ανάμεσά τους και με θερμοκρασίες T_1 και T_2 , όπως στο σχήμα παρακάτω, η ροή της θερμικής ενέργειας με ακτινοβολία θα είναι:

$$Q_{BB} = \varepsilon\sigma(T_{\text{υψηλή}}^4 - T_{\text{χαμηλή}}^4) \quad (1.7)$$

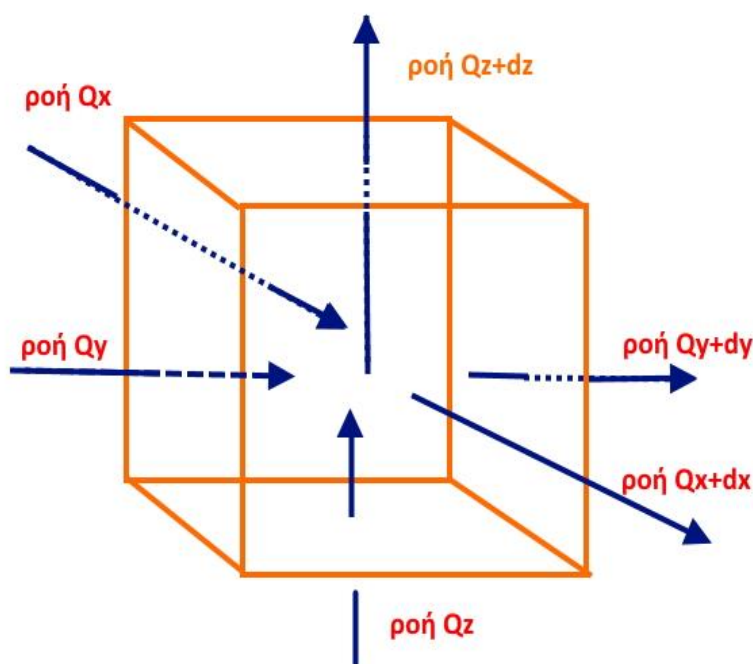
1.3.4 Η μέτρηση της Θερμοκρασίας

Για τη μέτρηση της θερμοκρασίας ενός σώματος, πέρα από τις «κλασικές» συσκευές όπως υδραργυρικό θερμόμετρο ή θερμική αντίσταση, έχουν υλοποιηθεί σύγχρονες μέθοδοι όπως η «θερμική μικροσκοπία σάρωσης» (thermal scanning microscopy), που επιτρέπουν μετρήσεις θερμοκρασίας να γίνονται σε πολύ μικρών διαστάσεων σώματα ή αλλιώς σε πολύ μικρής κλίμακας ανάλυση όπως 100nm σε επιφάνεια και 3 nm σε βάθος. Επίσης, χρησιμοποιούνται και άλλες τεχνικές όπως η «φασματική ή οπτική πυρομετρία», το «μοριακό θερμόμετρο», η «σύγχρονη φασματοσκοπία Raman με ανάλυση στο χρόνο» (time resolved coherent Raman spectroscopy), η «συνεστιακή μικροσκοπία και με λευκό φως προφίλομετρία» καθώς και άλλες.

1.4 Η ΕΞΙΣΩΣΗ ΤΗΣ ΑΓΩΓΗΣ ΤΗΣ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ

Θεωρώντας το στοιχειώδες τμήμα όγκου του σώματος (volume cell) όπως στο παρακάτω σχήμα, η διατήρηση της ενέργειας υπαγορεύει ότι: «Ο ρυθμός της ενέργεια που αποθηκεύεται στο στοιχειώδες τμήμα όγκου» = «ρυθμός ενέργειας που ρέει προς τα μέσα στο στοιχειώδες τμήμα όγκου» - (μείον) «ρυθμό ενέργειας που ρέει προς τα έξω του στοιχειώδους τμήματος» + (συν) «ρυθμό ενέργειας που παράγεται στη συγκεκριμένη θέση του στοιχειώδους τμήματος με άλλο μηχανισμό εκτός της αγωγής θερμότητας»

Σχηματικά:



Σχήμα 1.2 Η αγωγή της θερμότητας σε στοιχειώδη μονάδα όγκου

Έτσι, για τη στοιχειώδη μονάδα όγκου dV , έχουμε ότι:

$$\delta Q_{stored}/\delta t = \left(\frac{\delta Q_x}{\delta t} - \frac{\delta Q_{x+dx}}{\delta t} \right) + \left(\frac{\delta Q_y}{\delta t} - \frac{\delta Q_{y+dy}}{\delta t} \right) + \left(\frac{\delta Q_z}{\delta t} - \frac{\delta Q_{z+dz}}{\delta t} \right) + \delta Q_{th.gen}/\delta t \quad (1.8)$$

όπου οι ποσότητες $\delta Q / \delta t$ παριστάνουν ρυθμό ενέργειας δηλαδή Watts (J/sec).

Όμως, η ποσότητα δQ_x που εισέρχεται στο στοιχείο όγκου dV μέσω της επιφάνειας $\delta A = dydz$ σχετίζεται με τη θερμοκρασία με βάση το νόμο Fourier για την αγωγή θερμότητας ως εξής:

$$\frac{\delta Q_x}{\delta t} = -k (\delta A_x) \frac{\partial T}{\partial x} = -k \frac{\partial T}{\partial x} dydz \quad (1.9)$$

Όμοια ισχύει για τις ροές κατά τους άξονες y και z :

$$\frac{\delta Q_y}{\delta t} = -k \delta A_y \frac{\partial T}{\partial y} = -k \frac{\partial T}{\partial y} dx dz \quad (1.10)$$

και

$$\frac{\delta Q_z}{\delta t} = -k \delta A_z \frac{\partial T}{\partial z} = -k \frac{\partial T}{\partial z} dy dz \quad (1.11)$$

Από την άλλη μεριά, οι διαφορές:

$$\delta Q_x - \delta Q_{x+dx} \quad (1.12)$$

και

$$\delta Q_y - \delta Q_{y+dy} \quad (1.13)$$

και επίσης

$$\delta Q_z - \delta Q_{z+dz} \quad (1.14)$$

μπορούν να εκφραστούν με κατάλληλο ανάπτυγμα σε σειρά Taylor, ως εξής:

$$\delta Q_{x+dx} = \delta Q_x + \frac{\partial(\delta Q_x)}{\partial x} dx + \dots \quad (1.15)$$

και είναι:

$$\delta Q_{y+dy} = \delta Q_y + \frac{\partial(\delta Q_y)}{\partial y} dy + \dots \quad (1.16)$$

και επίσης:

$$\delta Q_{z+dz} = \delta Q_z + \frac{\partial(\delta Q_z)}{\partial z} dz + \dots \quad (1.17)$$

Έτσι, η αρχική σχέση για τις «ροές» θερμότητας γίνεται:

$$\frac{\delta Q_{stored}}{\delta t} = -\frac{\partial(\delta Q_x/\delta t)}{\partial x} dx - \frac{\partial(\delta Q_y/\delta t)}{\partial y} dy - \frac{\partial(\delta Q_z/\delta t)}{\partial z} dz + \frac{\delta Q_{th.gen}}{\delta t} \quad (1.18)$$

Η μεταβολή στην εσωτερική ενέργεια δQ_{stored} σε ένα στοιχείο όγκου δV που περικλείει μία μάζα $\delta m = \rho \delta V$ προκαλεί μεταβολή στη θερμοκρασία δT σύμφωνα με τη σχέση της θερμοδυναμικής:

$$\delta Q_{stored} = C_P \delta m \rho \delta V = C_P \rho \delta T \quad (1.19)$$

Οπότε, με $\delta V \rightarrow dV$ και $\delta Q_{stored} \rightarrow dQ_{stored}$ και $\delta T \rightarrow dT$ θα είναι:

$$C_P \rho \frac{\partial T}{\partial t} dV = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx dy dz + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) dx dy dz + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) dx dy dz + \frac{\delta Q_{th.gen}}{\delta t} \quad (1.20)$$

Η τελευταία εξίσωση μπορεί να γραφεί σε διαφορική μορφή με χρήση του τελεστή «ανάδελτα» (∇) και με το ότι $dV = dx dy dz$, ως εξής:

$$C_P \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(k \nabla T) + \frac{\delta Q_{th.gen}}{\delta t} \quad (1.21)$$

Στη γενική περίπτωση, ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας k είναι έμμεσα συνάρτηση της θέσης, δηλαδή $k=k(x,y,z)$, αφού είναι πρωτίστως συνάρτηση της θερμοκρασίας $T(x,y,z)$.

Θεωρώντας ότι ο συντελεστής k έχει εξάρτηση από τη θέση (x,y,z) μέσω της εξάρτησής του από τη θερμοκρασία σε αυτή τη θέση $T(x,y,z)$ μπορούμε να θεωρήσουμε, σε πρώτη προσέγγιση, ότι ο συντελεστής k έχει μία «πολυωνυμική» εξάρτηση από τη θερμοκρασία σε όρους δυνάμεων της μορφής T^n , δηλαδή ότι

$$k = \sum_{n=0}^N \kappa_n T^n \text{ με } k = \kappa_0 \text{ σε } T = 0 \quad (1.22)$$

Αντικαθιστώντας την εξάρτηση αυτή του συντελεστή k από τη θερμοκρασία στην εξίσωση της θερμότητας η νέα μορφή της εξίσωσης γίνεται ως εξής:

$$C_P \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla k * \nabla T + k \nabla^2 T + \frac{dQ_{th.gen(V)}}{dt} \quad (1.23)$$

όπου ο όρος $\frac{dQ_{th.gen(V)}}{dt}$ παριστάνει το ρυθμό «παραγωγής» θερμότητας εντός της στοιχειώδους μονάδας όγκου / στοιχειώδη μονάδα όγκου, με μονάδες (Joule sec⁻¹m⁻³) ή (Watt/m³) με μηχανισμό άλλον εκτός της αγωγής θερμότητας (πχ με οπτική απορρόφηση ενέργειας).

Λαμβάνοντας υπόψη την πολυωνυμική μορφή του k και τη σχέση

$$\nabla_x k = \frac{\partial k}{\partial T} \nabla_x T \quad (1.24)$$

η εξίσωση της αγωγής της θερμότητας γίνεται:

$$C_P \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial k}{\partial T} \nabla T * \nabla T + k \nabla^2 T + \frac{dQ_{th.gen(V)}}{dt} = (\sum_{n=1}^N n \kappa_n T^{n-1}) \nabla T \nabla T + (\sum_{n=0}^N \kappa_n T^n) \nabla(\nabla T) + \frac{dQ_{th.gen(V)}}{dt} \quad (1.25)$$

Αν θεωρηθεί ότι ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας k είναι ανεξάρτητος της θερμοκρασίας ($\frac{\partial k}{\partial T} = 0$) τότε η εξίσωση αγωγής της θερμότητας μετατρέπεται στη μορφή:

$$C_P \rho \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T + \frac{dQ_{th.gen(V)}}{dt} \quad (1.26)$$

ή ισοδύναμα,

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k}{C_P \rho} \nabla^2 T + \frac{1}{C_P \rho} \frac{dQ_{th.gen(V)}}{dt} \quad (1.27)$$

Υιοθετώντας τη μεταβλητή α να είναι

$$\alpha = \frac{k}{C_P \rho} \quad (1.28)$$

με το α να καλείται «συντελεστής θερμικής διάχυσης»,

η τελευταία εξίσωση για τη θερμότητα γράφεται ως:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T + \left(\frac{\alpha}{k}\right) \frac{dQ_{th.gen}(V)}{dt} \quad (1.29)$$

Για την επίλυση της Δ.Ε. της διάδοσης με αγωγή (διάχυση) της θερμότητας έχουν αναπτυχθεί διάφορες μέθοδοι είτε για αναλυτικές λύσεις είτε για αριθμητικές λύσεις μέσω υπολογιστικών αριθμητικών μεθόδων. Σε κάθε περίπτωση, γίνεται ένα σύνολο υποθέσεων – παραδοχών, ανάλογα με το συγκεκριμένο πρόβλημα που τίθεται, χωρίς όμως αυτές οι παραδοχές να είναι σε βάρος της γενικότητας των λύσεων που αποκτούνται. Στην περίπτωση των αναλυτικών λύσεων χρησιμοποιούνται συχνά μέθοδοι του Μαθηματικού Λογισμού ως «εργαλεία» για την απλούστευση των Δ.Ε. αλλά και την επίλυσή τους. Για παράδειγμα, ο μετασχηματισμός Fourier είναι ένα συχνό Μαθηματικό «εργαλείο» σε επίλυση Δ.Ε. της μορφής της (1.30) (R.N. Bracewell, 2000). Εφαρμόζεται με τη μέθοδο των διαχωριζόμενων μεταβλητών, δηλαδή υποθέτοντας ότι η λύση της (1.30) είναι μια συνάρτηση $T(x,t)$ που μπορεί να γραφεί ως

$$T(x, t) = G(t)f(x) \quad (1.30)$$

δηλαδή ως γινόμενο συναρτήσεων των ανεξάρτητων μεταβλητών x και t . Αυτό το στοιχείο ως βασική αρχική υπόθεση είτε μπορεί σε ορισμένες περιπτώσεις να περιορίζει τις λύσεις που αποκτούνται είτε όμως μπορεί να μην είναι και έγκυρη υπόθεση ευθύς εξαρχής μιας και η συνάρτηση – λύση $T(x,t)$ να μην μπορεί να γραφεί ως γινόμενο συναρτήσεων όπως στην (1.30).

Ένα άλλο Μαθηματικό «εργαλείο» που χρησιμοποιείται συχνά για την επίλυση Δ.Ε. είναι ο «Μετασχηματισμός Laplace». Ο Μετασχηματισμός Laplace (Μ.Λ.), έχει τη δυνατότητα να απλουστεύει, όταν εφαρμόζεται ως προς μία μεταβλητή, τις διαφορικές εξισώσεις δύο ή περισσότερων ανεξάρτητων μεταβλητών, έτσι ώστε η επίλυση της προκύπτουσας Δ.Ε. να γίνεται όχι τόσο δύσκολη υπόθεση. (K.F. Riley, et al., 2010). Επειδή ο Μ.Λ. δεν προϋποθέτει κάποια αρχική μορφή για τη λύση $T(x,t)$ στην (1.29), και επομένως επιτρέπει τη μέγιστη δυνατή γενικότητα σε λύσεις της (1.29), είναι το «εργαλείο» που χρησιμοποιείται και στην παρούσα μελέτη, σε μια προσέγγιση με τις ελάχιστες απαιτούμενες αρχικές παραδοχές και υποθέσεις, ώστε η λύση για την (1.29) να εξάγεται σε αναλυτική μαθηματική μορφή, παρέχοντας έτσι άμεσα όλη την εποπτεία στη συμπεριφορά της για θέση x και χρόνο t , όσο και τις εξαρτήσεις της λύσης από άλλες εμπλεκόμενες παραμέτρους. Παρατίθενται έτσι, ορισμένα βασικά στοιχεία του Μ.Λ. (D.Gustav, 1974)

που χρησιμοποιούνται σε διάφορα σημεία στην εύρεση αναλυτικών λύσεων της (1.30), στα κεφάλαια που ακολουθούν.

1.5 ΒΑΣΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΤΟΥ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΥ LAPLACE

Ορισμός του Μετασχηματισμού Laplace

Έστω $f(t)$ να είναι μία τμηματικά τοπικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση με $f: [0, +\infty) \rightarrow R$.

Ο Μετασχηματισμός Laplace (Μ.Λ.) της $f(t)$ ορίζεται η συνάρτηση $\mathcal{L}\{f\}(s)$ να είναι:

$F: A \subseteq C \rightarrow C$ το σύνολο των μιγαδικών αριθμών, με:

$$\mathcal{L}\{f\}(s) = F(s) \equiv \int_0^{+\infty} f(t)e^{-st} dt \quad \text{με } s = \sigma + j\omega \quad (1.31)$$

Προϋπόθεση ύπαρξης του Μετασχηματισμού Laplace μίας συνάρτησης:

Μία συνάρτηση $f: [0, +\infty) \rightarrow R$ λέγεται «εκθετικής τάξης» ή «εκθετικά φραγμένη» (για $t \rightarrow +\infty$) όταν υπάρχουν πραγματικές σταθερές $M > 0$ και $K > 0$ έτσι ώστε να είναι: $|f(t)| \leq Ke^{at} \quad \forall t > M$. Η σταθερά a αναφέρεται και ως η «εκθετική τάξη» της συνάρτησης $f(t)$.

Ιδιότητες του Μ.Λ.

Ο Μετασχηματισμός Laplace έχει ορισμένες βασικές ιδιότητες, όπως παρακάτω:

A) Γραμμικότητα: Ο μετασχηματισμός Laplace του αθροίσματος δύο συναρτήσεων f και g είναι ίσος με το άθροισμα των επιμέρους μετασχηματισμών. Δηλαδή, για δύο συναρτήσεις $f, g: [0, +\infty) \rightarrow R$ και με

$$F(s) = \mathcal{L}\{f\} \text{ για } s > a \text{ και } G(s) = \mathcal{L}\{g\} \text{ για } s > b, \text{ ισχύει ότι}$$

$$\mathcal{L}\{kf \pm mg\} = k\mathcal{L}\{f\} \pm m\mathcal{L}\{g\} \quad s > \max(a, b) \quad (1.32)$$

B) Μετασχηματισμός Laplace πρώτης παραγώγου:

Δίνεται από τη σχέση

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\left\{\frac{df}{dt}\right\} &= \int_0^{+\infty} \frac{df}{dt} e^{-st} dt = (\text{με κατά παράγοντες ολοκλήρωση}) = \\ &= sF(s) - f(0) \end{aligned} \quad (1.33)$$

Γ) Μετασχηματισμός Laplace παραγώγου n-τάξης.

Είναι:

$$\int_t \left\{ \frac{d^n f}{dt^n} \right\} = s^n F(s) - s^{n-1} f(0) - s^{n-2} f^{(1)}(0) - \dots - s f^{(n-2)}(0) - f^{(n-1)}(0) \quad (1.34)$$

όπου οι $f^{(k)}(0)$ είναι οι k-τάξης παράγωγοι της $f(t)$ στο σημείο $t=0$.

Δ) Μετασχηματισμός Laplace του ορισμένου ολοκληρώματος μιας συνάρτησης.

Ο μετασχηματισμός Laplace του ορισμένου ολοκληρώματος $I_t = \int_0^t f(z) dz$ είναι:

$$\int_t \{I_t\} = \frac{1}{s} F(s) \quad (1.35)$$

με $s > 0$ και $F(s)$ να είναι ο μετασχηματισμός Laplace της $f(t)$.

Ε) Μετασχηματισμός Laplace συνάρτησης με μετατόπιση τ στο χρόνο t .

Ο μετασχηματισμός της συνάρτησης $f(t - \tau)$ δίνεται από τη σχέση:

$$\int_t \{f(t - \tau)\} = e^{-s\tau} F(s) \quad (1.36)$$

με $s > 0$, όπου $F(s)$ είναι ο μετασχηματισμός Laplace της $f(t)$.

Ζ) Μετασχηματισμός Laplace συνάρτησης με μιγαδική μετατόπιση θ .

Ο μετασχηματισμός Laplace συνάρτησης $e^{-\theta t} f(t)$ είναι:

$$\int_t \{e^{-\theta t} f(t)\} = F(s + \theta) \quad (1.37)$$

με το θ να είναι εν γένει μιγαδικός αριθμός και $F(s)$ είναι ο μετασχηματισμός της $f(t)$.

Η) Αλλαγή χρονικής κλίμακας

Ο μετασχηματισμός Laplace της $f(at)$ δίνεται από τη σχέση:

$$\int_t \{f(at)\} = \frac{1}{|a|} F\left(\frac{s}{|a|}\right) \quad \text{με } a \neq 0 \quad (1.38)$$

Το θεώρημα της αρχικής τιμής: Αν η πρώτη παράγωγος $f^{(1)}(t)$ μπορεί να μετασχηματιστεί με Laplace, τότε η οριακή τιμή $\lim_{t \rightarrow 0} f(t)$ μπορεί να προσδιοριστεί σύμφωνα με την οριακή τιμή: $\lim_{s \rightarrow \infty} sF(s)$.

Το θεώρημα της τελικής τιμής. Το θεώρημα αυτό αναφέρεται στο πως συμπεριφέρεται η συνάρτηση $f(t)$ στην οριακή περίπτωση που $t \rightarrow \infty$. Αν η $f(t)$ έχει πρώτη παράγωγο $f^{(1)}(t)$ που μπορεί να μετασχηματισθεί κατά Laplace και ο παρονομαστής της ρητής συνάρτησης $sF(s)$ δεν έχει ρίζες στον άξονα των φανταστικών αριθμών ή στο δεξιό μιγαδικό ημιεπίπεδο, τότε ισχύει το εξής:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t) = \lim_{s \rightarrow 0} sF(s) \quad (1.39)$$

Αντίστροφος Μετασχηματισμός Laplace

Ο αντίστροφος μετασχηματισμός Laplace δίνεται από το παρακάτω μιγαδικό ολοκλήρωμα (ολοκλήρωμα Fourier-Mellin):

$$f(t) = \int_{\gamma-jT}^{\gamma+jT} F(s) e^{st} ds = \frac{1}{2\pi j} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{\gamma-jT}^{\gamma+jT} e^{st} F(s) ds \quad (1.40)$$

όπου γ πραγματικός αριθμός ώστε η διαδρομή στο περίγραμμα του ολοκληρώματος να είναι η «περιοχή σύγκλισης του $F(s)$ ». Η «περιοχή σύγκλισης» του μετασχηματισμού $F(s)$ ορίζεται ως εξής: «Εάν η f είναι μια ολοκληρώσιμη τοπικά συνάρτηση τότε το ολοκλήρωμα του μετασχηματισμού $F(s)$ της $f(t)$ θα συγκλίνει γενικά για $Re(s) \geq Re(s_0)$. Έτσι, η περιοχή του ημιεπιπέδου όπου ισχύει $Re(s) \geq Re(s_0)$ λέγεται «περιοχή σύγκλισης» του μετασχηματισμού (region of convergence – ROC)».

Συνέλιξη Συναρτήσεων

Η συνέλιξη δύο συναρτήσεων $f(t)$ και $g(t)$ ορίζεται ως εξής:

$$f(t) * g(t) = (f * g)(t) = \int_0^t f(\tau) g(t - \tau) d\tau \quad (1.41)$$

Σε σχέση με τον μετασχηματισμό Laplace μπορεί ναδειχθεί ότι, για το γινόμενο δύο μετασχηματισμών Laplace $F(s)$ και $G(s)$, των συναρτήσεων $f(t)$ και $g(t)$ αντίστοιχα, ο αντίστροφος μετασχηματισμός Laplace είναι:

$$\int_{\gamma-jT}^{\gamma+jT} F(s)G(s) = f(t) * g(t) \quad (1.42)$$

δηλαδή είναι η συνέλιξη των συναρτήσεων f και g .

Η χρησιμότητα του μετασχηματισμού Laplace στις Διαφορικές Εξισώσεις.

Ο μετασχηματισμός Laplace ως ένας ολοκληρωτικός μετασχηματισμός από την περιοχή t στην περιοχή s , μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως αποτελεσματικό εργαλείο στην επίλυση διαφορικών εξισώσεων με σταθερούς συντελεστές και δοσμένες αρχικές συνθήκες.

(I. Grattan-Guinness, 1997). Έτσι,

$$\text{αν } f^{(i)}(t) \text{ είναι η } i - \text{οστή παράγωγος της } f(t)$$

και θεωρηθεί η διαφορική εξίσωση:

$$\sum_{i=0}^n a_i f^{(i)}(t) = \varphi(t) \quad (1.43)$$

Τότε με βάση τις ιδιότητες του μετασχηματισμού Laplace για τις παραγώγους $f^{(n)}$

όπως είναι η παρακάτω,

$$\mathcal{L}\{f^{(n)}\} = s^n - \sum_{i=1}^n s^{n-i} f^{(i-1)}(0) \quad (1.44)$$

η αναφερθείσα διαφορική εξίσωση μετασχηματίζεται ως:

$$\mathcal{L}\{f(t)\} \sum_{i=0}^n a_i s^i - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^i a_i s^{i-j} f^{(j-1)}(0) = \mathcal{L}\{\varphi(t)\} \quad (1.45)$$

Και επιλύοντάς τη ως προς $\mathcal{L}\{f(t)\}$ προκύπτει ότι:

$$\mathcal{L}\{f(t)\} = \frac{\mathcal{L}\{\varphi(t)\} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^i a_i s^{i-j} c_{j-1}}{\sum_{i=0}^n a_i s^i} \quad (1.46)$$

όπου $c_{j-1} \equiv f^{(j-1)}(0)$

Τελικά, η $f(t)$ μπορεί να εξαχθεί από την τελευταία σχέση εφαρμόζοντας τον αντίστροφο μετασχηματισμό Laplace, δηλαδή,

$$f(t) = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\mathcal{L}\{\varphi(t)\} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^i a_i s^{i-j} c_{j-1}}{\sum_{i=0}^n a_i s^i} \right\} \quad (1.47)$$

Παράδειγμα εφαρμογής του μετασχηματισμού Laplace για την επίλυση γραμμικής διαφορικής εξίσωσης:

Βασικοί γνωστοί τύποι για μετασχηματισμούς Laplace

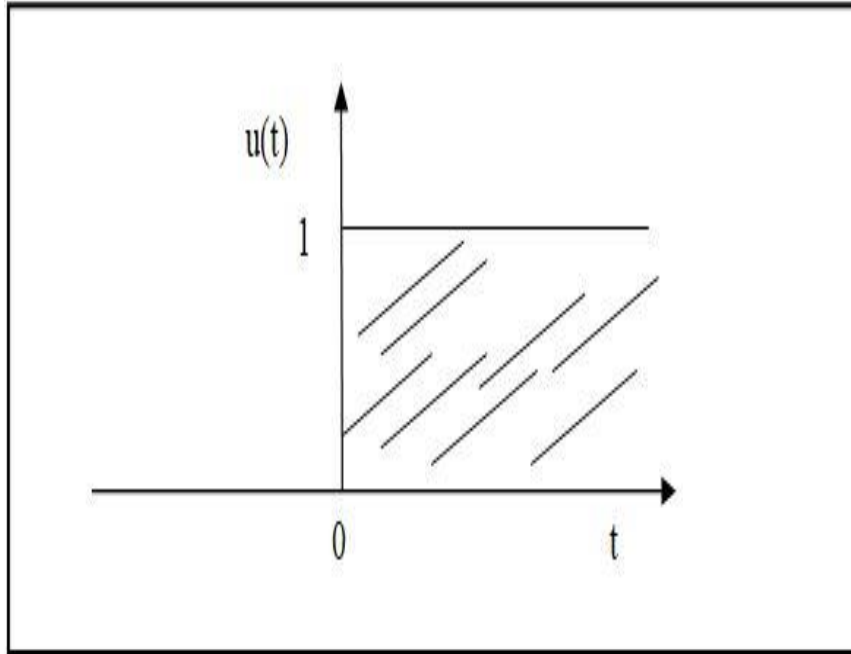
Παρατίθενται οι μετασχηματισμοί Laplace για ορισμένες βασικές συναρτήσεις (S, Lipschutz, et al., 2009).

A) Η μοναδιαία βηματική συνάρτηση (Unit step function)

Η μοναδιαία βηματική συνάρτηση $u(t)$ ορίζεται ως:

$$u(t) = \begin{cases} 1, & t \geq 0 \\ 0, & t < 0 \end{cases} \quad (1.48)$$

Γραφικά, η συνάρτηση $u(t)$ είναι :



Σχήμα 1.3 Γράφημα για τη μοναδιαία βηματική συνάρτηση $u(t)$

Ο μετασχηματισμός Laplace της βηματικής συνάρτησης μπορεί ναδειχθεί ότι είναι:

$$\int_t \{u(t)\} = \frac{1}{s} \quad (1.49)$$

$$\int_t \{\delta(t)\} = 1 \quad (1.50)$$

B) Συνάρτηση μοναδιαίου στιγμιαίου παλμού – (Συνάρτηση δέλτα)

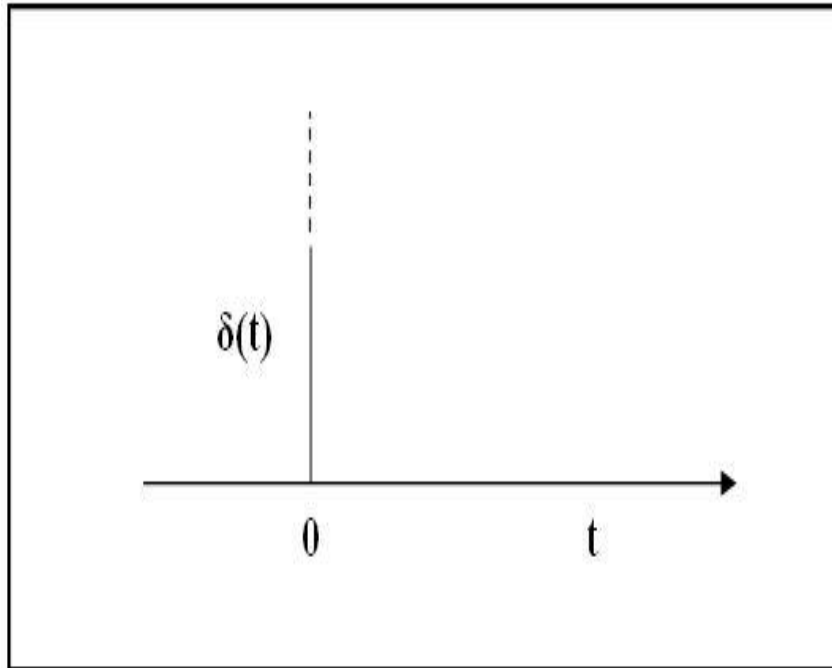
Η συνάρτηση μοναδιαίου στιγμιαίου παλμού ορίζεται ως

$$\delta(t) = \begin{cases} \infty, & t = 0 \\ 0, & t \neq 0 \end{cases} \quad (1.51)$$

έχοντας και την ιδιότητα:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(t) = 1 \quad (1.52)$$

Σχηματικά:



Σχήμα 1.4 Γραφική απεικόνιση της συνάρτησης $\delta(t)$

Ο μετασχηματισμός Laplace της συνάρτησης δέλτα μπορεί ναδειχθεί ότι είναι:

$$\int_t \{\delta(t)\} = 1 \quad (1.53)$$

B) Πολυωνυμική συνάρτηση

Ο μετασχηματισμός Laplace μιας πολυωνυμικής συνάρτησης της μορφής:

$$f(t) = kt^n, k \neq 0, \quad (1.54)$$

ως προς τη μεταβλητή t είναι:

$$\int_t \{kt^n\} = \frac{kn!}{s^{n+1}} \quad \text{με } n \in N, s > 0 \quad (1.55)$$

Δ) Η συνάρτηση $f(t) = t^{-\frac{1}{2}}, t > 0$

Ο μετασχηματισμός Laplace αυτής της συνάρτησης είναι :

$$\int_t \left\{t^{-\frac{1}{2}}\right\} = \int_t \left\{\frac{1}{\sqrt{t}}\right\} = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{s}} \quad (1.56)$$

Ε) Εκθετική συνάρτηση

Για την εκθετική συνάρτηση $f(t) = e^{-at}$, $a > 0$ ο μετασχηματισμός Laplace είναι:

$$\mathcal{L}\{e^{-at}\} = \frac{1}{s+a}, \quad \mu\epsilon \ s > 0 \quad (1.57)$$

Ζ) Περιοδική συνάρτηση

Μία περιοδική συνάρτηση $f(t) = f(t - kT)$ με περίοδο T έχει αναπαράσταση ως εξής:

$$f(t) = \sum_{n=0}^{\infty} u(t - nT) f_1(t - nT) \quad (1.58)$$

όπου η $f_1(t)$ είναι η μορφή της $f(t)$ στο διάστημα $[0, T]$.

Ο μετασχηματισμός Laplace της $f(t)$ μπορεί να δειχθεί ότι είναι:

$$\mathcal{L}\{f(t)\} = \frac{F(s)}{1 - e^{-sT}} \quad (1.59)$$

όπου $F(s)$ είναι ο μετασχηματισμός Laplace της $f_1(t)$ δηλαδή της $f(t)$ στο διάστημα $[0, T]$.

Βασικές σχέσεις για τον Αντίστροφο Μετασχηματισμό Laplace

$$\text{Α)} \quad \mathcal{L}\left[e^{-m\sqrt{s}}\right] = \frac{me^{-\frac{m^2}{4t}}}{2t\sqrt{\pi t}} \quad (m > 0) \quad (1.60)$$

$$\text{Β)} \quad \mathcal{L}\left[\frac{e^{-m\sqrt{s}}}{s}\right] = \text{erfc}\left(\frac{m}{2\sqrt{t}}\right) \quad (m > 0) \quad (1.61)$$

$$\text{Γ)} \quad \mathcal{L}\left[\frac{e^{-m\sqrt{s}}}{\sqrt{s}}\right] = \frac{e^{-\frac{m^2}{4t}}}{\sqrt{\pi t}} \quad (m > 0) \quad (1.62)$$

$$\text{Δ)} \quad \mathcal{L}\left[\frac{e^{-m\sqrt{s}}}{s\sqrt{s}}\right] = 2\sqrt{\frac{t}{\pi}} e^{-\frac{m^2}{4t}} - m \text{erfc}\left(\frac{m}{2\sqrt{t}}\right) \quad (m > 0) \quad (1.63)$$

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2. ΘΕΡΜΑΝΣΗ ΥΛΙΚΩΝ ΜΕ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΗΣΗ ΜΕ LASER

2.1 ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗ ΦΩΤΟΣ - ΥΛΗΣ

Η αλληλεπίδραση φωτός με την ύλη είναι ένα ευρύ και ανεξάντλητο πεδίο που συνεχώς δίνει καινούργια στοιχεία ταυτόχρονα με τη χρήση νέων υλικών και πηγών φωτός. Τα υλικά, με βάση τη διάκρισή τους σε μονωτές (διηλεκτρικά), αγωγούς (μέταλλα) και ημιαγωγούς, έχουν δυνατότητα να αλληλεπιδρούν με τις οπτικές συχνότητες (υπεριώδεις, ορατές, υπέρυθρες) ανάλογα με τη σύνθεσή τους και τις προσπίπτουσες συχνότητες και εντάσεις της οπτικής ακτινοβολίας. Ανάμεσα στις βασικές οπτικές ιδιότητες, στην αλληλεπίδραση μιας ακτίνας φωτός με ένα υλικό, είναι η ανάκλαση, η διάθλαση και η απορρόφηση του φωτός στο υλικό. Η ύπαρξη ανακλώμενων ή απορροφούμενων ακτίνων είναι σχετική με το είδος και τη γεωμετρία του υλικού και το είδος του φωτός, καθώς και με τη γεωμετρία της πρόσπτωσης του φωτός.

2.1.1 Οπτική απορρόφηση στα υλικά

Επιλύοντας τις εξισώσεις Maxwell για τη διάδοση ενός EM- κύματος σε υλικό, η συνιστώσα του ηλεκτρικού πεδίου, παράλληλα στην διαχωριστική επιφάνεια του υλικού, μεταβάλλεται με τη μορφή :

$$E_{//}(x) = E_0 e^{-\frac{\omega k x}{c}} e^{i\omega\left(t - \frac{nx}{c}\right)} \quad (2.1)$$

με το E_0 το πλάτος του προσπίπτοντος κύματος,

$e^{-\frac{\omega k x}{c}}$ να είναι ένας όρος απόσβεσης,

και $e^{i\omega\left(t - \frac{nx}{c}\right)}$ να είναι η ταλάντωση του EM – πεδίου.

Οι οπτικές ιδιότητες του υλικού μπορούν να εκφραστούν μέσω της σχετικής διηλεκτρικής σταθεράς με το πραγματικό μέρος ϵ_R και το «φανταστικό» (imaginary) μέρος ϵ_{Im} σύμφωνα με τη σχέση:

$$\varepsilon_r = \varepsilon_R - i \varepsilon_{Im} = (n - ik)^2 \quad (2.2)$$

όπου, η ένταση του EM – κύματος σε «βάθος διείσδυσης» x θα είναι:

$$I(x) = \text{Re}(E_{//}^2) = E_0^2 e^{-\frac{2\omega kx}{c}} \quad (2.3)$$

και μέσω του ορισμού:

$$d_{in} = \frac{c}{2\omega k} \quad (2.4)$$

ο συντελεστής εξασθένησης δ ορίζεται ως :

$$\delta = \left(\frac{1}{d_{in}} \right) = \frac{2\omega c}{k} = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (2.5)$$

Για παράδειγμα, στον πίνακα που ακολουθεί παρατίθενται οι τιμές του δ στο ορατό φάσμα των οπτικών κυμάτων, ως απλό ενδεικτικό στοιχείο για την τάξη μεγέθους του συντελεστή εξασθένησης σε υλικά:

Υλικά και οπτική εξασθένηση

Υλικό	δ (m^{-1})
Νερό	3.1
Γυαλί	3.5
Χρυσός	6.6×10^7
Γραφίτης	1.6×10^7

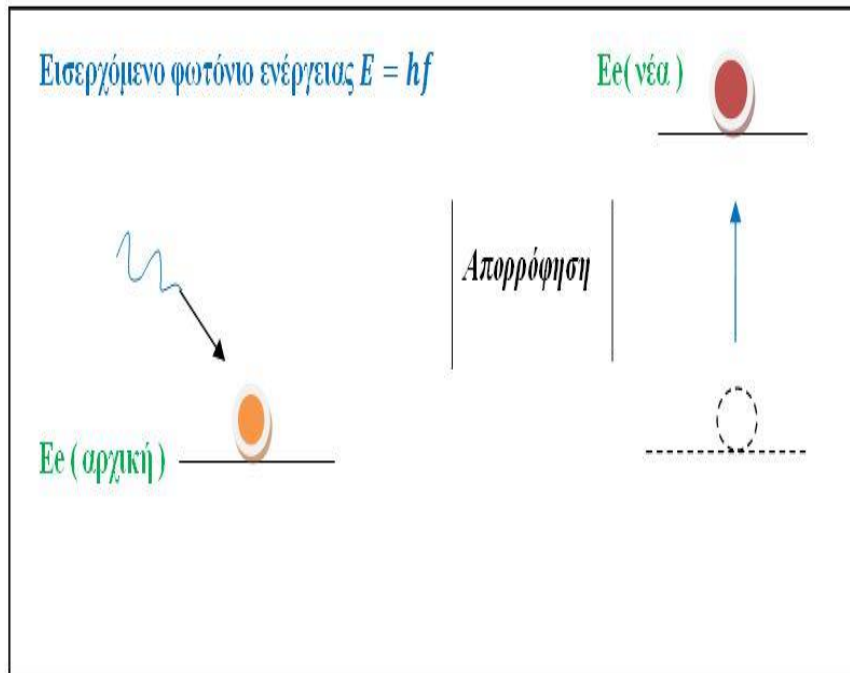
Πίνακας 2.1 Συντελεστής εξασθένησης ορισμένων υλικών (m^{-1})

$$\kappa = \frac{\delta \lambda}{4\pi} \quad (2.6)$$

Και

$$n_o = \frac{2I_o}{\mu_o E_o^2} \quad (2.7)$$

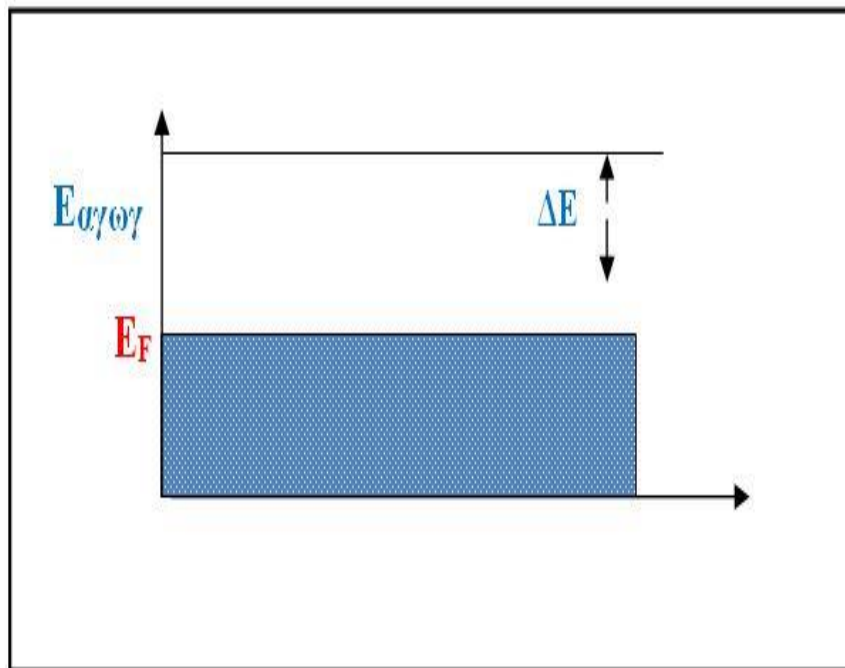
Σχηματικά, ο μηχανισμός απορρόφησης ενός φωτονίου από ένα ηλεκτρόνιο, μπορεί να δειχθεί παρακάτω ως σχηματική σειρά διαδικασιών από αριστερά προς δεξιά:



Σχήμα 2.1 Σχηματικά η αύξηση της ενέργειας ηλεκτρονίου από απορρόφηση φωτονίου

Στο διάγραμμα ενεργειακών ζωνών στα υλικά, θεωρώντας ως τρεις βασικές κατηγορίες υλικών τους αγωγούς, τους ημιαγωγούς και τους μονωτές, η απορρόφηση των φωτονίων περιγράφεται σε σχέση με την παρουσία φορέων φορτίου στις ενεργειακές ζώνες των υλικών και τις δυνατότητες «διέγερσης» (δηλαδή μετάβασης) των φορέων ανάμεσα σε ζώνες. Έτσι, για *αγωγούς όπως είναι τα μέταλλα*, οι ενεργειακές ζώνες των ηλεκτρονίων είναι (ποιοτικά) όπως στο σχήμα:

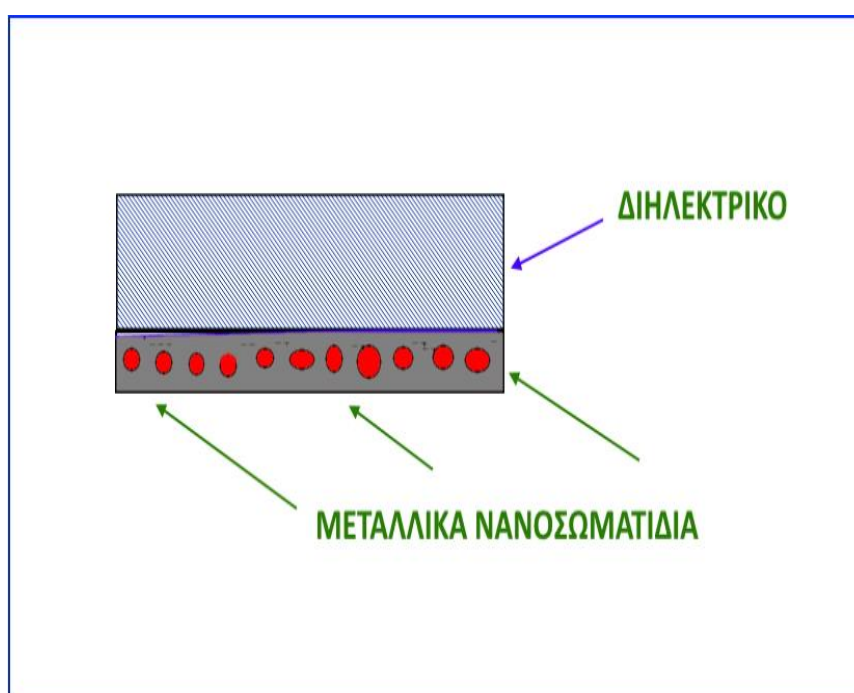
Ενέργειες ελευθέρων ηλεκτρονίων σε μέταλλα



Σχήμα 2.2 Ποιοτικό διάγραμμα ενεργειών ελευθέρων ηλεκτρονίων σε μέταλλα.

Τα ελεύθερα ηλεκτρόνια έχοντας «ενεργειακό περιθώριο» ΔE στη ζώνη αγωγιμότητας μπορούν να απορροφήσουν φωτόνια κυρίως στην περιοχή των υπέρυθρων μιας και το περιθώριο ΔE στη ζώνη αγωγιμότητας είναι μικρότερο από 1 eV . ($1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ Joule}$) Με E_F συμβολίζεται η ενέργεια Fermi, που είναι η ανώτερη ενεργειακή στάθμη που μέχρι εκεί υπάρχουν πλήρως κατειλημμένες ενεργειακές τιμές. Η οπτική απορρόφηση μειώνεται καθώς αυξάνεται η οπτική ενέργεια των φωτονίων στο ορατό και υπεριώδες. Η ύπαρξη των ελευθέρων ηλεκτρονίων σε επιφανειακά σημεία του μετάλλου είναι ένα στοιχείο που τα τελευταία χρόνια έχει οδηγήσει σε ανάπτυξη εντυπωσιακών διατάξεων που συνήθως χρησιμοποιούν νανοστρώματα μετάλλων σε διηλεκτρικά. Οι διατάξεις αυτές εκμεταλλεύονται τη δημιουργία πλασμονικών ταλαντώσεων στην αλληλεπίδρασή τους με το φως. Οι πλασμονικές ταλαντώσεις είναι ταλαντώσεις ομάδων ελευθέρων ηλεκτρονίων κάτω από το προσπίπτον ηλεκτρομαγνητικό πεδίο του οπτικού κύματος, έτσι ώστε τα ηλεκτρόνια να παρουσιάζουν ζώνες επιφανειακού φορτίου σε μία απόσταση δημιουργώντας έτσι επιφανειακά φορτία στις διεπιφάνειες μετάλλου και διηλεκτρικού. Αν

οι διαστάσεις τέτοιων περιοχών είναι μικρότερες από το μήκος κύματος τότε δημιουργούνται τα λεγόμενα επιφανειακά πλασματικά πολαριτόνια, επηρεάζοντας δραματικά τις οπτικές ιδιότητες των επιφανειών σε τέτοιες διατάξεις. Ο λόγος είναι ότι οι πλασματικές ταλαντώσεις μπορούν να απορροφήσουν μέρος της προσπίπτουσας οπτικής ενέργειας και μάλιστα με επιλεκτικό τρόπο, σε σχέση με τη συχνότητα του φωτός και την παρουσία ελευθέρων ηλεκτρονίων στις διεπιφάνειες των υλικών. Ένα μοντέλο που χρησιμοποιεί νανοστρώματα μετάλλου σε διηλεκτρικό είναι όπως απεικονίζεται στην παρακάτω εικόνα:

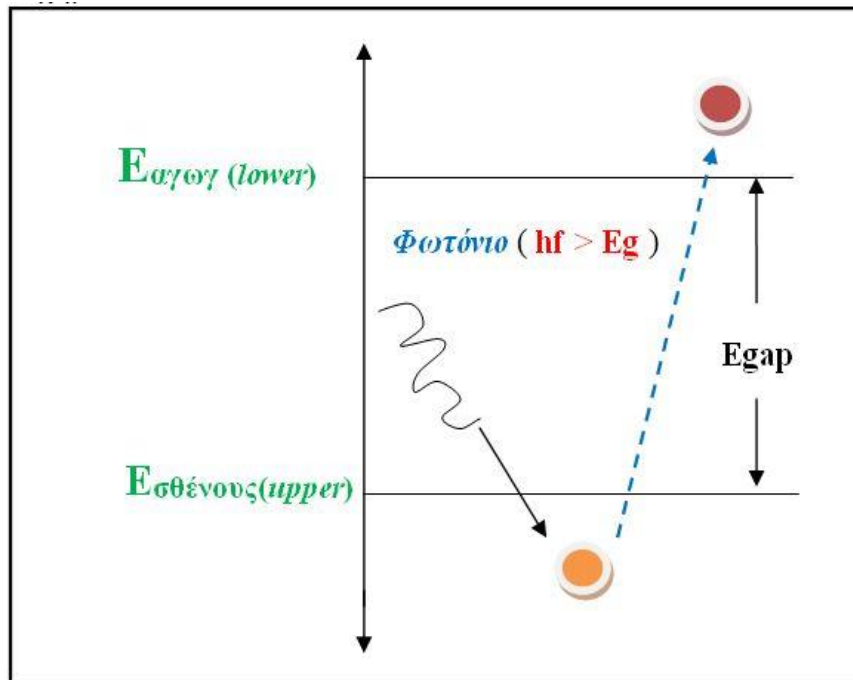


Εικόνα 2.1 Στρώμα διηλεκτρικού ακολουθούμενο από στρώμα μετάλλου με NP

Από την άλλη μεριά, στους ημιαγωγούς, στο διάγραμμα των ενεργειακών ζωνών των φορέων φορτίου (ηλεκτρόνια και οπές), υπάρχει ένα «ενεργειακό χάσμα» ανάμεσα στη ζώνη σθένους (όπου οι φορείς φορτίου είναι «δεμένοι» (bound) στα άτομα ή ιόντα του ημιαγωγού) και τη ζώνη αγωγιμότητας των φορέων φορτίου (όπου κινούνται με αυξημένη κινητική ενέργεια), με τις ενεργειακές τιμές στο ενεργειακό χάσμα να είναι «απαγορευμένες» για τους φορείς φορτίου. Αν, για παράδειγμα, ένα ηλεκτρόνιο στη ζώνη σθένους απορροφήσει ένα φωτόνιο με ενέργεια μεγαλύτερη ή ίση από το ενεργειακό

χάσμα (E_g) τότε το ηλεκτρόνιο θα μεταπηδήσει στη ζώνη αγωγιμότητας με αυξημένη πλέον κινητική ενέργεια, διαφορετικά δεν θα απορροφήσει την προσπίπτουσα ενέργεια.

Σχηματικά,

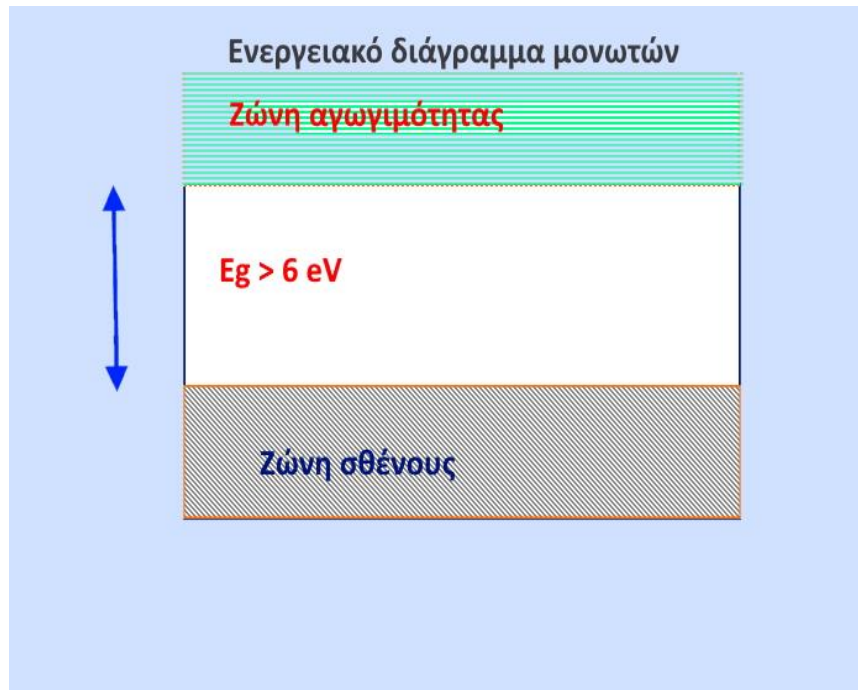


Σχήμα 2.3 Ενεργειακές «μεταβάσεις» φωτονίων

Η απορροφητικότητα των περισσότερων ημιαγωγών αυξάνει με την αύξηση της οπτικής συχνότητας από το υπέρυθρο προς το ορατό και το υπεριώδες. Επίσης, ενεργειακή μετάβαση γίνεται επίσης με απορρόφηση φωτονίων και δημιουργία εξιτονίων (excitons) : Στην περίπτωση αυτή δημιουργούνται ζεύγη ηλεκτρονίων – οπών και ενώ το ηλεκτρόνιο «παγιδεύεται» σε ένα τοπικό ενεργειακό επίπεδο, η οπή μπορεί να κινηθεί στη ζώνη σθένους. Το εξιτόνιο μπορεί να επανέλθει στην προηγούμενη κατάσταση με εκπομπή φωτονίου ή φωνονίου.

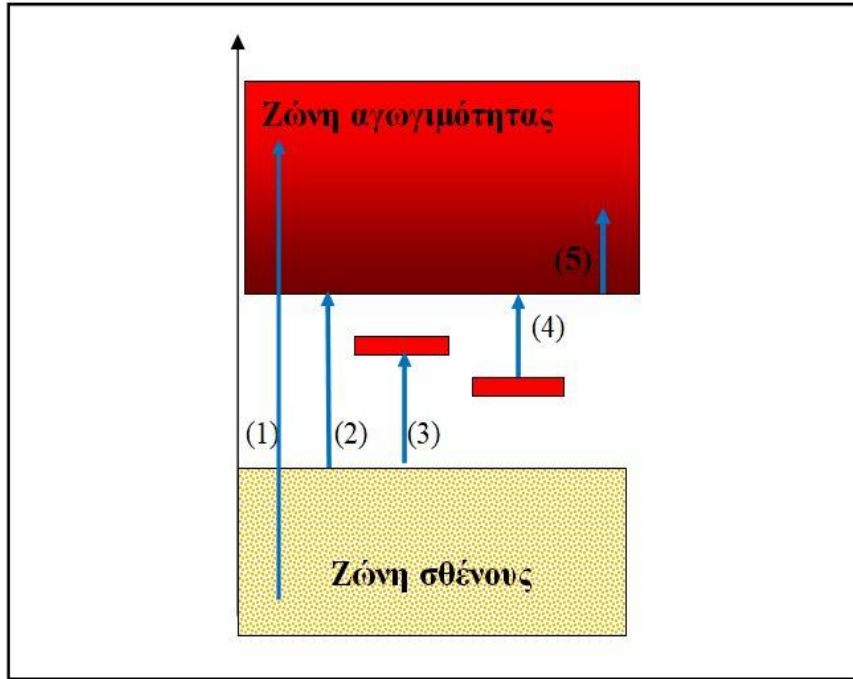
Όσο για την τρίτη κατηγορία, τους μονωτές, όπου ανήκουν και τα διηλεκτρικά υλικά, όπως το SiO_2 , οι ενεργειακές ζώνες της αγωγιμότητας έχουν μικρό περιθώριο να καταληφθούν από φορείς φορτίου που στην πλειοψηφία τους είναι «δεμένα» (bound) στους ηλεκτρονικούς δεσμούς των ατόμων του υλικού μιάς και υπάρχει αλληλοκάλυψη των ζωνών σθένους (upper level) και αγωγιμότητας (lower level).

Σχηματικά,



Σχήμα 2.4 Διάγραμμα ενεργειακών ζωνών σε διηλεκτρικά ή μονωτές (ποιοτικά)

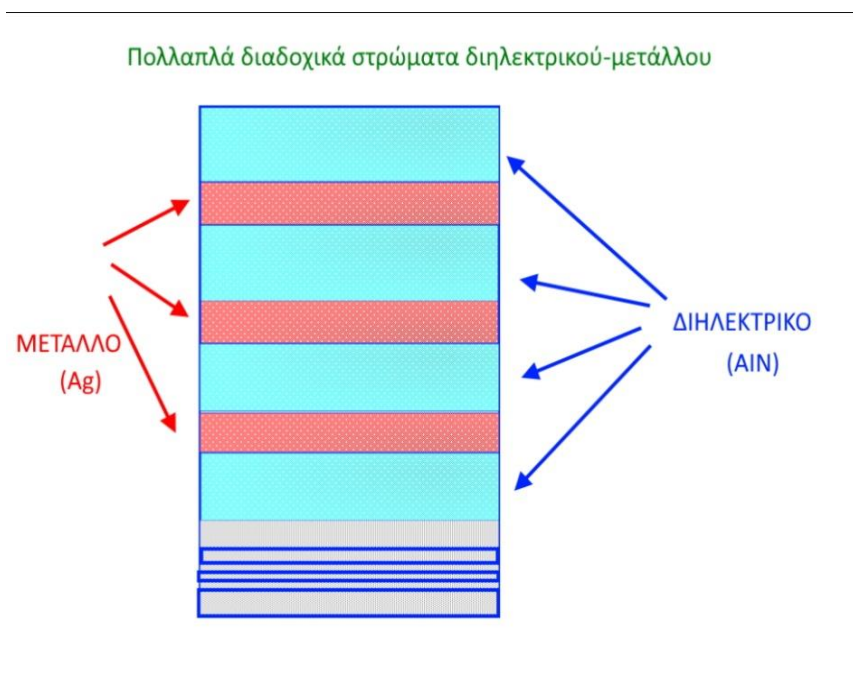
Έτσι, τα μονωτικά υλικά εμφανίζουν μικρή απορρόφηση (και αντίστοιχα μεγάλη ανάκλαση) στο μεγαλύτερο εύρος των οπτικών συχνοτήτων. Ειδικότερα, στα πολυμερή η μεταφορά της οπτικής ενέργειας γίνεται μέσω δόνησης και περιστροφής των μακρομοριακών αλυσίδων. Ο βαθμός κρυσταλλικότητας των πολυμερών είναι καθοριστικός παράγοντας για την θερμική αγωγιμότητα που είναι υψηλότερη από ότι στα άμορφα πολυμερή. Σχηματικά, τα είδη των πιθανών ενεργειακών μεταβάσεων (πλην δημιουργίας πλασμονίων και εξιτονίων) απεικονίζονται όπως παρακάτω:



Σχήμα 2.5 Ενεργειακές μεταβάσεις σε ημιαγωγούς

2.1.2 Το Μοντέλο που υιοθετήθηκε

Στο μοντέλο πολλαπλών στρώσεων που υιοθετείται στην παρούσα μελέτη, περιγράφεται η σειρά εναλλάξ στρωμάτων διηλεκτρικού (AlN) με ευγενές μέταλλο (Ag) όπως στην παρακάτω εικόνα:



Σχήμα 2.6 Πολλαπλά εναλλάξ στρώματα διηλεκτρικού – μετάλλου

Για τη θερμική συμπεριφορά τέτοιας διάταξης γίνεται η παρακάτω βασική παραδοχή:
Οι θερμικές σταθερές της διάταξης των δύο υλικών θα περιγράφονται αντίστοιχα από μία «ισοδύναμη» (effective) σταθερά. Έτσι, ο θερμικός συντελεστής θα είναι (A.Siozios, et al.,2015),(C.Bazioti, et al.,2014):

$$K_{th} = \frac{K_{AIN}K_{Ag}(L_{AIN}+L_{Ag})}{K_{AIN}L_{Ag}+K_{Ag}L_{AIN}} \quad (2.8)$$

Όπου τα L_{AIN} και L_{Ag} είναι τα συνολικά μήκη των στρωμάτων AIN και Ag και K_{AIN} και K_{Ag} είναι οι αντίστοιχοι θερμικοί συντελεστές των AIN και Ag .

Όμοια, για τις $(C_{p\rho})$ θα είναι:

$$(C_{p\rho})_{eff} = f_{AIN}(C_{p\rho})_{AIN} + f_{Ag}(C_{p\rho})_{Ag} \quad (2.9)$$

Και

$$a_{eff} = a = \frac{K_{th}}{(C_{p\rho})_{eff}} \quad (2.10)$$

Οι εφαρμογές με θέρμανση υλικών με φως Laser περιλαμβάνουν επιλεκτική κρυσταλλοποίηση άμορφων ημιαγωγών (πχ Si), Laser annealing, λιώσιμο μετάλλων και πλαστικών, αλλαγές φάσεων σε οπτικά υλικά αποθήκευσης δεδομένων όπως επίσης και σε περιπτώσεις κατασκευής και ανάπτυξης υλικών σε μικρής κλίμακα (πχ nanofabrication techniques). (H.Zoubos, et al., 2013), (J.R.Cole, N.J.Halas, 2006), (D. Wan, et al., 2010), (C. Ryan, et al., 2012). Από πλευράς θερμαντικής ικανότητας του Laser, μπορεί να θεωρηθεί σαν ένα «μαύρο κουτί» που παρέχει μία πηγή θερμότητας σε ένα χρονικό διάστημα. Έτσι, αποτελεί ένα χρήσιμο, πολλαπλό και ποικίλο εργαλείο με την ικανότητά του να επηρεάζει θερμαντικά τις επιφάνειες των υλικών που προσπίπτει αλλά και το σώμα των υλικών σε κάποιο βάθος διείσδυσης. Από την άλλη μεριά, τα μοντέλα περιγραφής της αγωγής θερμότητας λόγω της θέρμανσης που προκαλείται από την πρόσπτωση του Laser, έχουν πολλά σημεία που είναι κοινά με διαφοροποιήσεις όμως σε σχέση με τη γεωμετρία

του πειραματικού setup και του υλικού και τον τρόπο εφαρμογής της θερμαντικής δυνατότητας του Laser. Στις περιπτώσεις με παλμό ή παλμούς με Laser, αν η διάρκεια του παλμού είναι μεγαλύτερη από τον «χρόνο αντίδρασης» του πλέγματος (lattice) του υλικού τότε η αγωγή θερμότητας μπορεί να περιγράφεται από τον κε(μακροσκοπικό) νόμο του Fourier μιας και δίνεται αρκετός χρόνος για να μεταφερθεί η θερμότητα στο πλέγμα (lattice) του υλικού, από την απορρόφηση της ενέργειας των ηλεκτρονίων. Στην περίπτωση που η διάρκεια του παλμού είναι μικρότερη από τον «χρόνο αντίδρασης» του πλέγματος του υλικού, θα πρέπει να υπολογίζονται ξεχωριστά οι συνεισφορές των ηλεκτρονίων και των φωνονίων στις επαγόμενες μεταβολές της θερμοκρασίας. (C.Favazza, et al., 2006), (F.Ruffino , et al., 2012), (C.E. Rodriguez, et al., 2014).

Όμοια, στην περίπτωση των υλικών σε πολλαπλές στρώσεις (multilayers), η μετάδοση θερμότητας είναι διαφορετικού τύπου από ότι η κατά Fourier μετάδοση. Η κατανομές της θερμοκρασίας παρουσιάζουν σε αυτές τις περιπτώσεις σύνθετες μορφές (complex modes). Τα κύματα θερμότητας (thermal waves) μεταδίδονται, υπερκαλύπτονται μεταξύ τους και καταλήγουν σε σύνθετες κατανομές στη θερμοκρασία. Ένας σημαντικός παράγοντας σε αυτές τις περιπτώσεις είναι ο χρόνος καθυστέρησης μετάδοσης (thermal delay time – relaxation time) που αναφέρεται στο χρόνο μεταξύ της εφαρμογής της πηγής θέρμανσης πχ από την πρόσπτωση του Laser και της μεταφοράς της απορροφούμενης ενέργειας στο πλέγμα του υλικού μέσω των ηλεκτρονίων που αρχικά απορρόφησαν την (οπτική) ενέργεια. Αν ο παλμός του Laser είναι μεγαλύτερος σε διάρκεια από τον θερμικό χρόνο για την μετάδοση της απορροφούμενης ενέργειας, τότε η περιγραφή της διάδοσης της θερμότητας μέσω διάχυσης, δηλαδή τύπου Fourier, δίνει αρκετά καλή ακρίβεια στις προβλέψεις. Από την άλλη μεριά, αν ο χρόνος του παλμού είναι μικρότερος από το χρόνο που χρειάζεται το υλικό για την απορρόφηση της «οπτικής» θερμικής ενέργειας, τότε η περιγραφή μέσω θερμικών κυμάτων διάδοσης τύπου non-Fourier είναι πιο κατάλληλη στο να περιγράψει τις προκύπτουσες σύνθετες κατανομές στη θερμοκρασία. Στα υλικά πολλαπλών στρωμάτων η συμπεριφορά αυτή επηρεάζεται από τις ιδιότητες των υλικών και τον ρυθμό αλλαγής της «ροής» της θερμότητας. Υλικά με μεγάλο θερμικό χρόνο παρουσιάζουν πιο έντονα τις σύνθετες μορφές κατανομής της θερμοκρασίας, ειδικά στην περίπτωση των μικρής διάρκειας επαναλαμβανόμενων παλμών από Laser heating.

2.1.3 Το Laser ως πηγή οπτικής ακτινοβολίας

Η παροχή οπτικής ενέργειας από το Laser μπορεί να είναι:

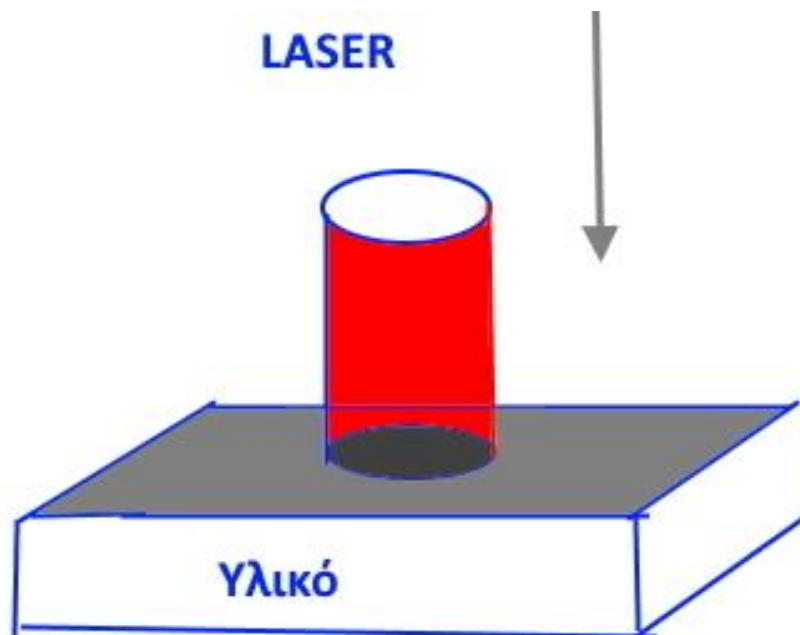
I) Συνεχόμενη

II) Μιας ορισμένης χρονικής διάρκειας (ένας παλμός Laser)

III) Με περιοδική ή όχι σειρά παλμών Laser.

Η ένταση του Laser, σε κάθε παλμό, θεωρείται να είναι σταθερή, ενώ μελετάται η επίδραση της παραγόμενης θερμότητας σε μία ή περισσότερες παραμέτρους (ιδιότητες) του θερμαινόμενου υλικού. Σε κάθε περίπτωση που γίνεται αναλυτική περιγραφή της αγωγής της θερμότητας γίνονται και ορισμένες απλουστεύσεις στις παραδοχές. Είναι όμως εφικτό, παρά τις απλουστεύσεις αυτές, να αναδειχθούν ορισμένες πολύτιμες πληροφορίες για τη «θερμική απόκριση» του υλικού και γενικά για τις αλλαγές που επιφέρει η αγωγή της θερμότητας κατά μήκος σε μια τουλάχιστον από τις διαστάσεις του υλικού.

Σχηματικά,



Σχήμα 2.7 Θέρμανση του υλικού με ακτινοβολία φωτός Laser

2.2 ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΗΣΗ ΜΕ LASER

Η ακτινοβολία γίνεται με πηγές Laser στο υπεριώδες φάσμα του φωτός. Το βασικό σκεπτικό, όσον αφορά την επιλογή των υπεριωδών συχνοτήτων, είναι ότι τα μέταλλα εμφανίζουν σημαντική απορρόφηση σε υψηλές οπτικές συχνότητες, κυρίως λόγω πλασματικών ταλαντώσεων. (S.J. Henley, et al.,2007). Έτσι, η απορρόφηση φωτός που

οδηγεί σε ανύψωση της θερμοκρασίας, που σε οπτικές συχνότητες ή υπέρυθρες θα χρειαζόνταν πολλαπλάσια ισχύ του Laser ανά μονάδα επιφάνειας. Γενικά, το φως του Laser (ορατό η μη) είναι «μονοχρωματικό» και «σε συμφωνία φάσης» (coherent). Αυτό σημαίνει ότι έχει ένα και μόνο ένα βασικό μήκος κύματος λ_0 , ως ΗΜ ακτινοβολία με πρακτικά ένα πολύ λεπτό εύρος $\Delta\lambda$ γύρω από το μήκος κύματος λ_0 . Ο όρος «σε συμφωνία φάσης» σημαίνει ότι όλα τα φωτόνια της δέσμης που εκπέμπεται είναι μεταξύ τους στην ίδια «φάση». Επίσης, η δέσμη φωτός του Laser μπορεί να είναι «πολωμένη» σε επίπεδο ή σε κυκλική ή ελλειπτική πόλωση. Δηλαδή, οι διευθύνσεις των $\{\vec{E}, \vec{B}\}$ του ΗΜ πεδίου μπορούν κατά τη διάδοση του φωτός Laser να είναι σε ένα μόνο επίπεδο και κάθετα μεταξύ τους διανύσματα ή να «περιστρέφονται» ως κάθετα μεταξύ τους διανύσματα με άξονα περιστροφής τη διεύθυνση διάδοσης.

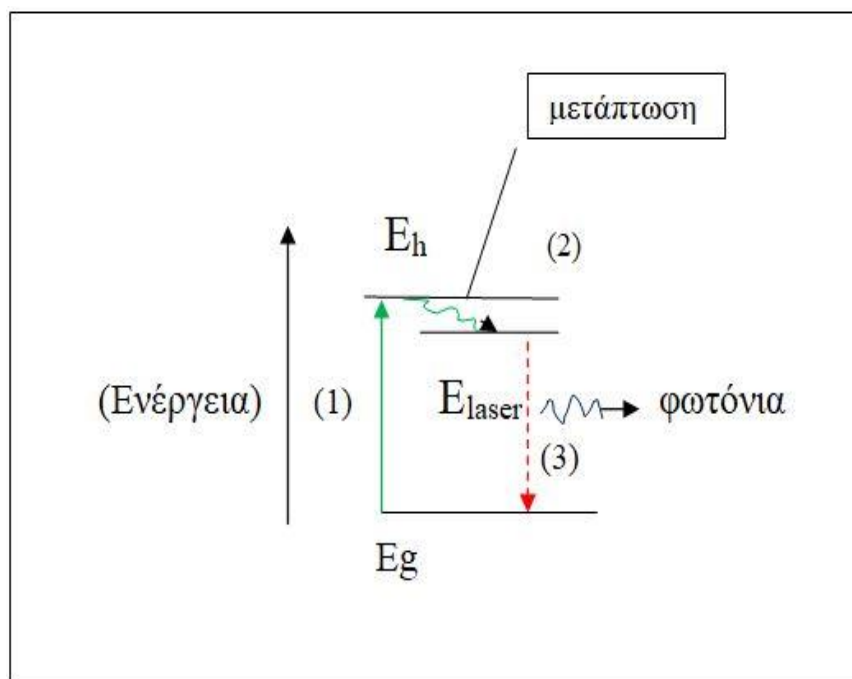
2.2.1 Μηχανισμός παραγωγής φωτός Laser

Το φως (ορατό η μη) του Laser παράγεται μέσω τριών διαδικασιών αλληλεπίδρασης ύλης – ενέργειας:

Στην πρώτη διαδικασία, τα ηλεκτρόνια ενός υλικού προσλαμβάνουν εξωτερική ενέργεια και «διεγείρονται» σε υψηλότερες ενεργειακά στάθμες. Στη συνέχεια μέσω μηχανισμών που δεν εκπέμπονται φωτόνια, όπως για παράδειγμα με χαλάρωση ταλάντωσης (vibrational relaxation) μεταπίπτουν σε λίγο χαμηλότερη ενεργειακή στάθμη. Στο τρίτο στάδιο τα ηλεκτρόνια όντας σε αυτή πλέον τη στάθμη παρουσιάζουν αυθόρμητη «αποδιέγερση» (spontaneous emission) και έτσι εκπέμπονται φωτόνια που ενεργειακά βρίσκουν ορισμένα ηλεκτρόνια σε ήδη «διεγερμένες» ενεργειακά στάθμες, με αποτέλεσμα με ένα είδος «κβαντικού συντονισμού» προκαλείται «αποδιέγερση» (εξαναγκασμένη εκπομπή) στα ηλεκτρόνια αυτά με αποτέλεσμα να ενισχύονται πλέον τα φωτόνια που εκπέμπονται. Έτσι, σταδιακά, κατά την «αποδιέγερση» των ηλεκτρονίων στο υλικό, αυξάνεται εκθετικά ο αριθμός των φωτονίων που εκπέπονται. Με χρήση κατάλληλων συντονιστών (resonant cavity) τα φωτόνια μπορούν να ενισχυθούν κατά μήκος μιάς διεύθυνσης και τελικά να εκπεμφθούν έξω από το υλικό σαν φως Laser. Χρειάζονται έτσι τρεις τουλάχιστον ενεργειακές στάθμες για τη «διέγερση» - «αποδιέγερση» των ηλεκτρονίων ώστε να μην αντιπαλεύουν την αντίστοιχη «απορόφηση» των φωτονίων τα ηλεκτρόνια που έχουν ήδη «αποδιεγερθεί». Από τη στάθμη μεγαλύτερου εύρους τα ηλεκτρόνια «μεταπέφτουν» στην αμέσως χαμηλότερη με μηχανισμούς διαφορετικούς της «αποδιέγερσης» όπως η vibrational relaxation και στη συνέχεια αυτά τα ηλεκτρόνια οδηγούνται σε «συντονισμένη» (εξαναγκασμένη) εκπομπή παρουσία φωτονίων ίδιου

ενεργειακού εύρους με το εύρος της στάθμης αυτής όπου «μετάπτωσαν» αρχικά τα «διεγερμένα» ηλεκτρόνια. Το αποτέλεσμα είναι να προσθέτονται έτσι νέοι αριθμό φωτονίων όμοιων σε συχνότητα και φάση μεταξύ τους. Για να έχουμε όμως έναρξη (και συνέχεια) των μηχανισμών αυτών θα πρέπει αρχικά τα ηλεκτρόνια της κάτω ενεργειακής θέσης να «διεγερθούν» αρχικά στην μεγαλύτερου εύρους στάθμη. Αυτό καλείται «αντιστροφή πληθυσμών» και η πρόσληψη της αρχικής απαραίτητης ενέργειας γίνεται με άντληση εξωτερικής οπτικής ή ηλεκτρομαγνητικής ενέργειας (pumping).

Σχηματικά,



Σχήμα 2.8 Τρόπος δημιουργίας της εκπομπής φωτός Laser

2.2.2 Βασικά είδη Laser ως πηγές ακτινοβολίας (refL1)

Τα Laser διαιρούνται σε ορισμένες ομάδες με διαχωριστικά κριτήρια (Web ref 1):

- (α) την κατάσταση του ενεργού υλικού (στερεό, υγρό, αέριο, πλάσμα)
- (β) την ζώνη μήκους κύματος (ορατό, υπέρυθρο, υπεριώδες...)
- (γ) τη μέθοδο διέγερσης του ενεργού υλικού (οπτική, ηλεκτρική,...)
- (δ) τα χαρακτηριστικά της εξερχόμενης ΗΜΑ Laser (ε) τον αριθμό των ενεργειακών επιπέδων που παίρνουν μέρος στη διαδικασία.

Το ενεργό υλικό καθορίζει:

1. το μήκος κύματος της εξερχόμενης δέσμης

2. τη μέθοδο διέγερσης που ενδείκνυται
3. την τάξη μεγέθους της εξερχόμενης ισχύος
4. την αποδοτικότητα του συστήματος Το ενεργό υλικό καθορίζει πολλές ιδιότητες του Laser και επί πλέον πρέπει να είναι «διαφανές» στο μήκος κύματος που το ίδιο «παράγει».

Επιπλέον , τα αέρια Laser χωρίζονται σε τέσσερις υπο-ομάδες:

- (i) ατομικά (π.χ. He-Ne και He-Cd) 36
- (ii) ατμών μετάλλου (Cu, Au)
- (iii) μοριακά (CO₂, N₂, χημικά, μακρινού υπέρυθρου, excimer)
- (iv) ιοντικά (Ar + , Kr+) B.

Τα υγρά Laser είναι κυρίως χρωστικών dye Γ.

Τα στερεά Laser χωρίζονται σε:

- (i) μονωτών (ρουβινίου, νεοδυμίου, αλεξανδρίτη, σαπφείρου)
- (ii) ημιαγωγών (διόδων)

Ειδικά Laser:

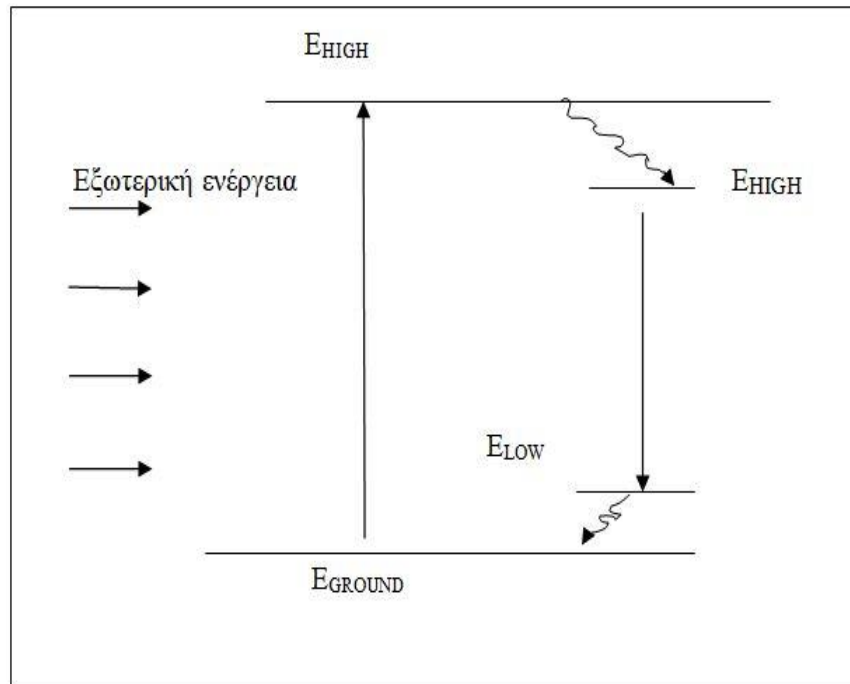
- (i) ακτίνων X
- (ii) ελεύθερου ηλεκτρονίου (FEL)

Μία κατηγορία Laser που εκπέμπουν στο υπεριώδες, είναι :

To Laser Νεοδυμίου (Nd:YAG Laser)

Το Nd:YAG laser είναι ένα στερεής κατάστασης laser. Το «ενεργό» υλικό, δηλαδή εκεί όπου γίνεται η παραγωγή του laser, είναι από ένα YAG κρύσταλλο στον οποίο έχουν «ντοπαριστεί» ιόντα του στοιχείου Νεοδύμιο (Nd). Το Νεοδύμιο παρουσιάζει ενεργειακές στάθμες στη ζώνη 4f. Το «pumping» γίνεται με μία συμβατική λάμπα ή με άλλο laser. Λειτουργεί ως laser με τέσσερα επίπεδα ενέργειας, το E_{GROUND}, E_{UPPER} και E_{HIGH} , E_{LOW}. Αρχικά, διεγείρονται ηλεκτρόνια από E_{GROUND} σε E_{UPPER} με οπτική απορρόφηση εξωτερικής οπτικής ενέργειας. Στη συνέχεια τα ηλεκτρόνια μέσω vibration relaxation μεταπίπτουν με γρήγορες μεταπτώσεις στη στάθμη E_{HIGH} η οποία έχει αρκετά μεγάλο «χρόνο ζωής». Από εκεί ξεκινώντας αυθόρμητη αποδιέγερση στη στάθμη E_{LOW} ενεργοποιείται και η εξαναγκασμένη αποδιέγερση στη στάθμη E_{LOW}. Από τη στάθμη E_{LOW} τα ηλεκτρόνια μεταπίπτουν με γρήγορη μετάπτωση μέσω vibration relaxation στη στάθμη E_{GROUND}, επιτρέποντας έτσι να ξεκινήσει δεύτερος κύκλος με εξωτερικό «pumping» κ.ο.κ.

Σχηματικά:



Σχήμα 2.9 Οι τέσσερις βασικές ενεργειακές στάθμες του Nd:YAG Laser

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3. ΑΝΑΛΥΤΙΚΕΣ ΛΥΣΕΙΣ ΓΙΑ ΤΗ ΔΙΑΔΟΣΗ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ

3.1 ΑΝΟΠΤΗΣΗ ΥΛΙΚΩΝ ΚΑΙ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΗΣΗ ΜΕ LASER

Η τεχνική της ανάπτυξης διαδοχικών στρωμάτων σε υλικά έχει βελτιωθεί τα τελευταία χρόνια με μεθόδους που επιτρέπουν πάχος στρωμάτων μέχρι ατομική κλίμακα και ανάπτυξη στρωμάτων με σημαντικό έλεγχο παραμέτρων καθαρότητας, προσμείξεων, συνθηκών θερμοκρασίας κ.α. Μία κατηγορία που εξελίσσεται γοργά τα τελευταία χρόνια είναι αυτή της ανάπτυξης πολλαπλών στρωμάτων σε διηλεκτρικά με ημιαγωγούς και μεταλλικά στοιχεία για τη δημιουργία χρήσιμων διατάξεων όπως φωτοθερμικά ή και φωτοκαταλυτικά και φωτοβολταϊκά στοιχεία, όπως επίσης και χρήσιμες διατάξεις στην οπτική αποθήκευση και οπτική επεξεργασία πληροφορίας. Μία σημαντική κατηγορία ανάμεσα σε τέτοιες διατάξεις είναι με την ανάπτυξη νανοστρωμάτων μετάλλων με ξεχωριστές και εντυπωσιακές δυνατότητες. Αυτές οι διατάξεις εκμεταλλεύονται την δημιουργία επιφανειακών πλασματικών ταλαντώσεων στην αλληλεπίδρασή τους με το φως έτσι ώστε να καθίσταται δυνατή η επιλεκτική απορρόφηση του φωτός, ρυθμίζοντας κατάλληλα τη συμπεριφορά των επιφανειακών πλασμονίων.

3.2 ΑΝΑΛΥΤΙΚΕΣ ΛΥΣΕΙΣ ΚΑΤΑ ΜΗΚΟΣ (1D) ΤΗΣ ΑΝΟΠΤΗΣΗΣ ΠΟΛΛΑΠΛΩΝ ΣΤΡΩΜΑΤΩΝ ΕΝΑΛΛΑΞ ΥΛΙΚΩΝ (ΑΙΝ,Αg)

3.2.1 Με συνεχόμενη ακτινοβολή με Laser

Θεωρούμε την κάθετη πρόσπτωση του Laser να παρέχει ένα ποσό θερμότητας Watt/m^2 , με διάδοση της θερμότητας από την επιφάνεια A στο πάνω μέρος ($x=0$) και κατά μήκος του μικτού υλικού προς τα κάτω (αυξανόμενο x). Σε ότι αφορά τον θερμικό συντελεστή, k_{eff} , θεωρείται να είναι ένας ισοδύναμος «ζυγισμένος»(weighted average) συντελεστής, για τα ποσοστά των επι μέρους υλικών επί του συνολικού όγκου.

Υποθέσεις – παραδοχές:

α) Οι φυσικές παράμετροι στη διάδοση της θερμότητας, δηλαδή ο θερμικός συντελεστής k , η πυκνότητα ρ και η θερμοχωρητικότητα C_p θεωρούνται να είναι ανεξάρτητες από τις μεταβολές της θερμοκρασίας.

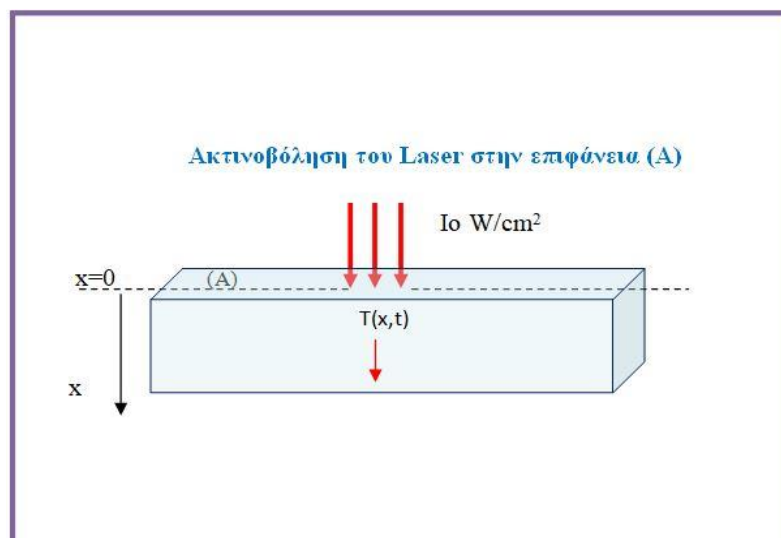
β) Η διάδοση της θερμότητας θεωρείται ότι γίνεται κατά μήκος της ανόπτωσης των υλικών, (διάδοση 1D), με αρχική θέση $x=0$ στο σημείο ακτινοβολήσης του Laser, και με πρώτο στρώμα υλικού το διηλεκτρικό ώστε να υπάρχει σχετική θερμική απομόνωση με το περιβάλλον και περιορισμένη ανάκλαση του φωτός του Laser.

γ) Το εύρος της διαμέτρου της ακτίνας του Laser (σε Gaussian type προφίλ) να είναι μεγαλύτερο από το μέγιστο συνολικό μήκος στην ανόπτωση των πολλαπλών στρωμάτων των υλικών.

δ) Ο χρόνος της οπτικής απορρόφησης θεωρείται να είναι αρκετά μικρός σε σχέση με τη διάρκεια ακτινοβολήσης είτε σε απλή ριπή είτε σε επαναλαμβανόμενες ριπές, έτσι ώστε να μην επηρεάζεται η μεταβολή της θερμοκρασίας από δυναμικά φαινόμενα σε περιγραφή 2^{ης} τάξης και άνω αλλά από μόνο από την (άμεση) οπτική απορρόφηση σαν δυναμική διαδικασία σε περιγραφή 1^{ης} τάξης.

Υιοθετείται έτσι η παρακάτω γεωμετρία :

Ημι-άπειρη λωρίδα κατά ένα μήκος x , με αξονική συμμετρία σε επίπεδο $y-z$, δηλαδή έχουμε ροή θερμότητας (heat flow) μόνο κατά 1 D.



Εικόνα 3.1 Γεωμετρία 1D για ακτινοβολήση με Laser και διάχυση της Θερμότητας

Για τη ροή της θερμότητας ισχύει η Διαφορική Εξίσωση (Δ.Ε),

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} \quad (3.1)$$

Όπου a ο συντελεστής διάχυσης με

$$\alpha = \frac{K_{eff}}{\rho_{eff} C_{p_{eff}}} \quad (3.2)$$

Οι όροι στην Δ.Ε που συμπεριλαμβάνουν συναγωγή και ακτινοβολία θερμότητας, μιας και έχει υπολογιστεί ως αμελητέα η επίδρασή τους στην επιφάνεια Α σε $x=0$, σε σχέση με τη διάδοση της θερμότητας κατά μήκος της διεύθυνσης x . (D.V. Bellas et al, 2017). Για την λύση της Δ.Ε. της σχέσης (E1) χρησιμοποιούνται 1) ο παρακάτω πίνακας τιμών των φυσικών θερμικών παραμέτρων για AlN και Ag και Si (E.D. Palik, 1998) και 2) οι παρακάτω αρχικές και συνοριακές συνθήκες:

1) Πίνακας θερμικών σταθερών

Υλικό	κ	ρ ($\times 10^3$ kg/m ³)	C_p (J/kgK)	K_{th} (W/mK)
AlN	0.19	3.26	740	10-285
Ag	1.18	10.49	235	429
Si	2.76	2.33	710	149

Πίνακας 3.1: Τιμές των φυσικών θερμικών παραμέτρων

2) Αρχικές και συνοριακές συνθήκες:

1^η συνθήκη: Για $t=0$, η αρχική θερμοκρασία κατά μήκος x λαμβάνεται ως

$$T(x, 0) = T_o \quad (3.3)$$

2^η συνθήκη: Στη θέση $x=x_o$, στο σημείο πρόσπτωσης του Laser, θεωρείται ότι ροή θερμότητας λόγω αγωγής είναι λόγω της θερμότητας που απορροφάται στη θέση $x=x_o$, δηλαδή:

$$-k \frac{\partial T}{\partial x} = Q_{in} + I(x_o)(1 - r)\delta(x_o) \quad (x = x_o) \quad (3.4a)$$

με $\delta(x_o)$ να είναι ο συντελεστής απορρόφησης στη θέση x και $I(x_o)$ να είναι η οπτική ένταση στη θέση x_o , εφόσον αφορά την επιφάνεια (ή διαχωριστική επιφάνεια) και δεν γίνεται οπτική εισχώρηση σε $x > x_o$, που σημαίνει ότι στην (διαχωριστική) επιφάνεια με $x=x_o$ η μεταβολή της θερμοκρασίας θα οφείλεται και στο ότι υπάρχει εξωτερική ροή θερμότητας Q_{in} δηλαδή από άλλη εξωτερική πηγή πέραν της πρόσπτωσης του φωτός Laser.

Όταν η πρόσπτωση του Laser γίνεται με διείσδυση εντός του υλικού και αυτό το στοιχείο λαμβάνεται υπόψη στη Δ.Ε. ως όρος για εξωτερική πηγή θερμότητας, τότε στην επιφάνεια $x=x_0$ θα είναι σε ισχύ η «συνοριακή» συνθήκη:

$$-k \frac{\partial T}{\partial x} = Q_{in} = I(x_0)(1-r)\delta(x_0) \quad (x = x_0) \quad (3.4b)$$

3^η συνθήκη: Στη θέση $x \rightarrow +\infty$ η θερμοκρασία T θα πρέπει να είναι άνω φραγμένη (πεπερασμένη), δηλαδή

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} T(x, t) \leq M, \quad M \in R - \{-\infty, +\infty\} \quad (3.5)$$

3.2.2 ΣΕΝΑΡΙΟ – Α:

1η περίπτωση: Συνεχόμενη σταθερή οπτική μετάδοση ενέργειας στη θέση $x=0$, χωρίς οπτική διείσδυση για $x>0$.

Για τη λύση της Δ.Ε ακολουθούνται τα εξής βήματα:

Αρχικά εφαρμόζεται ο μετασχηματισμός Laplace (Μ.Λ.) στη μεταβλητή του χρόνου, t , στα δύο μέρη της σχέσης (3.1) οπότε η νέα μορφή της εξίσωσης από το χώρο (x,t) στο χώρο (x,s) είναι:

$$\mathcal{L}_t \frac{\partial T}{\partial t} = a \mathcal{L}_t \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) \quad (3.6)$$

και χρησιμοποιώντας τις βασικές ιδιότητες του Μ.Λ που έχουν περιγραφεί ήδη στο ΚΕΦ.1, η μορφή της Δ.Ε γίνεται:

$$sU(x, s) - T(x, t = 0) = a \frac{d^2 U}{dx^2} \quad (3.7)$$

όπου η συνάρτηση $U(x, s)$ είναι ο Μ.Λ της $T(x, t)$ και είναι για $s>0$, $a>0$, $x \geq 0$, $t \geq 0$. Χρησιμοποιώντας, στην τελευταία σχέση (3.7), τη σχέση (3.3) για την 1^η συνθήκη, με αναδιάταξη των όρων εξάγεται ότι:

$$\frac{d^2 U}{dx^2} - \left(\frac{s}{a} \right) U = -\frac{T_0}{a} = V(s) \quad (3.8)$$

Η Δ.Ε στην σχέση (3.8) είναι Κ.Δ.Ε (Κανονική Διαφορική Εξίσωση) 2^{ης} τάξης με την αντίστοιχη ομογενή Δ.Ε. την:

$$\frac{d^2 U_h}{dx^2} - \left(\frac{s}{a}\right) U_h = 0 \quad (3.9)$$

η οποία έχει λύσεις της μορφής:

$$U_{homog}(x, s) = A(s)e^{+x\sqrt{\frac{s}{a}}} + B(s)e^{-x\sqrt{\frac{s}{a}}} \quad (3.10)$$

Η πλήρης λύση στη σχέση (3.8) θα είναι:

$$U(x, s) = U_{homog}(x, s) + U_{partial}(x, s) \quad (3.11)$$

όπου η $U_{partial}(x, s)$ είναι μερική λύση της Δ.Ε. στη σχέση (3.8).

Η ζητούμενη συνάρτηση $T(x, t)$ θα είναι ο Αντίστροφος Μετασχηματισμός Laplace για την $U(x, s)$, δηλαδή,

$$T(x, t) = \mathcal{L}_t^{-1} U(x, s) \quad (3.12)$$

Για τον προσδιορισμό των $A(s)$ και $B(s)$ στην ομογενή λύση χρησιμοποιούνται οι συνθήκες (1^η, 2^η και 3^η) που προαναφέρθηκαν. Από την 3^η συνθήκη, στη σχέση (3.5), εξάγεται ότι $A(s)=0$ μιας και ο όρος $A(s)e^{+x\sqrt{\frac{s}{a}}}$ με $x \rightarrow +\infty$ απειρίζεται ενώ θα πρέπει να έχει άνω φράγμα $M < \infty$.

Συνεπώς, η σχέση (3.11) με χρήση της σχέσης (3.10) δίνει:

$$U(x, s) = B(s)e^{-x\sqrt{\frac{s}{a}}} + U_{partial}(x, s) \quad (3.13)$$

Θεωρώντας ότι $u_1 = e^{gx}$ και $u_2 = e^{-gx}$, με $g = \sqrt{\frac{s}{a}}$ και $V(s) = -\frac{T_0}{a}$ για $x > 0$, η μερική λύση θα είναι:

$$U_{partial}(x, s) = e^{gx} * \left(- \int \frac{e^{-gz}V(s)}{W(z,s)} dz \right) + e^{-gx} * \left(\int \frac{e^{gz}V(s)}{W(z,s)} dz \right) \quad (3.14)$$

όπου η Wroskian ορίζουσα για τις συναρτήσεις u_1 και u_2 είναι:

$$W(x, s) = \begin{vmatrix} u_1 & u_2 \\ u_1' & u_2' \end{vmatrix} = u_1 u_2' - u_1' u_2 \quad (3.15)$$

Οπότε

$$W(x, s) = e^{gx}(-g)e^{-gx} - ge^{gx}e^{-gx} = -2g \quad (3.16)$$

και η μερική λύση $U_{partial}(x, s)$ είναι:

$$\begin{aligned} U_{partial}(x, s) &= e^{gx} * \left(- \int \frac{e^{-gz}V(s)}{(-2g)} dz \right) + e^{-gx} * \left(\int \frac{e^{gz}V(s)}{(-2g)} dz \right) = \frac{e^{gx}}{2g} * \\ &\left(\int e^{-gz} \left(-\frac{T_0}{a} \right) dz \right) - \frac{e^{-gx}}{2g} * \int e^{gz} \left(-\frac{T_0}{a} \right) dz = \frac{e^{gx}}{2g} * \left[\frac{T_0 e^{-gz}}{ga} \right] + \frac{e^{-gx}}{2g} * \left[\frac{T_0 e^{gz}}{ga} \right] = \frac{1}{2g} * \\ &\left(\frac{T_0}{ga} + \frac{T_0}{ga} \right) = \frac{T_0}{g^2 a} = \frac{T_0}{s} \end{aligned} \quad (3.17)$$

Η σχέση (3.13) με χρήση της σχέσης (3.17) δίνει:

$$U(x, s) = B(s) e^{-x \sqrt{\frac{s}{a}}} + \frac{T_0}{s} \quad (3.18)$$

Οπότε, χρησιμοποιώντας την ιδιότητα του Μ.Λ, όπως διατυπώθηκε στη Σχέση (1.54), προκύπτει ότι, θέτοντας $I_\varepsilon = I_0(1-r)$,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_t \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} &= \mathcal{L}_t \left\{ - \frac{\frac{dQ_{th.gen}(V)}{dt}}{k} \right\} \Big|_{x=0} \rightarrow \frac{\partial U(x,s)}{\partial x} \Big|_{x=0} = - \frac{\frac{dQ_{th.gen}(V)}{dt}}{sk} \Big|_{x=0} \rightarrow \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{x=0} = \\ &- \frac{I_\varepsilon \delta}{sk} \rightarrow \left(- \sqrt{\frac{s}{a}} B(s) \right) \Big|_{x=0} = - \frac{I_\varepsilon \delta}{sk} \rightarrow B(s) = \frac{I_\varepsilon \delta}{sk} \sqrt{\frac{a}{s}} \end{aligned} \quad (3.19)$$

Έτσι, η σχέση (3.18) γίνεται:

$$U(x, s) = \frac{I_\varepsilon \delta}{sk} \sqrt{\frac{a}{s}} e^{-x\sqrt{\frac{s}{a}}} + \frac{T_o}{s} \quad (3.20)$$

και με εφαρμογή του αντίστροφου Μετασχηματισμού Laplace δίνει:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_t^{-1}[sU(x, s) - T_o] &= \mathcal{L}_t^{-1}\left[\frac{\partial T(x, s)}{\partial t}\right] = \mathcal{L}_t^{-1}\left[s \frac{I_\varepsilon \delta}{ks} \sqrt{\frac{a}{s}} e^{-x\sqrt{\frac{s}{a}}} + s \frac{T_o}{s} - \right. \\ &\quad \left. T_o\right] = \frac{I_\varepsilon \delta \sqrt{a}}{k} \mathcal{L}_t^{-1}\left[\frac{e^{-x\sqrt{\frac{s}{a}}}}{\sqrt{s}}\right] \end{aligned} \quad (3.21)$$

ή αλλιώς

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{I_\varepsilon \delta \sqrt{a}}{k} \mathcal{L}_t^{-1}\left[\frac{e^{-x\sqrt{\frac{s}{a}}}}{\sqrt{s}}\right] \quad (3.22)$$

Από δω και πέρα με χρήση, από τον τύπο του αντίστροφου μετασχηματισμού Laplace της σχέσης (1.62), δηλαδή ότι:

$$\mathcal{L}_t^{-1}\left[\frac{e^{-m\sqrt{s}}}{\sqrt{s}}\right] = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} e^{-\frac{m^2}{4t}} \quad (3.23)$$

και κάνοντας αλλαγή μεταβλητής για

$$m = \frac{x}{\sqrt{a}} \quad (3.24)$$

η σχέση (3.22) δίνει:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{I_\varepsilon \delta \sqrt{a}}{k} \frac{1}{\sqrt{\pi t}} e^{-\frac{x^2}{4at}} \quad (3.25)$$

οπότε η λύση για την $T(x, t)$ θα είναι:

$$T(x, t) = \frac{I_\varepsilon \delta}{k} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \int_0^t \rho^{-1/2} e^{-\frac{x^2}{4a\rho}} d\rho + \Phi(x) \quad (3.26)$$

Στην τελευταία σχέση η $\Phi(x)$ προκύπτει ως σταθερά ολοκλήρωσης και είναι ανεξάρτητη του t . Επειδή για $T(x, t = 0)$ έχει θεωρηθεί ότι η αρχική θερμοκρασία είναι T_0 , είναι αποδεκτό να ισχύει ότι $\Phi(x) = T_0$, αφού το υπόλοιπο τμήμα στο ορισμένο ολοκλήρωμα από 0 έως t , μετά την ολοκλήρωση με όρια τα 0, t , θα δίνει την $f(t)-f(0)$ και με $t=0$, θα είναι $f(0)-f(0)=0$, η με άλλα λόγια:

$$T(x, 0) = 0 + \Phi(x) = T_0 \quad (3.27)$$

οπότε και

$$\Phi(x) = T_0 \quad (3.28)$$

Το τελευταίο ολοκλήρωμα στη σχέση (3.26), με το μετασχηματισμό μεταβλητών

$$z^2 = \frac{1}{\rho} \quad (\rho > 0) \text{ και } w^2 = \frac{x^2}{4a} \quad (3.29)$$

γίνεται:

$$T(x, t) = T_0 + \frac{I_{\varepsilon}\delta}{k} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \int_0^t z e^{-w^2 z^2} \left(-\frac{2}{z^3}\right) dz \quad (3.30)$$

και σε συνέχεια,

$$T(x, t) = T_0 - 2 \frac{I_{\varepsilon}\delta}{k} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \int_0^t z^{-2} e^{-w^2 z^2} dz \quad (3.31)$$

οπότε, έχοντας τη σχέση για το αόριστο ολοκλήρωμα

$$Iz = \int z^{-2} e^{-w^2 z^2} dz \quad (3.32)$$

εξάγεται η επόμενη σχέση, με ολοκλήρωση κατά παράγοντες,

$$Iz = \int \left(-\frac{1}{z}\right)' e^{-w^2 z^2} dz = -\frac{1}{z} e^{-w^2 z^2} - \int \left(-\frac{1}{z}\right)(-2w^2 z) e^{-w^2 z^2} dz \quad (3.33)$$

και στη συνέχεια,

$$T(x, t) = T_0 - 2 \frac{I_\varepsilon \delta}{k} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[-z^{-1} e^{-w^2 z^2} \right]_0^t + 2 \frac{I_\varepsilon \delta}{k} \sqrt{\frac{a}{\pi}} 2w \int_0^t e^{-w^2 z^2} d(wz) \quad (3.34)$$

Για τη χρήση των ορίων 0-t για το ρ , τίθεται:

$$\rho = \frac{1}{z^2} \text{ και } r = wz \quad (3.35)$$

οπότε,

$$T(x, t) = T_0 - 2 \frac{I_\varepsilon \delta}{k} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[-\sqrt{\rho} e^{-\frac{w^2}{\rho}} \right]_0^t + 2 \frac{I_\varepsilon \delta}{k} \sqrt{\frac{a}{\pi}} 2w \int_{r_1}^{r_2} e^{-r^2} dr \quad (3.36)$$

που δίνει:

$$T(x, t) = T_0 + 2 \frac{I_\varepsilon \delta}{k} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[\sqrt{t} e^{-\frac{w^2}{t}} - 0 \right] + 2 \frac{I_\varepsilon \delta}{k} \sqrt{\frac{a}{\pi}} 2w \int_{r_1}^{r_2} e^{-r^2} dr \quad (3.37)$$

Όσον αφορά για το ολοκλήρωμα:

$$I_r = \int_{r_1}^{r_2} e^{-r^2} dr \quad (3.38)$$

με τα όρια r_1 και r_2 είναι:

$$\rho_0^t \rightarrow z \sqrt{\frac{1}{t}} \rightarrow r \frac{w}{\sqrt{t}}, \quad \text{δηλαδή από } r_1 = \infty \text{ έως } r_2 = \frac{w}{\sqrt{t}} \quad (3.39)$$

και έτσι το I_r δίνει,

$$Ir = \int_{\infty}^{\frac{w}{\sqrt{t}}} e^{-r^2} dr = - \int_{\frac{w}{\sqrt{t}}}^{\infty} e^{-r^2} dr = - \left[\int_0^{\infty} e^{-r^2} dr - \int_0^{\frac{w}{\sqrt{t}}} e^{-r^2} dr \right] \quad (3.40)$$

Από την άλλη μεριά έχοντας ως βάση τον ορισμό της $\text{erf}(u)$ που είναι:

$$\text{erf}(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^u e^{-r^2} dr \quad (3.41)$$

η σχέση (3.37) δίνει:

$$T(x, t) = T_0 + 2 \frac{I_{\varepsilon} \delta}{k} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[\sqrt{t} e^{-\frac{w^2}{t}} \right] + 2 \frac{I_{\varepsilon} \delta}{k} \sqrt{\frac{a}{\pi}} w (-1) \left[\text{erf}(\infty) - \text{erf}\left(\frac{w}{\sqrt{t}}\right) \right] \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (3.42)$$

Όμως ισχύει ότι για την error function είναι: $\text{erf}(\infty) = 1$ και με το δεδομένο της σχέσης (3.29), ότι δηλαδή

$$w = \frac{x}{2\sqrt{a}}$$

θα είναι:

$$T(x, t) = T_0 + 2 \frac{I_{\varepsilon} \delta}{k} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[\sqrt{t} e^{-\frac{x^2}{4at}} \right] - 2 \frac{I_{\varepsilon} \delta}{k} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{x}{2\sqrt{a}} \left[1 - \text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right) \right] \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (3.43)$$

και τελικά,

$$T(x, t) = T_0 + 2 \frac{I_{\varepsilon} \delta}{k} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[\sqrt{t} e^{-\frac{x^2}{4at}} \right] - 2 \frac{I_{\varepsilon} \delta}{k} \left(\frac{x}{2}\right) \text{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right) \quad (3.44)$$

όπου η συνάρτηση $\text{erfc}(u)$ ορίζεται ως:

$$\text{erfc}(u) \equiv 1 - \text{erf}(u) \quad (3.45)$$

Τελικά, από τους παραπάνω υπολογισμούς προκύπτει ότι:

$$T(x, t) = T_0 + 2 \frac{I_{\varepsilon} \delta}{k} \left[\sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[\sqrt{t} e^{-\frac{x^2}{4at}} \right] - \left(\frac{x}{2}\right) \text{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right) \right] \quad (3.46)$$

3.2.3 ΣΕΝΑΡΙΟ - Α

2^η Περίπτωση: Οπτική μετάδοση θερμότητας με απλή ριπή του Laser διάρκειας τ_0

Η ροή θερμικής ισχύος ανά μονάδα επιφάνειας, $Q(t)$, λόγω της πρόσπτωσης του Laser στην επιφάνεια του πρώτου στρώματος μπορεί να παρασταθεί από την συνάρτηση:

$$I(t) = I_\varepsilon [u(t) - u(t - \tau_0)], \text{ με } t \geq 0, \quad (3.48)$$

Οι αρχικές και συνοριακές συνθήκες όπως και στην 1^η Περίπτωση του σεναρίου-Α, παραμένουν σε ισχύ, δηλαδή:

- i) για $t=0$, είναι $T(x,0)=T_0$, και
- ii) $-k \frac{\partial T}{\partial x}$ (για $x = 0$) = $I(t)$ Στην περίπτωση της πεπερασμένης διάρκειας του οπτικού παλμού, με θερμική ισχύ πρόσπτωσης I_0 και ισχύ διαθέσιμη για οπτική απορρόφηση στην επιφάνεια $I_\varepsilon = I_0(1 - r)\delta$ για διάρκεια τ_0 θα ισχύει ότι για θερμική ισχύ πρόσπτωσης $I(t)$ της σχέσης (3.48) θα δημιουργείται μία κατανομή $T(x, t)$ η οποία έχει, σύμφωνα και με τη σχέση (3.47) μια γραμμική εξάρτηση από την θερμική ισχύ $I = I_\varepsilon$. Επομένως, για τη θερμική ισχύ $I(t)$ της σχέσης (3.48) θα δημιουργείται η κατανομή $T(x, t)$ ως εξής:

$$T_{(2\eta-\text{περίπτωση})}(x, t) = T(x, t)u(t) - T(x, t - \tau_0)u(t - \tau_0) \quad (3.49)$$

και τελικά:

$$T(x, t) = \frac{2I_\varepsilon\delta}{k} \left[\sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[\sqrt{t} e^{-\frac{x^2}{4at}} \right] - \left(\frac{x}{2}\right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \right] u(t) - \frac{2I_\varepsilon\delta}{k} \left[\sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[\sqrt{t - \tau_0} e^{-\frac{x^2}{4a(t-\tau_0)}} \right] - \left(\frac{x}{2}\right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{a(t-\tau_0)}} \right) \right] u(t - \tau_0) \quad \text{ή σε}$$

άλλη μορφή:

$$T(x, t) = T_0 + \frac{2I_\varepsilon\delta}{k} \begin{cases} \left[\sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[\sqrt{t} e^{-\frac{x^2}{4at}} \right] - \left(\frac{x}{2}\right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \right] & t \leq \tau_0 \\ \left\{ \left[\sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[\sqrt{t} e^{-\frac{x^2}{4at}} \right] - \left(\frac{x}{2}\right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \right] - \left[\sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[\sqrt{(t - \tau_0)} e^{-\frac{x^2}{4a(t-\tau_0)}} \right] - \left(\frac{x}{2}\right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{a(t-\tau_0)}} \right) \right] \right\} & t > \tau_0 \end{cases} \quad (3.50)$$

3.2.4 ΣΕΝΑΡΙΟ - Β:

1η Περίπτωση: Η προσπίπτουσα συνεχόμενη σταθερή ακτινοβολία απορροφάται σε βάθος x , με συντελεστή απορρόφησης δ .

Η απορροφημένη ακτινοβολία δρα ως πηγή εσωτερικής θερμότητας (locally) και έτσι, η γενική μορφή της θερμικής ισχύος που δρα ως πηγή θερμικής ενέργειας είναι:

$$\frac{dQ_{th.gen(V)}}{dt} = I(x, t)\delta = I_o(1 - r) \delta e^{-\delta x} = I_\varepsilon \delta e^{-\delta x} \quad (3.51)$$

όπου το δ είναι ο «μέσος» συντελεστής απορρόφησης στο μήκος κύματος του Laser για το πολλαπλό στρώμα υλικών (διηλεκτρικό + ευγενές μέταλλο), και I_o είναι η ισχύς διείσδυσης στη θέση $x = 0$, ενώ το ποσοστό $\delta I_\varepsilon = \delta I_o(1 - r)$ είναι αυτό που στη θέση $x = 0$, αποτελεί την πηγή θερμότητας σε αυτή τη θέση.

Η Δ.Ε για την περίπτωση πηγής θερμότητας σε $x \geq 0$, είναι ως εξής:

$$(c_p \rho) \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} + I_\varepsilon(x, t) \quad (3.52)$$

και με τη σχέση:

$$\alpha = \frac{k}{c_p \rho} \quad (3.53)$$

η τελευταία σχέση (3.52) $\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} + \left(\frac{\alpha}{k}\right) I_\varepsilon(x, t)$ αναγράφεται ως:

$$(3.54)$$

Έχοντας πλέον τις συνοριακές συνθήκες (3.3) και (3.4b), και με την εφαρμογή του Μετασχηματισμού Laplace στον 2^ο όρο του 2^{ου} μέλους της τελευταίας σχέσης, (3.54), θα είναι:

$$I(x, s) = \int(Q(x, t) = \frac{I_o(1-r)\delta e^{-\delta x}}{s} \quad (3.55)$$

οπότε η νέα μορφή της Δ.Ε., σε χώρο μεταβλητών Laplace, θα είναι (με $I_\varepsilon = I_o(1 - r)$)

$$sU(x, s) - T(x, t = 0) = a \frac{d^2 U(x, s)}{dx^2} + \frac{a}{ks} I_\varepsilon \delta e^{-\delta x} \quad (3.56)$$

Θεωρώντας την αρχική Δ.Ε., στον χώρο (x, t) , είναι:

$$T(x, t = 0) = T(x) = T_o \quad (3.57)$$

Και με αναδιάταξη όρων η Δ.Ε. στο χώρο (domain) (x, s) είναι:

$$\frac{d^2 U}{dx^2} - \left(\frac{s}{a}\right) U = -\frac{T_o}{a} - \frac{I_\varepsilon \delta e^{-\delta x}}{ks} = V(s) = -\frac{T_o}{a} - V_o e^{-\delta x} \text{ με } V_o = \frac{I_\varepsilon \delta}{ks} \quad (3.58)$$

Η τελευταία μορφή της Δ.Ε. στο χώρο (x, s) είναι μη ομογενής Δ.Ε. 2^{ης} τάξης, με λύση για την αντίστοιχη ομογενή και μία μερική λύση, δηλαδή η λύση $U(x, s)$ στην σχέση (3.52) θα είναι της μορφής:

$$U(x, s) = A(s)e^{gx} + B(s)e^{-gx} + U_{\text{partial}}(x, s) \quad (3.59)$$

$$\text{με } g = \sqrt{\frac{s}{a}} \quad (3.60)$$

Χρησιμοποιώντας και εδώ τη συνοριακή συνθήκη iii) της σχέσης (3.5), συμπεραίνεται ότι είναι: $A(s) = 0$ (διότι δίνει εκθετική αύξηση για $x \rightarrow +\infty$). Έτσι, η γενική λύση της μπορεί να αποκτηθεί με χρήση της μεθόδου των μεταβλητών και της ορίζουσας Wronskian, για τις λύσεις της αντίστοιχης ομογενούς Δ.Ε. Θεωρώντας ότι $u_1 = e^{gx}$ και $u_2 = e^{-gx}$, η μερική λύση θα είναι:

$$U_{\text{partial}}(x, s) = e^{gx} * \left(- \int \frac{e^{-gz} V(s)}{W(z, s)} dz \right) + e^{-gx} * \left(\int \frac{e^{gz} V(s)}{W(z, s)} dz \right) \quad (3.61)$$

όπου η Wronskian ορίζουσα για τις συναρτήσεις u_1 και u_2 ορίζεται ότι είναι:

$$W(x, s) = \begin{vmatrix} u_1 & u_2 \\ u_1' & u_2' \end{vmatrix} = u_1 u_2' - u_1' u_2 \quad (3.62)$$

οπότε

$$W(x, s) = e^{gx}(-g)e^{-gx} - ge^{gx}e^{-gx} = -2g \quad (3.63)$$

και η μερική λύση $U_m(x, s)$ είναι:

$$\begin{aligned}
U_{\text{partial}}(x, s) &= e^{gx} * \left(- \int \frac{e^{-gz} V(s)}{(-2g)} dz \right) + e^{-gx} * \left(\int \frac{e^{gz} V(s)}{(-2g)} dz \right) = \frac{e^{gx}}{2g} * \left(\int e^{-gz} \left(-\frac{T_0}{a} - \right. \right. \\
&V_0 e^{-\delta z} \left. \left. dz \right) - \frac{e^{-gx}}{2g} * \int e^{gz} \left(-\frac{T_0}{a} - V_0 e^{-\delta z} \right) dz = \frac{e^{gx}}{2g} * \left[\frac{V_0}{(g+\delta)} e^{-(g+\delta)x} + \frac{T_0 e^{-gx}}{ga} \right] + \frac{e^{-gx}}{2g} * \\
&\left[\frac{V_0}{g-\delta} e^{(g-\delta)x} + \frac{T_0 e^{gx}}{ga} \right] = \frac{1}{2g} * \left(\left(\frac{V_0 e^{-\delta x}}{g+\delta} \right) + \frac{T_0}{ga} + \left(\frac{V_0 e^{-\delta x}}{g-\delta} \right) + \frac{T_0}{ga} \right) == \frac{V_0}{2g} * e^{-\delta x} * \frac{2g}{g^2 - \delta^2} + \\
&\frac{T_0}{g^2 a} = \frac{V_0 * e^{-\delta x}}{g^2 - \delta^2} + \frac{T_0}{g^2 a} = \frac{I_\varepsilon \delta e^{-\delta x}}{ks \left(\frac{s}{a} - \delta^2 \right)} + \frac{T_0}{g^2 a} = \frac{I_\varepsilon a \delta}{ks(s - a \delta^2)} e^{-\delta x} + \frac{T_0}{s} \quad (3.64)
\end{aligned}$$

$$\text{αφού } V_0 = \frac{I_\varepsilon \delta}{ks} \text{ και } g = \sqrt{\frac{s}{a}}$$

Δηλαδή,

$$U_{\text{partial}}(x, s) = \frac{I_\varepsilon a \delta}{ks(s - a \delta^2)} e^{-\delta x} + \frac{T_0}{s} \quad (3.65)$$

Τελικά, η λύση για Δ.Ε ως προς (x,s) είναι της μορφής:

$$\begin{aligned}
U(x, s) &= B(s) e^{-x \sqrt{\frac{s}{a}}} + U_{\text{partial}}(x, s) \Rightarrow \\
U(x, s) &= B(s) e^{-x \sqrt{\frac{s}{a}}} + \frac{I_\varepsilon a \delta}{ks(s - a \delta^2)} e^{-\delta x} + \frac{T_0}{s} \quad (3.66)
\end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας την 3^η συνθήκη με τη σχέση (3.4b) έχουμε ότι:

$$\left[\frac{dU(x, s)}{dx} \right]_{x=0} = \mathcal{L}_t \left[\frac{\partial T}{\partial x} \right]_{x=0} = 0 \quad (3.67)$$

Οπότε:

$$-\sqrt{\frac{s}{a}} B(s) - \frac{I_\varepsilon a \delta^2}{ks(s - a \delta^2)} = 0 \quad (3.68)$$

Και λύνοντας ως προς $B(s)$ έχουμε:

$$-\sqrt{\frac{s}{a}} B(s) = + \frac{I_\varepsilon a \delta^2}{ks(s - a \delta^2)} \Rightarrow B(s) = - \frac{I_\varepsilon \delta^2}{\sqrt{\frac{s}{a}} ks \left(\frac{s}{a} - \delta^2 \right)} \quad (3.69)$$

και έτσι θα είναι:

$$U(x, s) = - \frac{I_\varepsilon \delta^2}{\sqrt{\frac{s}{a}} ks \left(\frac{s}{a} - \delta^2 \right)} e^{-\sqrt{\frac{s}{a}} x} + \frac{I_\varepsilon a \delta}{ks(s - a \delta^2)} e^{-\delta x} + \frac{T_0}{s} \quad (3.70)$$

και τελικά,

$$T(x, t) = T_0 + \mathcal{L}_t^{-1} [R(x, s) + G(x, s)] \quad (3.71)$$

όπου

$$R(x, s) = -C_1 \left[\frac{e^{-\frac{x\sqrt{s}}{\sqrt{a}}}}{\sqrt{s}(s-a\delta^2)} \right] \quad (3.72)$$

με

$$C_1 = \left[\frac{I_\varepsilon a \sqrt{a} \delta^2}{k} \right] \quad (3.73)$$

και

$$G(x, s) = C_2 \left[\frac{e^{-\delta x}}{s(s-a\delta^2)} \right] \quad (3.74)$$

με

$$C_2 = \left[\frac{I_\varepsilon a \delta}{k} \right] \quad (3.75)$$

Έτσι, η σχέση (3.71) οδηγεί στην παρακάτω:

$$T(x, t) = -C_1 \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{1}{s(s-a\delta^2)} \right] * \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-\frac{x\sqrt{s}}{\sqrt{a}}}}{\sqrt{s}} \right] + C_2 e^{-\delta x} \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{1}{s(s-a\delta^2)} \right] + T_o \quad (3.76)$$

Όπου το σύμβολο * υποδηλώνει «συνέλιξη» των δύο συναρτήσεων ως προς χρόνο.

Σε συνέχεια της σχέσης (3.76), η συνάρτηση $T(x, t)$ θα είναι:

$$T(x, t) = -C_1 \left(\mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{1}{s} \right] * \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{1}{s-a\delta^2} \right] \right) * \left(\mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-\frac{x\sqrt{s}}{\sqrt{a}}}}{\sqrt{s}} \right] \right) + C_2 e^{-\delta x} \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{1}{s} \right] * \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{1}{s-a\delta^2} \right] + T_o \quad (3.77)$$

και σε πιο «συμπυκνωμένη» μορφή είναι:

$$T(x, t) = -C_1 Y(t) + C_2 e^{-\delta x} G(t) + T_o \quad (3.78)$$

όπου $Y(t) = G(t) * Q(t)$ είναι η «συνέλιξη» των $G(t) = \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{1}{s} \right] * \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{1}{s-a\delta^2} \right]$ και

$$Q(t) = \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-\frac{x\sqrt{s}}{\sqrt{a}}}}{\sqrt{s}} \right]$$

Όμως, για την $G(t)$ θα είναι:

$$G(t) = \int_0^t 1 e^{\alpha\delta^2(t-r)} dr = -\frac{e^{\alpha\delta^2 t}}{\alpha\delta^2} [e^{-\alpha\delta^2 r}]_0^t = -\frac{e^{\alpha\delta^2 t}}{\alpha\delta^2} [e^{-\alpha\delta^2 t} - 1] = \frac{[e^{\alpha\delta^2 t} - 1]}{\alpha\delta^2} \quad (3.79)$$

Η συνέλιξη της $G(t)$, με την συνάρτηση που προκύπτει από τη «συνέλιξη» των $Q(t) =$

$$\mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-\frac{x\sqrt{s}}{\sqrt{a}}}}{\sqrt{s}} \right] \text{ που είναι, σύμφωνα με τη σχέση (1.60), για } m = \frac{x}{\sqrt{a}},$$

$$Q(t) = \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-\frac{x\sqrt{s}}{\sqrt{a}}}}{\sqrt{s}} \right] = \frac{e^{-\frac{x^2}{4at}}}{\sqrt{\pi t}} \quad (3.80)$$

και έτσι δίνει:

$$Y(t) = Q(t) * G(t) = \frac{1}{\alpha\delta^2\sqrt{\pi}} \int_0^t (e^{\alpha\delta^2(t-r)} - 1) e^{-\frac{x^2}{4ar}} (r^{-\frac{1}{2}}) dr = \frac{e^{\alpha\delta^2 t}}{\alpha\delta^2\sqrt{\pi}} \int_0^t (e^{-\alpha\delta^2 r} e^{-\frac{x^2}{4ar}}) (r^{-\frac{1}{2}}) dr - \frac{1}{\alpha\delta^2\sqrt{\pi}} \int_0^t (e^{-\frac{x^2}{4ar}}) (r^{-\frac{1}{2}}) dr \quad (3.81)$$

Ο πρώτος όρος της $Y(t)$, ο $Y_1(t)$ είναι:

$$Y_1(t) = \frac{e^{\alpha\delta^2 t}}{\alpha\delta^2\sqrt{\pi}} \int_0^t (e^{-\alpha\delta^2 r} e^{-\frac{x^2}{4ar}}) (r^{-\frac{1}{2}}) dr \quad (3.81a)$$

ενώ ο δεύτερος όρος της $Y(t)$, ο $Y_2(t)$ είναι:

$$Y_2(t) = -\frac{1}{\alpha\delta^2\sqrt{\pi}} \int_0^t (e^{-\frac{x^2}{4ar}}) (r^{-\frac{1}{2}}) dr \quad (3.81b)$$

Χρησιμοποιώντας τον μετασχηματισμό μεταβλητών

$$v = \sqrt{r} \quad (3.82)$$

και με τη σχέση

$$dv = \frac{1}{2} r^{-\frac{1}{2}} dr \rightarrow r^{-\frac{1}{2}} dr = 2dv \quad (3.83)$$

ο όρος $Y_1(t)$ γίνεται:

$$Y_1(t) = 2C_A \int_0^{\sqrt{t}} (e^{-\alpha\delta^2 v^2} e^{-\frac{x^2}{4av^2}}) dv \quad (3.84)$$

όπου

$$C_A = \frac{e^{\alpha\delta^2 t}}{\alpha\delta^2\sqrt{\pi}} \quad (3.85)$$

Θεωρώντας τον μετασχηματισμό μεταβλητών:

$$u = \delta\sqrt{a}v - \frac{x}{2\sqrt{a}v} \quad (3.86)$$

θα είναι:

$$vu = \delta\sqrt{a} - \frac{x}{2\sqrt{a}} \Rightarrow \delta\sqrt{a}v^2 - u - \frac{x}{2\sqrt{a}} = 0 \quad (3.87)$$

και με επίλυση της δευτεροβάθμιας εξίσωσης που προκύπτει από τη σχέση (3.86), πολλαπλασιάζοντας τα μέλη με v , εξάγεται ότι:

$$v = \frac{u}{2\delta\sqrt{a}} + \frac{\sqrt{u^2+2\delta x}}{2\delta\sqrt{a}} \quad (3.88)$$

όπου γίνεται δεκτή μόνο η λύση με το (+) για να είναι $v \geq 0$.

Σε συνέχεια, θα είναι:

$$dv = \frac{1}{2\delta\sqrt{a}} du + \frac{1}{2\delta\sqrt{a}} \frac{u}{\sqrt{u^2+2\delta x}} du \quad (3.89)$$

Τα νέα όρια ολοκλήρωσης θα είναι:

Για $v \rightarrow 0$ $u \rightarrow -\infty$

Για $v \rightarrow \sqrt{t}$ $u \rightarrow \delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}}$

και έτσι, το ολοκλήρωμα της σχέσης (3.84) γίνεται:

$$Y1(t) = 2e^{-\delta x} C_A \int_{-\infty}^{\delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}}} \frac{1}{2\delta\sqrt{a}} du e^{-u^2} + 2e^{-\delta x} C_A \int_{-\infty}^{\delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}}} \frac{1}{2\delta\sqrt{a}} \frac{u}{\sqrt{u^2+2\delta x}} e^{-u^2} du \quad (3.90)$$

όπου χρησιμοποιήθηκε, σύμφωνα με το μετασχηματισμό μεταβλητών στη σχέση (3.86), η σχέση:

$$-\left(\delta^2 a v^2 + \frac{x^2}{4a v^2}\right) = -(u^2 + \delta x) = -\delta x - u^2 \quad (3.91)$$

Ο πρώτος όρος του $Y1(t)$ δίνει:

$$Y1A(t) = 2e^{-\delta x} C_A \int_{-\infty}^{\delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}}} \left(\frac{1}{2\delta\sqrt{a}} du e^{-u^2} \right) =$$

$$\sqrt{\pi} e^{-\delta x} C_A \frac{1}{2\delta\sqrt{a}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}}} (du e^{-u^2}) \quad (3.92)$$

Για το ολοκλήρωμα της τελευταίας σχέσης (3.92) είναι:

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}}} e^{-u^2} du = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 e^{-u^2} du + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}}} e^{-u^2} du = (\alpha\phi\acute{o}\upsilon e^{-u^2} \acute{\alpha}\rho\tau\iota\alpha) =$$

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-u^2} du + erf\left(\delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}}\right) = 1 + erf\left(\delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}}\right) = 1 + [1 -$$

$$erfc\left(\delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}}\right)] = 2 - erfc\left(\delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}}\right) \quad (3.93)$$

Έτσι, τελευταία σχέση δίνει:

$$Y1A(t) =$$

$$= \sqrt{\pi} e^{-\delta x} C_A \frac{1}{2\delta\sqrt{a}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}}} (du e^{-u^2}) = \frac{\sqrt{\pi}}{2\delta\sqrt{a}} e^{-\delta x} C_A (2 - erfc\left(\delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}}\right)) \quad (3.94)$$

ενώ ο δεύτερος όρος του Y1(t) είναι:

$$Y1B(t) = 2e^{-\delta x} C_A \frac{1}{2\delta\sqrt{a}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}}} \frac{1}{2\delta\sqrt{a}} \frac{u}{\sqrt{u^2 + 2\delta x}} e^{-u^2} du \quad (3.95)$$

και με το μετασχηματισμό μεταβλητών:

$$\sqrt{u^2 + 2\delta x} = m \Rightarrow u^2 + 2\delta x = m^2 \Rightarrow 2udu = 2mdm \Rightarrow udu = mdm \quad (3.96)$$

και τα νέα όρια της ολοκλήρωσης για το m είναι:

$$v \rightarrow \sqrt{t} \quad u \rightarrow \delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}} \quad m \rightarrow \sqrt{u^2 + 2\delta x} = \sqrt{\left(\delta\sqrt{at} + \frac{x}{2\sqrt{at}}\right)^2} = \delta\sqrt{at} + \frac{x}{2\sqrt{at}}$$

$$v \rightarrow 0 \quad u \rightarrow -\infty \quad m \rightarrow +\infty$$

οπότε ο όρος Y1B(t) μέσω της σχέσης (3.96), θα είναι:

$$Y1B(t) =$$

$$2e^{-\delta x} C_A \int_{-\infty}^{\delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}}} \frac{1}{2\delta\sqrt{a}} \frac{m}{\sqrt{m^2}} e^{-(m^2 - 2\delta x)} du = e^{-\delta x} C_A \frac{1}{\delta\sqrt{a}} \int_{+\infty}^{\delta\sqrt{at} + \frac{x}{2\sqrt{at}}} \frac{mdm}{m} e^{-(m^2 - 2\delta x)} =$$

$$C_A e^{+\delta x} \frac{1}{\delta\sqrt{a}} \int_{+\infty}^{\delta\sqrt{at} + \frac{x}{2\sqrt{at}}} dm e^{-m^2} = -C_A e^{+\delta x} \frac{1}{\delta\sqrt{a}} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \right) \int_{\delta\sqrt{at} + \frac{x}{2\sqrt{at}}}^{+\infty} e^{-m^2} dm \quad (3.97)$$

όπου, στην τελευταία σχέση, πολλαπλασιάζεται και διαιρείται ο όρος $\frac{2}{\sqrt{\pi}}$ για να «εμφανιστεί» με το ολοκλήρωμα στην μορφή $\text{erf}(\dots)$, καθώς και μία εναλλαγή των ορίων ολοκλήρωσης με ταυτόχρονη εναλλαγή του προσήμου. Έτσι η τελευταία σχέση (3.97) δίνει:

$$Y1B(t) = -C_A e^{+\delta x} \frac{1}{\delta\sqrt{a}} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} \right) \text{erfc} \left(\delta\sqrt{at} + \frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \quad (3.98)$$

οπότε τελικά,

$$\begin{aligned} Y1(t) &= Y1A(t) + Y1B(t) = \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{2\delta\sqrt{a}} e^{-\delta x} C_A \left[2 - \text{erfc} \left(\delta\sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \right] - \frac{\sqrt{\pi}}{2\delta\sqrt{a}} e^{+\delta x} C_A \left[\text{erfc} \left(\delta\sqrt{at} + \frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.99)$$

Ο δεύτερος όρος της $Y(t)$ στην τελευταία σχέση (3.81b) είναι όπως έχει ήδη αναφερθεί,

$$Y2(t) = -\frac{1}{a\delta^2\sqrt{\pi}} \int_0^t \left(e^{-\frac{x^2}{4ar}} \right) (r^{-\frac{1}{2}}) dr \quad (3.100)$$

Για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος αυτού χρησιμοποιείται ο μετασχηματισμός μεταβλητής:

$$v^2 = \frac{1}{r} \rightarrow 2v dv = -\frac{1}{r^2} dr = -v^4 dr \rightarrow dr = -2v^{-3} dv \quad (3.101)$$

και με νέα όρια

$$r \rightarrow 0 \quad v \rightarrow \infty$$

$$r \rightarrow t \quad v \rightarrow \frac{1}{\sqrt{t}}$$

οπότε η σχέση (3.100) γίνεται:

$$\begin{aligned} Y2(t) &= -\frac{1}{a\delta^2\sqrt{\pi}} \int_{\infty}^{\frac{1}{\sqrt{t}}} \left(e^{-\frac{x^2 v^2}{4a}} \right) v (-2v^{-3}) dv = \frac{+2}{a\delta^2\sqrt{\pi}} \int_{\infty}^{\frac{1}{\sqrt{t}}} e^{-\frac{x^2 v^2}{4a}} v^{-2} dv = \\ &= \frac{+2}{a\delta^2\sqrt{\pi}} \int_{\infty}^{\frac{1}{\sqrt{t}}} e^{-\frac{x^2 v^2}{4a}} \left(-\frac{1}{v} \right)' dv = \frac{+2}{a\delta^2\sqrt{\pi}} \left[\left(-\frac{1}{v} \right) e^{-\frac{x^2 v^2}{4a}} \right]_{\infty}^{\frac{1}{\sqrt{t}}} + \frac{+2}{a\delta^2\sqrt{\pi}} \int_{\infty}^{\frac{1}{\sqrt{t}}} \left(\frac{1}{v} \right) e^{-\frac{x^2 v^2}{4a}} \left(-\frac{vx^2}{2a} \right) dv = \\ &= \frac{+2}{a\delta^2\sqrt{\pi}} \left[\left(-\sqrt{t} \right) e^{-\frac{x^2}{4at}} \right] - \frac{+2}{a\delta^2\sqrt{\pi}} \frac{x}{\sqrt{a}} \int_{\infty}^{\frac{x}{2\sqrt{at}}} e^{-q^2} dq \end{aligned} \quad (3.102)$$

όπου χρησιμοποιήθηκε ο μετασχηματισμός :

$$q = \frac{x}{2\sqrt{a}}v$$

Τελικά,

$$Y_2(t) = \frac{+2}{a\delta^2\sqrt{\pi}} \left[(-\sqrt{t})e^{-\frac{x^2}{4at}} \right] + \frac{x}{\alpha\sqrt{a}\delta^2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{x}{2\sqrt{at}}}^{\infty} e^{-q^2} dq = -\frac{2\sqrt{t}}{a\delta^2\sqrt{\pi}} \left[e^{-\frac{x^2}{4at}} \right] +$$

$$\frac{x}{\alpha\sqrt{a}\delta^2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right) = -\frac{2\sqrt{t}}{a\delta^2} \left[\frac{e^{-\frac{x^2}{4at}}}{\sqrt{\pi}} - \frac{x}{2\sqrt{at}} \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \right] = -\frac{2\sqrt{at}}{\alpha\sqrt{a}\delta^2} \operatorname{ierfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right)$$

(3.103)

όπου η συνάρτηση $\operatorname{ierfc}(u)$ ορίζεται ως:

$$\operatorname{ierfc}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} - x \operatorname{erfc}(x) \quad (3.104)$$

και τελικά, θα είναι:

$$T_{(B-1\eta \text{ περίπτωση})}(x, t) = [-C_1 Y(t)] + [C_2 e^{-\delta x} G(t)] + T_o =$$

$$-\left(\frac{I_\varepsilon \alpha \sqrt{a} \delta^2}{k} \right) e^{-\delta x} \frac{e^{\alpha \delta^2 t}}{\alpha \delta^2 \sqrt{\pi}} \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2\delta \sqrt{a}} \left(2 - \operatorname{erfc} \left(\delta \sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \right) - \frac{\sqrt{\pi}}{2\delta \sqrt{a}} e^{+\delta x} \frac{e^{\alpha \delta^2 t}}{\alpha \delta^2 \sqrt{\pi}} \left(\operatorname{erfc} \left(\delta \sqrt{at} + \frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \right) \right] - \left(\frac{I_\varepsilon \alpha \sqrt{a} \delta^2}{k} \right) \left[-\frac{2\sqrt{at}}{\alpha \sqrt{a} \delta^2} \operatorname{ierfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \right] + \left[\left(\frac{I_\varepsilon \alpha \delta}{k} \right) \frac{e^{\alpha \delta^2 t} - 1}{a \delta^2} \right] e^{-\delta x} + T_o =$$

$$\frac{I_\varepsilon \delta}{k} \left\{ \left[(2\sqrt{at}) \operatorname{ierfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \right] + \left(\frac{1}{2\delta} \right) \left[e^{\alpha \delta^2 t - \delta x} \left[\operatorname{erfc} \left(\delta \sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \right] + e^{\alpha \delta^2 t + \delta x} \left[\operatorname{erfc} \left(\delta \sqrt{at} + \frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \right] \right] \right\} - \frac{I_\varepsilon}{k \delta} e^{\alpha \delta^2 t - \delta x} + \left[\left(\frac{I_\varepsilon \alpha \delta}{k} \right) \frac{e^{\alpha \delta^2 t} - 1}{a \delta^2} \right] e^{-\delta x} + T_o$$

(3.105)

Τελικά,

$$T(x, t) = T_o + \frac{I_\varepsilon}{k} \left[\begin{array}{l} 2\delta \sqrt{at} \operatorname{ierfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right) - \left(\frac{1}{\delta} \right) e^{-\delta x} \\ + \left(\frac{1}{2\delta} \right) e^{\alpha \delta^2 t + \delta x} \operatorname{erfc} \left(\delta \sqrt{at} + \frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \\ + \left(\frac{1}{2\delta} \right) e^{\alpha \delta^2 t - \delta x} \operatorname{erfc} \left(\delta \sqrt{at} - \frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \end{array} \right] \quad (3.106)$$

B-2η Περίπτωση: Με ένα παλμό Laser, διάρκειας τ_0 .

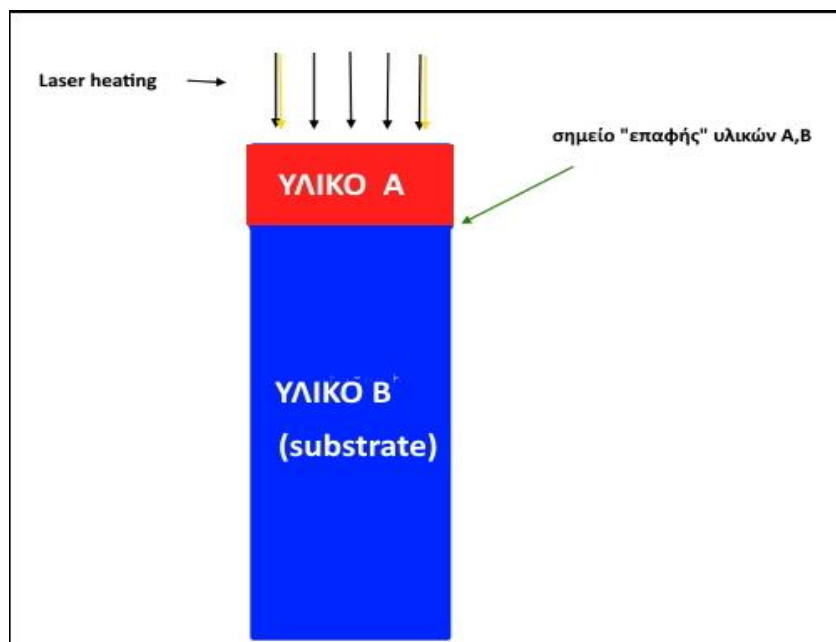
Σύμφωνα με τα προηγούμενα (Σενάριο –B, 1^η περίπτωση) θα είναι:

$$T(x, t) = u(t)T_{(B-1\eta)}(x, t) - u(t - \tau_0)T_{(B-1\eta)}(x, t - \tau_0) \quad (3.107)$$

3.3 ΣΕΝΑΡΙΟ – Γ:

Θέρμανση, με Laser, δύο διαδοχικών στρωμάτων με απορρόφηση οπτικής ενέργειας κατά μήκος των στρωμάτων.

Η περίπτωση του ημιάπειρου στερεού σώματος σε 1D είναι κάτι που δεν συναντάται συχνά σε τεχνολογικές εφαρμογές. Πιο συχνές περιπτώσεις είναι αυτές που πολλά λεπτά στρώματα (thin films) υλικών συνδυάζονται με υλικά σαν υπόβαθρο (substrates) με ίδιο ή διαφορετικό υλικό. Στην περίπτωση που περιγράφεται ένα στρώμα υλικού πάνω σε ένα άλλο υλικό που λειτουργεί ως υπόβαθρο, η περιγραφή είναι μια πιο ρεαλιστική κατάσταση από ότι για ένα μόνο ομογενές υλικό. Δηλαδή, σχηματικά :



Εικόνα 3.2 Δύο διαδοχικά στρώματα υλικών

Διάφορα μοντέλα έχουν αναπτυχθεί για να περιγράψουν την αγωγή θερμότητας σε τέτοιες περιπτώσεις (El-Adawi et al, 1995). Οι βασικές παραδοχές που υιοθετούνται από τέτοια μοντέλα περιγραφής, είναι ότι

- i) Η αρχική θερμοκρασία (T_0) των υλικών είναι η θερμοκρασία του περιβάλλοντος 300K. Στο σημείο «επαφής» των δύο στρωμάτων, σε απόσταση L από την κορυφή του πρώτου στρώματος, με την «οπτική» ενέργεια να προσπίπτει στο σημείο $x=0$, του πρώτου στρώματος, θα πρέπει να ισχύει ότι:

$$\lim_{x \rightarrow L^-} T(x, t) = \lim_{x \rightarrow L^+} T(x, t) \quad (3.108)$$

- ii) Στο όριο $x \rightarrow +\infty$ θα πρέπει η $T(x, t)$ να είναι άνω φραγμένη (πεπερασμένη), δηλαδή θα πρέπει να είναι:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} T(x, t) < M, \quad M \in R, \quad M > 0 \quad (3.109)$$

- iii) το κάθε υλικό να έχει σταθερό και ομογενή συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας, ειδικής θερμότητας και πυκνότητας.

Έτσι, στην περίπτωση αυτή, μία πηγή θέρμανσης, όπως υπεριώδες φως Laser, προσπίπτει στην επιφάνεια στο υλικό A ($x=0$). Ανάλογα με το βάθος x της οπτικής διείσδυσης στο πρώτο υλικό A ή και παραπέρα διείσδυσης στο δεύτερο υλικό B, όπου θα είναι $x \geq L$, θα υπάρχουν και οι αντίστοιχες περιπτώσεις περιγραφής με χρήση της αντίστοιχης Δ.Ε. για τη διάδοση της θερμότητας κατά μήκος x . Έτσι, διακρίνονται και περιγράφονται ξεχωριστά οι τρεις διακριτές περιπτώσεις, σε σχέση με το «μέγιστο βάθος» διείσδυσης X_{\max} της οπτικής δέσμης:

1^η περίπτωση

Το «μέγιστο βάθος» X_{\max} να είναι εντός του πρώτου μόνο υλικού. (Δηλαδή $X_{\max} < L$)

2η περίπτωση

Το «μέγιστο βάθος» X_{\max} να φθάνει μέχρι το σημείο «επαφής» ($X_{\max} = L$) των δύο υλικών.

3^η περίπτωση:

Το «μέγιστο βάθος» X_{\max} να εκτείνεται εντός και του δεύτερου υλικού B, ($X_{\max} > L$)

Έτσι, αναλυτικά, στη γενική περίπτωση θα είναι:

3.3.1 Περίπτωση 1^η: 2^η Κατανομή T(x,t) για x<<L

Στην περίπτωση αυτή, η δέσμη Laser εισχωρεί σε «βάθος» x<=L και η κατανομή θερμοκρασίας στο υλικό A, η T_A(x, t) ως περιγράφεται και στη σχέση (3.105)

Δηλαδή,

$$T_A(x, t) = T_0 + \frac{I_E}{k} \left[\begin{aligned} & 2\delta\sqrt{at} \operatorname{ierfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right) - \left(\frac{1}{\delta}\right) e^{-\delta x} \\ & + \left(\frac{1}{2\delta}\right) e^{\alpha\delta^2 t + \delta x} \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\delta^2 at + \frac{x^2}{4at}}\right) \\ & + \left(\frac{1}{2\delta}\right) e^{\alpha\delta^2 t - \delta x} \operatorname{erfc}\left(\delta\sqrt{at} - \frac{x}{\sqrt{at}}\right) \end{aligned} \right] \quad (3.108)$$

που ισχύει για x<=L. Η ένταση της οπτικής δέσης θα εισχωρεί σε σημαντική τιμή έως ένα βάθος στο υλικό B, και θα ισχύει :

$$T_B(x - L, t) = T_0 \quad t \geq 0 \quad (3.109)$$

αφού οι επαγόμενες, λόγω του Laser, μεταβολές στην θερμοκρασία στο υλικό A, δεν «φθάνουν» ποτέ στο B και επομένως και στο «σύνορο» (x=L). Θα μπορούσε να επηρεαστεί η θερμοκρασία στο B μόνο αν ο χρόνος έκθεσης του A στην οπτική ενέργεια ήταν αρκετά μεγάλος σε σχέση με τη διάρκεια μιας απλής ριπής του Laser. Έτσι, για το B δεν θα δημιουργείται καμία ουσιαστική μεταβολή στην αρχική του θερμοκρασία, την T₀.

3.3.2 Περίπτωση 3: Κατανομή T(x,t) για X>=L

Στην περίπτωση αυτή, η δέσμη Laser εισχωρεί σε «βάθος» x και η κατανομή θερμοκρασίας στο υλικό A, η T_A(x, t) περιγράφεται όμοια όπως στη σχέση (3.105).

Δηλαδή,

$$T_A(x, t) = T_0 + \frac{I_E}{k_1} \left[\begin{aligned} & 2\delta_1\sqrt{a_1 t} \operatorname{ierfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{a_1 t}}\right) - \left(\frac{1}{\delta_1}\right) e^{-\delta_1 x} \\ & + \left(\frac{1}{2\delta_1}\right) e^{a_1\delta_1^2 t + \delta_1 x} \operatorname{erfc}\left(\delta_1\sqrt{a_1 t} + \frac{x}{\sqrt{a_1 t}}\right) \\ & + \left(\frac{1}{2\delta_1}\right) e^{a_1\delta_1^2 t - \delta_1 x} \operatorname{erfc}\left(\delta_1\sqrt{a_1 t} - \frac{x}{\sqrt{a_1 t}}\right) \end{aligned} \right] \quad (3.110)$$

που ισχύει για L και k_1 , δ_1 και a_1 οι θερμικές σταθερές (συντελεστής θερμικής αγωγής, συντελεστής απορρόφησης, συντελεστής διάχυσης αντίστοιχα) για το υλικό A.

Για το υλικό B, θα έχουμε την ίδια Δ.Ε. που περιγράφει τη θερμοκρασία σύμφωνα με το «Σενάριο A – 1^η περίπτωση» (σχέση 3.8), όπου όμως η εξωτερική «πηγή» θερμότητας, Q_{in} , θα λαμβάνεται στο σημείο, σε σχέση με τη συνοριακή συνθήκη (3.4b), ως:

$$Q_{in} = I_L \delta_2 = I_0(1 - r)\delta_2 e^{-\delta_1 L}$$

και έτσι, στο χώρο Laplace, η σχέση για την κατανομή $U_B(x - L, s)$ θα είναι, σύμφωνα και με τη σχέση:

$$U(x, s) = U_B(x - L, s) = D(s)e^{-\frac{(x-L)\sqrt{s}}{\sqrt{a_2}}} + \frac{I_L a_2 \delta_2}{k_2 s (s - \alpha_2 \delta_2^2)} e^{-\delta_2(x-L)} + \frac{T_0}{s}$$

όπου

$$I_L = I_0(1 - r)e^{-\delta_1 L} \quad (3.111)$$

δηλαδή η οπτική ένταση που έχει διεισδύσει μέσω του υλικού A σε βάθος L .

Στη θέση $x \sim L$, θα ισχύει η παρακάτω συνοριακή συνθήκη:

$$T_B(x - L, t) = T_A(x, t) \Big|_{x=L}$$

και στο «χώρο Laplace» θα είναι:

$$D(s) + \frac{I_L a_2 \delta_2}{k_2 s (s - \alpha_2 \delta_2^2)} + \frac{T_0}{s} = B(s)e^{-L\sqrt{\frac{s}{a_1}}} + \frac{I_\varepsilon a_1 \delta_1}{k_1 s (s - \alpha_1 \delta_1^2)} e^{-\delta_1 L} + \frac{T_0}{s} \rightarrow D(s) = B(s)e^{-L\sqrt{\frac{s}{a_1}}} + \frac{I_\varepsilon a_1 \delta_1}{k_1 s (s - \alpha_1 \delta_1^2)} e^{-\delta_1 L} - \frac{I_L a_2 \delta_2}{k_2 s (s - \alpha_2 \delta_2^2)} \quad (3.112)$$

Για την κατανομή $U_B(x - L, s)$ θα είναι:

$$U_B(x - L, s) = D(s)e^{-\frac{(x-L)\sqrt{s}}{\sqrt{a_2}}} + \frac{I_L a_2 \delta_2}{k_2 s (s - \alpha_2 \delta_2^2)} e^{-\delta_2(x-L)} + \frac{T_0}{s} \rightarrow T_B(x - L, t) =$$

$$\mathcal{L}_t^{-1} \left[D(s)e^{-\frac{(x-L)\sqrt{s}}{\sqrt{a_2}}} \right] + \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{I_L a_2 \delta_2}{k_2 s (s - \alpha_2 \delta_2^2)} e^{-\delta_2(x-L)} \right] + T_0 \rightarrow T_B(x - L, t) =$$

$$\mathcal{L}_t^{-1} \left[B(s)e^{-\frac{L\sqrt{s}}{a_1}} e^{-\frac{(x-L)\sqrt{s}}{\sqrt{a_2}}} \right] + \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{I_\varepsilon a_1 \delta_1}{k_1 s (s - \alpha_1 \delta_1^2)} e^{-\delta_1 L} e^{-\frac{(x-L)\sqrt{s}}{\sqrt{a_2}}} \right] -$$

$$\begin{aligned}
& \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{I_L a_2 \delta_2}{k_2 s (s - \alpha_2 \delta_2^2)} e^{-(x-L) \sqrt{\frac{s}{a_2}}} \right] + \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{I_L a_2 \delta_2}{k_2 s (s - \alpha_2 \delta_2^2)} e^{-\delta_2 (x-L)} \right] + T_0 \rightarrow T_B(x-L, t) = \\
& \mathcal{L}_t^{-1} \left[-\frac{I_\varepsilon \alpha_1 \sqrt{\alpha_1} \delta_1^2}{k_1 \sqrt{s} s (s - \alpha_1 \delta_1^2)} e^{-\sqrt{s} \left[\frac{L}{\sqrt{a_1}} + \frac{x-L}{\sqrt{a_2}} \right]} \right] + \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{I_\varepsilon a_1 \delta_1}{k_1 s (s - \alpha_1 \delta_1^2)} e^{-\delta_1 L} e^{-(x-L) \sqrt{\frac{s}{a_2}}} \right] - \\
& \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{I_L a_2 \delta_2}{k_2 s (s - \alpha_2 \delta_2^2)} e^{-(x-L) \sqrt{\frac{s}{a_2}}} \right] + \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{I_L a_2 \delta_2}{k_2 s (s - \alpha_2 \delta_2^2)} e^{-\delta_2 (x-L)} \right] + T_0
\end{aligned} \tag{3.113}$$

Οπότε θα είναι:

$$\begin{aligned}
T_B(x-L, t) &= -\frac{I_\varepsilon \alpha_1 \sqrt{\alpha_1} \delta_1^2}{k_1} \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-n\sqrt{s}}}{\sqrt{s} s (s - \alpha_1 \delta_1^2)} \right] + \frac{I_\varepsilon a_1 \delta_1}{k_1} e^{-\delta_1 L} \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-(x-L) \sqrt{\frac{s}{a_2}}}}{s (s - \alpha_1 \delta_1^2)} \right] - \\
& \frac{I_L a_2 \delta_2}{k_2} \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-(x-L) \sqrt{\frac{s}{a_2}}}}{s (s - \alpha_2 \delta_2^2)} \right] + \frac{I_L a_2 \delta_2}{k_2} \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-\delta_2 (x-L)}}{k_2 s (s - \alpha_2 \delta_2^2)} \right] + T_0 = -Z_1 \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-n\sqrt{s}}}{\sqrt{s} s (s - \alpha_1 \delta_1^2)} \right] + \\
& Z_2 \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-q\sqrt{s}}}{s (s - \alpha_1 \delta_1^2)} \right] - Z_3 \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-q\sqrt{s}}}{s (s - \alpha_2 \delta_2^2)} \right] + Z_4 \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-\delta_2 (x-L)}}{s (s - \alpha_2 \delta_2^2)} \right] + T_0 = R1(t) + \\
& R2(t) + R3(t) + R4(t) + T_0
\end{aligned} \tag{3.114}$$

όπου

$$Z_1 = \frac{I_\varepsilon \alpha_1 \sqrt{\alpha_1} \delta_1^2}{k_1}, Z_2 = \frac{I_\varepsilon a_1 \delta_1}{k_1} e^{-\delta_1 L}, Z_3 = \frac{I_L a_2 \delta_2}{k_2}, Z_4 = \frac{I_L a_2 \delta_2}{k_2}, n = \frac{L}{\sqrt{a_1}} + \frac{x-L}{\sqrt{a_2}}, q = \frac{x-L}{\sqrt{a_2}} \tag{3.115}$$

Όμως,

Η συνέλιξη των $\mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{1}{s} \right] = 1$ και $\mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{1}{s - \alpha_1 \delta_1^2} \right] = e^{\alpha_1 \delta_1^2 t}$ δίνει:

$$\Phi(t) = \int_0^t 1 e^{\alpha_1 \delta_1^2 (t-r)} d r = -\frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t}}{\alpha_1 \delta_1^2} \left[e^{-\alpha_1 \delta_1^2 r} \right]_0^t = \frac{[e^{\alpha_1 \delta_1^2 t} - 1]}{\alpha_1 \delta_1^2} \tag{3.116}$$

Η συνέλιξη της $\Phi(t)$, με την συνάρτηση $F1(t)$ που προκύπτει από $\mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-n\sqrt{s}}}{\sqrt{s}} \right]$ και που

είναι, σύμφωνα με τη σχέση (1.62), για $n = \frac{x-L}{\sqrt{a_2}} + \frac{x}{\sqrt{a_1}}$,

$$F_1(t) = -\mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-n\sqrt{s}}}{\sqrt{s}} \right] = -\frac{e^{-\frac{n^2}{4t}}}{\sqrt{\pi t}} = \frac{e^{-\frac{1}{4t} \left[\frac{x-L}{\sqrt{a_2}} + \frac{L}{\sqrt{a_1}} \right]^2}}{\sqrt{\pi t}} \quad (3.117)$$

δίνει, με βήματα αλλαγών μεταβλητών ως εξής:

$$\begin{aligned} R1(t) &= -Z_1 \int_0^t F_1(r) \Phi(t-r) dr = -Z_1 \int_0^t \frac{e^{-\frac{n^2}{4r}}}{\sqrt{\pi r}} \Phi(t-r) dr = \\ &= -Z_1 \int_0^t \frac{e^{-\frac{n^2}{4r}} [e^{\alpha_1 \delta_1^2 (t-r)} - 1]}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi r}} dr \end{aligned} \quad (3.118)$$

Δηλαδή,

$$\begin{aligned} R1(t) &= -Z_1 \int_0^t \frac{e^{-\frac{n^2}{4r}} [e^{\alpha_1 \delta_1^2 (t-r)} - 1]}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi r}} dr = \\ &= -Z_1 \frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t}}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-\frac{n^2}{4r} - \alpha_1 \delta_1^2 r} dr r^{-\frac{1}{2}} \\ &= -Z_1 \frac{1}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-\frac{n^2}{4r}} dr r^{-\frac{1}{2}} = R1A(t) + R1B(t) \end{aligned} \quad (3.119)$$

Το ολοκλήρωμα R1A(t) γίνεται:

$$R1A(t) = -Z_1 \frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t}}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-\frac{n^2}{4r} - \alpha_1 \delta_1^2 r} dr r^{-\frac{1}{2}} \quad (3.120)$$

και με τον μετασχηματισμό μεταβλητών

$$v = \sqrt{r} \rightarrow dv = \frac{1}{2} r^{-\frac{1}{2}} dr \rightarrow 2dv = r^{-\frac{1}{2}} dr \quad (3.121)$$

δίνει:

$$R1A(t) = -Z_1 \frac{2e^{\alpha_1 \delta_1^2 t}}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \int_0^{\sqrt{t}} e^{-\frac{n^2}{4v^2} - \delta_1^2 \alpha_1 v^2} dv \quad (3.122)$$

Με τον επιπλέον μετασχηματισμό μεταβλητών:

$$u = \delta_1 \sqrt{a_1} v - \frac{n}{2v} \quad (3.123)$$

και επιλύοντας ως προς v τη άνω σχέση (3.123) θα είναι:

$$v = \frac{u + \sqrt{u^2 + 2n\delta_1 \sqrt{a_1}}}{2\delta_1 \sqrt{a_1}} \quad (3.124)$$

όπου μόνο η θετική ρίζα $v \geq 0$ γίνεται αποδεκτή λύση,

Επίσης, ισχύει ότι:

$$u^2 = \delta_1^2 a_1 v^2 + \frac{n^2}{4v^2} - n\delta_1 \sqrt{a_1} \rightarrow \delta_1^2 a_1 v^2 + \frac{n^2}{4v^2} = u^2 + n\delta_1 \sqrt{a_1} \quad (3.125)$$

Από την σχέση (3.124) προκύπτει ότι:

$$dv = \frac{1}{2\delta_1 \sqrt{a_1}} du + \frac{udu}{2\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{u^2 + 2n\delta_1 \sqrt{a_1}}} \quad (3.126)$$

και εφαρμόζοντας τα περιεχόμενα των σχέσεων (3.123,3.125,3.126)

το ολοκλήρωμα $R1A(t)$ δίνει:

$$\begin{aligned} R1A(t) &= -Z1 \frac{2e^{\alpha_1 \delta_1^2 t}}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{t} - \frac{n}{2\sqrt{t}}} e^{-(u^2 + n\delta_1 \sqrt{a_1})} \left[\frac{1}{2\delta_1 \sqrt{a_1}} du \right. \\ &\quad \left. + \frac{udu}{2\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{u^2 + 2n\delta_1 \sqrt{a_1}}} \right] \\ &= -Z1 \frac{2e^{\alpha_1 \delta_1^2 t} e^{-n\delta_1 \sqrt{a_1}}}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi} 2\delta_1 \sqrt{a_1}} \int_{-\infty}^{\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{t} - \frac{n}{2\sqrt{t}}} e^{-u^2} du \\ &\quad - Z1 \frac{2e^{\alpha_1 \delta_1^2 t} e^{-n\delta_1 \sqrt{a_1}}}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi} 2\delta_1 \sqrt{a_1}} \int_{-\infty}^{\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{t} - \frac{n}{2\sqrt{t}}} e^{-u^2} \frac{udu}{\sqrt{u^2 + 2n\delta_1 \sqrt{a_1}}} \end{aligned} \quad (3.127)$$

Επειδή ισχύει ότι:

$$\begin{aligned}
& \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{t} - \frac{n}{2\sqrt{t}}} e^{-u^2} du = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 e^{-u^2} du + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{t} - \frac{n}{2\sqrt{t}}} e^{-u^2} du = \\
& \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-u^2} du + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{t} - \frac{n}{2\sqrt{t}}} e^{-u^2} du = 1 + \operatorname{erf} \left(\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{t} - \frac{n}{2\sqrt{t}} \right) = 1 + 1 - \\
& \operatorname{erfc} \left(\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{t} - \frac{n}{2\sqrt{t}} \right) = 2 - \operatorname{erfc} \left(\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{t} - \frac{n}{2\sqrt{t}} \right) \quad (3.128)
\end{aligned}$$

το ολοκλήρωμα $R1A(t)$ με τις αλλαγές στον πρώτο όρο

θα είναι:

$$\begin{aligned}
R1A(t) &= -Z1 \frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t} e^{-n \delta_1 \sqrt{a_1}}}{2 \alpha_1 \delta_1^3 \sqrt{a_1}} \left[2 - \operatorname{erfc} \left(\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{t} - \frac{n}{2\sqrt{t}} \right) \right] - \\
Z1 & \frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t} e^{-n \delta_1 \sqrt{a_1}}}{2 \alpha_1 \delta_1^3 \sqrt{a_1}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{t} - \frac{n}{2\sqrt{t}}} e^{-u^2} \frac{udu}{\sqrt{u^2 + 2n \delta_1 \sqrt{a_1}}} \quad (3.129)
\end{aligned}$$

Ο δεύτερος όρος στο ολοκλήρωμα $R1A(t)$, με τον μετασχηματισμό

$$\zeta^2 = u^2 + 2n \delta_1 \sqrt{a_1} = \delta_1^2 a_1 v^2 + \frac{n^2}{4v^2} - n \delta_1 \sqrt{a_1} + 2n \delta_1 \sqrt{a_1} = \left(\delta_1 \sqrt{a_1} v + \frac{n}{2v} \right)^2 \quad (3.130)$$

και

$$2\zeta d\zeta = 2udu \rightarrow udu = \zeta d\zeta \quad (3.131)$$

θα είναι:

$$\begin{aligned}
& \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\infty}^{\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{t} + \frac{n}{2\sqrt{t}}} e^{-(\zeta^2 - 2n \delta_1 \sqrt{a_1})} \frac{\zeta d\zeta}{\zeta} = e^{+2n \delta_1 \sqrt{a_1}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\infty}^{\delta_1 \sqrt{a_1} t + \frac{n}{2\sqrt{t}}} e^{-\zeta^2} d\zeta = \\
& -e^{+2n \delta_1 \sqrt{a_1}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\delta_1 \sqrt{a_1} t + \frac{n}{2\sqrt{t}}}^{\infty} e^{-\zeta^2} d\zeta = -e^{+2n \delta_1 \sqrt{a_1}} \operatorname{erfc} \left(\delta_1 \sqrt{a_1} t + \frac{n}{2\sqrt{t}} \right) \quad (3.132)
\end{aligned}$$

οπότε το ολοκλήρωμα $R1A(t)$ θα είναι:

$$\begin{aligned}
R1A(t) &= -Z1 \frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t} e^{-n \delta_1 \sqrt{a_1}}}{2 \alpha_1 \delta_1^3 \sqrt{a_1}} \left[2 - \operatorname{erfc} \left(\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{t} - \frac{n}{2\sqrt{t}} \right) \right] + \\
Z1 & \frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t} e^{+n \delta_1 \sqrt{a_1}}}{2 \alpha_1 \delta_1^3 \sqrt{a_1}} \operatorname{erfc} \left(\delta_1 \sqrt{a_1} t + \frac{n}{2\sqrt{t}} \right) \\
& (3.133)
\end{aligned}$$

Το ολοκλήρωμα $R1B(t)$ είναι:

$$R1B(t) = -Z1 \frac{1}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-\frac{n^2}{4r}} dr r^{-\frac{1}{2}}$$

Με τη βοήθεια του μετασχηματισμού

$$v = \frac{1}{\sqrt{r}} \rightarrow dv = -\left(\frac{1}{2}\right) r^{-\frac{3}{2}} dr \rightarrow dr = -2r^{\frac{3}{2}} dv = -2v^{-3} dv \quad (3.134)$$

το $R1B(t)$ γίνεται:

$$\begin{aligned} R1B(t) &= +Z1 \frac{2}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-\frac{n^2 v^2}{4}} v v^{-3} dv = +Z1 \frac{2}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-\frac{n^2 v^2}{4}} v^{-2} dv = \\ &+ Z1 \frac{2}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \left[\int_{\frac{1}{\sqrt{t}}}^{\frac{1}{\sqrt{0}}} e^{-\frac{n^2 v^2}{4}} \left(-\frac{1}{v}\right)' dv \right] = +Z1 \frac{2}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \left(\left[\left(-\frac{1}{v}\right) e^{-\frac{n^2 v^2}{4}} \right]_{\frac{1}{\sqrt{t}}}^{\frac{1}{\sqrt{0}}} - \right. \\ &\left. \int_{\frac{1}{\sqrt{t}}}^{\frac{1}{\sqrt{0}}} e^{-\frac{n^2 v^2}{4}} \left(-\frac{n^2 v}{2}\right) \left(-\frac{1}{v}\right) dv \right) = +Z1 \frac{2}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \left(\left[\left(-\frac{1}{v}\right) e^{-\frac{n^2 v^2}{4}} \right]_{\frac{1}{\sqrt{t}}}^{\frac{1}{\sqrt{0}}} - \right. \\ &\left. n \int_{\frac{1}{\sqrt{t}}}^{\frac{1}{\sqrt{0}}} e^{-\frac{n^2 v^2}{4}} d\left(\frac{n}{2} v\right) \right) = Z1 \frac{2}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \left(\left[-\sqrt{t} e^{-\frac{n^2}{4t}} - 0 \right] + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{nerfc}\left(\frac{n}{2\sqrt{t}}\right) \right) = \\ &\frac{2Z1}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \left(-\sqrt{t} e^{-\frac{n^2}{4t}} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{nerfc}\left(\frac{n}{2\sqrt{t}}\right) \right) \quad (3.135) \end{aligned}$$

Η συνέλιξη της $\Phi(t)$,με την συνάρτηση $F_2(t)$ που προκύπτει από $\mathcal{L}_t^{-1} \left[\left[e^{-q\sqrt{s}} \right] \right]$ και

που είναι, σύμφωνα με τη σχέση (3.??), για $q = \frac{x-L}{\sqrt{a_2}}$,

$$F_2(t) = \mathcal{L}_t^{-1} \left[\left[e^{-q\sqrt{s}} \right] \right] = \frac{q e^{-\frac{q^2}{4t}}}{2t\sqrt{\pi t}} =$$

Και η $R2(t)$ θα είναι:

$$\begin{aligned} R2(t) &= Z_2 F_2 * \Phi(t) = Z_2 \int_0^t \frac{q e^{-\frac{q^2}{4r}} \left(e^{\alpha_1 \delta_1^2 (t-r)} - 1 \right)}{2r\sqrt{\pi r} \alpha_1 \delta_1^2} dr = \\ &Z_2 \frac{q e^{\alpha_1 \delta_1^2 t}}{2\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-\frac{q^2}{4r} - \alpha_1 \delta_1^2 r} r^{-\frac{3}{2}} dr - Z_2 \frac{q e^{\alpha_1 \delta_1^2 t}}{2\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-\frac{q^2}{4r}} r^{-\frac{3}{2}} dr = R2A(t) + \\ &R2B(t) \quad (3.136) \end{aligned}$$

Ο όρος $R2A(t)$ με τον μετασχηματισμό

$$v = \frac{1}{\sqrt{r}} \rightarrow dv = \left(-\frac{1}{2}\right) r^{-\frac{3}{2}} dr \rightarrow r^{-\frac{3}{2}} dr = -2dv \quad (3.137)$$

δίνει:

$$R2A(t) = Z_2 \frac{(-2)qe^{\alpha_1\delta_1^2 t}}{2\alpha_1\delta_1^2\sqrt{\pi}} \int_0^{\sqrt{t}} e^{-\frac{q^2v^2}{4} - \alpha_1\delta_1^2/v^2} dv \quad (3.138)$$

Χρησιμοποιώντας τον μετασχηματισμό

$$u = -\frac{\delta_1\sqrt{\alpha_1}}{v} + \frac{qv}{2} \rightarrow u^2 = \frac{\delta_1^2\alpha_1}{v^2} + \frac{q^2v^2}{4} - q\delta_1\sqrt{\alpha_1} \rightarrow \frac{\delta_1^2\alpha_1}{v^2} + \frac{q^2v^2}{4} = u^2 + q\delta_1\sqrt{\alpha_1} \quad (3.139)$$

και επιλύοντας ως προς v ,

$$vu = -\delta_1\sqrt{\alpha_1} + \frac{qv^2}{2} \rightarrow \frac{qv^2}{2} - vu - \delta_1\sqrt{\alpha_1} = 0 \quad (3.140)$$

με λύση

$$v = \frac{u + \sqrt{u^2 + 2q\delta_1\sqrt{\alpha_1}}}{q} \rightarrow dv = \left(\frac{1}{q}\right) du + \left(\frac{1}{q}\right) \frac{udu}{\sqrt{u^2 + 2q\delta_1\sqrt{\alpha_1}}} \quad (3.141)$$

η έκφραση για το $R2A(t)$ δίνει:

$$R2A(t) = Z_2 \frac{(-2)qe^{\alpha_1\delta_1^2 t}}{2\alpha_1\delta_1^2\sqrt{\pi}} \left[\int_{\infty}^{-\delta_1\sqrt{\alpha_1 t} + \frac{q}{2\sqrt{t}}} e^{-(u^2 + q\delta_1\sqrt{\alpha_1})} \left(\frac{1}{q}\right) du + \int_{\infty}^{-\delta_1\sqrt{\alpha_1 t} + \frac{q}{2\sqrt{t}}} e^{-(u^2 + q\delta_1\sqrt{\alpha_1})} \left(\frac{1}{q}\right) \frac{udu}{\sqrt{u^2 + 2q\delta_1\sqrt{\alpha_1}}} \right] \quad (3.142)$$

Επειδή ισχύει ότι:

$$u^2 + 2q\delta_1\sqrt{\alpha_1} = \frac{\delta_1^2\alpha_1}{v^2} + \frac{q^2v^2}{4} + q\delta_1\sqrt{\alpha_1} = \left(\frac{\delta_1\sqrt{\alpha_1}}{v} + \frac{qv}{2}\right)^2 = \eta^2 \quad (3.143)$$

και

$$2udu = 2\eta d\eta \rightarrow udu = \eta d\eta \quad (3.144)$$

η σχέση για το $R2A(t)$ γίνεται:

$R2A(t) =$

$$Z_2 \frac{(-2)qe^{\alpha_1\delta_1^2 t - q\delta_1\sqrt{\alpha_1}}}{2\alpha_1\delta_1^2\sqrt{\pi}} \left[\int_{\infty}^{-\delta_1\sqrt{\alpha_1 t} + \frac{q}{2\sqrt{t}}} e^{-u^2} \left(\frac{1}{q}\right) du + \int_{\infty}^{-\delta_1\sqrt{\alpha_1 t} + \frac{q}{2\sqrt{t}}} e^{-u^2} \left(\frac{1}{q}\right) \frac{u}{\sqrt{u^2 + 2q\delta_1\sqrt{\alpha_1}}} du \right] \quad (3.145)$$

Για την $R2B(t)$ είναι:

$$R2B(t) = -Z_2 \frac{qe^{\alpha_1 \delta_1^2 t}}{2\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-\frac{q^2}{4}} r^{-\frac{3}{2}} dr \quad (3.146)$$

και με τον μετασχηματισμό

$$v = r^{-\frac{1}{2}} \rightarrow dv = (-1/2) r^{-\frac{3}{2}} dr \rightarrow r^{-\frac{3}{2}} dr = -2dv \quad (3.147)$$

το ολοκλήρωμα $R2B(t)$ γίνεται:

$$\begin{aligned} R2B(t) &= Z_2 \frac{qe^{\alpha_1 \delta_1^2 t}}{2\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-\frac{q^2 v^2}{4}} dv = Z_2 \frac{qe^{\alpha_1 \delta_1^2 t}}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{q}{2\sqrt{t}}} e^{-\frac{q^2 v^2}{4}} d\left(\frac{qv}{2}\right) = \\ &Z_2 \frac{qe^{\alpha_1 \delta_1^2 t}}{\alpha_1 \delta_1^2} \operatorname{erf}\left(\frac{q}{2\sqrt{t}}\right) \end{aligned} \quad (3.148)$$

Η $R3(t)$ είναι όμοια με την $R2(t)$ για α_2 και δ_2 αντί για α_1 και δ_1 της $R2(t)$ (παρατίθεται στα παρακάτω).

Η $R4(t)$ δίνει:

$$R4(t) = Z_4 \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-\delta_2(x-L)}}{s(s-\alpha_2 \delta_2^2)} \right] = Z_4 e^{-\delta_2(x-L)} \frac{[e^{\alpha_2 \delta_2^2 t} - 1]}{\alpha_2 \delta_2^2} \quad (3.149)$$

Συνοψίζοντας για τους όρους της $T_B(x-L, t)$:

$$T_B(x-L, t) = R1(t) + R2(t) + R3(t) + R4(t) + T_0 \quad (3.150)$$

όπου:

$$\begin{aligned}
R1(t) = & -Z_1 \int_0^t \frac{e^{-\frac{n^2}{4r}}}{\sqrt{\pi r}} \frac{[e^{\alpha_1 \delta_1^2 (t-r)} - 1]}{\alpha_1 \delta_1^2} dr = -Z_1 \frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t} e^{-n \delta_1 \sqrt{a_1}}}{2 \alpha_1 \delta_1^3 \sqrt{a_1}} \left[2 - \operatorname{erfc} \left(\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{t} - \frac{n}{2\sqrt{t}} \right) \right] \\
& + Z_1 \frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t} e^{+n \delta_1 \sqrt{a_1}}}{2 \alpha_1 \delta_1^3 \sqrt{a_1}} \operatorname{erfc} \left(\delta_1 \sqrt{a_1} t + \frac{n}{2\sqrt{t}} \right) + \frac{2Z_1}{\alpha_1 \delta_1^2 \sqrt{\pi}} \left(-\sqrt{t} e^{-\frac{n^2}{4t}} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{nerfc} \left(\frac{n}{2\sqrt{t}} \right) \right) \quad (3.151)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
R2(t) = & Z_2 \int_0^t \frac{q e^{-\frac{q^2}{4r}}}{2r \sqrt{\pi r}} \frac{(e^{\alpha_1 \delta_1^2 (t-r)} - 1)}{\alpha_1 \delta_1^2} dr = Z_2 \frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t - q \delta_1 \sqrt{a_1}}}{2 \alpha_1 \delta_1^2} \left[2 - \operatorname{erfc} \left(\delta_1 \sqrt{a_1} t - \frac{q}{2\sqrt{t}} \right) \right] + \\
& Z_2 \frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t + q \delta_1 \sqrt{a_1}}}{2 \alpha_1 \delta_1^2} \left[\operatorname{erfc} \left(\delta_1 \sqrt{a_1} t + \frac{q}{2\sqrt{t}} \right) \right] + Z_2 \frac{q e^{\alpha_1 \delta_1^2 t}}{\alpha_1 \delta_1^2} \operatorname{erf} \left(\frac{q}{2\sqrt{t}} \right) \quad (3.152)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
R3(t) = & -Z_3 \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-q\sqrt{s}}}{s(s - \alpha_2 \delta_2^2)} \right] = -Z_3 \frac{e^{\alpha_2 \delta_2^2 t - q \delta_2 \sqrt{a_2}}}{2 \alpha_2 \delta_2^2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\delta_2 \sqrt{a_2} t - \frac{q}{2\sqrt{t}} \right) \right] - \\
& Z_3 \frac{e^{\alpha_2 \delta_2^2 t + q \delta_2 \sqrt{a_2}}}{2 \alpha_2 \delta_2^2} \left[\operatorname{erfc} \left(\delta_2 \sqrt{a_2} t + \frac{q}{2\sqrt{t}} \right) \right] - Z_3 \frac{q e^{\alpha_2 \delta_2^2 t}}{\alpha_2 \delta_2^2} \operatorname{erf} \left(\frac{q}{2\sqrt{t}} \right) \quad (3.153)
\end{aligned}$$

$$R4(t) = Z_4 e^{-\delta_2(x-L)} \frac{[e^{\alpha_2 \delta_2^2 t} - 1]}{\alpha_2 \delta_2^2} \quad (3.154)$$

όπου

$$Z_1 = \frac{I_\varepsilon \alpha_1 \sqrt{a_1} \delta_1^2}{k_1}, Z_2 = \frac{I_\varepsilon a_1 \delta_1}{k_1} e^{-\delta_1 L}, Z_3 = \frac{I_L a_2 \delta_2}{k_2}, Z_4 = \frac{I_L a_2 \delta_2}{k_2}, \quad (3.155)$$

$$n = \frac{L}{\sqrt{a_1}} + \frac{x-L}{\sqrt{a_2}}, q = \frac{x-L}{\sqrt{a_2}} \quad (3.156)$$

Οι τελικές εκφράσεις για τα R1(t), R2(t), R3(t) και R4(t) είναι ως εξής;

$$\begin{aligned}
R1(t) = & -\frac{I_\varepsilon \alpha_1 \sqrt{a_1} \delta_1^2}{k_1} \int_0^t \frac{e^{-\frac{n^2}{4r}}}{\sqrt{\pi r}} \frac{[e^{\alpha_1 \delta_1^2 (t-r)} - 1]}{\alpha_1 \delta_1^2} dr = -\frac{I_\varepsilon}{k_1} \frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t} e^{-n \delta_1 \sqrt{a_1}}}{2 \delta_1} \left[2 - \right. \\
& \left. \operatorname{erfc} \left(\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{t} - \frac{n}{2\sqrt{t}} \right) \right] + \frac{I_\varepsilon}{k_1} \frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t} e^{+n \delta_1 \sqrt{a_1}}}{2 \delta_1} \operatorname{erfc} \left(\delta_1 \sqrt{a_1} t + \frac{n}{2\sqrt{t}} \right) + \\
& \frac{I_\varepsilon}{k_1} \frac{2\sqrt{a_1}}{\sqrt{\pi}} \left(-\sqrt{t} e^{-\frac{n^2}{4t}} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{nerfc} \left(\frac{n}{2\sqrt{t}} \right) \right) = -\frac{I_\varepsilon}{k_1} \frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t} e^{-n \delta_1 \sqrt{a_1}}}{2 \delta_1} \left[2 - \right. \\
& \left. \operatorname{erfc} \left(\delta_1 \sqrt{a_1} \sqrt{t} - \frac{n}{2\sqrt{t}} \right) \right] + \frac{I_\varepsilon}{k_1} \frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t} e^{+n \delta_1 \sqrt{a_1}}}{2 \delta_1} \operatorname{erfc} \left(\delta_1 \sqrt{a_1} t + \frac{n}{2\sqrt{t}} \right) +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{I_\varepsilon}{k_1} 2\sqrt{\alpha_1 t} \left(-\frac{e^{-\frac{n^2}{4t}}}{\sqrt{\pi}} + \frac{n}{2\sqrt{t}} \operatorname{erfc}\left(\frac{n}{2\sqrt{t}}\right) \right) &= \frac{I_\varepsilon}{k_1} \left[2\sqrt{\alpha_1 t} \operatorname{ierfc}\left(\frac{n}{2\sqrt{t}}\right) + \right. \\ &\left. \left(\frac{1}{2\delta_1}\right) \left[e^{\alpha_1 \delta_1^2 t} e^{-n\delta_1 \sqrt{\alpha_1}} \operatorname{erfc}\left(\delta_1 \sqrt{\alpha_1} \sqrt{t} - \frac{n}{2\sqrt{t}}\right) + \right. \right. \\ &\left. \left. e^{\alpha_1 \delta_1^2 t} e^{+n\delta_1 \sqrt{\alpha_1}} \operatorname{erfc}\left(\delta_1 \sqrt{\alpha_1} t + \frac{n}{2\sqrt{t}}\right) \right] \right] - \frac{I_\varepsilon}{k_1 \delta_1} e^{\alpha_1 \delta_1^2 t} e^{-n\delta_1 \sqrt{\alpha_1}} \quad (3.157) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} R2(t) &= \frac{I_\varepsilon \alpha_1 \delta_1}{k_1} e^{-\delta_1 L} \int_0^t \frac{q e^{-\frac{q^2}{4r}}}{2r\sqrt{\pi r}} \frac{(e^{\alpha_1 \delta_1^2 (t-r)} - 1)}{\alpha_1 \delta_1^2} dr = \frac{I_\varepsilon}{k_1} e^{-\delta_1 L} \frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t - q\delta_1 \sqrt{\alpha_1}}}{2\delta_1} \left[2 - \right. \\ &\left. \operatorname{erfc}\left(\delta_1 \sqrt{\alpha_1} t - \frac{q}{2\sqrt{t}}\right) \right] + \frac{I_\varepsilon}{k_1} e^{-\delta_1 L} \frac{e^{\alpha_1 \delta_1^2 t + q\delta_1 \sqrt{\alpha_1}}}{2\delta_1} \left[\operatorname{erfc}\left(\delta_1 \sqrt{\alpha_1} t + \frac{q}{2\sqrt{t}}\right) \right] + \\ &\frac{I_\varepsilon}{k_1} e^{-\delta_1 L} \frac{q e^{\alpha_1 \delta_1^2 t}}{\delta_1} \operatorname{erf}\left(\frac{q}{2\sqrt{t}}\right) \quad (3.158) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} R3(t) &= -\frac{I_L \alpha_2 \delta_2}{k_2} \mathcal{L}_t^{-1} \left[\frac{e^{-q\sqrt{s}}}{s(s - \alpha_2 \delta_2^2)} \right] = -\frac{I_L}{k_2} \frac{e^{\alpha_2 \delta_2^2 t - q\delta_2 \sqrt{\alpha_2}}}{2\delta_2} \left[1 + \operatorname{erf}\left(\delta_2 \sqrt{\alpha_2} t - \frac{q}{2\sqrt{t}}\right) \right] - \\ &\frac{I_L}{k_2} \frac{e^{\alpha_2 \delta_2^2 t + q\delta_2 \sqrt{\alpha_2}}}{2\delta_2} \left[\operatorname{erfc}\left(\delta_2 \sqrt{\alpha_2} t + \frac{q}{2\sqrt{t}}\right) \right] - \frac{I_L}{k_2} \frac{q e^{\alpha_2 \delta_2^2 t}}{\delta_2} \operatorname{erf}\left(\frac{q}{2\sqrt{t}}\right) \quad (3.159) \end{aligned}$$

$$R4(t) = \frac{I_L}{k_2} e^{-\delta_2(x-L)} \frac{[e^{\alpha_2 \delta_2^2 t} - 1]}{\delta_2} \quad (3.160)$$

και συνολικά,

$$\mathbf{T}_B(\mathbf{x} - \mathbf{L}, t) = \mathbf{R1}(t) + \mathbf{R2}(t) + \mathbf{R3}(t) + \mathbf{R4}(t) + \mathbf{T}_0 \quad (3.161)$$

με

$$n = \frac{x-L}{\sqrt{\alpha_2}} + \frac{L}{\sqrt{\alpha_1}}$$

και

$$q = \frac{x-L}{\sqrt{\alpha_2}}$$

Με βάση τις εξαχθείσες αναλυτικές εκφράσεις για τα T_A και T_B , των σχέσεων (3.110) και (3.161), είναι δυνατό να αποτυπωθούν γραφικά μια πληθώρα γραφημάτων σε σχέση με τις τιμές των παραμέτρων που υπεισέρχονται στις εκφράσεις για τα T_A , T_B . Είναι ένα στοιχείο που θα μπορούσε να επεκτείνει την διερεύνηση της συμπεριφοράς της θερμοκρασίας στην περίπτωση των δύο στρωμάτων υλικών Α και Β, σε κατευθύνσεις που θα μπορούσαν να αναδείξουν με μεγαλύτερη λεπτομέρεια τη θερμική συμπεριφορά των

υλικών ειδικά κοντά στα σύνορα των διατάξεών τους σε διάφορες γεωμετρικές διευθετήσεις και προσανατολισμούς.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4. ΓΡΑΦΙΚΕΣ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΕΙΣ ΑΝΑΛΥΤΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΩΝ ΚΑΙ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΜΕ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟ COMSOL-MULTIPHYSICS

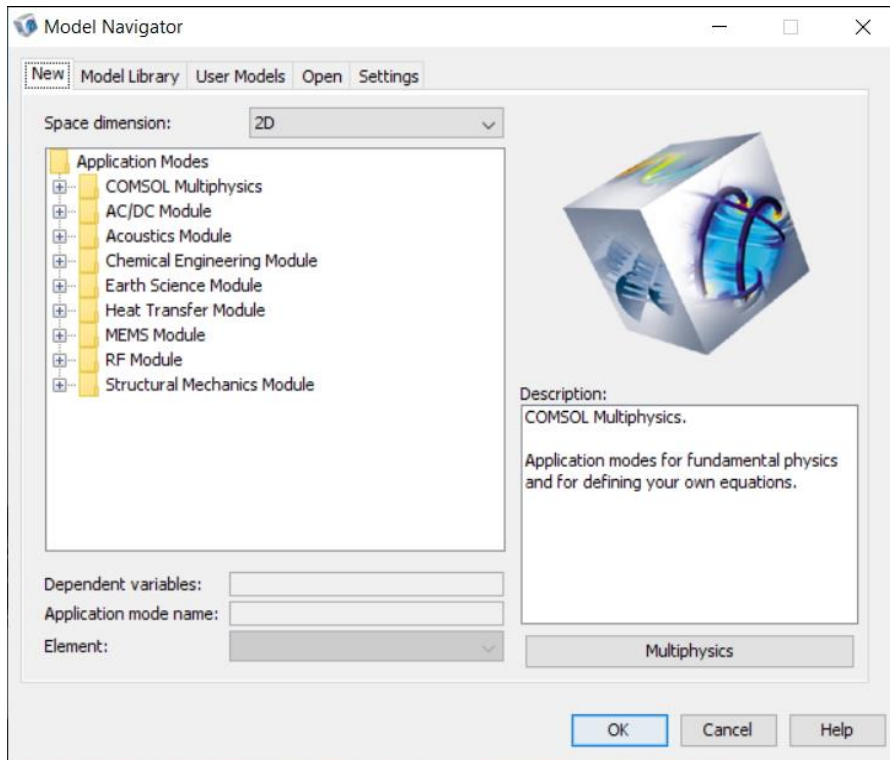
4.1 ΤΟ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟ COMSOL-MULTIPHYSICS ®

Το Λογισμικό ComSol-MultiPhysics ® [Web-ref 3] είναι χρήσιμο για προσομοιώσεις φυσικών διεργασιών σε πολλές περιπτώσεις επιστημονικών και τεχνικών διατάξεων. Χρησιμοποιώντας τις παραμέτρους υλικών, τις γεωμετρίες από 1D έως και 3D, και τα μαθηματικά εργαλεία των Διαφορικών εξισώσεων, είναι σε θέση να εκτελεί αριθμητικούς υπολογισμούς σε προσομοιώσεις για τα εμπλεκόμενα φυσικά μεγέθη σε διατάξεις που οι αναλυτικές μαθηματικές σχέσεις είναι δύσκολο να εξαχθούν. Οι αριθμητικοί υπολογισμοί αποτυπώνονται και σε γραφήματα στο επίπεδο ή στο χώρο, ή μπορούν και να εξαγονται σε αρχεία.

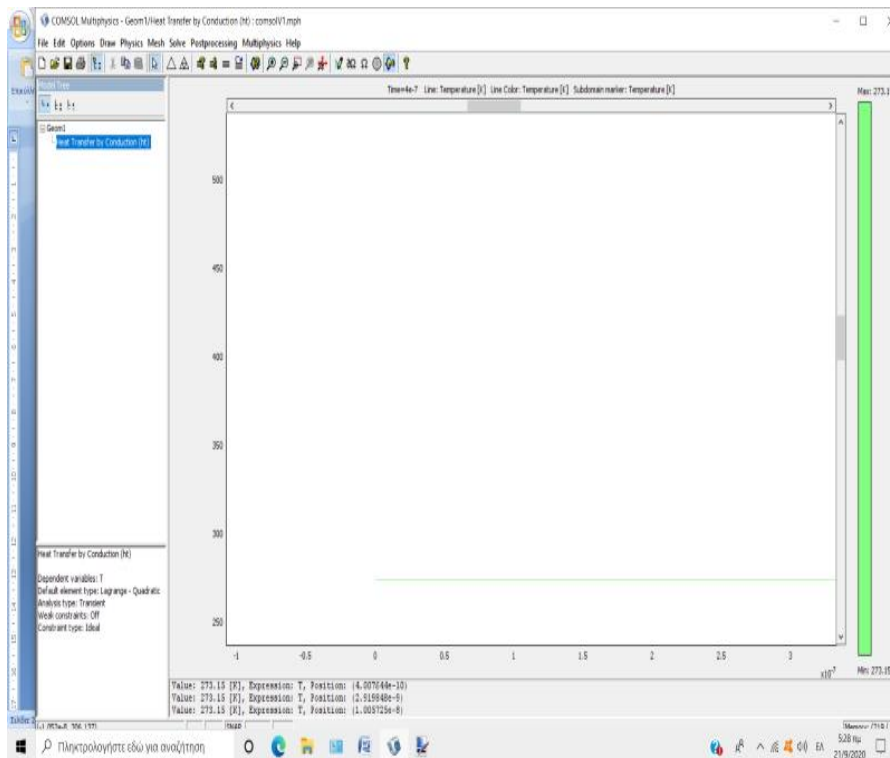
Τα βήματα για την εκτέλεση μιας προσομοίωσης με το Λογισμικό αυτό είναι ως εξής:

- Επιλογή της διάστασης στο χώρο της διάταξης (1D, 2D, 3D).
- Επιλογή των αξόνων και της γεωμετρίας για τη σχεδίαση της διάταξης
- Επιλογή της «Φυσικής» που περιγράφει τα εμπλεκόμενα φυσικά μεγέθη
- Επιλογή των υλικών με τις φυσικές τους παραμέτρους (είτε από τις βιβλιοθήκες του Λογισμικού είτε με προσδιορισμό «νέου υλικού»)
- Επιλογή των συνοριακών συνθηκών και των αρχικών τιμών φυσικών μεγεθών
- Επιλογή του «πλέγματος» (mesh) στη γεωμετρία της διάταξης για χρήση στις διαφορικές εξισώσεις που περιγράφουν τις φυσικές διεργασίες στη διάταξη και της αριθμητικής μεθόδου (αλγόριθμος με διαφορικές παραγώγους 1^{ης} ή και ανώτερης τάξης)
- Εκτέλεση της προσομοίωσης με γραφικές απεικονίσεις των αποτελεσμάτων.

Μερικές εικόνες από το περιβάλλον εργασίας στο Λογισμικό ComSol-MultiPhysics είναι όπως παρακάτω:



Εικόνα 4.1 Το Λογισμικό ComSol-MultiPhysics - αρχική «φόρτωση» του Λογισμικού



Εικόνα 4.2 Το «περιβάλλον εργασίας» της προσομοίωσης που χρησιμοποιήθηκε

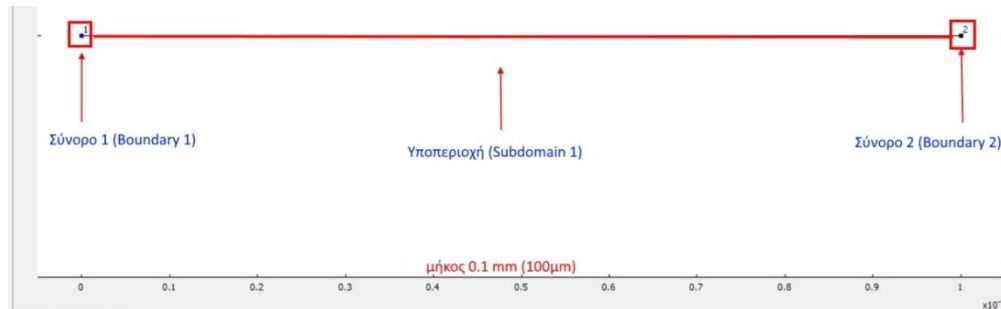
4.2 ΓΡΑΦΙΚΕΣ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΕΙΣ ΤΩΝ «ΣΕΝΑΡΙΩΝ A1, A2, B1, B2»

Έχοντας τις αναλυτικές μορφές των λύσεων για την κατανομή της θερμοκρασίας $T(x,t)$ στις περιπτώσεις των «Σεναρίων» A1, A2, B1, B2 που περιγράφηκαν στο ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3, γίνεται εδώ μια σειρά γραφικών απεικονίσεων των λύσεων $T(x,t)$ και με ταυτόχρονη προβολή γίνεται και η αντιπαράθεση με τις προβλεπόμενες κατανομές με προσομοίωση κάθε φορά με το Λογισμικό ComSol MultiPhysics (v3.5a) ενώ για τις απεικονίσεις των αναλυτικά υπολογισμένων κατανομών $T(x,t)$ χρησιμοποιείται το Λογισμικό Matlab (vR2015b).

4.2.1 Γενικές ρυθμίσεις στο Λογισμικό ComSol MultiPhysics.

Έτσι, στη διαδικασία που ακολουθήθηκε για την προσομοίωση των «Σεναρίων A1,A2 έως και B2» όπως περιγράφηκαν στα προηγούμενα (ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3), αρχικά προσδιορίζεται η «Γεωμετρία» σε 1D , με μήκος 0.1 mm για την «προσομοίωση» της «ημιάπειρης» ράβδου για τη διάδοση της θερμότητας. Η απόσταση αυτή κρίνεται ως επαρκής για τα μήκη των 100-200 nm που είναι στο επίκεντρο της εξέτασης για τις κατανομές $T(x,t)$ και επιπλέον παρέχεται η δυνατότητα για πιο «πυκνό» πλέγμα υποδιαιρέσεων των διαστημάτων που χρησιμοποιεί το ComSol με μεθόδους «διακριτών» στοιχείων για την επίλυση των εμπλεκόμενων Διαφορικών εξισώσεων και τη «σύγκλιση» των λύσεων. Στη συνέχεια καθορίζονται οι «σταθερές» του προβλήματος και οι αντίστοιχες «συννοριακές» συνθήκες. Καθορίζεται τέλος η πυκνότητα του «πλέγματος» υποδιαιρέσεων των διαστημάτων της απόστασης σε 122000 διαστήματα, ενώ το «βήμα» χρόνου καθορίζεται σε 0,25 nsec. Στη συνέχεια, αφού επιλυθεί το «πρόβλημα» γίνεται εξαγωγή των δεδομένων απόσταση-Θερμοκρασία ($x-T$) σε αρχεία .txt (ASCII μορφή) και ακολούθως τα αρχεία αυτά «εισάγονται» στο Λογισμικό Matlab, και απεικονίζονται οι αντίστοιχες κατανομές $T(t)$ για διάφορες θέσεις x , ταυτόχρονα με τις κατανομές από τις αναλυτικές μορφές των θερμοκρασιών $T(x,t)$. Οι επιπλέον ρυθμίσεις στο Λογισμικό ComSol για κάθε «Σενάριο» παρατίθενται στο Παράρτημα, ενώ οι γενικές κοινές ρυθμίσεις του Λογισμικού ComSol απεικονίζονται όπως παρακάτω:

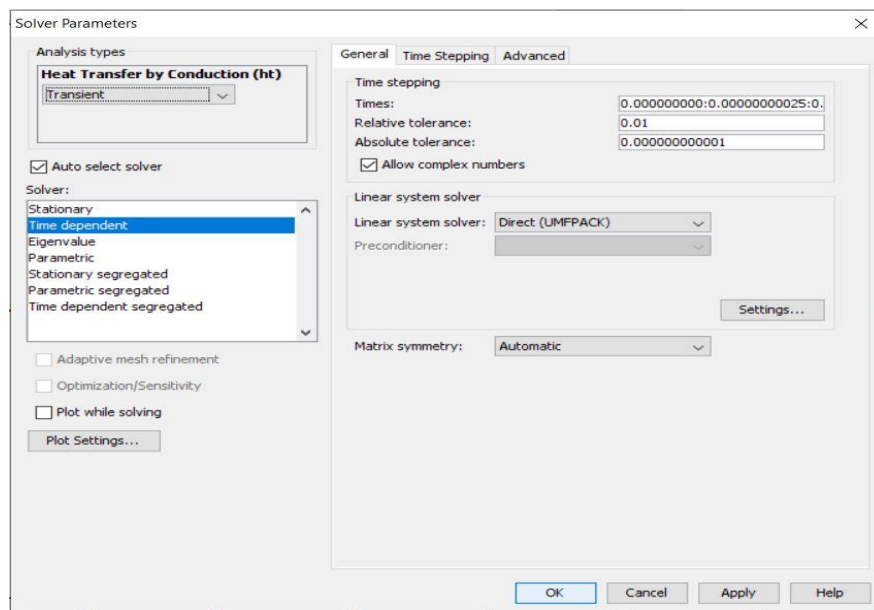
Γεωμετρία 1D, μήκος 0-0.1mm



Εικόνα 4.3 Το 1D γεωμετρικό μοντέλο στο ComSol για την προσομοίωση της «ημιάπειρης» ράβδου για διάδοση θερμότητας.

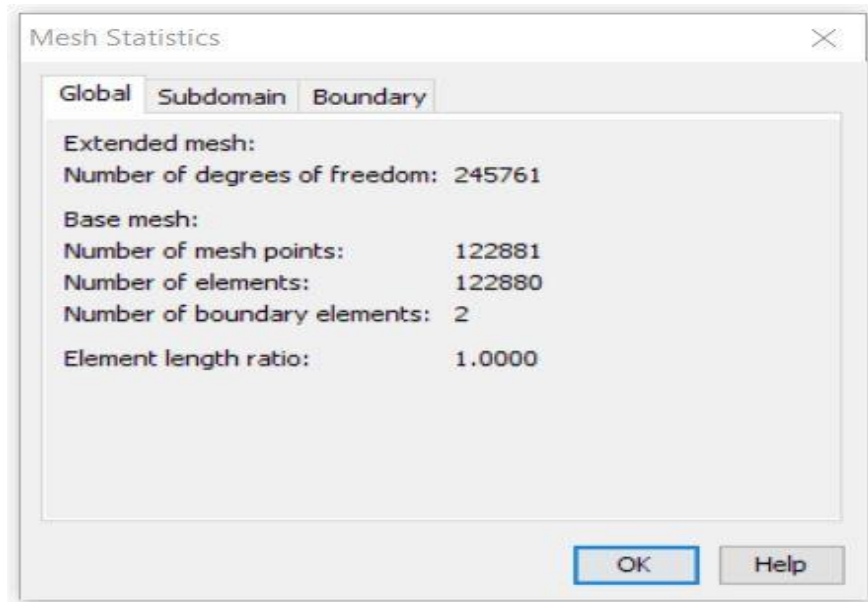
Παράμετροι επίλυσης και πλήθος διαστημάτων υποδιαίρεσης (mesh size)

Παράμετροι για την επίλυση Δ.Ε.



Εικόνα 4.4a Παράμετροι του Λογισμικού ComSol για την επίλυση της Διαφορικής εξίσωσης της διάδοσης θερμότητας κατά μήκος x, και χρόνους t

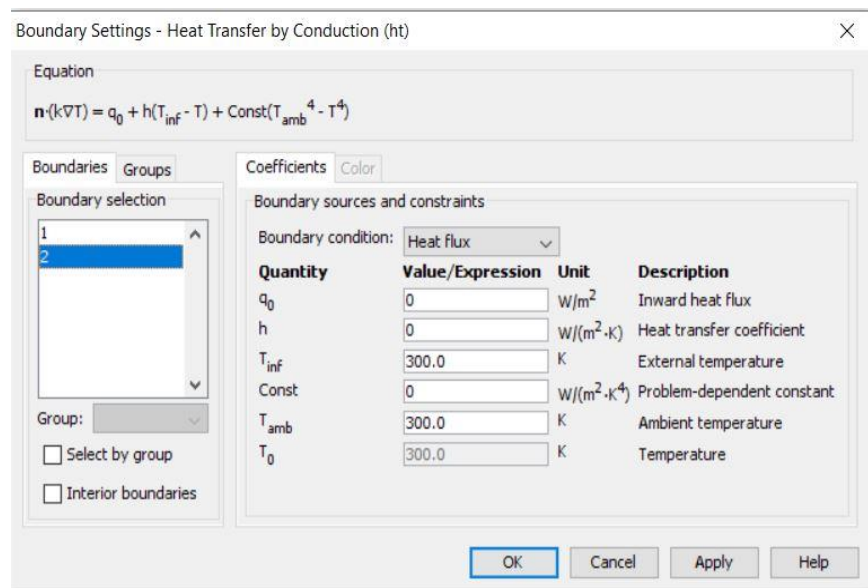
Υποδιαίρεση διαστημάτων



Εικόνα 4.4b Το σχήμα υποδιαίρεσης διαστημάτων (mesh size) του Λογισμικού ComSol για την επίλυση της Διαφορικής εξίσωσης της διάδοσης θερμότητας κατά μήκος x , και χρόνους t

Συνοριακή συνθήκη *Boundary condition 2*

Στο σημείο 2 του γεωμετρικού τμήματος (Εικόνα 4.3), η κοινή ρύθμιση στο Λογισμικό ComSol για τη συνοριακή συνθήκη απεικονίζεται ως εξής:



Εικόνα 4.5 Ρύθμιση στο Λογισμικό ComSol της συνοριακής συνθήκης του σημείου 2

Μερικές από τις εμπλεκόμενες κοινές παραμέτρους στα «Σενάρια» καθορίζονται ως εξής:

Συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας διηλεκτρικού (ΑΙΝ) $K_{AIN}=20 \text{ W/mK}$

Συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας Αργύρου $K_{Ag}=429 \text{ W/mK}$

Ένταση προσπίπτουσας ακτινοβολίας $I_0=5000 \text{ W/mK}$

Συντελεστής ανάκλασης στην επιφάνεια $r=25\%$

Το σύνολο των παραμέτρων που στο Λογισμικό ComSol καθορίζονται στην επιλογή «Constants» απεικονίζεται στο Παράρτημα για κάθε αντίστοιχο «Σενάριο».

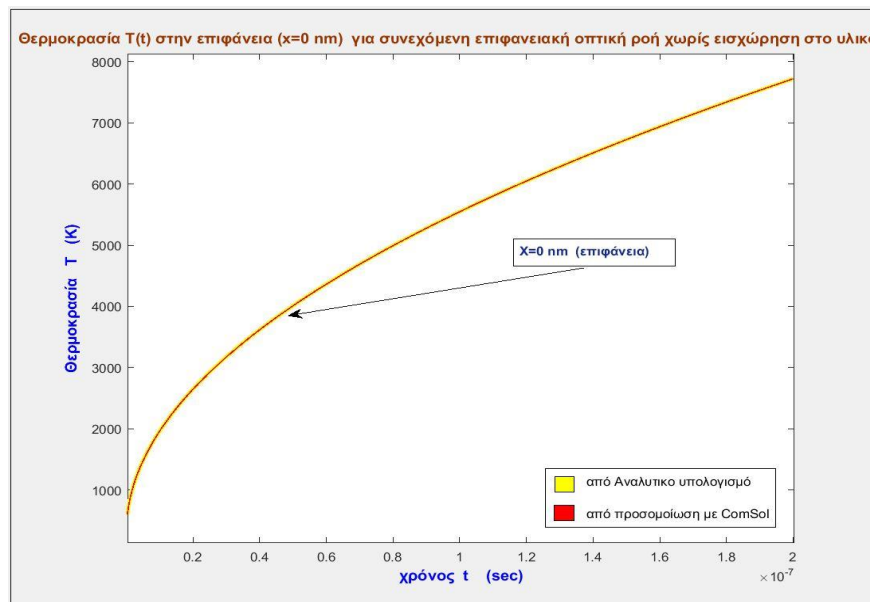
4.3 Γραφικές απεικονίσεις για «Σενάριο A1»

Στο «Σενάριο A1», όπως έχει περιγραφεί στο ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3, γίνεται συνεχόμενη πρόσπτωση οπτικής ενέργειας χωρίς εισχώρηση στο υλικό. Η αναλυτική μορφή της κατανομής $T(x,t)$ σύμφωνα και με την Σχέση (3.46) υπολογίστηκε αναλυτικά ως:

$$T(x, t) = T_0 + 2 \frac{I_0 \delta}{k} \left[\sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[\sqrt{t} e^{-\frac{x^2}{4at}} \right] - \left(\frac{x}{2} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \right] \quad (4.1)$$

Γραφική απεικόνιση $T(t)$ για $x=0 \text{ nm}$ (επιφάνεια)

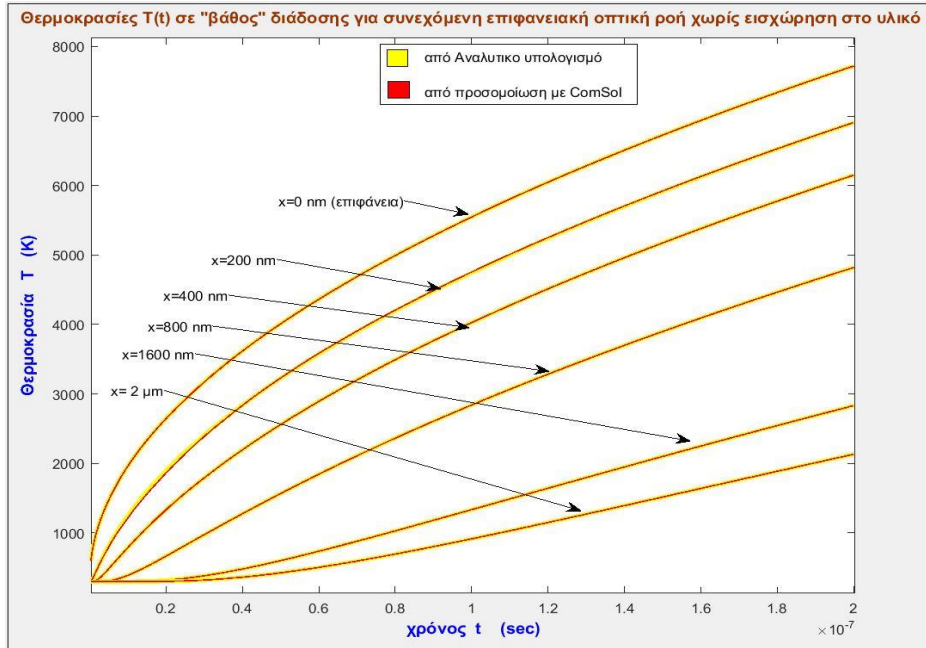
Ταυτόχρονη γραφική απεικόνιση για δεδομένα από Αναλυτικό υπολογισμό και προσομοίωση με ComSol.



Εικόνα 4.6 Κατανομή θερμοκρασίας $T(t)$ στη θέση $x=0 \text{ nm}$ (επιφάνεια) για συνεχόμενη επιφανειακή οπτική ροή χωρίς εισχώρηση στο υλικό ($K_{AIN}=20 \text{ W/mK}$, συντ.απορρόφησης $= 3.31 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$)

Γραφική απεικόνιση T(t) για x=0 nm(επιφάνεια), 200nm, 400nm, 800nm, 1600nm και 2μm

Ταυτόχρονη γραφική απεικόνιση για δεδομένα από Αναλυτικό υπολογισμό και προσομοίωση με ComSol



Εικόνα 4.7 Κατανομή θερμοκρασίας T(t) σε «βάθος» x=0, 200, 400, 800, 1600 nm και 2 μm, για συνεχόμενη επιφανειακή οπτική ροή χωρίς εισχώρηση στο υλικό(KAIN=20W/mK, συντ.απορρόφησης = 3.31x10⁷ m⁻¹)

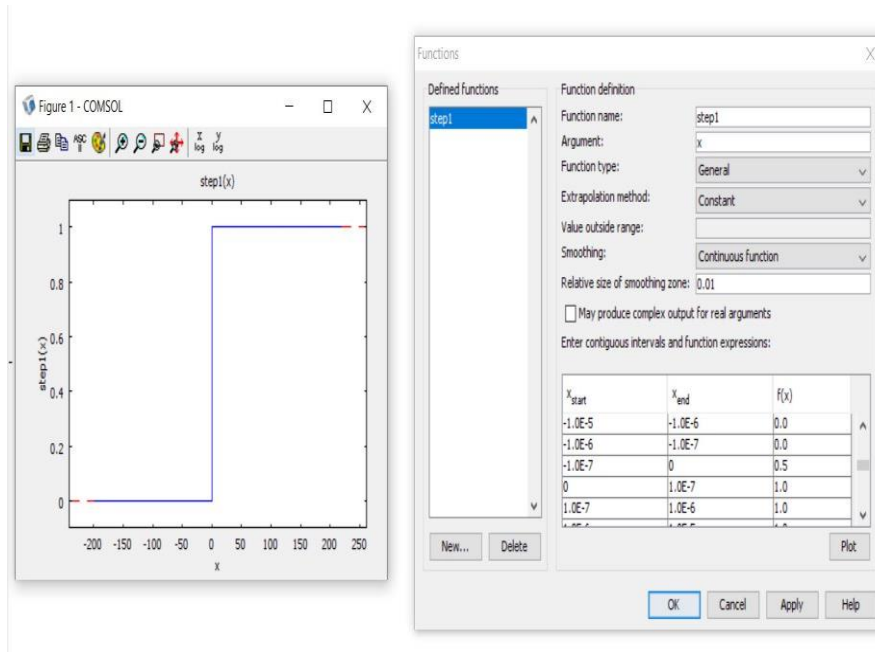
4.4 Γραφικές απεικονίσεις για «Σενάριο A2»

Στο «Σενάριο A1», όπως έχει περιγραφεί στο ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3, γίνεται συνεχόμενη πρόσπτωση οπτικής ενέργειας χωρίς εισχώρηση στο υλικό. Η αναλυτική μορφή της κατανομής T(x,t) σύμφωνα και με την Σχέση (3.50) υπολογίστηκε αναλυτικά ως:

$$T(x, t) = T_0 + 2 \frac{I_0 \delta}{k} \begin{cases} \left[\sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[\sqrt{t} e^{-\frac{x^2}{4at}} \right] - \left(\frac{x}{2} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \right] & t \leq \tau_0 \\ \left\{ \left[\sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[\sqrt{t} e^{-\frac{x^2}{4at}} \right] - \left(\frac{x}{2} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \right] - \left[\sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[\sqrt{(t-\tau_0)} e^{-\frac{x^2}{4a(t-\tau_0)}} \right] - \left(\frac{x}{2} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{a(t-\tau_0)}} \right) \right] \right\} & t > \tau_0 \end{cases} \quad (4.2)$$

Στην περίπτωση αυτή, για την προσομοίωση παλμού πεπερασμένης διάρκειας το, χρησιμοποιήθηκε η συνάρτηση $step1(t)$, οριζόμενη στο ComSol από τον χρήστη.

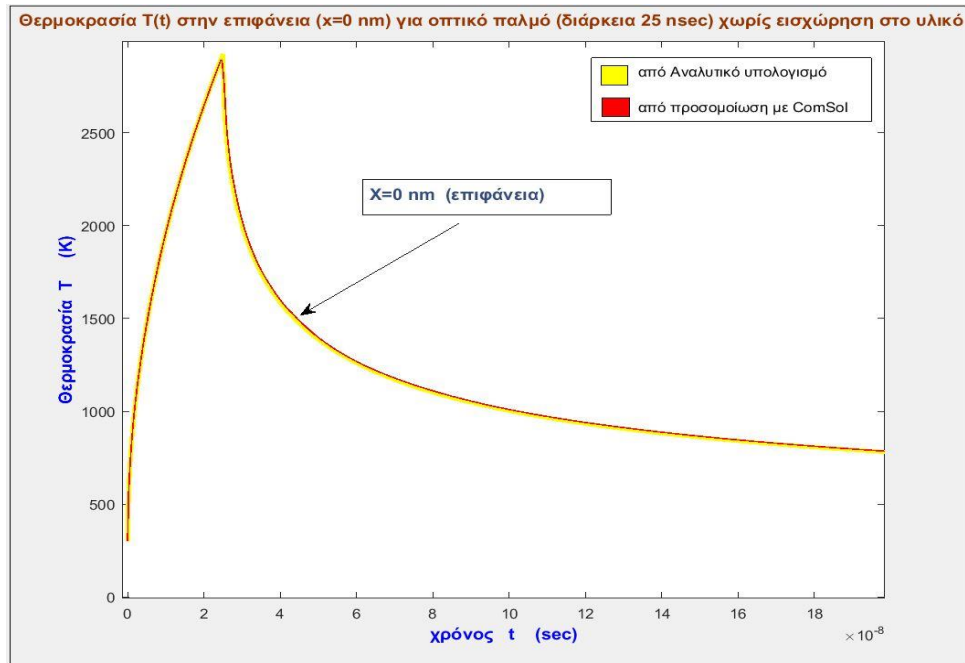
Η συνάρτηση $step1(t)$ με τον ορισμό της και τη γραφική της απεικόνιση είναι ως εξής:



Εικόνα 4.8 Η οριζόμενη συνάρτηση $step1$ για τη χρήση στην προσομοίωση του «flat» σχήματος του οπτικού παλμού διάρκειας t_0 .

Γραφική απεικόνιση $T(t)$ για $x=0$ nm (επιφάνεια)

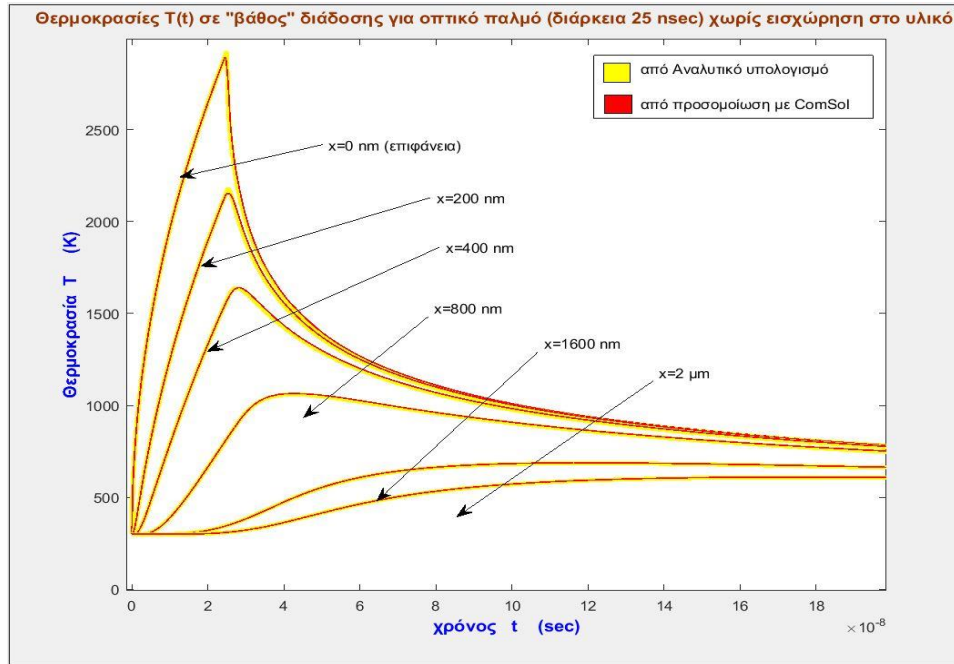
Ταυτόχρονη απεικόνιση για δεδομένα από Αναλυτικό υπολογισμό και προσομοίωση με ComSol



Εικόνα 4.9 Κατανομή θερμοκρασίας $T(t)$ στην επιφάνεια ($x=0$ nm) για οπτικό παλμό διάρκειας 25 nsec χωρίς εισχώρηση στο υλικό ($KAIN=20W/mK$, συντ.απορρόφησης = $3.31 \times 10^7 m^{-1}$)

Γραφική απεικόνιση $T(t)$ για $x=0$ nm (επιφάνεια), 200nm ,400nm, 800nm, 1600nm, 2μm

Ταυτόχρονη γραφική απεικόνιση για δεδομένα από Αναλυτικό υπολογισμό και προσομοίωση με ComSol



Εικόνα 4.10 Κατανομή θερμοκρασίας $T(t)$ σε θέσεις $x=0,200,400,800,1600$ nm και $2\mu\text{m}$, για οπτικό παλμό διάρκειας 25 nsec χωρίς εισχώρηση στο υλικό ($KAIN=20\text{W/mK}$, συντ.απορρόφησης $= 3.31 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$)

4.5 Γραφικές απεικονίσεις για «Σενάριο B1»

Στο «Σενάριο B1», όπως έχει περιγραφεί στο ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3, γίνεται συνεχόμενη πρόσπτωση οπτικής ενέργειας με εισχώρηση στο υλικό. Η αναλυτική μορφή της κατανομής $T(x,t)$ σύμφωνα και με την Σχέση (3.106) υπολογίστηκε αναλυτικά ως:

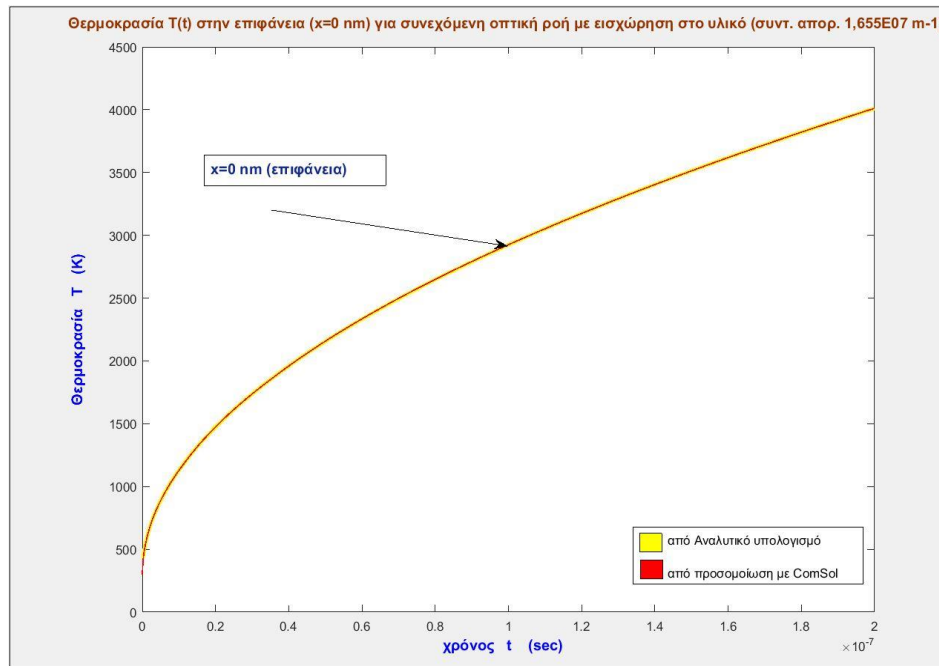
$$T(x,t) = T_0 + \frac{I_0 \delta}{k} \left[\begin{array}{l} 2\sqrt{at} \operatorname{ierfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right) - \left(\frac{1}{\delta^2} \right) e^{-\delta x} \\ + \left(\frac{1}{2\delta^2} \right) e^{\alpha\delta^2 t + \delta x} \operatorname{erfc} \left(\delta\sqrt{at} + \frac{x}{\sqrt{at}} \right) \\ + \left(\frac{1}{2\delta^2} \right) e^{\alpha\delta^2 t - \delta x} \operatorname{erfc} \left(\delta\sqrt{at} - \frac{x}{\sqrt{at}} \right) \end{array} \right] \quad (4.3)$$

Για το «Σενάριο B1» όπως και για το «Σενάριο B2», επειδή η οπτική ακτινοβολία εισχωρεί σε ένα βάθος στο υλικό, για να είναι πιο ρεαλιστικοί οι υπολογισμοί, χρησιμοποιείται ο συντελεστής απορρόφησης $\delta(B)$ να έχει μειωμένη τιμή σε σχέση με αυτή των A1 και A2 Σεναρίων. Δηλαδή, εδώ, όπως και για το B2, θα είναι $\delta(B) = \delta(A) / 2.0 = 3.31 \times 10^7 / 2 = 1.655 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$.

Η μικρότερη τιμή του συντελεστή απορρόφησης επιτρέπει, για την ίδια προσπίπτουσα ένταση I_0 , μεγαλύτερο βάθος διείσδυσης, αφού η προσπίπτουσα ένταση σταδιακά κατά την εισχώρηση στο υλικό εξασθενείται λιγότερο, σε σχέση με ένα αυξημένο συντελεστή απορρόφησης. Κατά τα άλλα, στο «Σενάριο B1» και «Σενάριο B2», όλες οι άλλες παράμετροι παραμένουν οι ίδιες όπως αυτές των Σεναρίων A1, A2.

Γραφική απεικόνιση $T(t)$ για $x=0$ nm (επιφάνεια)

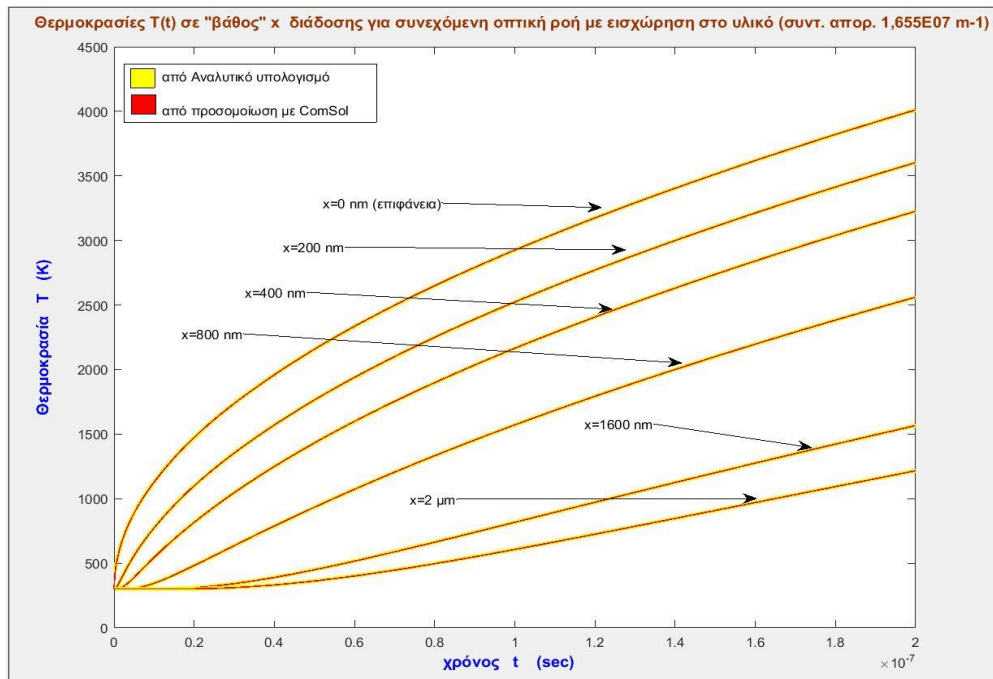
Ταυτόχρονη γραφική απεικόνιση για δεδομένα από Αναλυτικό υπολογισμό και προσομοίωση με ComSol



Εικόνα 4.11 Κατανομή θερμοκρασίας $T(t)$ στην επιφάνεια ($x=0$ nm) για συνεχόμενη επιφανειακή οπτική ροή με εισχώρηση στο υλικό ($KAIN=20W/mK$, συντ.απορρόφησης = 1.655×10^7 m⁻¹)

Γραφική απεικόνιση $T(t)$ για $x=0$ nm (επιφάνεια), 200nm, 800nm, 1600nm, 2μm

Ταυτόχρονη γραφική απεικόνιση για δεδομένα από Αναλυτικό υπολογισμό και προσομοίωση με ComSol



Εικόνα 4.12 Κατανομή θερμοκρασίας $T(t)$ στις θέσεις $x=0, 200, 800, 1600$ nm και 2 μm για συνεχόμενη οπτική ροή στην επιφάνεια με εισχώρηση στο υλικό ($KAIN=20W/mK$, συντ.απορρόφησης = 1.655×10^7 m⁻¹)

4.6 Γραφικές απεικονίσεις για «Σενάριο B2»

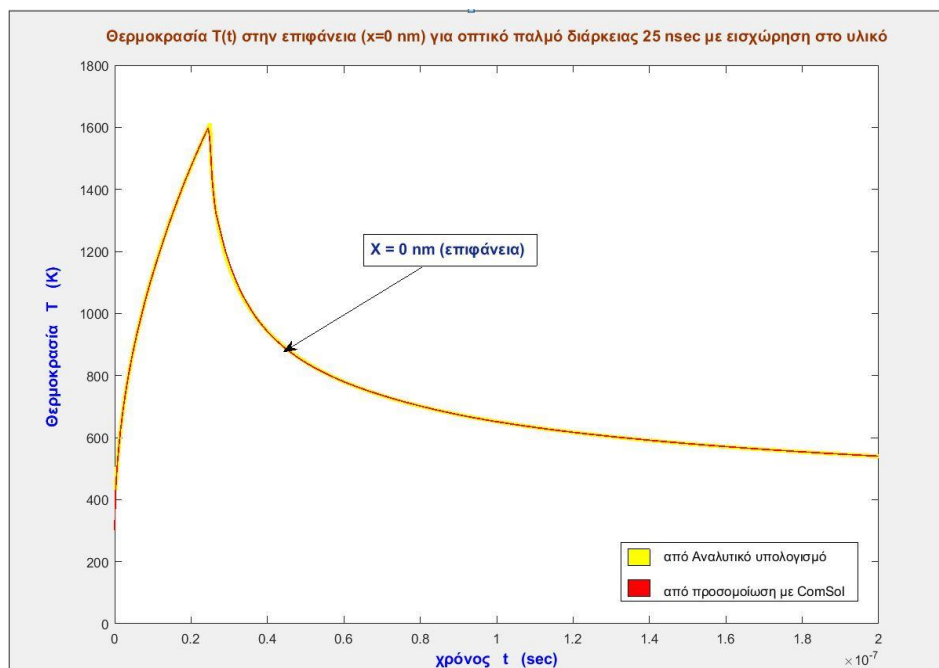
Στο «Σενάριο B2», όπως έχει περιγραφεί στο ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3, γίνεται πρόσπτωση οπτικού παλμού με εισχώρηση στο υλικό. Η αναλυτική μορφή της κατανομής $T(x,t)$ σύμφωνα και με την Σχέση (3.107) υπολογίστηκε αναλυτικά ως:

$$T(x, t) = u(t)T_{(B-1\eta)}(x, t) - u(t - \tau_o)T_{(B-1\eta)}(x, t - \tau_o) \quad (4.4)$$

Στην περίπτωση αυτή, για την προσομοίωση παλμού πεπερασμένης διάρκειας το, χρησιμοποιήθηκε η συνάρτηση $step1(t)$, οριζόμενη στο ComSol από τον χρήστη όπως έχει ήδη περιγραφεί για το «Σενάριο A2».

Γραφική απεικόνιση $T(t)$ για $x=0$ nm (επιφάνεια)

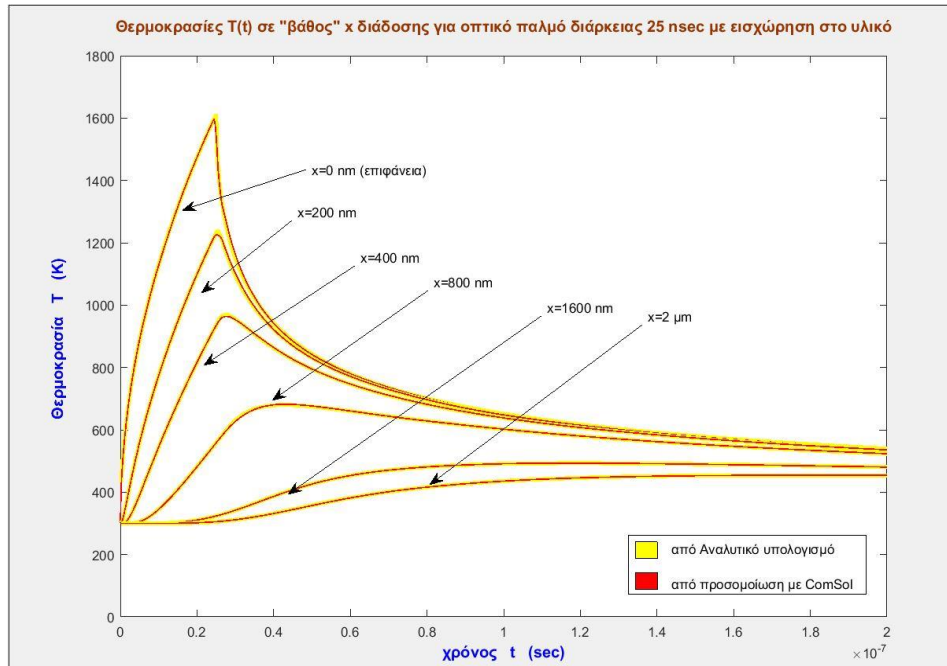
Ταυτόχρονα για δεδομένα από Αναλυτικό υπολογισμό και προσομοίωση με ComSol



Εικόνα 4.13 Κατανομή θερμοκρασίας $T(t)$ στην επιφάνεια ($x=0$ nm) για οπτικό παλμό διάρκειας 25 nsec με εισχώρηση στο υλικό ($KAIN=20W/mK$, συντ.απορρόφησης = $1.655 \times 10^7 m^{-1}$)

Γραφική απεικόνιση $T(t)$ για $x=0$ nm (επιφάνεια), 200nm ,800nm ,1600nm και 2μm

Ταυτόχρονη γραφική απεικόνιση για δεδομένα από Αναλυτικό υπολογισμό και προσομοίωση με ComSol



Εικόνα 4.14 Κατανομή θερμοκρασίας $T(t)$ στις θέσεις $x=0, 200, 800, 1600$ nm, 2 μm για οπτικό παλμό διάρκειας 25 nsec με εισχώρηση στο υλικό ($KAIN=20W/mK$, συντ.απορρόφησης = $1,655 \times 10^7 m^{-1}$)

Από τα παραπάνω γραφήματα των προσομοιώσεων σε σύγκριση με τα γραφήματα των αναλυτικών υπολογισμών (Εικόνες 4.6 έως και 4.14), διαπιστώνεται συμφωνία των γραφικών αποτελεσμάτων σε κλίμακες και χρόνου και αποστάσεων των αναλυτικών υπολογισμών για τις κατανομές $T(x,t)$ με τις προβλέψεις των προσομοιώσεων με το Λογισμικό ComSol MultiPhysics. Με την αύξηση του (υπεριώδους) μήκους κύματος και επομένως με τη μείωση του συντελεστή απορρόφησης, (για παράδειγμα, από $3.31 \times 10^7 m^{-1}$ για τα «Σενάρια A1 και A2» σε $1.655 \times 10^7 m^{-1}$ για τα «Σενάρια B1 και B2» , τα μέγιστα των θερμοκρασιών μειώνονται μιας και ο ρυθμός της «πηγής» της εσωτερικής θερμικής ενέργειας dQ/dt μειώνεται, αφού είναι ανάλογος του συντελεστή απορρόφησης.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ

Στα διάφορα σενάρια, που διαπραγματεύθηκαν στη μελέτη αυτή, σε σχέση με τη διάχυση της θερμότητας κάτω από την πρόσπτωση οπτικής δέσμης σε ένα ή δύο διαδοχικά στρώματα από διαφορετικά υλικά, οι περιγραφές υιοθέτησαν ένα γεωμετρικό μοντέλο της διάδοσης της θερμότητας καθώς και της οπτικής διάδοσης σε μία διάσταση (1D), ενώ έγιναν ταυτόχρονα και ορισμένες παραδοχές για την απλούστευση στην προσέγγιση, κάθε φορά, του αντίστοιχου προβλήματος με αναλυτικό υπολογισμό των κατανομών $T(x,t)$. Ανάλογες κατανομές αποκτήθηκαν με προσομοιώσεις χρησιμοποιώντας το Λογισμικό ComSol MultiPhysics (v3.5).[Web-ref 3].

Έτσι, στο «Σενάριο-A» θεωρείται η αναλυτική κατανομή $T(x,t)$ της θερμοκρασίας σε βάθος x ενός υλικού που στη θέση $x=0$ δέχεται οπτική δέσμη, χωρίς οπτική διείσδυση αλλά μόνο στην επιφάνειά του. Η κατανομή $T(x,t)$ υπολογίστηκε για συνεχόμενη οπτική δέσμη αλλά και για ένα οπτικό παλμό διάρκειας τ . Από τις γραφικές απεικονίσεις που δόθηκαν μπορεί να εξαχθεί ως συμπέρασμα ότι η προσπίπτουσα οπτική ένταση, οι θερμικές παράμετροι του υλικού και η διάρκεια του οπτικού παλμού είναι οι πλέον καθοριστικές παράμετροι στις κατανομές $T(x,t)$.

Στο «Σενάριο – B» εξετάστηκε και υπολογίστηκε η κατανομή $T(x,t)$ όταν η οπτική δέσμη εισχωρεί σε βάθος στο υλικό που προσπίπτει, με τις δύο περιπτώσεις της συνεχόμενης οπτικής δέσμης και του απλού οπτικού παλμού διάρκειας τ . Από τις παραθέσεις των γραφικών απεικονίσεων για την περίπτωση οπτικών παλμών με διαφορετικά οπτικά μήκη κύματος, αναδειχεται ο ρόλος του επιλεγόμενου μήκους κύματος στις προκαλούμενες θερμοκρασιακές μεταβολές μιας και ουσιαστικά καθορίζει το συντελεστή της απορρόφησης της οπτικής ενέργειας. Έτσι, με διαφορετικά μήκη κύματος, οι συντελεστές απορρόφησης της οπτικής δέσμης διαφοροποιούνται με αποτέλεσμα να δίνεται η δυνατότητα των επιλεκτικών μεταβολών $\Delta T(x,t)$ με κατάλληλες επιλογές των οπτικών μηκών λ του Laser.

Στις περιπτώσεις των «Σεναρίων A και B» χρησιμοποιήθηκαν παράλληλα και αντίστοιχες προσομοιώσεις με το Λογισμικό ComSol MultiPhysics (v3.5). Στις προσομοιώσεις χρησιμοποιήθηκε το 1D μοντέλο του Λογισμικού για την αγωγή θερμότητας, και η αριθμητική επίλυση της Δ.Ε. διάδοσης της θερμότητας κατά μήκος x του υλικού, με τις κατάλληλες κάθε φορά συνοριακές συνθήκες. Τα αποκτηθέντα αποτελέσματα, όπως διαφαίνονται στις αντίστοιχες γραφικές απεικονίσεις, στο

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4, είναι σε **πλήρη συμφωνία** με τα αντίστοιχα αποκτηθέντα από τους αναλυτικούς υπολογισμούς, τόσο στην «ποιοτική» συμπεριφορά των κατανομών $T(x,t)$ όσο και στο εύρος των αριθμητικών τιμών τους.

Στο «Σενάριο – Γ» αναπτύχθηκε, στο 1D μοντέλο διάδοσης της θερμότητας και της οπτικής δέσμης, η μεθοδολογία και ο αναλυτικός υπολογισμός της κατανομής $T(x,t)$ στην περίπτωση δύο διαδοχικών στρωμάτων υλικών A και B. Στην παρούσα μελέτη, το υλικό A θα αντιπροσώπευε ένα «ισοδύναμο» των διαδοχικών στρωμάτων του διηλεκτρικού AlN και μετάλλου Ag, σε εκτεινόμενο συνολικό μήκος ~ 120 nm, με το ποσοστό Ag να είναι στο 33% του συνολικού όγκου των στρωμάτων. Ως υλικό B θεωρείται ένα άλλο υλικό με διαφορετικές γενικά θερμικές παραμέτρους σε σχέση με το υλικό A. Για τον υπολογισμό των κατανομών της θερμοκρασίας T_A για το υλικό A και T_B για το υλικό B, ως σχέση – κλειδί για την εξασφάλιση της συνέχειας στη συνάρτηση $T(x,t)$ από το A στο B, θεωρήθηκε η συνθήκη : $T_A(x=L,t)=T_B(x=L,t)$.

Σε συνολική εκτίμηση από την εξέταση των τριών σεναρίων, ως κοινό καθοριστικό χαρακτηριστικό στις κατανομές $T(x,t)$ αναδειχεται αφενός μεν ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας του υλικού (-ών), αλλά και επίσης ο ρόλος του μήκους κύματος της οπτικής δέσμης που πλέον με κατάλληλη επιλογή δρα ρυθμιστικά στην ανάπτυξη των $T(x,t)$ τόσο σε μέγιστες τιμές όσο και σε επιθυμητές τιμές απόστασης x από την «κορυφή» των στρωμάτων, μιας και καθορίζει του συντελεστή απορρόφησης της οπτικής ενέργειας και επομένως και τον ρυθμό διάδοσης, σε απόσταση και χρόνο, της αναπτυσσόμενης κάθε φορά κατανομής της θερμοκρασίας.

ΕΠΙΛΟΓΟΣ

Στην παρούσα μελέτη περιγράφηκαν με υπολογισμούς σε μαθηματικές αναλυτικές μορφές οι κατανομές της θερμοκρασίας σε ανόπτηση υλικών σε λεπτά στρώματα κάτω από την ακτινοβολία με Laser. Το φυσικό μοντέλο που υιοθετήθηκε για την μελέτη προσδιορίζεται από 1D- γεωμετρία στην διεύθυνση διάχυσης της θερμότητας, τις φυσικές σταθερές των υλικών να είναι ανεξάρτητες της θερμοκρασίας, το «πάχος» του «γκαουσιανού» προφίλ του Laser (beam waist w_0) να είναι μεγαλύτερο σε διαστάσεις από το «βάθος» εισχώρησης του Laser ή της διάδοσης της θερμότητας και τέλος οι συχνότητες του Laser να είναι τέτοιες ώστε να υπάρχει σημαντικός συντελεστής οπτικής απορρόφησης κατά την διάδοση της θερμότητας και της οπτικής ακτίνας.

Ως βασική αφετηρία θεωρήθηκε η βασική διαφορική εξίσωση για τη διάδοση της θερμότητας, χωρίς όμως όρους για «συναγωγή» (convection) ή ακτινοβολία μέλανος σώματος (thermal radiation), μιας και τα ποσά θερμότητας που εμπλέκονται για τις περιπτώσεις αυτές και σε σχέση με το μοντέλο της 1D διάδοσης που υιοθετήθηκε είναι αμελητέα. Με τη χρήση του Μαθηματικού εργαλείου των μετασχηματισμών Laplace , εξετάστηκαν μετά τον υπολογισμό τους οι λύσεις που παρέχονται για την $T(x,t)$ μέσα από γραφικές απεικονίσεις με ορισμένες τιμές παραμέτρων όπως ο θερμικός συντελεστής του διηλεκτρικού, ο συντελεστής απορρόφησης καθώς και η ένταση της προσπίπτουσας δέσμης. Οι υπολογισμοί αντιπαραβλήθηκαν, μέσω των αντίστοιχων γραφικών απεικονίσεων, με τις προβλέψεις των προσομοιώσεων του Λογισμικού ComSol MultiPhysics (v3.5a). Τα αποτελέσματα των αντιπαραβολών αυτών έδειξαν τις θεωρητικές αναλυτικές μορφές των κατανομών της θερμοκρασίας να είναι σε απόλυτη συμφωνία με τις προβλέψεις των προσομοιώσεων με το Λογισμικό ComSol. Από τις γραφικές απεικονίσεις είτε των αναλυτικών μορφών είτε των προσομοιώσεων με το Λογισμικό, διαφαίνεται άμεσα η επίδραση των φυσικών θερμικών παραμέτρων των υλικών στην κατανομή της θερμοκρασίας και αναδεικνύεται άμεσα ένας δυναμικός αλλά δυναμικός μηχανισμός ελέγχου των μέγιστων αναπτυσσόμενων τιμών θερμοκρασίας, μέσω ελέγχου του συντελεστή απορρόφησης της οπτικής ενέργειας, δηλαδή ουσιαστικά μέσω μεταβολής κάθε φορά του μήκους κύματος της υπεριώδους ακτινοβολίας από το UV Laser.

Επίσης, ένα κεντρικό βασικό σημείο, στην παρούσα μελέτη, απετέλεσε και ο υπολογισμός με αναλυτικές μεθόδους της κατανομής $T(x,t)$ στην περίπτωση δύο διαδοχικών στρωμάτων υλικών με διαφορετικό, στη γενική περίπτωση, σύνολο φυσικών θερμικών παραμέτρων. Με απόκτηση σχετικών αντίστοιχων γραφικών απεικονίσεων θα

αναδεικνύονταν άμεσα οι καθοριστικοί παράγοντες στις επαγόμενες θερμοκρασιακές κατανομές στα δύο στρώματα, και αυτό θα αποτελούσε μία μελλοντική κατεύθυνση στη συνέχεια της παρούσας μελέτης. Επίσης, στα πλαίσια της παρούσας μελέτης, θα μπορούσε, έχοντας ως βάση τα εργαλεία του Μαθηματικού Λογισμού των διαφορικών εξισώσεων (μετασχηματισμοί Laplace, μετασχηματισμοί Fourier, κλπ) , να διερευνηθεί περαιτέρω το πεδίο λύσεων, σε αναλυτική μορφή, σε γεωμετρίες 2Δ και 3Δ, όπου παρόλη την αυξανόμενη συνθετότητα των μαθηματικών εκφράσεων, οι τελικά εξαγόμενες σχέσεις είναι πιο κοντά στην «πραγματική» εικόνα των φυσικών διαδικασιών.

Γενικά, δίνοντας την κατάλληλη ερμηνεία στις μαθηματικές εκφράσεις και ποσότητες, όπως αυτές περιγράφουν τις φυσικές διεργασίες στον «κόσμο των υλικών», ο Ερευνητής, ο Επιστήμονας, κάνει πιο κοντινά βήματα στο «πραγματικό», το «εφικτό» , το «προβλέψιμο», το «υλοποιήσιμο», που είναι οι δομικές οντότητες σε νέες επιστημονικές και τεχνολογικές επιτεύξεις.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Αναφορές σε Δημοσιεύσεις (References on Publications)

Grattan-Guinness, I (1997), "Laplace's integral solutions to partial differential equations", in Gillispie, C. C. (ed.), *Pierre Simon Laplace 1749–1827: A Life in Exact Science*, Princeton: Princeton University Press, ISBN 978-0-691-01185-1

S.S. Joshi, S.F. Patil, V. Iyer, S. Mahumuni, Radiation induced synthesis and characterization of copper nanoparticles, *Nanostruct. Mater.* 10 (1998) 1135–1144.

G. Kenanakis, et al., Perfect absorbers based on metal–insulator–metal structures in the visible region: a simple approach for practical applications, *Appl. Phys. A* 123 (2017) 77.

Joseph M. Luther, Prashant K. Jain, Trevor Ewers, A. Paul Alivisatos, Localized surface plasmon resonances arising from free carriers in doped quantum dots, *Nat. Mater.* 10 (2011) 361–366, <https://doi.org/10.1038/nmat3004>.

H. Atwater, A. Polman, Plasmonic for improved photovoltaic devices, *Nat. Mater.* 9 (3) (2010) 205–213, <https://doi.org/10.1038/nmat2629>

H. Zoubos, L.E. Koutsokeras, D.F. Anagnostopoulos, E. Lidorikis, S.A. Kalogirou, A.R. Wildes, P.C. Kelires, P. Patsalas, Broadband optical absorption of amorphous carbon/Ag nanocomposite films and its potential for solar harvesting applications, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 117 (2013) 350.

P. Nikolaou, C. Mina, M. Constantinou, L.E. Koutsokeras, G. Constadinides, E. Lidorikis, A. Avgeropoulos, P.C. Kelires, P. Patsalas, Functionally graded poly(dimethylsiloxane)/silver nanocomposites with tailored broadband optical absorption, *Thin Solid Films* 581 (2015) 14.

J.R. Core, N.J. Halas, Optimized plasmonic nanoparticle distributions for solar spectrum harvesting, *Appl. Phys. Lett.* 89 (2006) (Art. No 153120).

G. Kakavelakis, I. Vangelidis, A. Heuer-Jungemann, A.G. Kanaras, E. Lidorikis, E. Stratakis, E. Kymakis, Plasmonic backscattering effect in high – efficient organic photovoltaic devices, *Adv. Energy Mater.* 6 (2016) (Art. No 1501640).

A. Siozios, D.C. Koutsogeorgis, E. Lidorikis, G.P. Dimitrakopoulos, N. Pliatsikas, G. Vourlias, T. Kehagias, P. Komninou, W. Cranton, C. Kosmidis, P. Patsalas, Laser – mater interactions, phase changes and diffusion phenomena during laser annealing of plasmonic

AlN:Ag templates and their applications in optical encoding, *J. Phys. D. Appl. Phys.* 48 (2015) (Art. No 285306).

A. Siozios, D.C. Koutsogeorgis, E. Lidorikis, G.P. Dimitrakopoulos, T. Kehagias, H. Zoubos, P. Kominou, W.M. Cranton, C. Kosmidis, P. Patsalas, Optical encoding by plasmonic - based patterning: hard and inorganic materials become photosensitive, *Nano Lett.* 12 (2012) 259.

G. Kajtár, M. Kafesaki, E.N. Economou, C.M. Soukoulis, Theoretical model of homogeneous metal–insulator–metal perfect multi-band absorbers for the visible spectrum, *J. Phys. Appl. Phys.* 49 (2016), 055104.

M.B. Cortie, A.M. McDonagh, Synthesis and optical properties of hybrid and alloy plasmonic nanoparticles, *Chem. Rev.* 111 (2011) 3713.

D.Wan, H.I. Chen, S.C. Tseng, L.A. Wang, Y.P. Chen, One-shot deep UV-pulsed laser induced photomodification of hollow metal nanoparticles for high density data storage on flexible substrates, *ACS Nano* 4 (2010) 165.

L. De Sio, et al., Next-generation thermo-plasmonic technologies and plasmonic nanoparticles in optoelectronics, *Prog. Quant. Electron.* 41 (2015) 23–70.

V.K. Pustovalov, L.G. Astafyeva, W. Fritzsche, Light-absorption selection of nanoparticles and nanofluids containing nanoparticles for their effective heating by solar radiation, *Nanotechnol. Environ. Eng.* 2 (2017) 7.

Halidias, Nikolaos (2018), A generalisation of Laplace and Fourier transforms, *Asian Journal of Mathematics and Computer Research*

M. A. El-Sayed, “Some interesting properties of metals confined in time and nanometer space of different shapes,” *Accounts of Chemical Research*, vol. 34, no. 4, pp. 257–264, 2001.

M.J. Beliatis, S.J. Henley, S.R.P. Silva, Engineering the Plasmon resonance of large area bimetallic nanoparticle films by laser nanostructuring for chemical sensors, *Opt.Lett.* 36 (8) (2011) 1362.

N. Kalfagiannis, A. Siozios, D.V. Bellas, D.Toliopoulos, L. Bowen, N.Pliatsikas, W.M. Cranton, C. Kosmidis, D.C. Koutsogeorgis, E.Lidorikis, P.Patsalas, Selective modification of nanoparticle arrays by laser-induced self assembly (MONA-LISA):putting control into bottom-up plasmonic nanostructuring, *Nanoscale* 8 (2016) 8236

C. Favazza, R. Kalyanaraman, R. Sureshkuar, Robust nanopatterning by laser-induced dewetting of metal nanofilms, *Nanotechnology* 17 (2006) 4229.

- C.E. Rodriguez, R.J. Pelaez, C.N. Afonso, S. Riedel, P. Leiderer, D. Jimenez-Key, A. Climent-Font, Plasmonic response and transformation mechanism upon single laser exposure of metal discontinuous films, *Appl. Surf. Sci.* 302 (2014) 32.
- S.J. Henley, J.D. Carey, S.R.P. Silva, Metal nanoparticle production by pulsed laser nanostructuring of thin metal films, *Appl. Surf. Sci.* 253 (2007) 8080.
- E. Lidorikis, A.C. Ferrari, Photonics with multiwall carbon nanotube arrays, *ACS Nano* 3 (2009) 1238.
- N.J. Hallas, Plasmonics: an emerging field fostered by Nano Lett. 10 (2010) 3816.
- M. M. Miller, A.A. Lazarides, Sensitivity of metal nanoparticle surface Plasmon resonance to the dielectric environment, *J. Phys. Chem. B* 109 (2005) 21556.
- N. Lagos, M.M. Sigalas, E. Lidorikis, Theory of plasmonic near-field enhanced absorption in solar cells, *Appl. Phys. Lett.* 99 (2011) (Art No 063304).
- F. Schedin, E. Lidorikis, A. Lombardo, V.G. Kravets, A.K. Geim, A.N. Grigorenko, K.S. Novoselof, A.C. Ferrari, Surface-enhanced Raman spectroscopy of graphenes, *ACS Nano* 4 (2010) 517.
- F. Hubenthal, Nanoparticles and their tailoring with laser light, *Eur. J. Phys.* 30 (2009) S49.
- F. Ruffino, A. Pulgiara, E. Carria, C. Bongiorno, C. Spinella, M.G. Grimaldi, Formation of nanoparticles from laser irradiated Au thin film on SiO₂/Si: elucidating the Rayleigh-instability role, *Mater. Lett.* 84 (2012) 27.
- G. Walters, I.P. Parkin, The incorporation of noble metal nanoparticles into host matrix thin films: synthesis, characterisation and applications., *J. Mater. Chem.* 19 (2009) 574.

Αναφορές σε Βιβλία (Book references)

- Bracewell, R. N. (2000), *The Fourier Transform and Its Applications* (3rd ed.), Boston: McGraw-Hill, ISBN 978-0-07-116043-8
- Riley, K. F.; Hobson, M. P.; Bence, S. J. (2010), *Mathematical methods for physics and engineering* (3rd ed.), Cambridge University Press, p. 455, ISBN 978-0-521-86153-3
- Lipschutz, S.; Spiegel, M. R.; Liu, J. (2009), *Mathematical Handbook of Formulas and Tables*, Schaum's Outline Series (3rd ed.), McGraw-Hill, p. 183, ISBN 978-0-07-154855-7

Doetsch, Gustav (1974), Introduction to the Theory and Application of the Laplace Transformation, Springer, ISBN 978-0-387-06407-9

Welty, James R.; Wicks, Charles E.; Wilson, Robert Elliott (1976). Fundamentals of momentum, heat, and mass transfer (2nd edition).

Lienhard, John H. IV; Lienhard, John H. V (2019). A Heat Transfer Textbook (5th ed.). Mineola, NY: Dover Pub. p. 3.

Αναφορές σε Ιστότοπους (Web references)

[Web-ref 1]: web.phys.ksu.edu/vqm/laserweb/Preface/Hp001.htm

[Web-ref 2]: www.mathworks.com

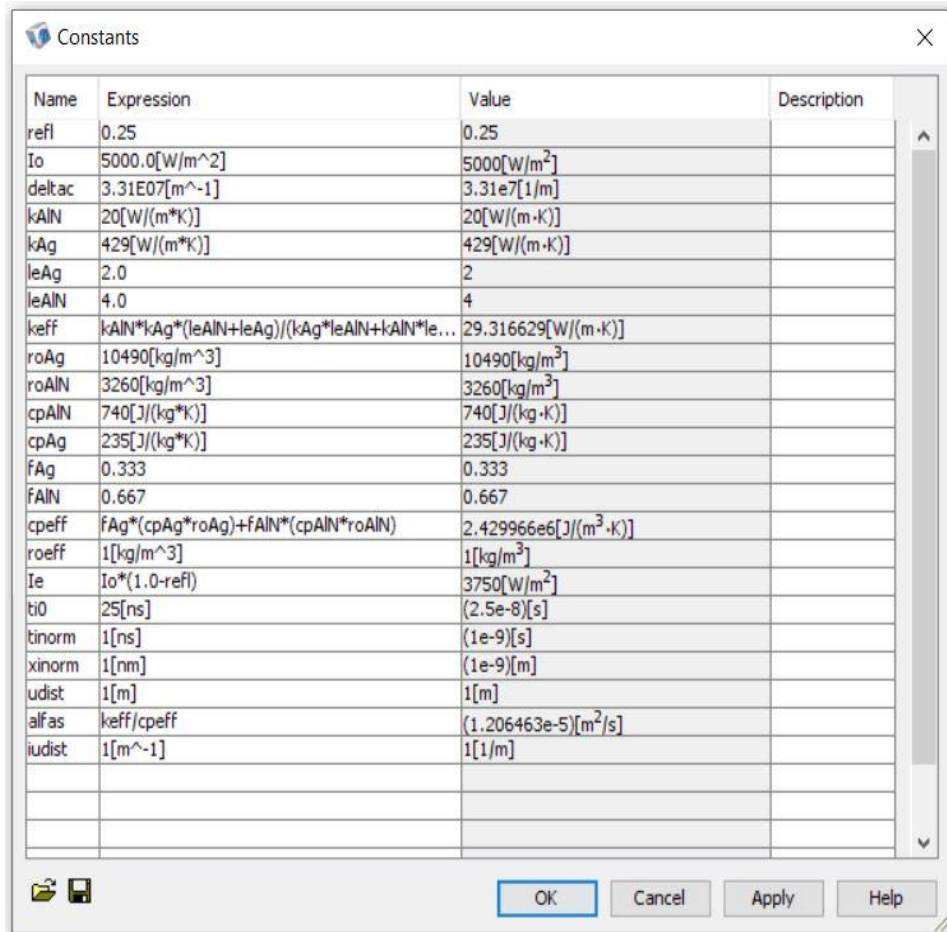
[Web-ref 3]: www.comsol.com

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

A) ΟΙ ΕΠΙΠΛΕΟΝ ΡΥΘΜΙΣΕΙΣ ΣΤΟ ComSol ΓΙΑ ΣΕΝΑΡΙΑ A1, A2, B1, B2

Για το «Σενάριο A1» οι επιπλέον (ή διαφορετικές) ρυθμίσεις είναι ως εξής:

«Σταθερές» που εμπλέκονται στους υπολογισμούς στο ComSol



Name	Expression	Value	Description
refl	0.25	0.25	
Io	5000.0[W/m^2]	5000[W/m^2]	
deltac	3.31E07[m^-1]	3.31e7[1/m]	
kAlN	20[W/(m*K)]	20[W/(m·K)]	
kAg	429[W/(m*K)]	429[W/(m·K)]	
leAg	2.0	2	
leAlN	4.0	4	
keff	kAlN*kAg*(leAlN+leAg)/(kAg*leAlN+kAlN*le...	29.316629[W/(m·K)]	
roAg	10490[kg/m^3]	10490[kg/m^3]	
roAlN	3260[kg/m^3]	3260[kg/m^3]	
cpAlN	740[J/(kg*K)]	740[J/(kg·K)]	
cpAg	235[J/(kg*K)]	235[J/(kg·K)]	
fAg	0.333	0.333	
fAlN	0.667	0.667	
cpeff	fAg*(cpAg*roAg)+fAlN*(cpAlN*roAlN)	2.429966e6[J/(m^3·K)]	
roeff	1[kg/m^3]	1[kg/m^3]	
Ie	Io*(1.0-refl)	3750[W/m^2]	
ti0	25[ns]	(2.5e-8)[s]	
tinorm	1[ns]	(1e-9)[s]	
xinorm	1[nm]	(1e-9)[m]	
udist	1[m]	1[m]	
alfas	keff/cpeff	(1.206463e-5)[m^2/s]	
iudist	1[m^-1]	1[1/m]	

Συνοριακές συνθήκες - Σύνορο 1 (B.C. 1)

Boundary Settings - Heat Transfer by Conduction (ht)

Equation

$$\mathbf{n} \cdot (k \nabla T) = q_0 + h(T_{\text{inf}} - T) + \text{Const}(T_{\text{amb}}^4 - T^4)$$

Boundaries Groups

Boundary selection

1
2

Group:

Select by group

Interior boundaries

Coefficients Color

Boundary sources and constraints

Boundary condition: Heat flux

Quantity	Value/Expression	Unit	Description
q_0	$I_e \cdot \text{deltac} \cdot \text{udist}$	W/m ²	Inward heat flux
h	0	W/(m ² ·K)	Heat transfer coefficient
T_{inf}	300.0	K	External temperature
Const	0	W/(m ² ·K ⁴)	Problem-dependent constant
T_{amb}	300.0	K	Ambient temperature
T_0	300.0	K	Temperature

OK Cancel Apply Help

Υποπεριοχή (Subdomain 1)

Subdomain Settings - Heat Transfer by Conduction (ht)

Equation

$$\delta_{ts} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T) = Q + h_{\text{trans}}(T_{\text{ext}} - T) + C_{\text{trans}}(T_{\text{ambtrans}}^4 - T^4), T = \text{temperature}$$

Subdomains Groups

Subdomain selection

1

Group:

Select by group

Active in this domain

Physics Init Element Color/Style

Thermal properties and heat sources/sinks

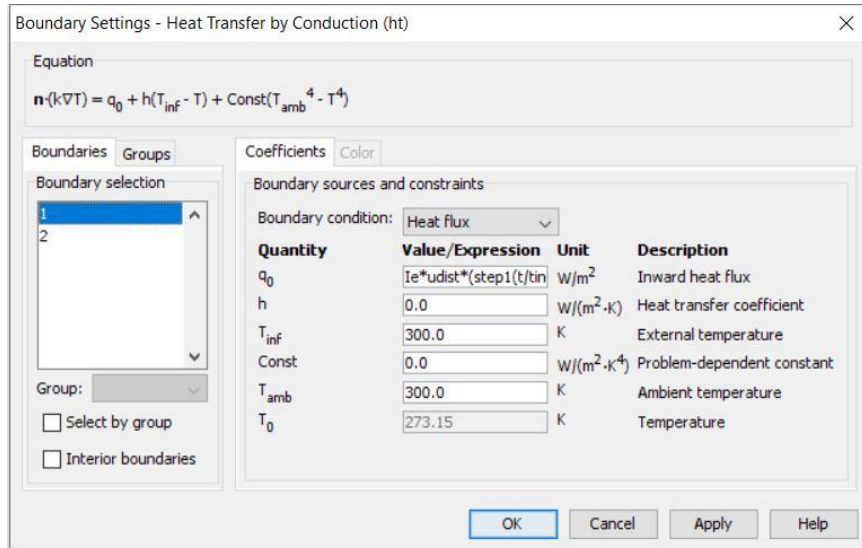
Library material: Load...

Quantity	Value/Expression	Unit	Description
δ_{ts}	1		Time-scaling coefficient
k	keff	W/(m·K)	Thermal conductivity
ρ	roeff	kg/m ³	Density
C_p	cpeff/roeff	J/(kg·K)	Heat capacity at constant pressure
Q	0.0	W/m ³	Heat source
h_{trans}	0	W/(m ³ ·K)	Convective heat transfer coefficient
T_{ext}	300.0	K	External temperature
C_{trans}	0	W/(m ³ ·K ⁴)	User-defined constant
T_{ambtrans}	300.0	K	Ambient temperature

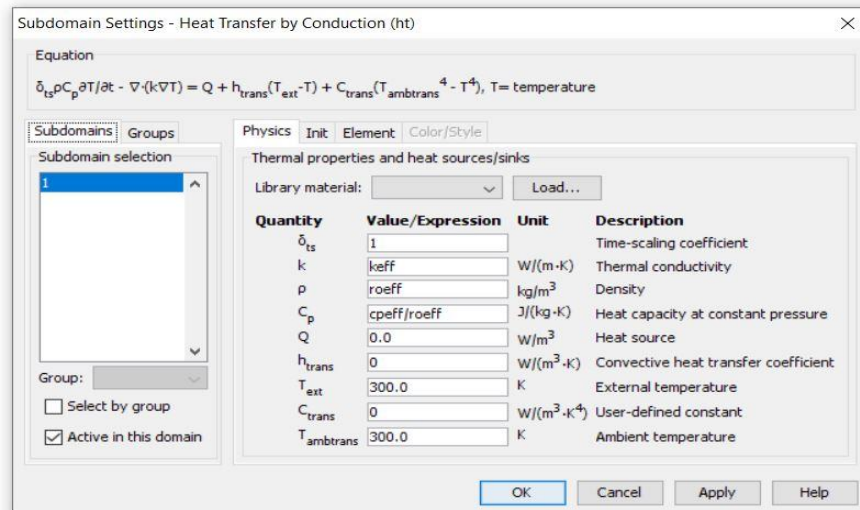
OK Cancel Apply Help

Για το «Σενάριο Α2» οι επιλέγον (ή διαφορετικές) ρυθμίσεις είναι ως εξής:

Συνοριακές συνθήκες –Σύνορο 1 (B.C. 1)



Υποπεριοχή (Subdomain 1)



Για το «Σενάριο B1» οι επιπλέον (ή διαφορετικές) ρυθμίσεις είναι ως εξής:

«Σταθερές» που εμπλέκονται στους υπολογισμούς στο ComSol

Name	Expression	Value	Description
refl	0.25	0.25	
Io	5000.0[W/m^2]	5000[W/m^2]	
deltac	1.655E07[m^-1]	1.655e7[1/m]	
kAlN	20[W/(m*K)]	20[W/(m-K)]	
kAg	429[W/(m*K)]	429[W/(m-K)]	
leAg	2.0	2	
leAlN	4.0	4	
keff	kAlN*kAg*(leAlN+leAg)/(kAg*leAlN+kAlN*leAg)	29.316629[W/	
roAg	10490[kg/m^3]	10490[kg/m^3]	
roAlN	3260[kg/m^3]	3260[kg/m^3]	
cpAlN	740[J/(kg*K)]	740[J/(kg-K)]	
cpAg	235[J/(kg*K)]	235[J/(kg-K)]	
fAg	0.333	0.333	
fAlN	0.667	0.667	
cpeff	fAg*(cpAg*roAg)+fAlN*(cpAlN*roAlN)	2.429966e6[J/	
roeff	1[kg/m^3]	1[kg/m^3]	
Ie	Io*(1.0-refl)	3750[W/m^2]	
ti0	25[ns]	(2.5e-8)[s]	
tinorm	1[ns]	(1e-9)[s]	
xinorm	1[nm]	(1e-9)[m]	
udist	1[m]	1[m]	
alfas	keff/cpeff	(1.206463e-5)[m	

Συνοριακές συνθήκες – Σύνορο B.C. 1

Boundary Settings - Heat Transfer by Conduction (ht)

Equation

$$n \cdot (k \nabla T) = q_0 + h(T_{inf} - T) + \text{Const}(T_{amb}^4 - T^4)$$

Boundaries: 1, 2

Group: Select by group Interior boundaries

Coefficients

Boundary condition: Heat flux

Quantity	Value/Expression	Unit	Description
q_0	$I_e \cdot \text{deltac} \cdot \text{udist}$	W/m ²	Inward heat flux
h	0	W/(m ² ·K)	Heat transfer coefficient
T_{inf}	300.0	K	External temperature
Const	0	W/(m ² ·K ⁴)	Problem-dependent constant
T_{amb}	300.0	K	Ambient temperature
T_0	300.0	K	Temperature

Υποπεριοχή (Subdomain 1)

Subdomain Settings - Heat Transfer by Conduction (ht)

Equation

$$\delta_{ts} \rho C_p \partial T / \partial t - \nabla \cdot (k \nabla T) = Q + h_{trans} (T_{ext} - T) + C_{trans} (T_{ambtrans}^4 - T^4), T = \text{temperature}$$

Subdomains Groups

Subdomain selection

1

Group:

Select by group

Active in this domain

Physics Init Element Color/Style

Thermal properties and heat sources/sinks

Library material: Load...

Quantity	Value/Expression	Unit	Description
δ_{ts}	1		Time-scaling coefficient
k	keff	W/(m·K)	Thermal conductivity
ρ	roeff	kg/m ³	Density
C_p	cpeff/roeff	J/(kg·K)	Heat capacity at constant pressure
Q	[e*deltac*(exp(-(x*c	W/m ³	Heat source
h_{trans}	0 [e*deltac*(exp(-(x*deltac	W/(m ² ·K)	Convective heat transfer coefficient
T_{ext}	300.0	K	External temperature
C_{trans}	0	W/(m ³ ·K ⁴)	User-defined constant
$T_{ambtrans}$	300.0	K	Ambient temperature

OK Cancel Apply Help

Για το «Σενάριο B2» οι επιλέγον (ή διαφορετικές) ρυθμίσεις είναι ως εξής:

Συνοριακές συνθήκες – Σύνορο B.C.1

Boundary Settings - Heat Transfer by Conduction (ht)

Equation

$$\mathbf{n} \cdot (k \nabla T) = q_0 + h (T_{inf} - T) + \text{Const} (T_{amb}^4 - T^4)$$

Boundaries Groups

Boundary selection

1
2

Group:

Select by group

Interior boundaries

Coefficients Color

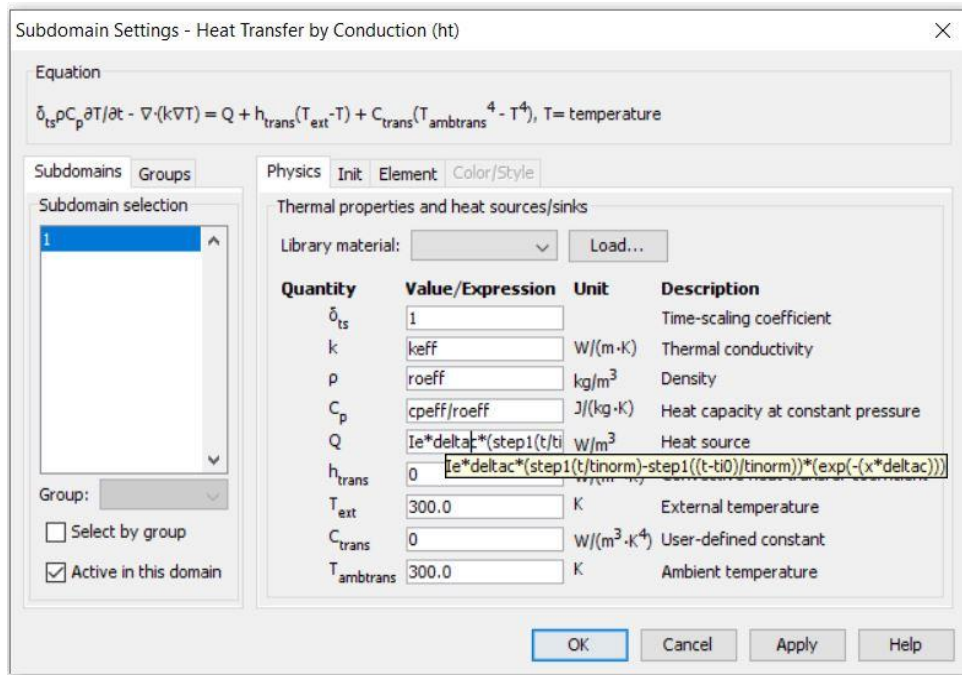
Boundary sources and constraints

Boundary condition: Heat flux

Quantity	Value/Expression	Unit	Description
q_0	[e*deltac*udist*(stej	W/m ²	Inward heat flux
h	0 [e*deltac*udist*(step1(t/tinorm)-step1((t-ti0)/tinorm))	W/(m ² ·K)	
T_{inf}	300.0	K	External temperature
Const	0	W/(m ² ·K ⁴)	Problem-dependent constant
T_{amb}	300.0	K	Ambient temperature
T_0	300.0	K	Temperature

OK Cancel Apply Help

Υποπεριοχή (Subdomain 1)



B) ΚΩΔΙΚΑΣ σε MatLab

Συνάρτηση MatLab για «Σενάριο A1»

```
function okA1 = findTforAlcase( xxia, ttia )
%UNTITLED Summary of this function goes here
% Detailed explanation goes here
```

```
Tauo=300.0;
Ioo=5000.0;
imkain=0.19;
imkag=1.18;
refleca=0.25;
kain=20.0;
kag=429.0;
fAg=0.333;
fAIN=0.667;
imkeff=imkain*fAIN+imkag*fAg;
lain=4.0;
lag=2.0;
delta=3.31e07;
kth=(kain*kag*(lag+lain))/(kain*lag+kag*lain);
Iee=Ioo*(1.0-refleca);
roag=10490.0;
roain=3260.0;
ceain=740.0;
ceag=235.0;
```



```

cepeeff=fAIN*(ceain*roain)+fAg*(ceag*roag);
alfa=kth/cepeeff;
%
timi=0.000000000:0.00000000025:0.000000200;
apotelesmaA1=zeros(801);
xronosA1=zeros(801);
%%%%%
xxia=0.000002000;
%%%%%
for jjm=1:801
    if (timi(jjm)<=0.0)
        apotelesmaA1(jjm)=300.0;
        xronosA1(jjm)=0.0;
        ttia=xronosA1(jjm);
    else
        xronosA1(jjm)=timi(jjm);
        ttia=timi(jjm);
    end
end
tiorisma=xxia/(2.0*sqrt(alfa*ttia));
thermoA1=Tauo+((2.0*Iee*delta)/kth)*(sqrt(alfa*ttia))*ierfc(tiorisma);
apotelesmaA1(jjm)=thermoA1;
end
end
plot(xronosA1,apotelesmaA1);
okA1=1.0;
end

```

Συνάρτηση MatLab για «Σενάριο A2»

```

function okA2 = findTforA2case()
%UNTITLED Summary of this function goes here
% Detailed explanation goes here

Tauo=300.0;
Ioo=5000.0;
imkain=0.19;
imkag=1.18;
totauo=0.000000025;
refleca=0.25;
kain=20.0;
kag=429.0;
fAg=0.333;
fAIN=0.667;
imkeff=imkain*fAIN+imkag*fAg;
lain=4.0;
lag=2.0;
delta=3.31e07;
kth=(kain*kag*(lag+lain))/(kain*lag+kag*lain);

```

```

Iee=Ioo*(1.0-refleca);
roag=10490.0;
roain=3260.0;
ceain=740.0;
ceag=235.0;
cepeeff=fAIN*(ceain*roain)+fAg*(ceag*roag);
alfa=kth/cepeeff;
%
timi2=0.000000000:0.00000000025:0.000000200;
apotelesmaA2=zeros(801);
xronosA2=zeros(801);
%%%%
xxia=0.000002000;
%%%%
    for jjmm=1:801
        if (timi2(jjmm)<=0.0)
            apotelesmaA2(jjmm)=300.0;
            xronosA2(jjmm)=0.0;
            ttia2=xronosA2(jjmm);
        else
            xronosA2(jjmm)=timi2(jjmm);
            ttia2=timi2(jjmm);

tiorisma=xxia/(2.0*sqrt(alfa*ttia2));
thermoA2=((2.0*Iee*delta)/kth)*(sqrt(alfa*ttia2))*ierfc(tiorisma);
if (ttia2>totauo)
    xttia2=ttia2-totauo;
    xtiorisma=xxia/(2.0*sqrt(alfa*xttia2));

xthermoA2=((2.0*Iee*delta)/kth)*sqrt(alfa*xttia2)*ierfc(xtiorisma);
else
    xthermoA2=0.0;
end
apotelesmaA2(jjmm)=Tauo+thermoA2-xthermoA2;
    end
end
plot(xronosA2,apotelesmaA2);
okA2=1.0;
end

```

Συνάρτηση MatLab για «Σενάριο B1»

```

function okB1 = findTforBlcase()
%UNTITLED Summary of this function goes here
% Detailed explanation goes here

```



```

Tauo=300.0;
Ioo=5000.0;
imkain=0.19;
imkag=1.18;
refleca=0.25;
kain=20.0;
kag=429.0;
fAg=0.333;
fAIN=0.667;
imkeff=imkain*fAIN+imkag*fAg;
totio=0.000000025;
lain=4.0;
lag=2.0;
delta=1.655e07;
kth=(kain*kag*(lag+lain))/(kain*lag+kag*lain);
Iee=Ioo*(1.0-refleca)*delta;
roag=10490.0;
roain=3260.0;
ceain=740.0;
ceag=235.0;
cepeeff=fAIN*(ceain*roain)+fAg*(ceag*roag);
alfa=kth/cepeeff;
%%%%%%%%%%
xiabl=0.000002000;
%%%%%%%%%%
tiabl=0.000000000:0.00000000025:0.000000200;
xronosB1=zeros(801);
apotelesmaB1=zeros(801);
for mmj=1:801
    xronosB1(mmj)=ttiabl(mmj);
    zztia=ttiabl(mmj);
    tosqi=(alfa*zztia);
    oris=xiabl/(2.0*sqrt(tosqi));
    tothermbb11=(Iee/kth)*((2.0*(sqrt(tosqi))*(ierfc(oris)))-
    ((1.0/(delta*delta))*(exp(-(delta*xiabl)))));
    tocex=alfa*delta*delta*zztia+delta*xiabl;
    tocex2=alfa*delta*delta*zztia-delta*xiabl;
    tocerf= delta*sqrt(tosqi)+(xiabl/(2.0*(sqrt(tosqi))));
    tocerf2=delta*sqrt(tosqi)-(xiabl/(2.0*(sqrt(tosqi))));
    tothermbb11=tothermbb11+(Iee/kth)*(1.0/(2.0*(delta*delta)))*(
    exp(tocex))*erfc(toc erf);
    tothermbb11=tothermbb11+(Iee/kth)*(1.0/(2.0*(delta*delta)))*(
    exp(tocex2))*erfc(toc erf2);

apotelesmaB1(mmj)=Tauo+tothermbb11;
end
plot(xronosB1,apotelesmaB1);
hold on
okB1=1.0;
end

```

Συνάρτηση MatLab για «Σενάριο B2»

```
function okB2 = findTforB2case()

%UNTITLED Summary of this function goes here
% Detailed explanation goes here

Tauo=300.0;
Ioo=5000.0;
imkain=0.19;
imkag=1.18;
refleca=0.25;
kain=20.0;
kag=429.0;
fAg=0.333;
fAIN=0.667;
imkeff=imkain*fAIN+imkag*fAg;
totio=0.000000025;
lain=4.0;
lag=2.0;
delta=1.655e07;
kth=(kain*kag*(lag+lain))/(kain*lag+kag*lain);
Iee=Ioo*(1.0-refleca)*delta;
roag=10490.0;
roain=3260.0;
ceain=740.0;
ceag=235.0;
cepeeff=fAIN*(ceain*roain)+fAg*(ceag*roag);
alfa=kth/cepeeff;
%%%%%%%%%%
xiab2=0.000002000;
%%%%%%%%%%
ttiab2=0.000000000:0.00000000025:0.000000200;
xronosB2=zeros(801);
apotelesmaB2=zeros(801);
for xmmj=1:801

    xronosB2(xmmj)=ttiab2(xmmj);
    zztia=ttiab2(xmmj);
    tosqi=alfa*zztia;
    %apotelesmaB1(mmj)=Tauo+((2.0*Iee)/kth)*sqrt(tosqi);
    oris=xiab2/(2.0*sqrt(tosqi));
    tothermbb22=(Iee/kth)*((2.0*(sqrt(tosqi))*(ierfc(oris)))-
    ((1.0/(delta*delta))*(exp(-(delta*xiab2)))));
    tocex=alfa*delta*delta*zztia+delta*xiab2;
    tocex2=alfa*delta*delta*zztia-delta*xiab2;
    tocerf= delta*sqrt(tosqi)+(xiab2/(2.0*sqrt(tosqi)));
    tocerf2=delta*sqrt(tosqi)-(xiab2/(2.0*sqrt(tosqi)));
```

```

tothermbb22=tothermbb22+(Iee/kth)*(1.0/(2.0*(delta*delta)))*(
exp(tocecx))*erfc(tocerf);
tothermbb22=tothermbb22+(Iee/kth)*(1.0/(2.0*(delta*delta)))*(
exp(tocecx2))*erfc(tocerf2);
if (zztia>totio)
    xzztia=zztia-totio;
    xtosqi=alfa*xzztia;
xoris=xiab2/(2.0*sqrt(xtosqi));
xtothermbb22=(Iee/kth)*((2.0*(sqrt(xtosqi))*(ierfc(xoris)))-
((1.0/(delta*delta))*(exp(-(delta*xiab2)))));
xtocecx=alfa*delta*delta*xzztia+delta*xiab2;
xtocecx2=alfa*delta*delta*xzztia-delta*xiab2;
xtocerf= delta*sqrt(xtosqi)+(xiab2/(2.0*sqrt(xtosqi)));
xtocerf2=delta*sqrt(xtosqi)-(xiab2/(2.0*sqrt(xtosqi)));
xtothermbb22=xtothermbb22+(Iee/kth)*(1.0/(2.0*(delta*delta)))
*(exp(xtocecx))*erfc(xtocerf);
xtothermbb22=xtothermbb22+(Iee/kth)*(1.0/(2.0*(delta*delta)))
*(exp(xtocecx2))*erfc(xtocerf2);
else
    xtothermbb22=0.0;
end
apotelesmaB2(xmmj)=Tauo+(tothermbb22-xtothermbb22);
end
plot(xronosB2,apotelesmaB2);
okB2=1.0;
end

```