

Dokumentation zum Applet "Diffusor"

Autoren:

Sören Witt

Niclas Köser

User-Eingaben:

Physikalische Parameter:

- D_{RT} , Diffusionskonstante bei Raumtemperatur ($\approx 300K$), $[D_{RT}] = \frac{cm^2}{s}$
- E_a , Aktivierungsenergie, $[E_a] = eV$
- T , Temperatur, $[T] = K$
- r , Sprungweite, $[r] = \text{\AA}$

Simulations-Parameter:

- n , Anzahl der Rechnungsdurchläufe zwischen jedem Neuzeichnen des Grafen und der diffundierenden Teilchen
- Δt , Zeitschritt pro Rechnungsdurchlauf. Von dt hängt die Sprungwahrscheinlichkeit A ab. Es gibt daher einen Maximalwert für A und Δt . (s. Unten)

Auswertung der Parameter

Berechnung der tatsächlichen, von der Temperatur T und der Aktivierungsenergie E_a abhängigen, Diffusionskonstanten D_T :

sei $x := k \cdot T$, k : Boltzmann-Konstante.

Und sei $x_{RT} = k \cdot T_{RT} \approx 25meV$, unter der Annahme die Raumtemperatur $T_{RT} \approx 300K$.

$$\begin{aligned} D_0 &:= \frac{D_{RT}}{e^{-\frac{E_a}{x_{RT}}}} \\ D_T &= D_0 \cdot e^{-\frac{E_a}{x}} \\ &= D_{RT} \cdot \left[\frac{e^{-\frac{E_a}{x}}}{e^{-\frac{E_a}{x_{RT}}}} \right] \\ &= D_{RT} \cdot e^{\frac{E_a}{x_{RT}} - \frac{E_a}{x}} \\ &= D_{RT} \cdot e^{E_a \left(\frac{1}{x_{RT}} - \frac{1}{x} \right)} \end{aligned}$$

Berechnung der Sprungwahrscheinlichkeit A :

$$A = a \cdot \Delta t$$

Sprungrate $a := \frac{\#}{[t]}$, #: Anzahl, [t]: Zeiteinheit

$\Delta t < \Delta t_{max}$, wobei $\Delta t_{max} = \frac{A_{max}}{a}$

Programmablauf

Die Benutzereingaben werden gemäß den genannten Berechnungen ausgewertet, worauf ein Thread gestartet wird, der n -mal jedes Teilchen um r springen läßt, wenn $random \leq A$. Die Richtung hängt von $random \lesseqgtr 0,5$ ab.

Im selben Zuge wird der Zeitparameter der analytischen Funktion um $n \cdot \Delta t$ erhöht.

Danach werden die Teilchen und die analytische Funktion neu gezeichnet und das Histogramm neu errechnet und gezeichnet.

Die Formel der Analytischen Lösung lautet

$$f(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_T t}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4D_T t}}$$

x = Ort, t = Zeitpunkt.

Hinweis: Die Größe des beobachteten Bereichs hängt maßgeblich von der Breite des Applets b (in Pixel) ab. Das hängt mit der Darstellung der Teilchen zusammen, bei der 1 Pixel der Sprungweite r entspricht, also wird ein Bereich von $b \cdot r$ Å beobachtet, abzulesen an der Skala unter der analytischen Funktion.

Genaueres ist der Dokumentation des Quell-Codes zu entnehmen.