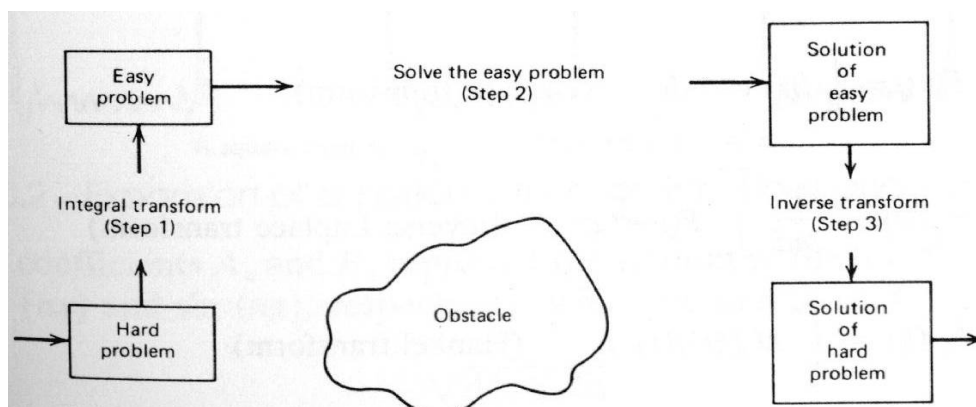


2. Vorlesung

2.) LÖSUNG DER LINEAREN DIFFUSIONSGLEICHUNG MIT VERSCHIEDENEN RANDBEDINGUNGEN

- 2.1) Transformationsmethoden
- 2.2) Kontinuierliche, planare Quelle (Lineare Diffusion im halbbunendlichen Medium)
 - 2.2.1) Fehlerfunktion
 - 2.2.2) Eigenschaften der Lösung für die kontinuierliche, planare Quelle
- 2.3) Instantane, planare Diffusionsquelle
- 2.4) Dünnschichtkonfigurationen
- 2.5) Diffusionspaar
 - 2.5.1) Superpositionsprinzip
 - 2.5.2.) Vergleich mit der Lösung aus 2.2.)
- 2.6) Schichtanordnung

2.) Lösung der linearen Diff.Gl: Integraltransformation zur Lösung von PDEs



2.1) Lösung der linearen Diff.-Gl.: Transformationsmethoden

$$\mathcal{L}\{F(t)\} \equiv \int_a^b F(t)K(t,p)dt = \tilde{F}(p)$$

wobei

- $\mathcal{L}\{F(t)\}$ Die Laplace-Transformation überführt eine **Objektfunktion**, $F(t)$, in eine **Bildfunktion**, $\tilde{F}(p)$.
- t Unabhängige Variable: Zeit
- $K(t,p)$ Kern der Transformation
- e^{-pt} Laplace-Kern

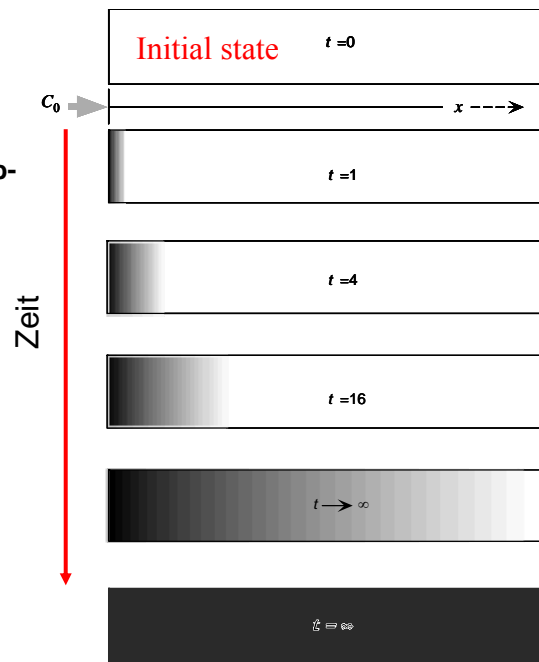
2.1) Laplacetransformation

TABLE 3.1 Short table of Laplace transforms

Object Function $F(t)$	Image Function $\mathcal{L}\{F(t)\} = f(p)$	Condition
$\cos \omega t$	$\frac{p}{p^2 + \omega^2}$	
$\sin \omega t$	$\frac{\omega}{p^2 + \omega^2}$	
e^{at}	$\frac{1}{p - a}$	$p > a$
1	$\frac{1}{p}$	
t^n	$\frac{n!}{p^{n+1}}$	$n \geq 0$
$e^{at} t^n$	$\frac{G(n+1)}{(p-a)^{n+1}}$	$p > a, n > -1$
$\frac{a}{2\sqrt{\pi}t^{3/2}} e^{-a^2/4t}$	$e^{-a\sqrt{p}}$	$a > 0$
$\frac{1}{\sqrt{\pi t}} e^{-a^2/4t}$	$\frac{1}{\sqrt{p}} e^{-a\sqrt{p}}$	$a \geq 0$
$\operatorname{erfc}\left(\frac{a}{2\sqrt{t}}\right)$	$\frac{1}{p} e^{-a\sqrt{p}}$	$a \geq 0$
$(2t^{3/2})^n \operatorname{erfc}\left(\frac{a}{2\sqrt{t}}\right)$	$p^{-(1+n/2)} e^{-a\sqrt{p}}$	$a \geq 0, n \geq -1$

2.2) Kontinuierliche planare Quelle

Lineare Diffusion in ein halb-unendliches Medium



2.2) Kontinuierliche, planare Quelle: Randbedingungen

- Die Diffusionsgleichung ist eine PDE 2. Ordnung. Es werden daher 2 Rand- oder Anfangsbedingungen benötigt, um eine eindeutige Lösung zu finden.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) \left\{ \begin{array}{l} 1) \text{ Anfangszustand:} \\ C = 0, \text{ für } x > 0, t = 0. \\ 2) \text{ Bedingung am linken Rand:} \\ \text{Bei } x = 0 \text{ ist } C_0 \text{ konstant für } t > 0. \end{array} \right.$$

2.2) Kont. planare Quelle: Laplacetransformation der "x-Ableitung"

$$\tilde{C}(x, p) \equiv \int_0^{\infty} C(x, t) e^{-pt} dt$$



$C(x, t)$ Objektfunktion

e^{-pt} Laplace Kern

\tilde{C} Bildfunktion

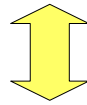
$\tilde{C}(x, p)$ Laplace-transformierte von $C(x, t)$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{1}{D} \frac{\partial C}{\partial t} = 0$$

Lineare Diffusionsgleichung

$$\int_0^{\infty} e^{-pt} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dt$$

Laplace-
transformation
der x-Ableitung.



$$\int_0^{\infty} e^{-pt} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dt = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^{\infty} C e^{-pt} dt = \frac{d^2 \tilde{C}}{d x^2}$$

2.2) Kont. planare Quelle: Laplacetransformation

Partielle Integration

$$-\frac{1}{D} \int_0^{\infty} e^{-pt} \left(\frac{\partial C}{\partial t} \right) dt = -\frac{1}{D} \left(C e^{-pt} \Big|_0^{\infty} - p \int_0^{\infty} C e^{-pt} dt \right) = -\frac{p}{D} \tilde{C}$$



$$C e^{-pt} \Big|_0^{\infty} = 0 - C \Big|_{t=0} = 0$$

Randbedingung

Laplace-Transformation des 2. Fickschen Gesetzes für RB $C(x, 0) = 0$

$$\left(\frac{d^2 \tilde{C}}{d x^2} \right) - \frac{p}{D} \tilde{C} = 0$$

2.2) Kont. planare Quelle: Lsg. Der DGL nach Laplacetransformation

Transformation der Randbedingung $C(0,t)=C_0$:

$$\tilde{C}(0) = \int_0^{\infty} C_0 e^{-pt} dt = -\frac{C_0}{p} e^{-pt} \Big|_0^{\infty}$$

$$\tilde{C}(0) = \frac{C_0}{p}$$

Allgemeine Lösung der Transformation:

$$\tilde{C} = \frac{C_0}{p} e^{\pm \sqrt{\frac{p}{D}} x}$$

Die spezielle Lösung für die Bildfunktion ist die **negative** Wurzel, weil die positive Lösung nicht-physikalisches Verhalten zeigt: $\tilde{C}(x) \rightarrow \infty$

$$\tilde{C}(x) = \frac{C_0}{p} e^{-\sqrt{\frac{p}{D}} x}$$

2.2) Rücktransformation

TABLE 3.1 Short table of Laplace transforms

Object Function $F(t)$	Image Function $L\{F(t)\} = f(p)$	Condition
$\cos \omega t$	$\frac{p}{p^2 + \omega^2}$	
$\sin \omega t$	$\frac{\omega}{p^2 + \omega^2}$	
e^{at}	$\frac{1}{p - a}$	$p > a$
1	$\frac{1}{p}$	
t	$\frac{1}{p^2}$	
t^n	$\frac{n!}{p^{n+1}}$	$n \geq 0$
$e^{at} t^n$	$\frac{G(n+1)}{(p-a)^{n+1}}$	$p > a, n > -1$
$\frac{a}{2\sqrt{\pi t^{3/2}}} e^{-a^2/4t}$	$e^{-a\sqrt{p}}$	$a > 0$
$\frac{1}{\sqrt{\pi t}} e^{-a^2/4t}$	$\frac{1}{\sqrt{p}} e^{-a\sqrt{p}}$	$a \geq 0$
$\operatorname{erfc}\left(\frac{a}{2\sqrt{t}}\right)$	$\frac{1}{p} e^{-a\sqrt{p}}$	$a \geq 0$
$(2t^{3/2})^n \operatorname{erfc}\left(\frac{a}{2\sqrt{t}}\right)$	$p^{-(1+n/2)} e^{-a\sqrt{p}}$	$a \geq 0, n \geq -1$

→

2.2) Kont. planare Quelle: Rücktransformation der Lsg.

Das Konzentrationsfeld, welches zur zuvor bestimmten Bildfunktion gehört, wird formal durch Rücktransformation gefunden.
(Hilfsmittel: Tabellen, Mathematische Software)

$$C(x,t) = C_0 \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

Die Fehlerfunktion, $\operatorname{erf}(z)$, und dessen Komplement, $\operatorname{erfc}(z)$, sind folgendermaßen definiert:

$$\operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-\eta^2} d\eta$$

2.2.1) Fehlerfunktion

- Für kleine Argumente:

$$\operatorname{erf}(z) = -\operatorname{erf}(-z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(z - \frac{z^3}{(3 \cdot 1)!} + \frac{z^5}{(5 \cdot 2)!} - \frac{z^7}{(7 \cdot 3)!} + \dots \right), (|z| < 1)$$

- Für sehr große Argumente:

$$\operatorname{erf}(z) = 1 - \frac{e^{-z^2}}{z\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{1}{2z^2} + \dots \right), (z \rightarrow +\infty)$$

2.2.1) Fehlerfunktion

- Stückweise Näherung für bestimmte Argumentbereiche:

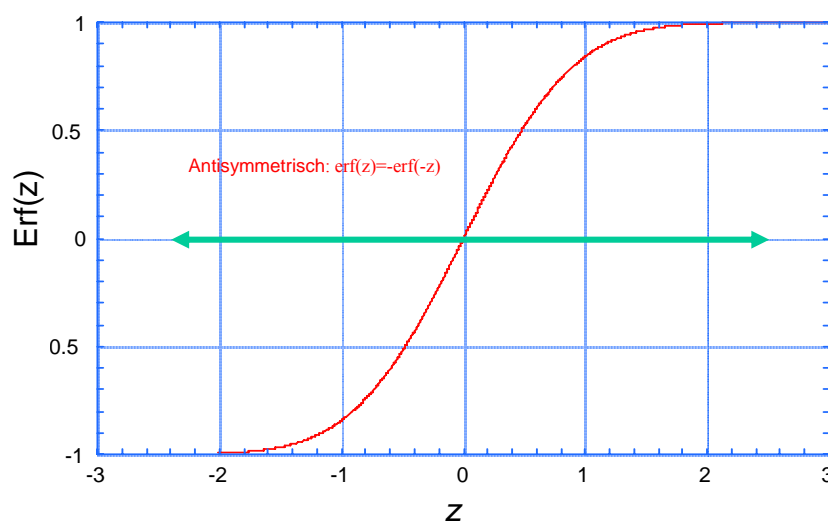
$$\operatorname{erf}(z) = \begin{cases} 1.12838 z, & (0 \leq z \leq 0.15) \\ -0.0198 + z(1.2911 - 0.4262 z), & (0.15 \leq z \leq 1.5) \\ 0.8814 + 0.0584 z, & (1.5 \leq z \leq 2) \\ 1, & (2 \leq z) \end{cases}$$

- Rationale Näherung für positive Argumente, $z > 0$:

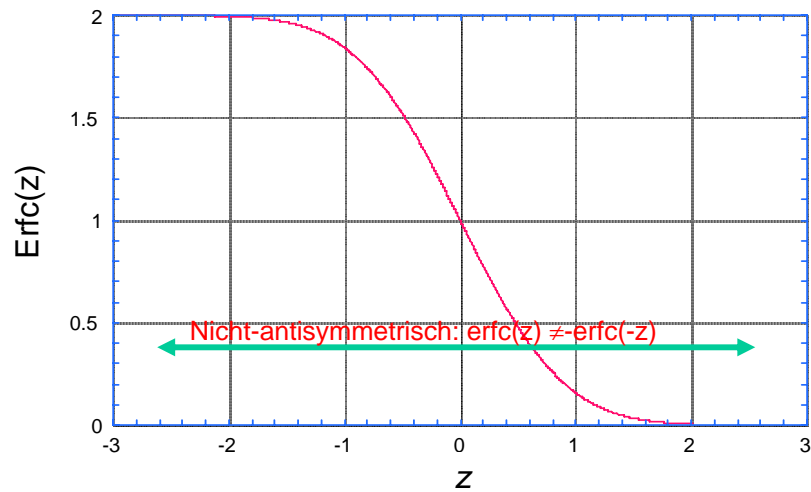
$$\operatorname{erf}(z) = 1 - \left[\frac{1 + 0.278393 z + 0.230389 z^2}{0.000972 z^3 + 0.078108 z^4} \right]^{-4} + \varepsilon(z) < 5 \times 10^{-5}$$

Nützlich für Tabellenkalkulationen

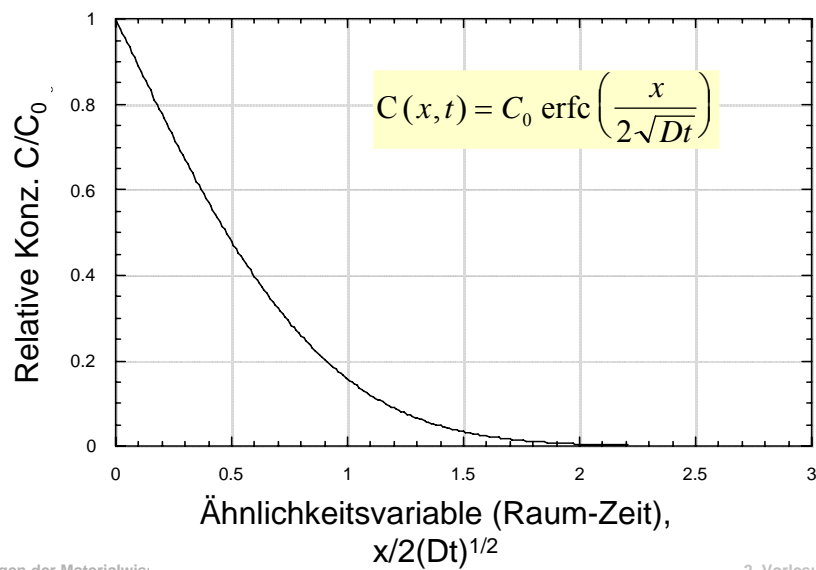
2.2.1) Fehlerfunktion



2.2.1) Komplementäre Fehlerfunktion



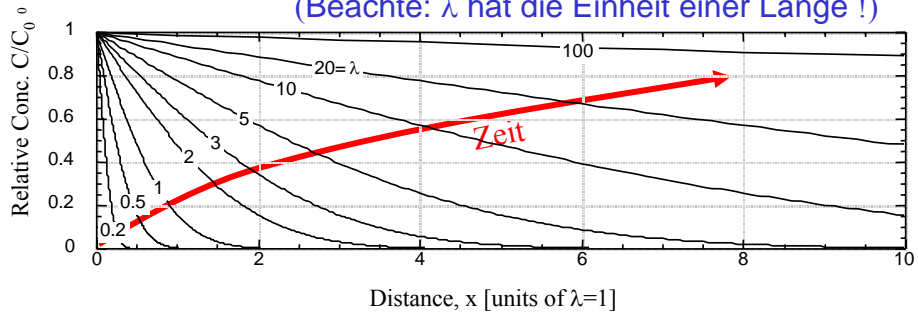
2.2.2) Eigenschaften der Lösung: Konzentration als Funktion der Ähnlichkeitsvariablen



2.2.2) Konzentrationsfeld als Funktion des Abstands

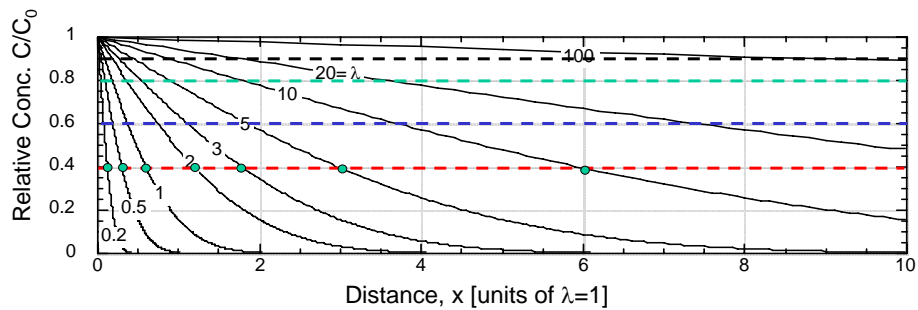
$\lambda = 2(Dt)^{1/2}$ ist ein Maß für die Zeit oder Diffusivität

(Beachte: λ hat die Einheit einer Länge !)



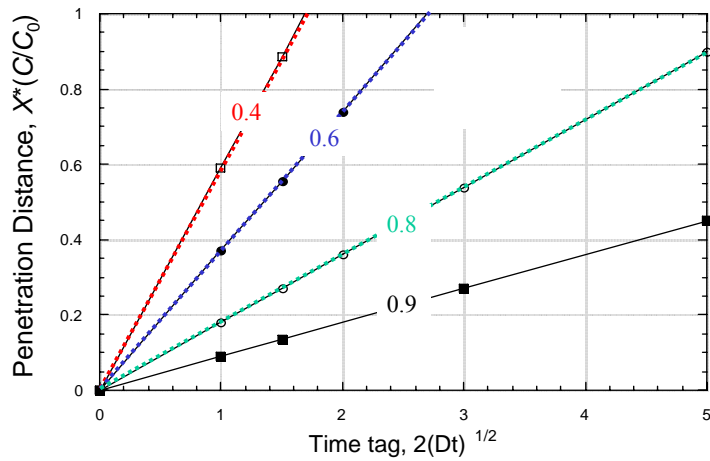
2.2.2) Diffusive Durchdringung X^*

$$X^* = K t^{1/2}$$



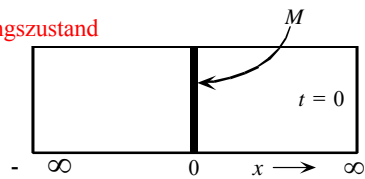
2.2.2) Durchdringungslänge X^* als Funktion der Quadratwurzel der Zeit für verschiedene Konzentrationen

Singularität für $C \rightarrow 0$, Durchdringungsgeschwindigkeit geht gegen unendlich! Problem der parabolischen PDE!



2.3) Instantane planare Diffusionsquelle in einem unendlichen Medium

Anfangszustand

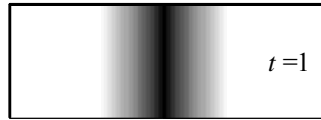
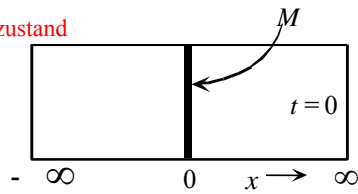


Zeit

Endzustand

2.3) Instantane planare Diffusionsquelle in einem unendlichen Medium

Anfangszustand



Endzustand

Zeit

Eine endliche Menge eines diffundierenden Materials breitet sich in die benachbarten Bereiche aus.

2.3) Instantane planare Diffusionsquelle

Aus der Laplacetransformation des 2. Fickschen Gesetzes folgt:

$$\frac{p}{D} \tilde{C}(x, p) - \frac{d^2 \tilde{C}(x, p)}{dx^2} = \frac{C(x, 0)}{D} \left\{ \begin{array}{l} t=0, C(x, 0)=0, \text{ für alle } x \neq 0 \\ \text{Anfangsbedingung} \\ C(\pm\infty, t) = 0 \\ \text{Randbedingung} \end{array} \right.$$

Für das gestellte Problem gilt Massenerhaltung (pro Einheitsfläche):

$$\int_{-\infty}^{\infty} C(x, t) dx = M$$

2.3) Instantane planare Diffusionsquelle

Reduktion der Laplacetransformierten wegen $C(x, 0)=0$ zu:

$$\frac{p}{D}\tilde{C}(x, p) - \frac{d^2\tilde{C}(x, p)}{dx^2} = 0$$

Mit der allgemeinen Lösung:

$$\tilde{C} = Ae^{(\sqrt{p/D})x} + Be^{-(\sqrt{p/D})x}$$

$$\tilde{C} = Ae^{\sqrt{p/D}x},$$

$x < 0, (B = 0)$

$$\tilde{C} = Be^{-(\sqrt{p/D})x},$$

$x > 0, (A = 0)$

2.3) Instantante planare Diffusionsquelle

Massenerhaltung (symmetrisch): $\int_0^{\infty} C(x, t) dx = \frac{M}{2}$

Laplacetransformierte der Massenerhaltung:

$$\mathcal{L}\left\{\int_0^{\infty} C(x, t) dx\right\} = \mathcal{L}\left\{\frac{M}{2}\right\} \quad \text{oder} \quad \int_0^{\infty} e^{-pt} \int_0^{\infty} C(x, t) dx dt = \int_0^{\infty} \frac{M}{2} e^{-pt} dt$$

Daraus folgt für $x > 0$:

$$\int_0^{\infty} \tilde{C}(x, p) dx = \frac{M}{2p} \quad \text{oder} \quad -\frac{B}{\sqrt{p/D}} e^{-(\sqrt{p/D})x} \Big|_0^{\infty} = \frac{M}{2p}$$

und deshalb $B = \frac{M}{2\sqrt{pD}}$

2.3) Instantane planare Diffusionsquelle

Transformierte Lösung $\tilde{C}(x, p) = \frac{M}{2\sqrt{D}} \frac{e^{-\left(\frac{x}{\sqrt{D}}\right)\sqrt{p}}}{\sqrt{p}}$

Inversion der transformierten Lösung

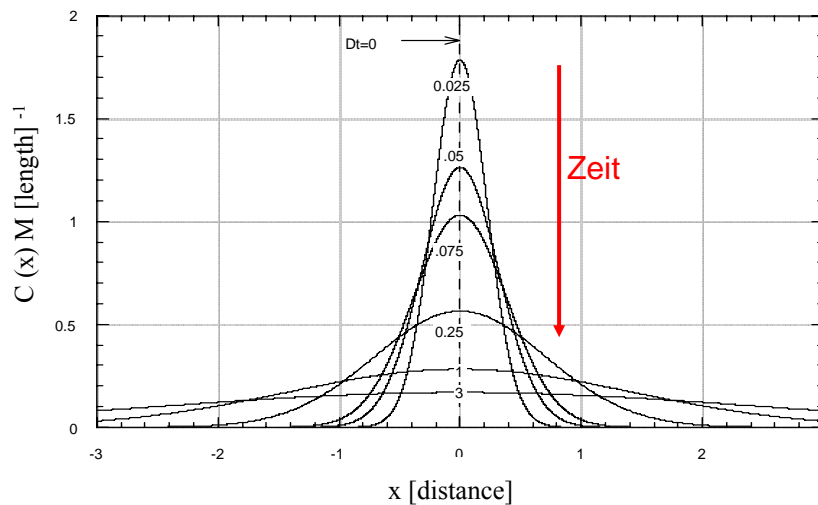
$L^{-1}\{\tilde{C}\} = C(x, t) = \frac{M}{2\sqrt{D}} L^{-1}\left\{p^{-\frac{1}{2}} e^{-a\sqrt{p}}\right\}$ wobei $a = x / (D)^{1/2}$.

Aus Tabelle der Laplacetransformierten: $L^{-1}\left\{\frac{e^{-a\sqrt{p}}}{\sqrt{p}}\right\} = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} e^{-a^2/4t}$

Lösung:

$$C(x, t) = \frac{M}{2\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

2.3) Normalisierte Darstellung für die Lösung der 1-dim. planaren Diffusionsquelle



2.3) Massenerhaltung für die planare Quelle

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{C(x,t)}{M} dx = 1$$

$$\frac{C(x,t)}{M} \equiv \rho(x),$$

daher \rightarrow

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1$$



Gaussintegral:

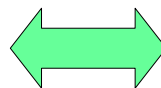
$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du = 1$$

Beachte Verbindung von Wahrscheinlichkeitstheorie und Diffusionsfeldern !

2.4) Dünnschicht-Konfiguration

Dünnschichtkonfigurationen werden in experimentellen Untersuchungen verwendet, um Diffusionskoeffizienten für Tracerdiffusion zu bestimmen. Die Dünnschichtkonfiguration ist der Lösung für die instantane planare Quelle ähnlich. Die Quelle (dünne Schicht) ist an der Oberfläche der Probe und die Diffusion erfolgt nur in einen Halbraum.

$$C(x,t) = \frac{M_{thin\ film}}{\sqrt{\pi Dt}} e^{-x^2/4Dt}$$



$$C(x,t) = \frac{M}{2\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

wobei $M_{thin-film}$ die Stärke der Quelle beschreibt.

$$2M_{thin-film} = M$$

2.4) Analyse von Dünnschichtdaten

Logarithmieren von

$$C(x, t) = \frac{M_{\text{thin film}}}{\sqrt{\pi D t}} e^{-x^2/4Dt}$$

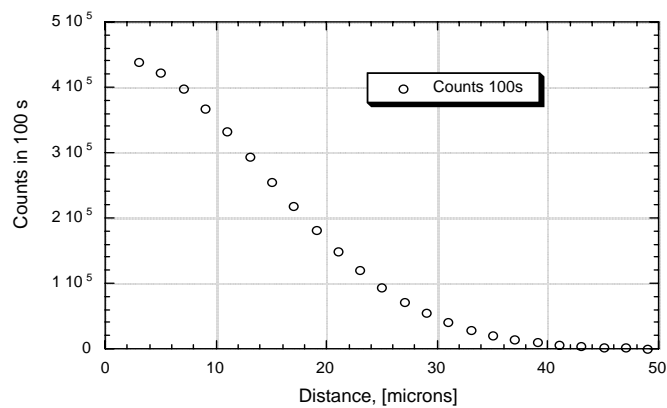
Ergibt:

$$\ln[C(x, t)] = \ln\left[\frac{M_{\text{thin film}}}{\sqrt{\pi D t}}\right] - \frac{x^2}{4Dt}$$

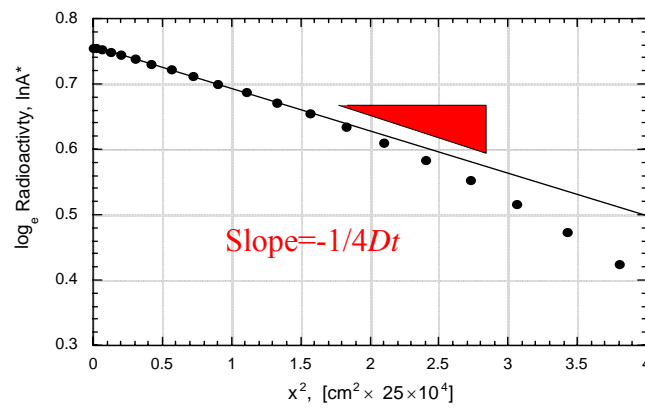
Aus der halblogarithmischen Darstellung
 $\ln C$ über x^2 ergibt sich die Steigung $= -1/4Dt$

2.4) Dünnschichtexperiment

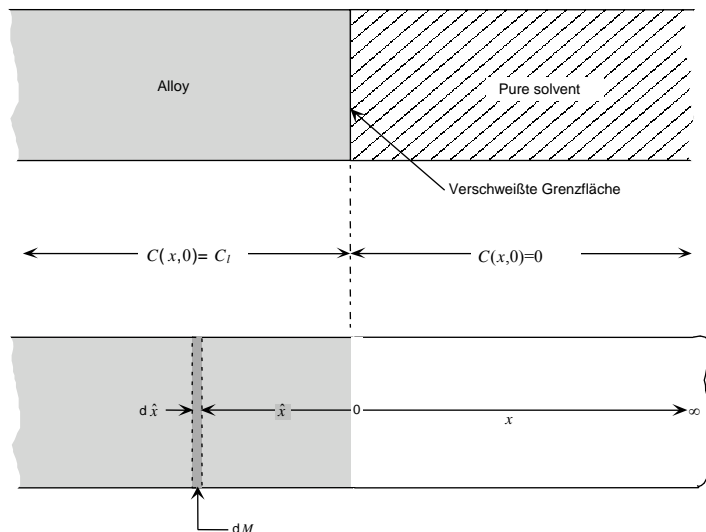
Zählraten aus Geiger-Müller-Zähler für 25 verschiedene Mikroschliffe.



2.4) Log Konzentration versus x^2

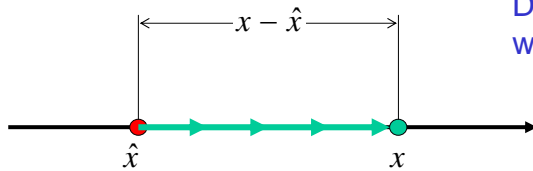


2.5) Diffusionspaar



Differentielle Quelle

2.5) Diffusionspaar: Koordinaten der Quelle und des Feldes



Quellpunkt

Feldpunkt

Ein **Quellpunkt** bezeichnet die Stelle, an dem Diffundanten emittiert werden.

Der **Feldpunkt** beschreibt die Stelle, an der sich die gewünschte Konzentration $C(x, t)$ einstellt.

Die Konzentration $C(x, t)$ hängt von Quell- und Feldpunkt ab.

2.5.1) Diffusion in verbundenen Materialblöcken: Superposition

Die Konzentration für die Diffusion im Falle zweier verbundenener Materialblöcke ist gegeben als 1-dim. Superposition des Quellintegrals:

$$C(x, t) = C_l \int_{-\infty}^0 e^{-\frac{(x-\hat{x})^2}{4Dt}} \frac{d\hat{x}}{\sqrt{4\pi Dt}}$$

Bei unendlicher Dicke der Materialblöcke, kann folgende Substitution

verwendet werden:

$$u = \frac{x - \hat{x}}{2\sqrt{Dt}}$$

Der Feldpunkt x wird als konstant angesehen!

Das total Differential von u ist:

$$du = \frac{-d\hat{x}}{2\sqrt{Dt}} \quad (x = \text{const.})$$

2.5.1) Diffusion in verbundenen Materialblöcken

Quellintegral als Funktion der neuen Variablen $u(\hat{x}, t)$

$$C(x, t) = -C_l \int_{\infty}^{\frac{x}{2\sqrt{Dt}}} \frac{e^{-u^2}}{\sqrt{\pi}} du = C_l \int_{\frac{x}{2\sqrt{Dt}}}^{\infty} \frac{e^{-u^2}}{\sqrt{\pi}} du$$

Umschreiben der rechten Seite

$$C(x, t) = \frac{C_l}{2} \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-u^2} du - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{x}{2\sqrt{Dt}}} e^{-u^2} du \right)$$

Integral ausgedrückt durch Fehlerfunktion

$$C(x, t) = \frac{C_l}{2} \left[\text{erf}(\infty) - \text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \right]$$

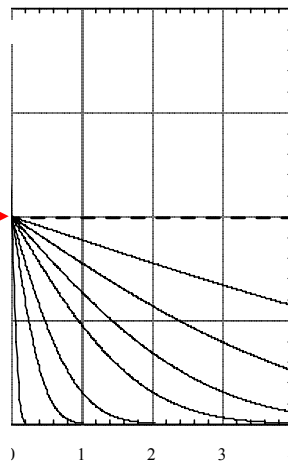
Grube-Jedele Lösung

$$C(x, t) = \frac{C_l}{2} \text{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

2.5.1) Grube-Jedele Lösung

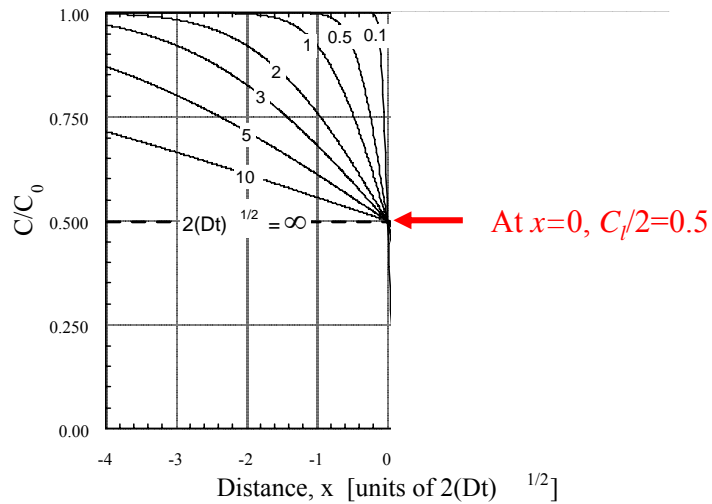
$$C(x, t) = \frac{C_l}{2} \text{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

At $x=0$, $C_l/2=0.5$ →



2.5.1) Grube-Jedele Lösung

$$C(x, t) = \frac{C_l}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$



2.5.2) Vergleich mit 2.2.): Diffusion mit fester Konzentration am Rand

Vergleiche

$$C(x, t) = C_0 \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

Feste Randkonzentration

$$C(x, t) = \frac{C_l}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

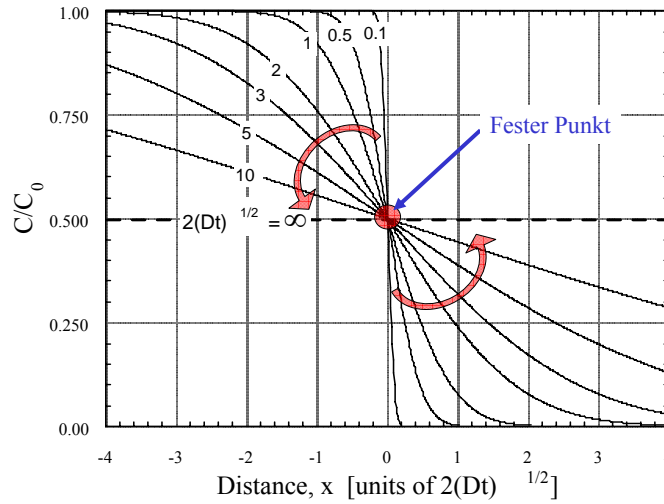
Grube-Jedele

Die Konzentrationsverteilung im Fall der verbundenen Materialblöcke "rotieren" um den Punkt $(C(0, t)/C_l)=1/2$.

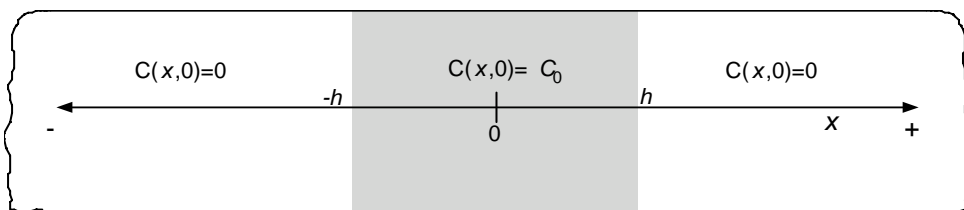
Der Konzentrationslevel $C_l/2$ ist ein **Fester Punkt** des Diffusionsfeldes.

2.5.2 Grube-Jedele Lösung

$$C(x,t) = \frac{C_l}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$



2.6.) Schichtanordnung: Quelle endlicher Breite



Verteilte Quellen

Formale Integrallösung:

$$C(x,t,h) = \frac{C_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-h}^{+h} e^{-\frac{(x-\hat{x})^2}{4Dt}} d\hat{x}$$

2.6) Quelle endlicher Breite

Standardform des Integrals:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{x-h}{2\sqrt{Dt}}}^{\frac{x+h}{2\sqrt{Dt}}} e^{-u^2} du$$

Aufteilung in zwei Beiträge:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{x-h}{2\sqrt{Dt}}}^0 e^{-u^2} du + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{x+h}{2\sqrt{Dt}}} e^{-u^2} du \right)$$

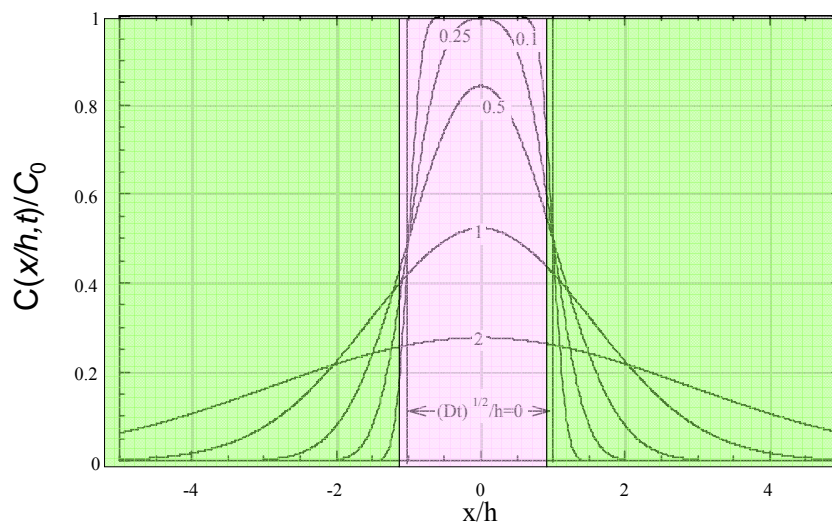
Ausgedrückt als Fehlerfunktion:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{x+h}{2\sqrt{Dt}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x-h}{2\sqrt{Dt}}\right) \right]$$

Diffusionslösung:

$$\frac{C(x/h,t)}{C_0} = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{x/h+1}{2\sqrt{Dt/h^2}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x/h-1}{2\sqrt{Dt/h^2}}\right) \right]$$

2.6) Konzentration als Funktion des Abstands



Zusammenfassung

- Instantane planare Quellen können aufintegriert werden, um die Lösung der linearen Diffusionsgleichung (2. Ficksches Gesetz) für Geometrien mit ausgedehnten Quellen zu finden.
- Die Grube-Jedele Lösung kann als komplementäre Fehlerfunktion ausgedrückt werden.
- Durch die Analyse der Durchdringung in klassischen Diffusionspaaren, können die Diffusionskoeffizienten bestimmt werden.
- Zeitschritte für Quellen in Schichtanordnung lassen sich durch die Ähnlichkeitsvariable $[2(Dt)^{1/2}](1/h)$ ausdrücken, die **zwei** Längenskalen enthält: Eine *geometrische* Skala, h , und eine "*Diffusions*" skala, $(Dt)^{1/2}$.

Lernziele

Sie sollten in der Lage sein,

- die Integraltransformation als Lösungsverfahren des 2. Fickschen Gesetzes zu erläutern
- Randbedingungen und Lösungen des 2. Fickschen Gesetzes in linearer, 1-dim. Form für verschiedene Geometrien anzugeben:
 - Planare, kontinuierliche Quelle
 - Instantante, planare Quelle
 - Dünnschichtanordnung
 - Schichtsystemanzugeben
- die physikalische Bedeutung der Ähnlichkeitsvariablen zu erläutern