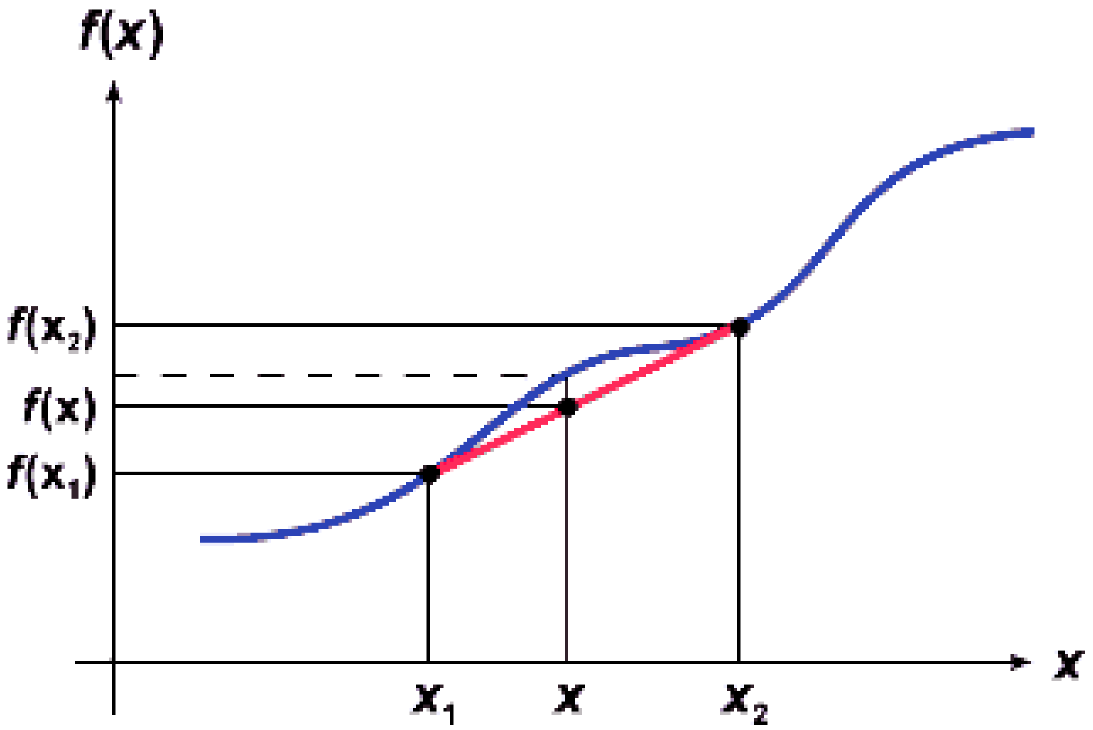
Gaussches Fehlerintegral (nicht analytisch lösbar)

$\frac{x}{2\cdot\sqrt{D\cdot t}}$	$\mathrm{erf}\left(\frac{x}{2\cdot\sqrt{D\cdot t}}\right)$
y	$\mathrm{erf}(y)$
0	0
0.10	0.1125
0.20	0.2227
0.30	0.3286
0.40	0.4284
0.50	0.5205
0.60	0.6039

$$\frac{c_a - c_x}{c_a - c_0} = \mathrm{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\tau^2}\,\mathrm{d}\tau$$

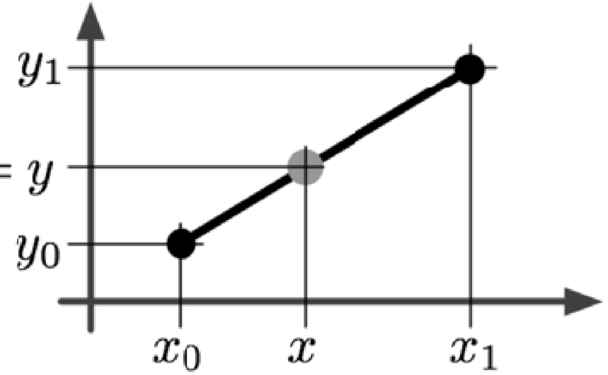
Lineare Interpolation



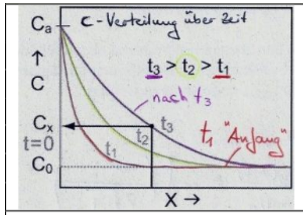
Lineare Interpolation

x_i	$y = erf(x_i)$
x_0	y_0
x (gegeben)	y (gesucht)
x_1	y_1

$$y = y_0 + \frac{(x - x_0)(y_1 - y_0)}{x_1 - x_0} = y$$



Unbedingt auf die Formelsammlung! Bei Cédric (Seite 10):



$\frac{x}{2\sqrt{Dt}}$	$erf(\frac{x}{2\sqrt{Dt}})$		
		0.60	0,6039
0	0	0.70	0,6778
0.10	0,1125	0.80	0,7421
0.20	0,2227	0.90	0,7970
0.30	0,3286	1.00	0,8427
0.40	0,4284	1.50	0,9661
0.50	0,5205	2.00	0,9953

Für ln(D)-(1/T) Graph: $\ln(D) = \ln(D_0) - \frac{Q}{R} \cdot \frac{1}{T}$

→ Steigung: $-\frac{Q}{R}$ und Schnittpunkt y-Achse: $\ln(D_0)$

Was diffundiert besser in was? → Vergleich D bei geg. T (mit Tab.)

Interpolation, wenn auf Tab. zw. 2 erf-Werten:

$$W_{eff} = W_1 + (W_2 - W_1) \cdot \frac{\mathrm{erf}(W_{eff}) - \mathrm{erf}(W_1)}{\mathrm{erf}(W_2) - \mathrm{erf}(W_1)}$$

Diffusion: thermisch aktiviert → D ist T-abhängig:

Arrhenius-Funktion: $D = D_0 \cdot e^{-\frac{Q}{RT}} = D_0 \cdot e^{-\frac{\tilde{Q}}{kT}}$ in $\left[\frac{m^2}{s}\right]$

Q in [J/mol] = Aktivierungsen. = Platzwechsel- +ev. Leerstellenbildungsenergie → $\tilde{Q}$ = Energie für 1 Atom

Aktivierungsenergie $Q = (0.14 \ldots 0.17) \cdot \frac{T_S}{K} \left[\frac{kJ}{mol}\right]$ | $! \, Q \sim T_S$

Lineare Interpolation

Was bis anhin passiert ist:

$$\frac{c_a - c(x,t)}{c_a - c_0} = \frac{1.13 - 0.6}{1.13 - 0.2} = 0.570 = \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D \cdot t}}\right)$$

Todo: Finde $\frac{x}{2\sqrt{Dt}}$ *mithilfe linearer Interpolation:*

$\frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}}$	$\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}}\right)$
y	$\operatorname{erf}(y)$
0	0
0.40	0.4284
0.50	0.5205
0.60	0.6039

x_i	y
x_0	y_0
x	y
x_1	y_1

$$y = y_0 + \frac{(x - x_0)(y_1 - y_0)}{x_1 - x_0} = y$$