

Chemische und elektrochemische Wellen

Hauptseminar: Wellenphänomene

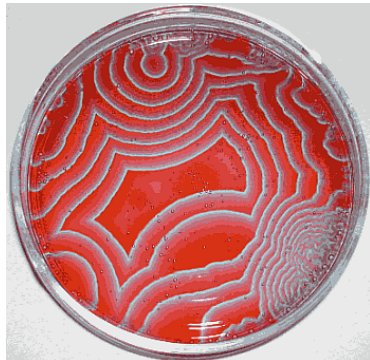
Mathis Kormann

Fachbereich Physik, Mathematik und Informatik (FB 08)
der Johannes Gutenberg-Universität Mainz

06. Juli 2026

Was sind chemische Wellen?

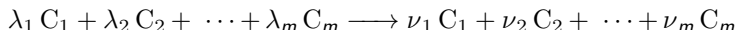
- ▶ Bewegung einer chemischen Konzentrationsfront
- ▶ Zusammensetzung aus Reaktion und Diffusion
- ▶ Bekanntestes Beispiel: Belousov-Zhabotinskii



Das Massenwirkungsgesetz

- ▶ Die Reaktionsgeschwindigkeit ist proportional zur Wahrscheinlichkeit, dass die Teilchen zusammenstoßen.

Für eine Reaktion der Form



wird die Reaktionsrate berechnet durch

$$\dot{r} = k \prod_{i=1}^m [C_i]^{\lambda_i}.$$

C_i : i -ter chemischer Stoff
 $[C_i]$: Konzentration von C_i
 λ_i : stöchiom. Koeffizient (Edukt)
 ν_i : stöchiom. Koeffizient (Produkt)
 $\dot{r}$: Reaktionsrate
 k : Geschwindigkeitskonstante

Charakteristik der Reaktionsrate $\dot{r}$:

- ▶ **Dimension:** $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$
- ▶ **Größenordnung:** 10^{-7} bis 10^{-10}

Für eine Reaktion mit m chemischen Stoffen betrachten wir:

$m_i :=$ molare Masse des i -ten Stoffes

$\lambda_i, \nu_i :=$ stöchiometrische Koeffizienten

Aufgrund der **Massenerhaltung** gilt für die Gesamtreaktion

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i m_i = \sum_{i=1}^m \nu_i m_i.$$

Massenerhaltung eines einzelnen Stoffes

Die zeitliche Änderung eines einzelnen Stoffes C_i im Verlauf der Reaktion ist gekoppelt an die Reaktionsrate $\dot{r}$

C_i : i -ter chemischer Stoff
 $\dot{r}$: Reaktionsrate
 λ_i, ν_i : stöchiom. Koeffizienten
 m_i : molare Masse von C_i

$$\frac{d[C_i]}{dt} = (\nu_i - \lambda_i)\dot{r}.$$

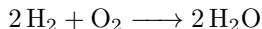
Wie folgt daraus die globale Massenerhaltung?

Für die zeitliche Änderung der **Gesamtmasse** im System muss gelten

$$\sum_{i=1}^m m_i \frac{d[C_i]}{dt} = \sum_{i=1}^m m_i (\nu_i - \lambda_i) \dot{r} = \dot{r} \cdot \underbrace{\left(\sum_{i=1}^m \nu_i m_i - \sum_{i=1}^m \lambda_i m_i \right)}_{=0} = 0.$$

Fazit: Die Gleichung bilanziert das lokale Erscheinen und Verschwinden von Teilchen so, dass die Gesamtmasse des Systems perfekt erhalten bleibt.

Bei der Verbrennung von Sauerstoff



ist die Reaktionsrate proportional zu $[\text{H}_2]^2[\text{O}_2]$.

Solche Reaktionen sind unrealistisch, denn

- ▶ die Gesamtreaktion wird aufgeteilt in viele kleinere **Elementarreaktionen**,
- ▶ das Massenwirkungsgesetz gibt Aufschluss über die Geschwindigkeit der Reaktion.

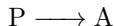
Unser System ist

- ▶ perfekt durchmischt (unendlich schnelle Diffusion),
- ▶ homogen verteilt (Konzentration nur abhängig von der Zeit).

Beispiel I (Zerfall)

$$\begin{aligned} p &:= [P] && - \text{Konzentr. } P \\ a &:= [A] && - \text{Konzentr. } A \\ \frac{d[C_i]}{dt} &= (\nu_i - \lambda_i)\dot{r} \end{aligned}$$

Betrachte den Zerfall



mit der Reaktionsrate $\dot{r}(t) = kp$.

Dies führt zu dem ODE-System

$$\begin{aligned} \frac{dp}{dt} &= -kp, & \frac{da}{dt} &= kp, \\ p(0) &= p_0, & a(0) &= a_0. \end{aligned}$$

Da die Gleichung für p entkoppelt vom System ist folgt

$$p(t) = p_0 e^{-kt}.$$

Beispiel I

Einsetzen in die Gleichung für $a(t)$ liefert

$$\begin{aligned}\frac{dp}{dt} &= -kp \\ \frac{da}{dt} &= kp \\ p(t) &= p_0 e^{-kt}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{da}{dt} &= kp_0 e^{-kt} \\ \Rightarrow \int da &= kp_0 \int e^{-kt} dt \\ \Rightarrow a(t) + c_1 &= kp_0 \left(-\frac{1}{k} e^{-kt} + c_2 \right) \\ \Rightarrow a(t) &= -p_0 e^{-kt} + c.\end{aligned}$$

Mit Einsetzen der Anfangswertbedingung

$$\begin{aligned}a(0) &= -p_0 e^{-k \cdot 0} + c = -p_0 + c \stackrel{!}{=} a_0 \iff c = p_0 + a_0, \\ a(t) &= a_0 + p_0 - p_0 e^{-kt} = a_0 + p_0 (1 - e^{-kt}).\end{aligned}$$

Beispiel I

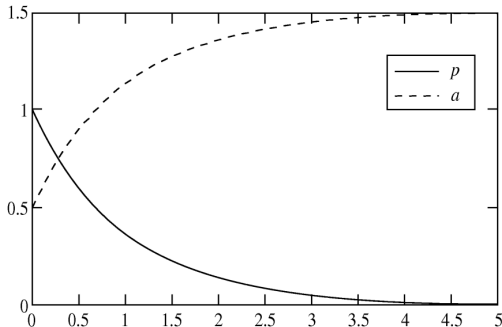
Für $t \rightarrow \infty$ lässt sich folgendes beobachten:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} a(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} a_0 + p_0(1 - e^{-kt}) = a_0 + p_0$$

und

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} p_0 e^{-kt} = 0.$$

Mit der Zeit zerfällt der chemische Stoff P also komplett und es bleibt nur noch der Stoff A (inklusive seiner Anfangskonzentration) übrig.



Beispielparameter:

- ▶ $k = 1$
- ▶ $p_0 = 1$
- ▶ $a_0 = 0,5$

Langzeitverhalten:

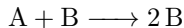
$$p(t) \rightarrow 0$$

$$a(t) \rightarrow 1,5$$

Beispiel II (Autokatalyse)

$$\begin{aligned} b &:= [B] && - \text{Konzentr. } B \\ a &:= [A] && - \text{Konzentr. } A \\ \frac{d[C_i]}{dt} &= (\nu_i - \lambda_i)\dot{r} \end{aligned}$$

Betrachten wir nun:



mit Reaktionsrate $\dot{r} = k[A][B]$. Dies ist eine **autokatalytische** Reaktion, je höher die Konzentration von B, desto schneller die Reaktion. Das ODE-System lautet

$$\begin{aligned} \frac{da}{dt} &= -kab, & \frac{db}{dt} &= kab, \\ a(0) &= a_0, & b(0) &= b_0. \end{aligned}$$

Beispiel II

$$\begin{aligned}\frac{da}{dt} &= -kab \\ \frac{db}{dt} &= kab\end{aligned}$$

Addieren beider Gleichungen liefert

$$\frac{da}{dt} + \frac{db}{dt} = \frac{d(a+b)}{dt} = -kab + kab = 0.$$

Somit ist $a(t) + b(t)$ für alle t konstant, und es gilt mit den Anfangswerten

$$a + b = a_0 + b_0.$$

Wir stellen nach a um und setzen ein

$$\frac{db}{dt} = kb(a_0 + b_0 - b).$$

Substituieren wir nun $\lambda = a_0 + b_0$, erhalten wir:

$$\frac{db}{dt} = kb(\lambda - b).$$

Beispiel II

Wir betrachten das gekoppelte System mit

$$\lambda := a_0 + b_0$$

und der Differentialgleichung

$$\frac{db}{dt} = kb(\lambda - b).$$

Trennen der Variablen und Integration liefert

$$\int \frac{db}{b(\lambda - b)} = \int k \, dt.$$

Mit der Partialbruchzerlegung (*) folgt daraus

$$\frac{1}{\lambda} \int \left(\frac{1}{b} + \frac{1}{\lambda - b} \right) db = kt + c_1.$$

(*) **Partialbruchzerlegung:**

$$\frac{1}{b(\lambda - b)} = \frac{A}{b} + \frac{B}{\lambda - b}$$

Koeffizientenvergleich:

$$A\lambda = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \frac{1}{\lambda}$$

$$B - A = 0 \quad \Rightarrow \quad B = \frac{1}{\lambda}$$

Beispiel II

Aus der Integration der beiden Brüche der vorherigen Folie folgt

$$\frac{1}{\lambda} (\ln(b) - \ln(\lambda - b)) = kt + c_1.$$

Durch Anwenden der Logarithmengesetze und Potenzieren erhalten wir

$$\ln\left(\frac{b}{\lambda - b}\right) = \lambda kt + c_3 \quad \Rightarrow \quad \frac{b}{\lambda - b} = ce^{\lambda kt}.$$

Auflösen nach der gesuchten Konzentration $b(t)$ liefert

$$b(t) = \frac{\lambda ce^{\lambda kt}}{1 + ce^{\lambda kt}}.$$

Durch Einsetzen der Anfangswertbedingung erhalten wir

$$b(0) = b_0 = \frac{\lambda c}{1 + c} = (\lambda - b_0)c \Rightarrow c = \frac{b_0}{a_0}.$$

Beispiel II

Einsetzen liefert nun:

$$c = \frac{b_0}{a_0}$$
$$a(t) + b(t) = a_0 + b_0$$

$$b(t) = \frac{(a_0 + b_0) \frac{b_0}{a_0} e^{kt(a_0+b_0)}}{1 + \frac{b_0}{a_0} e^{kt(a_0+b_0)}}$$
$$= \frac{b_0(a_0 + b_0)e^{kt(a_0+b_0)}}{a_0 + b_0e^{kt(a_0+b_0)}}.$$

Mithilfe der Gleichung $a(t) + b(t) = a_0 + b_0$ lösen wir nun für $a(t)$

$$a(t) = \frac{(a_0 + b_0)(a_0 + b_0e^{kt(a_0+b_0)}) - b_0(a_0 + b_0)e^{kt(a_0+b_0)}}{a_0 + b_0e^{kt(a_0+b_0)}}$$
$$= \frac{(a_0 + b_0)(a_0 + b_0e^{kt(a_0+b_0)} - b_0e^{kt(a_0+b_0)})}{a_0 + b_0e^{kt(a_0+b_0)}}$$
$$= \frac{(a_0 + b_0)a_0}{a_0 + b_0e^{kt(a_0+b_0)}}$$

Beispiel II

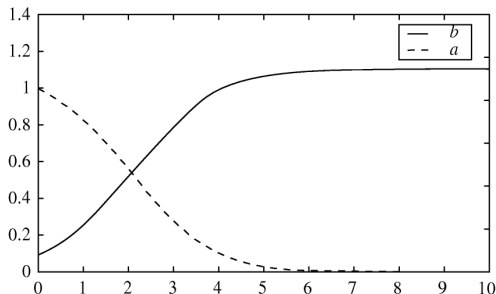
Betrachten wir das Verhalten für $t \rightarrow \infty$

►

$$\lim_{t \rightarrow \infty} a(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{(a_0 + b_0)a_0}{a_0 + b_0 e^{kt(a_0 + b_0)}} = 0.$$

►

$$\lim_{t \rightarrow \infty} b(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{b_0(a_0 + b_0)e^{kt(a_0 + b_0)}}{a_0 + b_0 e^{kt(a_0 + b_0)}} = a_0 + b_0.$$



Beispielparameter:

- $k = 1$
- $a_0 = 1$
- $b_0 = 0,1$

Langzeitverhalten:

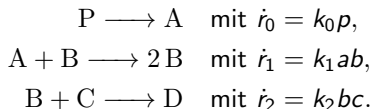
$$a(t) \rightarrow 0$$

$$b(t) \rightarrow 1,1$$

Beispiel III (Landolt Reaktion)

$$\begin{array}{ll} p := [P] & - \text{Konzentr. } P \\ a := [A] & - \text{Konzentr. } A \\ b := [B] & - \text{Konzentr. } B \\ c := [C] & - \text{Konzentr. } C \end{array}$$

Unter gewissen Umständen kann man die Bildung von Iod aus Iodsäure und schwefliger Säure zeitlich verzögern. Betrachten wir beispielhaft ein vereinfachtes Modell



Beispiel III

$$\frac{d[C_i]}{dt} = (\nu_i - \lambda_i)\dot{r}$$

Man erhält das gekoppelte nichtlineare Differentialgleichungssystem:

$$\frac{dp}{dt} = -k_0 p,$$

$$\frac{db}{dt} = k_1 ab - k_2 bc,$$

$$\frac{da}{dt} = k_0 p - k_1 ab,$$

$$\frac{dc}{dt} = -k_2 bc.$$

Da die Gleichung für p entkoppelt vom System ist, erhalten wir

$$p(t) = p_0 e^{-k_0 t}.$$

Einsetzen führt uns zu

$$\frac{da}{dt} = k_0 p_0 e^{-k_0 t} - k_1 ab.$$

Beispiel III: Der Landolt-Effekt ($k_2 \gg k_1$)

Betrachten wir die ausgeklammerte Differentialgleichung für B

$$\frac{db}{dt} = b \cdot \left(\underbrace{k_1 \cdot a}_{\text{Erzeugung}} - \underbrace{k_2 \cdot c}_{\text{Verbrauch}} \right).$$

Phase 1: Die Verzögerungsphase ($c \gg 0$)

Solange viel C vorhanden ist, dominiert der rechte Term ($k_1 a \ll k_2 c$):

$$\frac{db}{dt} \approx -(k_2 c) \cdot b \implies b(t) \text{ wird nahe 0 gehalten.}$$

Mathematisch wirkt das System wie ein extrem schneller exponentieller Zerfall.

Beispiel III: Der Landolt-Effekt ($k_2 \gg k_1$)

Betrachten wir die ausgeklammerte Differentialgleichung für B

$$\frac{db}{dt} = b \cdot \left(\underbrace{k_1 \cdot a}_{\text{Erzeugung}} - \underbrace{k_2 \cdot c}_{\text{Verbrauch}} \right).$$

Phase 2: Die Explosion ($c \rightarrow 0$)

Ist der Vorrat an C vollständig aufgebraucht, bricht die Bremse weg:

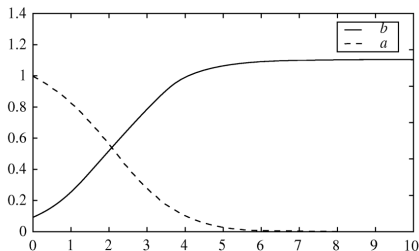
$$\frac{db}{dt} = k_1 ab \implies b(t) \text{ wächst rein exponentiell.}$$

Die Autokatalyse ist nun völlig ungehemmt und schießt rasant nach oben.

Beispiel III: Der Landolt-Effekt

Kinetik des uninhibierten Systems:

- ▶ **Verbrauch von a (gestrichelt):** Das Edukt a sinkt durch die Reaktion kontinuierlich ab, bis es vollständig verbraucht ist ($\approx t = 6$).
- ▶ **S-förmiges Wachstum von b :** Der Autokatalysator b zeigt den typischen **sigmoidalen Verlauf**. Die Reaktionsgeschwindigkeit $\frac{db}{dt} = k_1 ab$ ist maximal, wenn beide Konzentrationen hoch sind (Schnittpunkt bei $t \approx 2.2$).
- ▶ **Sättigung:** Sobald $a \rightarrow 0$ läuft, friert das System ein. b erreicht asymptotisch seinen maximalen Endwert.



Diffusion ist ein physikalischer Prozess, der zum Ausgleich von Konzentrationsunterschieden führt. Er wird durch die zufällige Eigenbewegung der Stoffteilchen verursacht.

- ▶ $c(x, t)$ die Konzentration eines Stoffes in mol m^{-3} .
- ▶ $\vec{q}(x, t)$ der Stofffluss/Diffusionsfluss in mol s^{-1} .

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{q} = 0$$

$\frac{\partial c}{\partial t}$ Zeitliche Konzentrationsänderung an einem festen Ort

$\nabla \cdot \vec{q}$ Divergenz des Stoffflusses (Zu- und Abstrom aus der Umgebung)

Physikalische Bedeutung:

- ▶ Beschreibt ein rein konservatives System **ohne** chemische Reaktion.
- ▶ Die Gesamtmenge des Stoffes bleibt im Raum exakt erhalten (Stoffhaltung).
- ▶ Eine Änderung der Konzentration ist *ausschließlich* durch räumlichen Transport möglich.

Der Transportmechanismus: Das Ficksche Gesetz

Der Stofffluss q wird durch das **1. Ficksche Diffusionsgesetz** (benannt nach Adolf Fick) beschrieben

$$\vec{q} = -D\nabla c.$$

$D(c) > 0$ **Diffusionskoeffizient** (Maß für die Mobilität der Teilchen in m^2s^{-1})

∇c **Konzentrationsgradient** (zeigt in Richtung des steilsten Anstiegs)

Die physikalische Intuition:

- **Das Minuszeichen:** Erzwingt, dass der Fluss materiell vom Ort der *höheren* zum Ort der *niedrigeren* Konzentration stattfindet (Ausgleich von Unterschieden).
- **Die Triebkraft:** Je steiler das Konzentrationsgefälle (∇c), desto massiver und schneller ist der resultierende Stofffluss.

$$\begin{aligned}\vec{q} &= -D\nabla c \\ 0 &= \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{q}\end{aligned}$$

Setzen wir nun beide Gleichungen ineinander ein, erhalten wir eine nichtlineare Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D\nabla c).$$

Für D konstant erhalten wir den linearen Fall

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\nabla^2 c.$$

Im Folgenden werden wir mittels der Fouriertransformation eine Lösung dieser partiellen Differentialgleichung ermitteln, im Falle, dass wir nur noch eine Raumdimension haben. Dafür wiederholen wir kurz etwas Theorie.

Exkurs: Die Fourier-Transformation

Um partielle Differentialgleichungen im unendlichen Raum ($\mathbb{R}$) zu lösen, transformieren wir die Ortsvariable x in den Frequenzraum (Wellenzahl k).

Definition: Fourier-Transformation

Für eine integrierbare Funktion $u(x)$ ist die Fourier-Transformierte $\hat{u}(k) = \mathcal{F}\{u\}(k)$ definiert durch

$$\hat{u}(k) := \int_{-\infty}^{\infty} u(x) e^{-ikx} dx.$$

Die inverse Fourier-Transformation

Die Rücktransformation in den Ortsraum erfolgt über

$$u(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{u}(k) e^{ikx} dk.$$

Beweis: Transformation von Ableitungen

Ziel: Wir wollen zeigen, wie sich die Ortsableitung $\frac{\partial u}{\partial x}$ im Fourier-Raum verhält.

Voraussetzung:

Wir nehmen an, dass die Konzentration im Unendlichen verschwindet (physikalisch sinnvoll, denn weit weg vom Klecks ist keine Substanz):

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} u(x) = 0.$$

Anwendung der Definition und partielle Integration ($\int u'v = [uv] - \int uv'$):

$$\begin{aligned}\mathcal{F}\left\{\frac{\partial u}{\partial x}\right\} &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) \cdot e^{-ikx} dx \\ &= \underbrace{\left[u(x)e^{-ikx}\right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0 \text{ laut Voraussetzung}} - \int_{-\infty}^{\infty} u(x) \cdot (-ike^{-ikx}) dx \\ &= +ik \int_{-\infty}^{\infty} u(x)e^{-ikx} dx = ik \cdot \hat{u}(k)\end{aligned}$$

Die Identität der zweiten Ableitung

Da der Laplace-Operator in einer Dimension der zweiten Ortsableitung entspricht ($\nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$), wenden wir das Ergebnis der vorherigen Folie iterativ an

$$\mathcal{F} \left\{ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right\} = \mathcal{F} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \right\}.$$

Mit dem bewiesenen Linearitätsfaktor ik folgt sofort:

$$\begin{aligned} \mathcal{F} \left\{ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right\} &= ik \cdot \mathcal{F} \left\{ \frac{\partial u}{\partial x} \right\} \\ &= ik \cdot (ik \cdot \hat{u}(k)) \\ &= (ik)^2 \cdot \hat{u}(k) \stackrel{!}{=} -\mathbf{k}^2 \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

Fazit für unseren Vortrag:

Die Fourier-Transformation verwandelt den geometrisch komplexen Differentialoperator $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ im Ortsraum in einen rein algebraischen Multiplikationsfaktor $-\mathbf{k}^2$ im Frequenzraum.

Herleitung der Fundamentallösung (Teil 1)

Wir starten mit der linearen Diffusionsgleichung im unendlichen Raum:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad \text{mit } c(x, 0) = c_0(x), \text{ für } -\infty < x < \infty$$

Anwendung der Fourier-Transformation ($\mathcal{F}$) bezüglich der Ortsvariable x :

$$\mathcal{F} \left\{ \frac{\partial c}{\partial t} \right\} = D \cdot \mathcal{F} \left\{ \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right\}.$$

Mit unserer bewiesenen Ableitungsidentität ($\nabla^2 \rightarrow -k^2$) wird die PDE zur gewöhnlichen Differentialgleichung (ODE) im Fourier-Raum zu

$$\frac{d\hat{c}}{dt} = -Dk^2 \hat{c}.$$

Diese ODE beschreibt einen einfachen exponentiellen Zerfall und besitzt die Lösung

$$\hat{c}(k, t) = \hat{c}_0(k) \cdot e^{-Dk^2 t}.$$

Herleitung der Fundamentallösung (Teil 2)

Um die Lösung $\hat{c}(k, t) = \hat{c}_0(k) \cdot e^{-Dk^2 t}$ in den Ortsraum zurückzuholen, nutzen wir das **Faltungstheorem**

$$c(x, t) = \mathcal{F}^{-1}\{\hat{c}_0(k) \cdot e^{-Dk^2 t}\} = c_0(x) * G(x, t).$$

Die Rücktransformierte des hinteren Terms liefert die Gauß-Verteilung (Green'sche Funktion)

$$G(x, t) = \mathcal{F}^{-1}\{e^{-Dk^2 t}\} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}.$$

Ausschreiben der Faltung (*) als Integral führt uns direkt auf

Fundamentallösung der Diffusion:

$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} c_0(X) \exp\left(-\frac{(x - X)^2}{4Dt}\right) dX.$$

Fundamentallösung der Diffusion:

$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} c_0(X) \exp\left(-\frac{(x - X)^2}{4Dt}\right) dX.$$

Setzen wir nun $c_0 = \delta(X)$ (Delta-Distribution), erhalten wir als Lösung

$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(X) \exp\left(-\frac{(x - X)^2}{4Dt}\right) dX$$

$$\Rightarrow c(x, t) = \frac{e^{-\frac{x^2}{4Dt}}}{\sqrt{4\pi Dt}}.$$

Lösung der Diffusionsgleichung:

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

Die erhaltene Lösung ist eine **Gauß-Verteilung** (Glockenkurve) mit folgenden Eigenschaften:

- ▶ **Maximale Höhe:** Schwindet mit $1/\sqrt{4\pi Dt}$ im Zentrum ($x = X$).
- ▶ **Charakteristische Breite:** Wächst mit der Ordnung $\mathcal{O}(\sqrt{4\pi Dt})$.

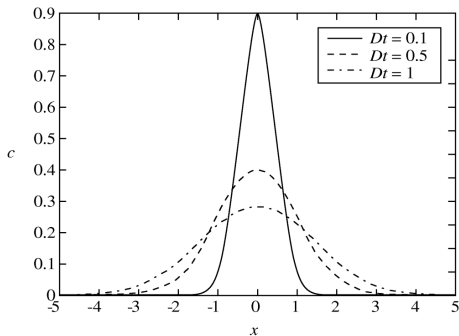
Das fundamentale Diffusionsgesetz ($\mathcal{O}(\sqrt{t})$):

Da die Breite der Konzentrationsfront proportional zur **Quadratwurzel der Zeit** ($\sqrt{t}$) wächst, verlangsamt sich die räumliche Ausbreitung der Chemikalie zusehends.

Kritischer Fall: Für $|x| \gg 1$ und $t \ll 1$ wird c sehr klein, aber nicht null.

Visualisierung der Fundamentallösung

- ▶ Das Produkt **Dt** bestimmt die Gestalt der Gauß-Glocke.
- ▶ **Mit wachsendem Dt (Zeit oder Mobilität):**
 - ▶ sinkt das Maximum bei $x = 0$,
 - ▶ verbreitert sich die Front im Raum.
- ▶ **Flächenerhaltung:** Die Gesamtfläche unter jeder Kurve ist trotz des Abflachens exakt gleich groß (Stoffenerhaltung!).



Einfluss der Anfangsbedingung: $c_0(x) = H(-x)$

Setzt man anstelle einer Punktquelle eine **Heaviside-Stufenfunktion** $H(-x)$ als Anfangsbedingung ein, ändert sich das qualitative Verhalten fundamental:

Punktquelle (Klecks):

- ▶ Begrenzte Stoffmenge.
- ▶ Maximum im Zentrum sinkt kontinuierlich gegen 0.
- ▶ Lösungstyp: **Gauß-Glocke**.

Stufenquelle (Reservoir):

- ▶ Unendlicher Vorrat für $x < 0$.
- ▶ Konzentration an der Grenze $x = 0$ bleibt konstant bei 0.5.
- ▶ Lösungstyp: **Fehlerfunktion** (erfc).

Chemische Intuition:

Die stufenförmige Verteilung beschreibt das **Ineinanderfließen zweier Phasen**. Da von links unaufhörlich Teilchen nachrücken, flacht das Zentrum hier nicht gegen Null ab, sondern es bildet sich eine permanente, sich verbreiternde **Konzentrationsfront**.

Berechnung für die Stufenfunktion

Setzt man die Anfangsbedingung $c_0(X) = H(-X)$ in die Fundamentallösung ein, schränkt dies den Integrationsbereich auf $(-\infty, 0]$ ein:

$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^0 e^{-\frac{(x-X)^2}{4Dt}} dX$$

Substitutions-Trick:

Wir definieren die dimensionslose Variable $s := \frac{x-X}{\sqrt{4Dt}}$ mit $dX = -\sqrt{4Dt} ds$. Anpassung der Grenzen liefert:

$$X = -\infty \implies s = +\infty \quad \text{und} \quad X = 0 \implies s = \frac{x}{\sqrt{4Dt}}$$

Nach Einsetzen und Kürzen des Faktors $\sqrt{4Dt}$ erhalten wir die endgültige Formel aus dem Buch:

$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{x}{\sqrt{4Dt}}}^{\infty} e^{-s^2} ds = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}} \right)$$

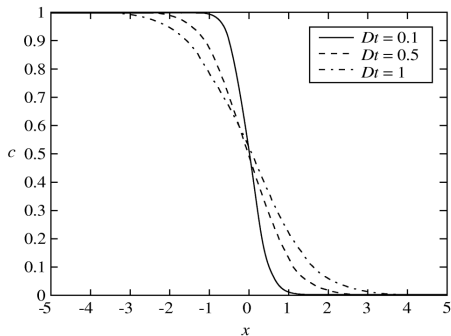
Visualisierung der Stufenquelle (erfc)

Analyse des transienten Verhaltens:

► **Flacheres Profil mit wachsendem Dt :**

- Für kleine Zeiten ($Dt = 0.1$) ist die Trennschicht noch sehr scharf.
- Mit fortschreitender Zeit ($Dt = 1.0$) verfließt die Stufe zusehends.

► **Wichtige Erkenntnis:** Reine Diffusion kann eine Front *nur* verbreitern und destabilisieren.



Die Brücke zum Hauptteil (Chemische Wellen):

Um eine **wandernde Front mit konstanter Schärfe** zu erhalten, benötigen wir die Kopplung mit einer autokatalytischen Reaktion. Erst die Chemie verhindert das hier sichtbare „Zerschmelzen“ der Front!

Zusammenfassung I: Die Bausteine

1. Lokale Kinetik (Reaktion)

- ▶ Rein zeitliche Systeme (ODEs) beschreiben Prozesse im homogen durchmischten Medium.
- ▶ **Nichtlinearität:** Autokatalyse ($A + B \longrightarrow 2B$) und Hemmung durch Inhibitoren ermöglichen komplexe Zeitverläufe.
- ▶ **Clock-Effekt:** Große Ratendifferenzen ($k_2 \gg k_1$) führen zu schlagartigen Konzentrationsumschlägen.

2. Räumlicher Transport (Diffusion)

- ▶ Die **Stofferhaltung** bildet die Bilanzgrundlage (Kontinuitätsgleichung).
- ▶ Das **Ficksche Gesetz** ($\vec{q} = -D\nabla c$) beschreibt den passiven Ausgleich von Gradienten.
- ▶ **Instabilität:** Reine Diffusion führt mathematisch (erfc-Lösung) stets zum „Verschmieren“ von Fronten.

3. Reaktions-Diffusions-Systeme

- ▶ Erst die Kopplung beider Phänomene ermöglicht **chemische Wellen**.
- ▶ **Stabilität:** Die Reaktion wirkt dem Diffusionsverlust entgegen und stabilisiert die Wellenform.
- ▶ **Phänomenologie:** Es entstehen wandernde Fronten mit konstanter Geschwindigkeit v und scharfem Profil.

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!

Fragen und Diskussion

Literaturgrundlage:

J. Billingham und A. C. King:

Wave Motion, Cambridge University Press, 2000.