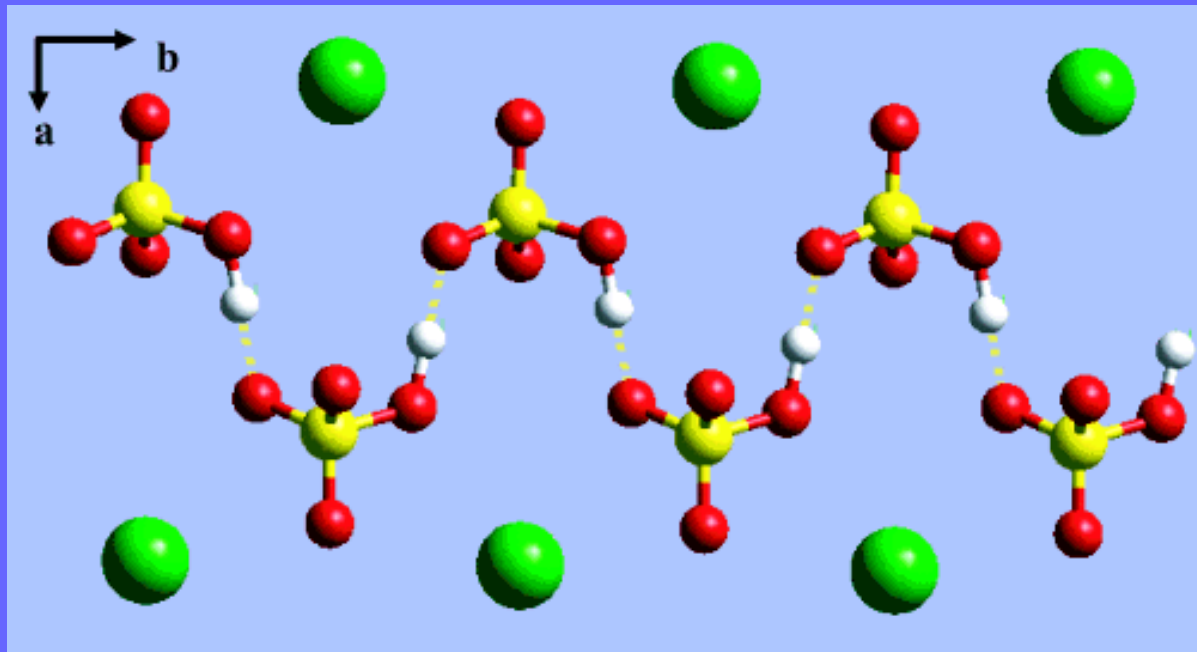


Modelowanie transportu superprotonowego

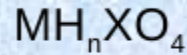


Andrzej Drzewiński
Instytut Fizyki UZ

Zagadnienie realizowane w WCSS (grant nr 82)

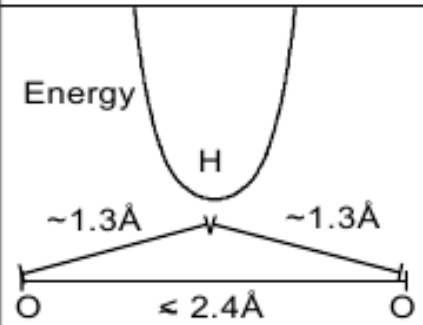
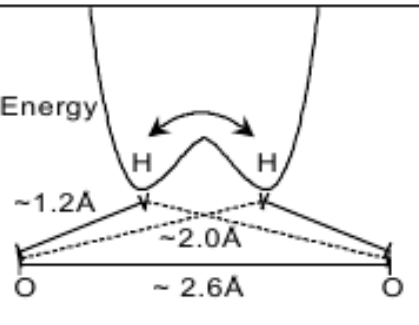
Solid acid compounds

the general formula:

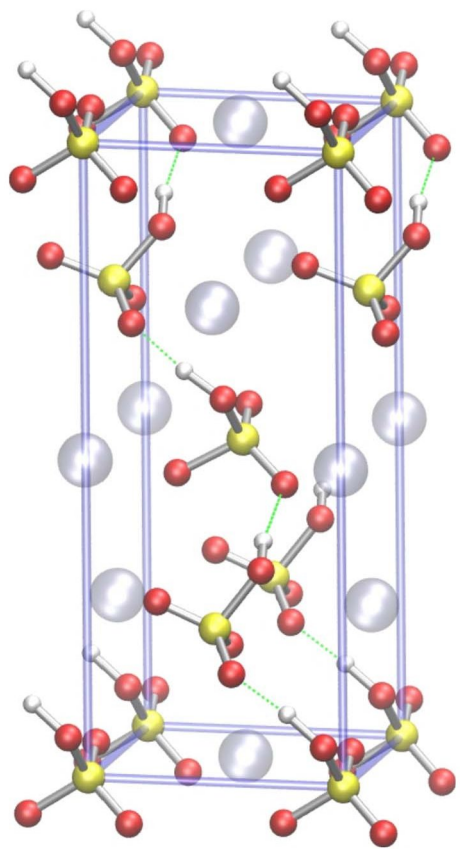


M- metal or organic monovalent cations, provide overall charge balance to the hydrogen bond network.

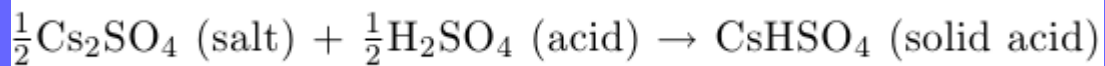
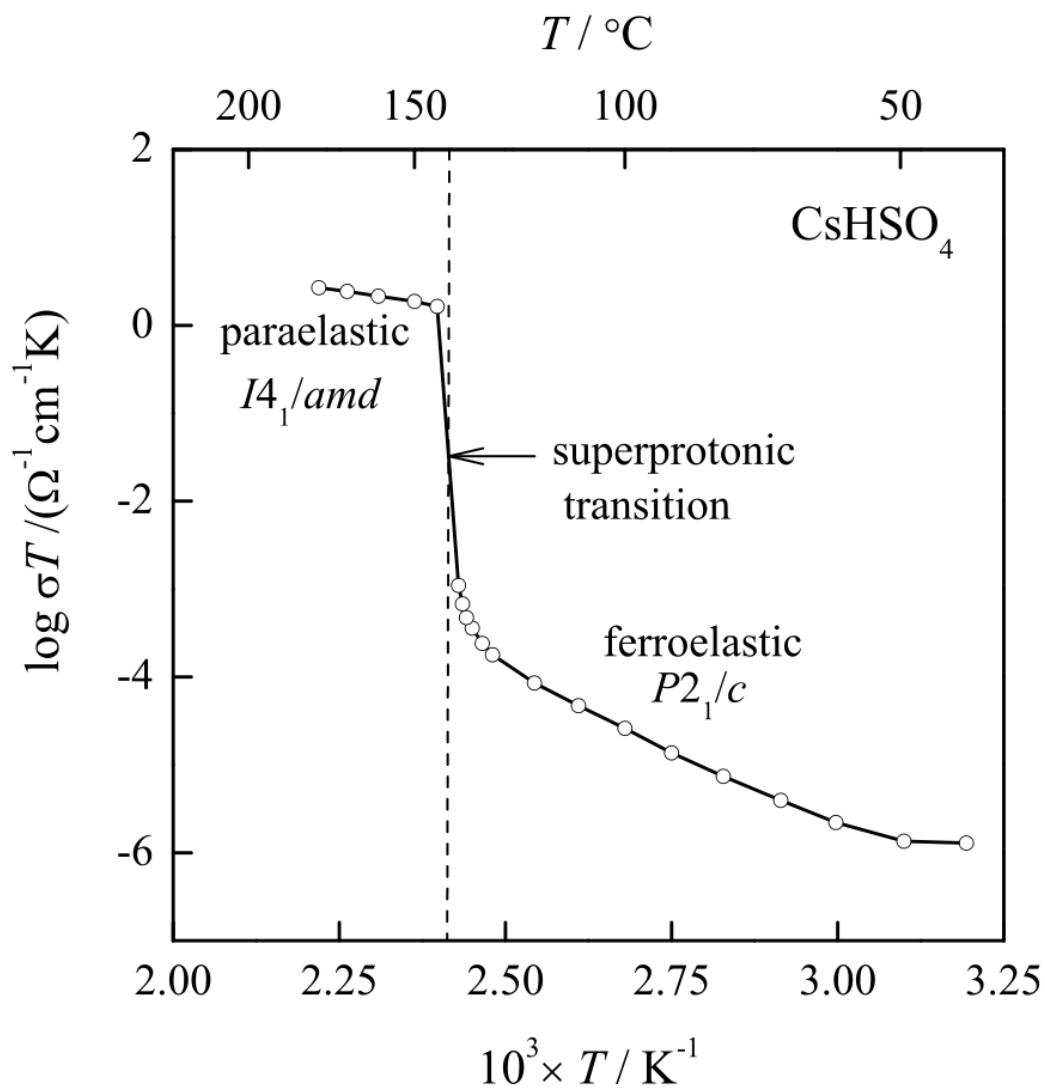
oxyanions, often tetrahedral (SO_4 , SeO_4 , PO_4 , AsO_4 etc.)

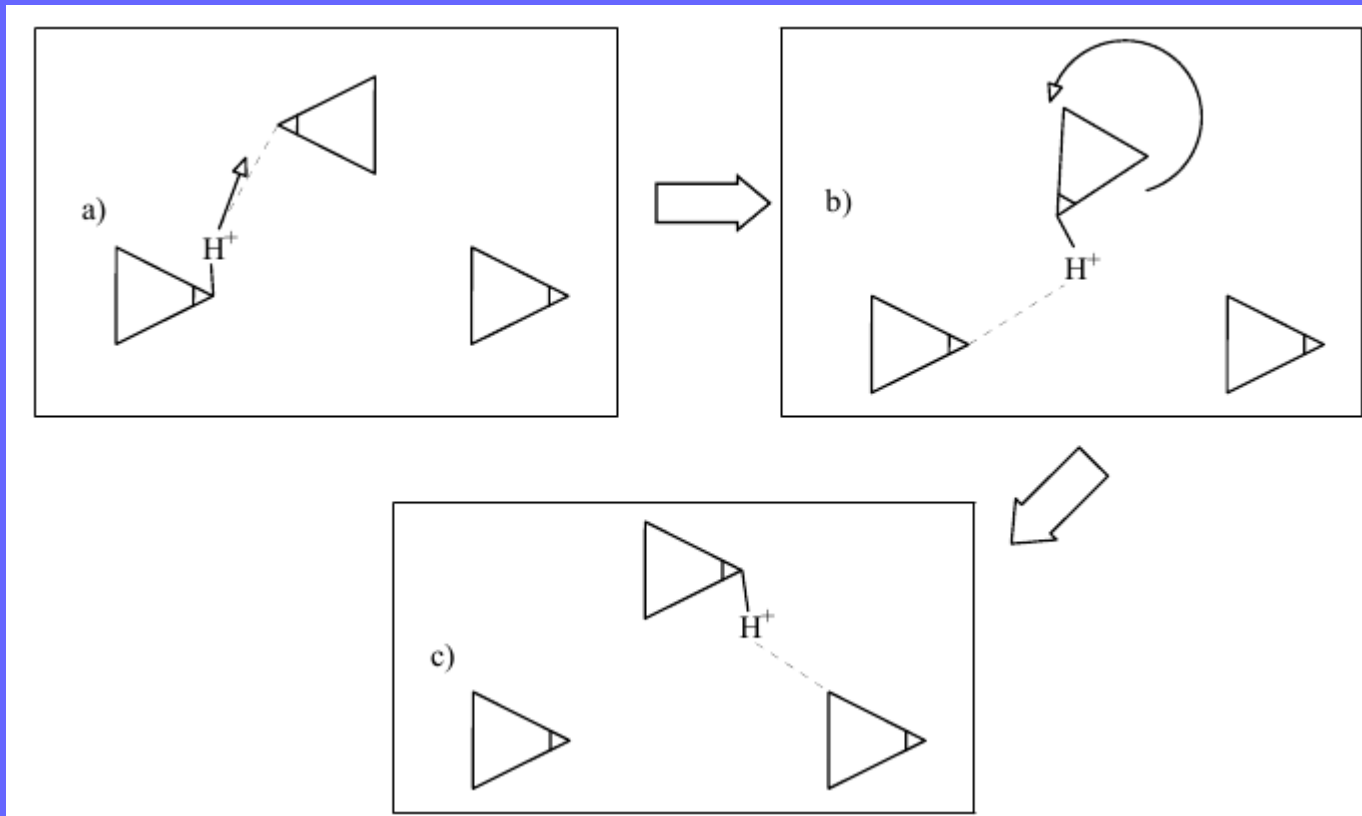
bond type	strong	medium
symmetric	 <p>Energy</p> <p>H</p> <p>~1.3Å</p> <p>~1.3Å</p> <p>< 2.4Å</p> <p>O</p>	 <p>Energy</p> <p>H</p> <p>H</p> <p>~1.2Å</p> <p>~1.2Å</p> <p>~2.0Å</p> <p>~2.6Å</p> <p>O</p>

Przewodniki superjonowe, to ciała stałe o wiązaniach głównie jonowych, które wykazują wysokie przewodnictwo jonowe (większe niż umowna granica 10^{-5} $1/\Omega$ cm).

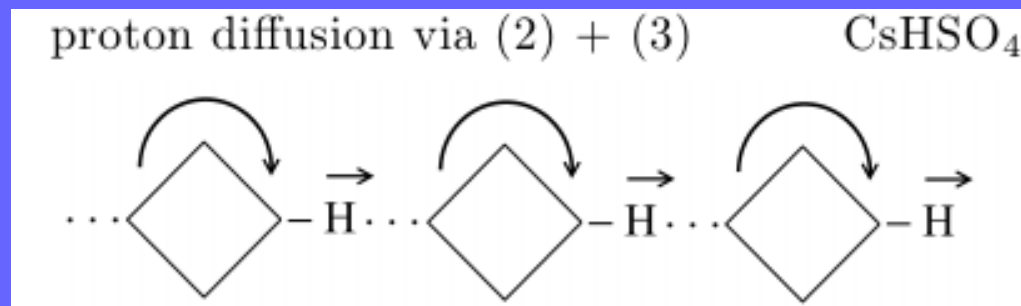


CsHSO₄





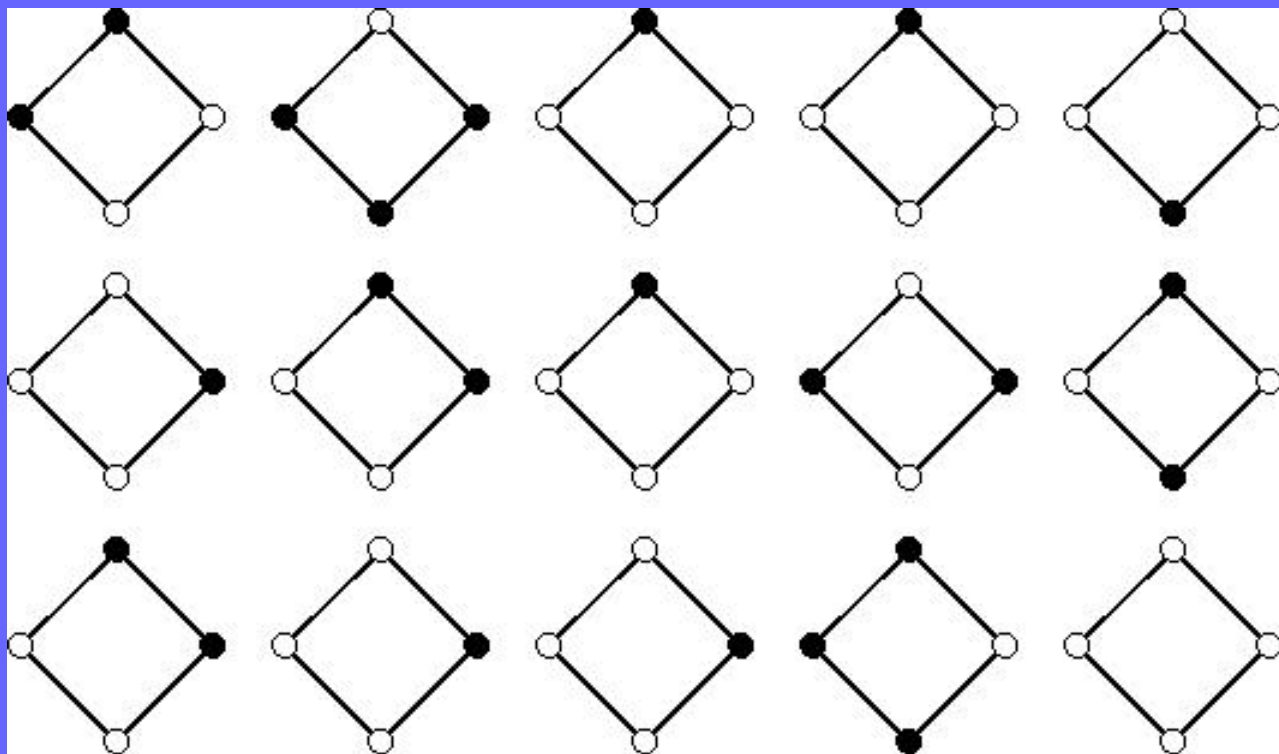
Mechanism Grotthussa



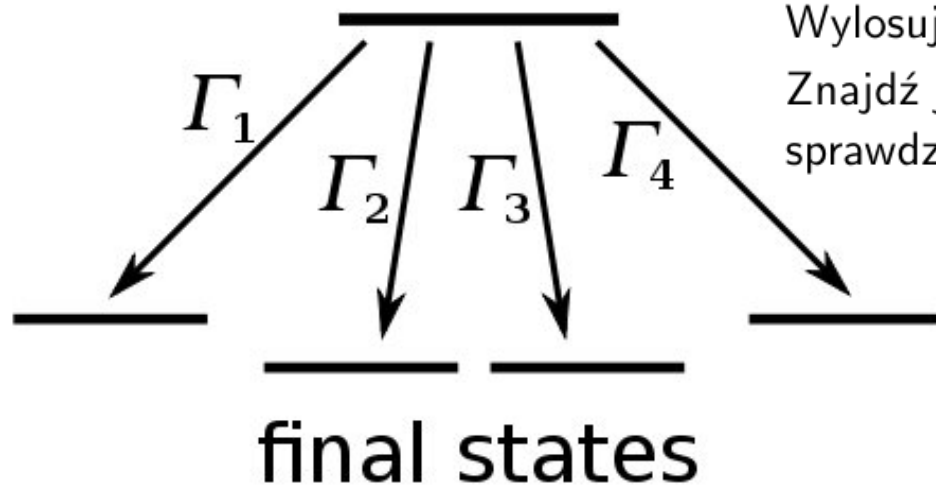
d=1



d=2



initial state



Wylosuj liczbę losową $v \in]0, 1]$

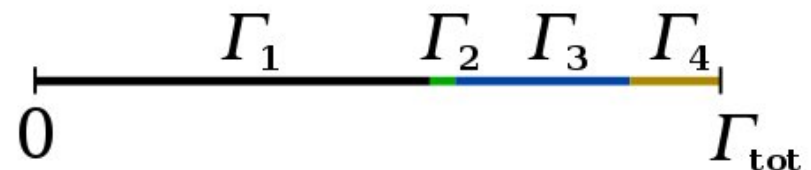
Znajdź jaka transformacja W_i będzie miała miejsce sprawdzając $\Gamma_{i-1} < v\Gamma_{tot} \leq \Gamma_i$, ($\Gamma_{tot} = \Gamma_N$)

rozkład prawdopodobieństwa czasu pierwszego zdarzenia dany jest przez

$$P_1(t) = \Gamma \exp(-\Gamma t)$$

Wylosuj liczbę losową $u \in]0, 1]$

Powiększ czas $t = t + \Delta t$ gdzie: $\Delta t = -\frac{\log u}{\Gamma_{tot}}$



Wartości parametrów w modelu:

częstość rotacji (prefaktor): 10^{11} Hz

częstość tunelowania (prefaktor): $5 \cdot 10^9$ Hz

energia aktywacji dla rotacji: 0.35 eV

efektywna bariera kulombowska: 0.4 eV

parametry potencjału wiązania wodorowego:

wysokość: 0.6 eV

szerokość: 0.6 Angstrema

odległość między środkami prętów: 2.4 Angstrema = 1.8 + 0.6,

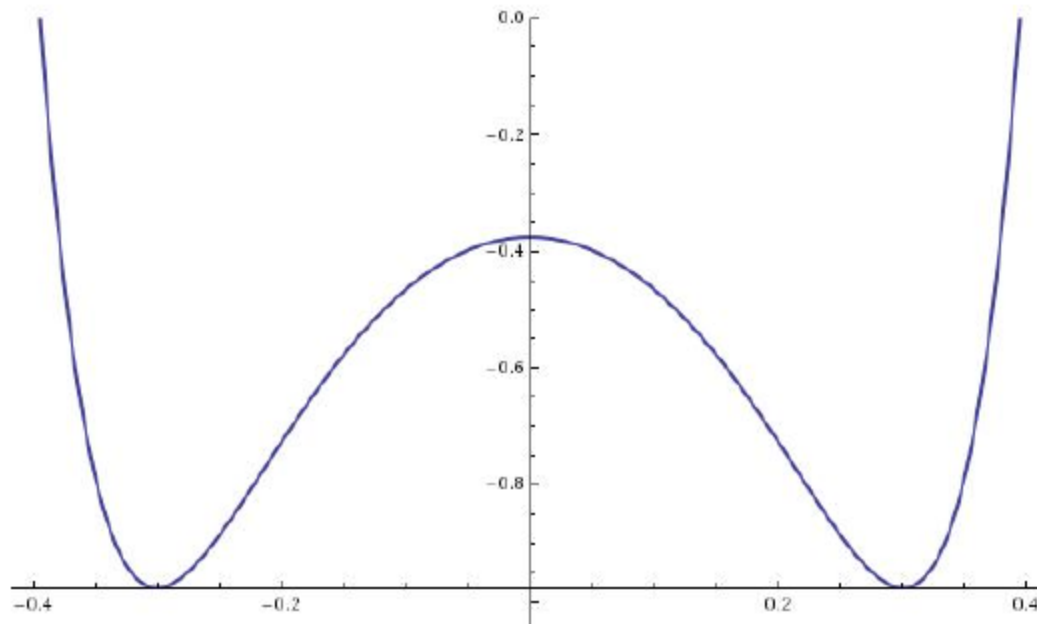
czyli w czynniku boltzmanowskim stoi

$\exp(-e \cdot 1.8 \cdot |\text{electricfield}| / kT)$ albo 1.

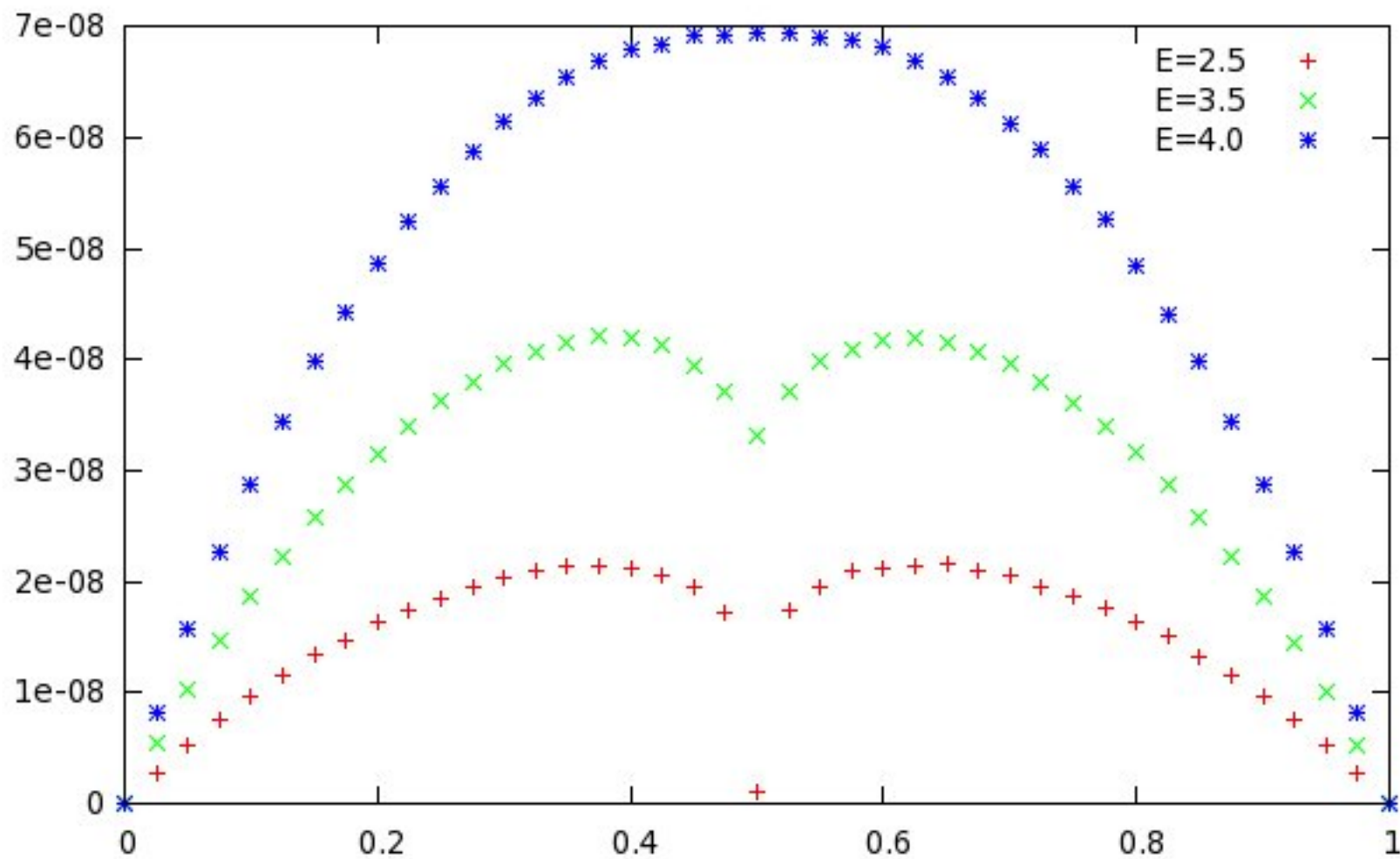
rozmiar łańcucha: 100 do 1000 prętów.

Potencjał wiązania wodorowego przybliżamy przez potencjał zbudowany z 2 potencjałów Morse'a.

$$V(x) = M\left(\frac{d}{2} - x\right) + M\left(\frac{d}{2} + x\right), \quad M(x) = g \left[e^{-\frac{2x}{b}} + e^{-\frac{x}{b}} \right]$$

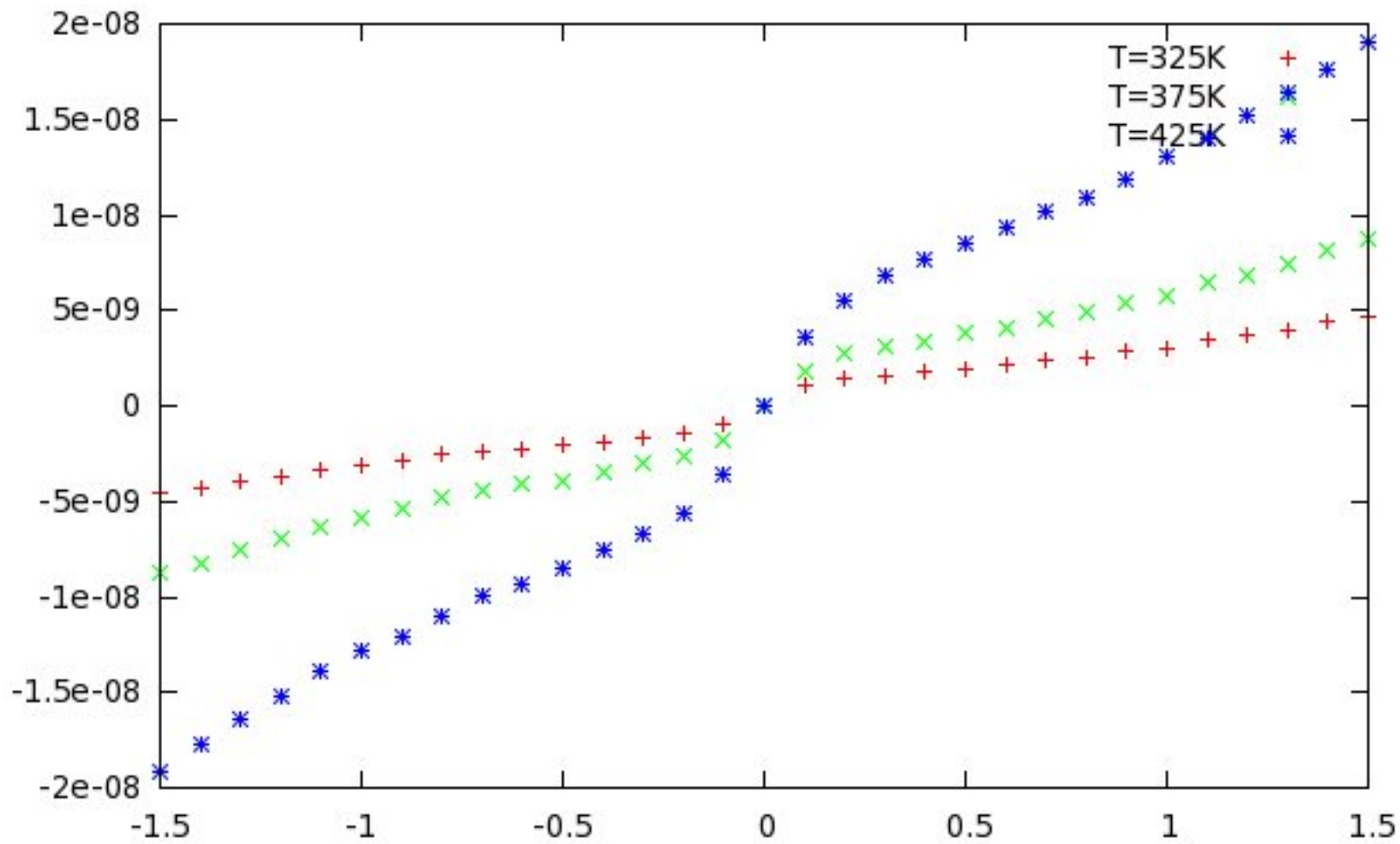


σ



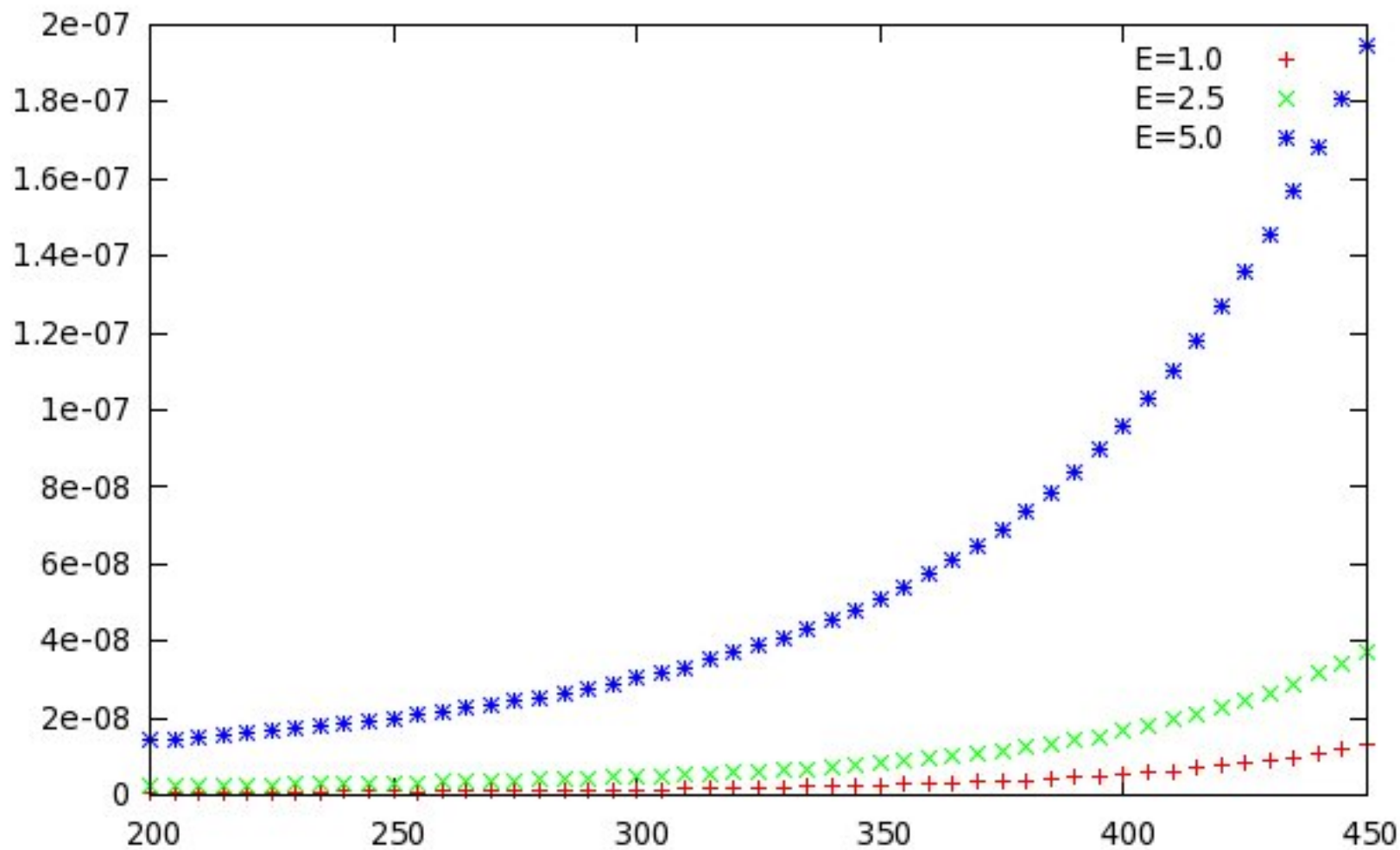
koncentracja

σ



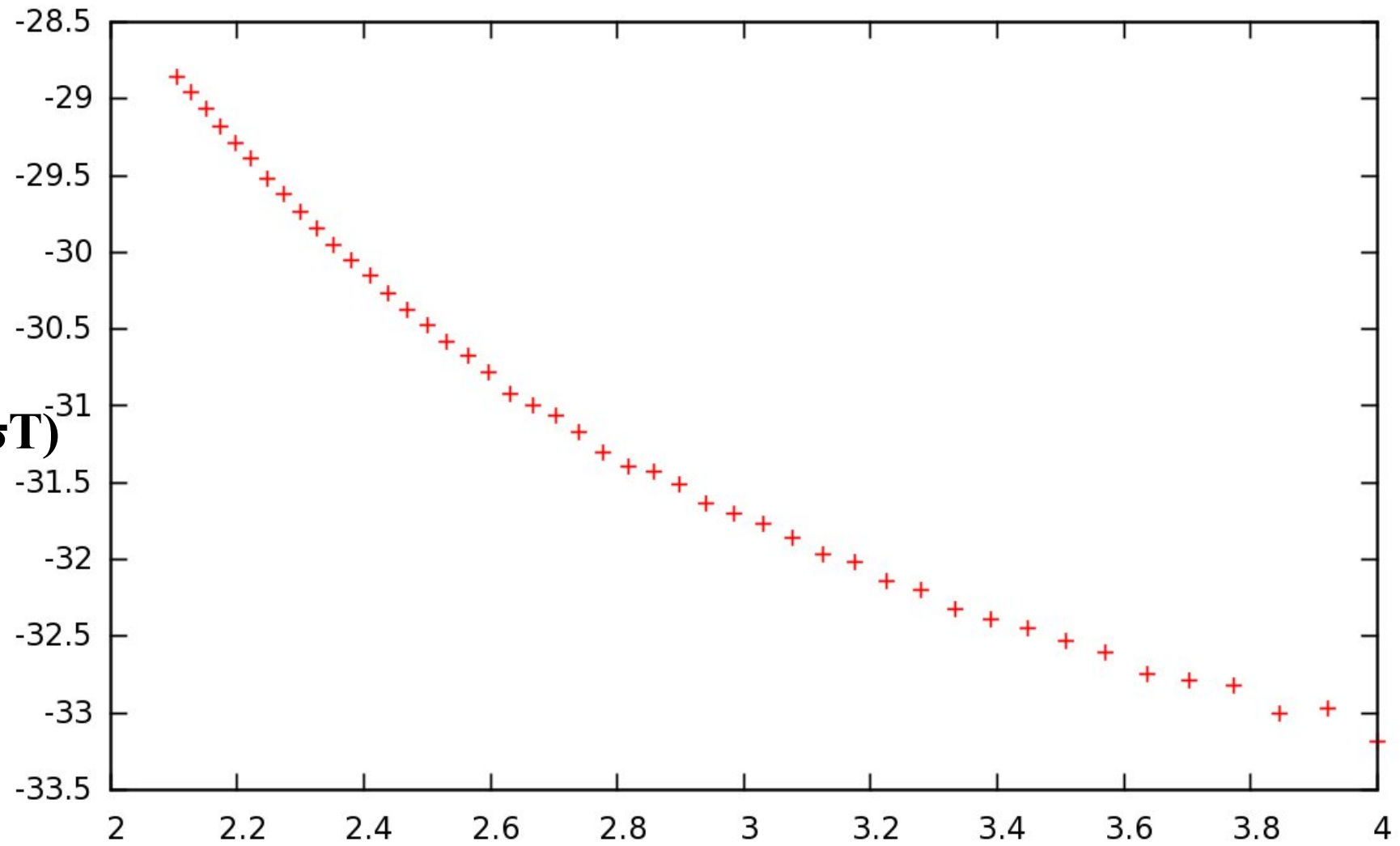
napięcie

σ



temperatura

$\log(\sigma T)$



$1000/T$

Dziękuję za uwagę

