

Ansicht der Benutzeroberfläche

TRAGMIN 5.0

Files Calculate Tools Quit

Load data

Load job

Save job

Calculate

View file

GasGraph

Create data f.

Data base

Quit

Data file:
C:\Tragmin5\calculation\Sn.dat

Job file:
no Jobfile

Calculation

☐ One room, One temperature
☐ One room, Temperature series
☒ Chemical vapor transport

☒ Show calculation output
Write files ?
☐ Partial pressures
☐ Solubility of components
☐ Transport efficiencies
☐ Migration rates

Constant

☐ Pressure
☒ Volume

Special calculations

Vary: ☐ Mean temperature ☐ Quantity

Pressure (atm) Volume (Liter)

Temperatures

T (Source) / K	T (Sink) / K	Delta T / K
673	573	-10

Endothermic Transport

Graphics

☒ Partial pressures
☐ Solubility of components
☐ Transport efficiencies
☐ Migration rates

Transport distance (cm) Cross-section (cm*cm)

Save graph

	Elements	n / mmol	n / mol	m / mg
1	Sn	10.0	1.0000E-002	1187.100000
2	I	1	1.0000E-003	126.905000
3	N	0.00001	1.0000E-008	0.000140

Set
 to
 mmol

lg p(i) / atm

T / K ---->

Abbildung 1: Ansicht der Benutzeroberfläche von TRAGMIN 5

0 Vorbetrachtungen

Der Ordner „Tragmin5“ muss, um korrekt funktionieren zu können, im Laufwerk C:\ des Computers abgespeichert werden.

Eine Übersicht der beinhalteten Ordner und Dateien ist in Abbildung 2 zu sehen. Auf deren einzelnen Funktionen wird im Folgenden eingegangen.

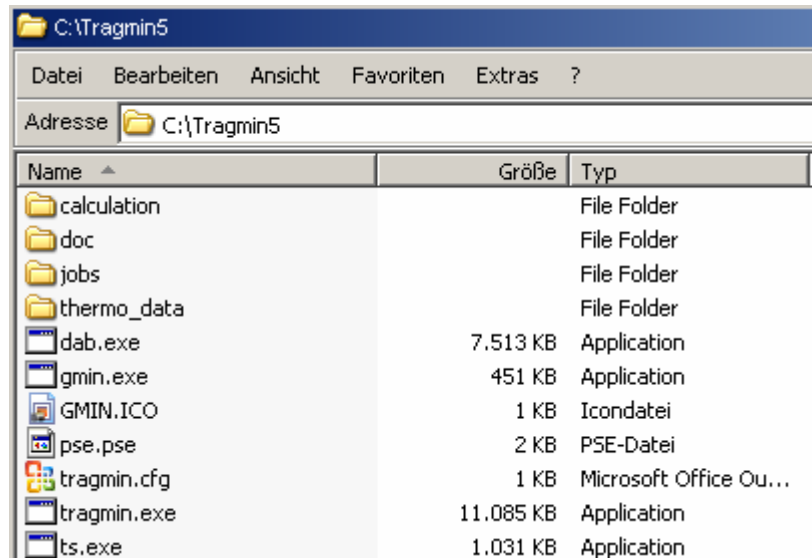


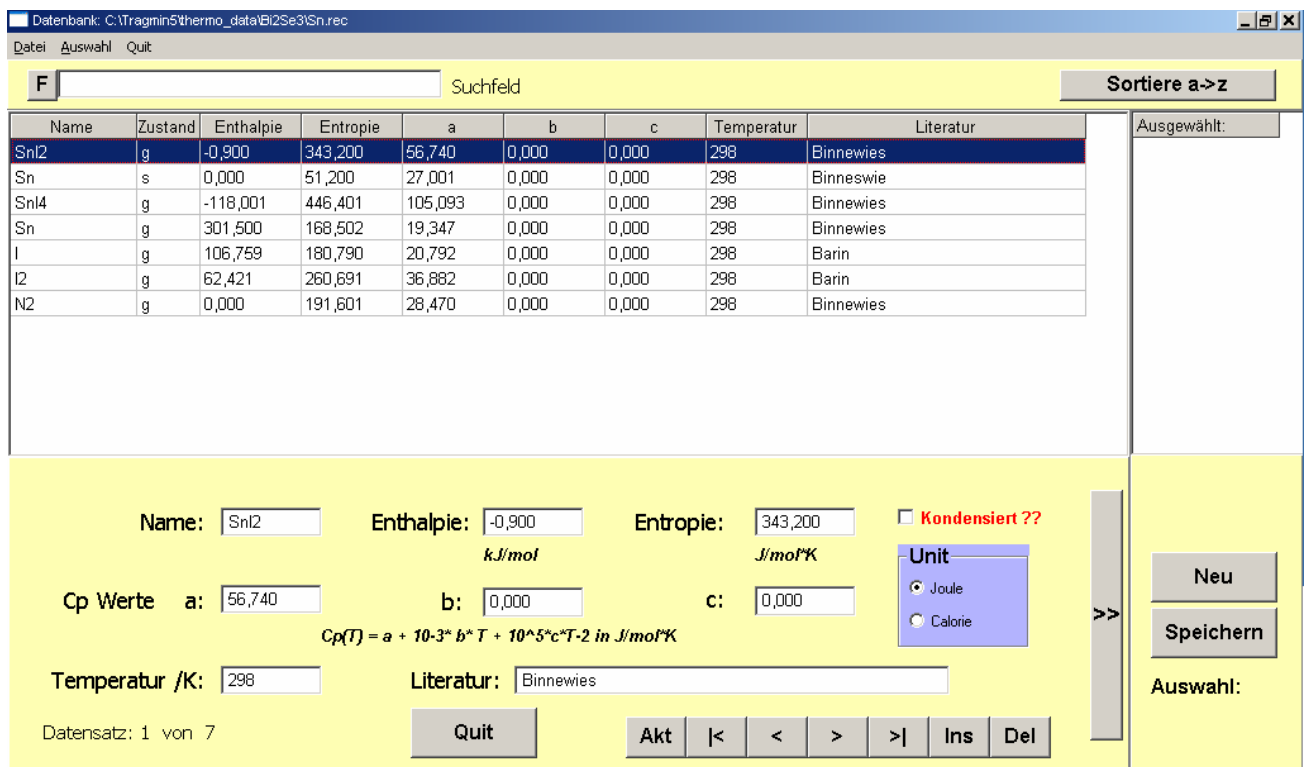
Abbildung 2: Ansicht der TRAGMIN 5-Ordner und -Dateien

1 Datenbank

Data base

1.1 Datensätze hinterlegen

Vor der Modellierung des Transportes ist es notwendig die thermodynamischen Daten der festen (oder ggf. flüssigen) Phasen und der Gasspezies, die sich prinzipiell in dem System befinden können, in der Datenbank des Programms zu hinterlegen. Zu dieser gelangt man entweder über die Ausführungs-Datei C:\Tragmin5\dab.exe oder indem man bei bereits geöffnetem TRAGMIN-Programm auf den Button „Data base“ (im linken Menü) klickt. Anschließend wird selbstständig ein neues Fenster geöffnet, wie es in Abbildung 3 zu sehen ist.



Name	Zustand	Enthalpie	Entropie	a	b	c	Temperatur	Literatur
Snl2	g	-0,900	343,200	56,740	0,000	0,000	298	Binnewies
Sn	s	0,000	51,200	27,001	0,000	0,000	298	Binnewies
Snl4	g	-118,001	446,401	105,093	0,000	0,000	298	Binnewies
Sn	g	301,500	168,502	19,347	0,000	0,000	298	Binnewies
I	g	106,759	180,790	20,792	0,000	0,000	298	Barin
I2	g	62,421	260,691	36,882	0,000	0,000	298	Barin
N2	g	0,000	191,601	28,470	0,000	0,000	298	Binnewies

Name: Enthalpie: Entropie: ☐ Kondensiert ??

Cp Werte a: b: c:

Temperatur /K: Literatur:

Datensatz: 1 von 7

Unit: ☒ Joule ☐ Calorie

Neu Speichern Auswahl: Quit Akt |< < > >| Ins Del

Abbildung 3: Benutzeroberfläche der Datenbank

Bevor man anfängt Werte in die Datenbank einzugeben, muss man in dem blau unterlegten Feld „Unit“ (Einheit) die Voreinstellung von Calorie auf Joule ändern! Werden die Werte in Calorien eingegeben, ist eine nachträgliche automatische Umrechnung in Joule durch das Programm NICHT möglich und man muss alles noch einmal (mit der richtig angeklickten Einheit) abtippen. Nur in älterer Literatur wird man unter Umständen noch thermodynamische Daten in Calorie finden.

Nun füllt man die Daten jeder Verbindung einzeln in die leeren Felder ein:

Name: chemische Formel z.B. SnI_2 (Ziffern werden nicht tiefgestellt)

Enthalpie und Entropie: Zahlenwerte in kJ/mol bzw. J/(mol·K)

„Kondensiert??“: bei flüssigen und festen Stoffen ein Häkchen setzen (alternativ die Leertaste drücken)

C_p Werte:

Hier ist dringend zu beachten, dass das Polynom für die molare Wärmekapazität in der Form $C_p(T) = a + b \cdot 10^{-3} \cdot T + c \cdot 10^5 \cdot T^{-2}$ eingegeben werden muss. Die meisten Quellen geben die Polynome mit $C_p(T) = a + b \cdot 10^{-3} \cdot T + c \cdot 10^6 \cdot T^{-2}$ an. Man hat also entweder die Möglichkeit a, b, und ein entsprechend umgerechnetes c einzutragen oder das gegebene Polynom für eine bestimmte Temperatur T auszurechnen und das Ergebnis nur im Feld für a einzugeben ($b=0$, $c=0$).

Temperatur: z. B. 298 K, die Umrechnung der Enthalpie und Entropie für höhere Temperaturen führt das Programm selbstständig aus (Kirchhoffsche Gesetze)

Nach dem Ausfüllen dieses Datenblattes klickt man auf den unteren grauen Button „Ins“ und wiederholt den gesamten Vorgang, bis alle Spezies übernommen sind. Ein Löschen einer Verbindung ist durch Markieren der Datenzeile und Klicken auf den grauen „Del“-Button möglich.

In sämtlichen Datensätzen sollten stets die Werte für Stickstoff enthalten sein, damit Berechnungen untereinander vergleichbar sind. (Generell würde sich auch eine andere Gasspezies als Bezugssystem eignen, wenn sie selbst keine Auswirkungen auf die Transportwirksamkeit der übrigen Gasspezies hat.)

Zum Speichern des fertigen Datenblattes geht man oben auf den Reiter „Datei“ und wählt nach dem Klicken von „Speichern“ den Ordner C:\Tragmin5\thermo_data (Dateiformat .rec wird automatisch generiert). Mittels „Datei“ und „Laden“ können gespeicherte Dateien wieder abgerufen werden.

1.2 Tipps und Tricks

Bei häufigem Gebrauch von TRAGMIN empfiehlt es sich einen großen Datensatz mit sämtlichen verwendeten Verbindungen zu erstellen. Aus diesem heraus können ohne weitere Daten-Eingabe kleinere Berechnungs-Dateien erstellt werden. (Dies bietet sich an, wenn man nur wenige Komponenten variieren möchte.)

Das Datenblatt wird regulär, wie in Kapitel 1.1 beschrieben, angefertigt bzw. bereits fertige Dateien in die Datenbank geladen. Durch einen Doppelklick auf die gewünschte Verbindung wird die Liste am rechten Rand (siehe Abbildung 3) entsprechend befüllt. Hat man die gewünschten Spezies zusammengestellt, muss dieses Datenblatt über den „Speichern“-Button unten rechts gesichert werden! Das Klicken von „Datei“ und „Speichern“ ist für diese Liste unwirksam.

2 Datenfile in TRAGMIN erstellen

Create data f.

Um eine Datei der Datenbank in TRAGMIN nutzen zu können, muss diese im Programm noch konvertiert werden. Dafür klickt man auf den Button „Create data f.“ (im linken Menü) und sucht sich die gewünschte .rec-Datei aus C:\Tragmin5\thermo_data heraus. Anschließend wird ein Fenster geöffnet, wie es links in Abbildung 4 zu sehen ist.

Die Reihenfolge der Komponenten der kondensierten Phasen spielt für die Berechnung keine Rolle und kann mit dem Button „Keep order“ in die leere Spalte übernommen werden. Bei der Reihenfolge der Gasphasen muss darauf geachtet werden, dass die Bezugsgasspezies (hier Stickstoff, siehe Ende Kapitel 1.1) immer am Ende der leeren Spalte steht. Man markiert also einzeln alle anderen Komponenten und überträgt sie mittels „----->“ in die rechte Spalte, Stickstoff wird als letzte hinzugefügt.

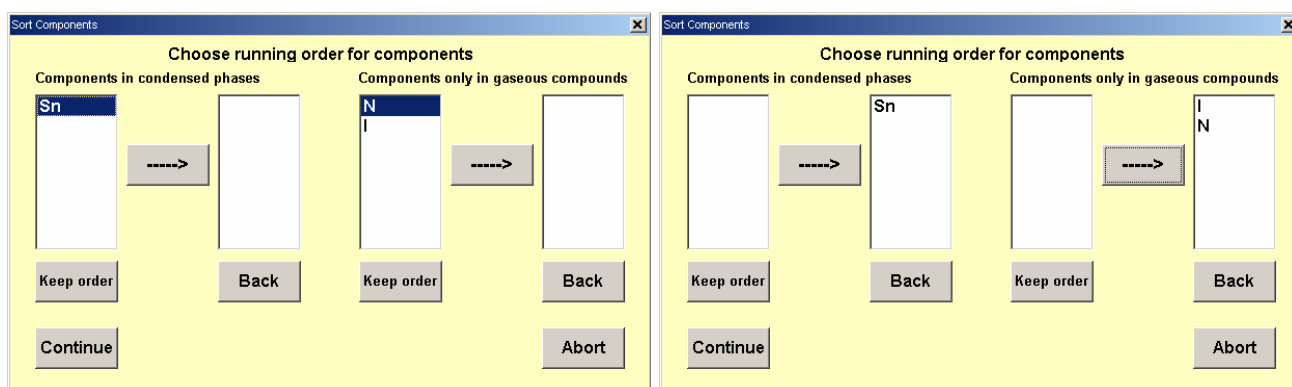


Abbildung 4: Sortierung der Komponenten

Anschließend klickt man auf den Button „Continue“ unten links. Es wird ein Fenster wie in Abbildung 5 geöffnet. Dieses sollte per „Save + Close“ geschlossen werden.

TRAGMIN generiert daraus ein Datenfile, welches im Ordner C:\Tragmin5\calculation zu speichern ist. Dieses Datenfile umfasst drei einzelne Dateien mit dem gegebenen Namen und den Endungen .dat, .res und .tra. In der Regel wird man nur von der .dat-Datei Gebrauch machen, die anderen Dateien sind aber keinesfalls zu löschen.

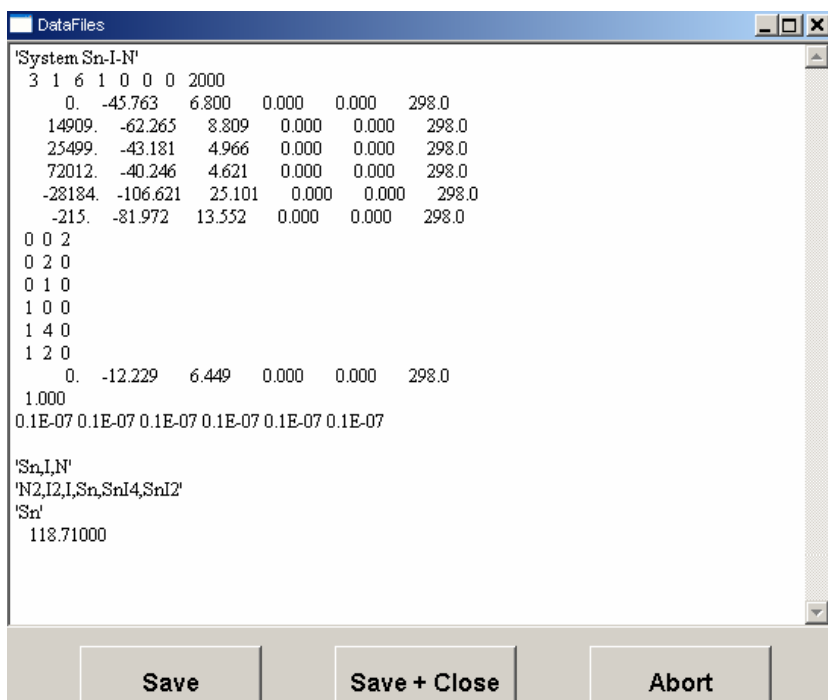


Abbildung 5: Zusammenfassung der in der .rec-Datei verwendeten Spezies

3 Berechnungen

Load data

Calculate

Zur Durchführung von Berechnungen benötigt man nun die .dat-Datei, die zuvor im Ordner C:\Tragmin5\calculation angelegt wurde. Über den Button „Load data“ wird sie in TRAGMIN geladen. Man erhält oben rechts im Programm (siehe Abbildung 1) eine Auflistung der beteiligten Elemente, deren Stoffmenge in mmol einzutragen ist. Kommas müssen dabei als Punkte geschrieben werden. Stickstoff sollte pauschal auf ca. 10^{-5} mmol gesetzt werden, da beim Evakuieren immer ein Restdruck dieser Größenordnung in der Ampulle verbleibt.

Set
N
to
E-5
mmol
OK

Bei der Arbeit mit Quarzglasampullen handelt es sich um ein geschlossenes System, daher sollte in dem Kasten „Constant“ Volume angeklickt werden. Bei einer Länge von 100 mm und einem Innendurchmesser von 16 mm kann das voreingestellte Volumen von 0,02 l beibehalten werden, ansonsten ist es neu zu berechnen.

Constant
☐ Pressure
☒ Volume

Anschließend werden die Temperaturen von Quelle (Auflösungsraum/Source) und Senke (Abscheidungsraum/Sink) in Kelvin eingegeben. Dabei wird die Quelltemperatur

T (Source) / K	T (Sink) / K	Delta T / K
673	573	-10

Endothermic Transport

bei exothermen Reaktionen niedriger, bei endothermen Reaktionen höher gewählt als die Senktemperatur. Als ΔT sind in der Regel ± 10 K zu wählen. Benötigt TRAGMIN damit zu viele Berechnungsschritte, erfolgt eine Aufforderung ΔT zu erhöhen.

Sind alle relevanten Daten eingegeben, klickt man auf den Button „Calculate“ um die Berechnung zu starten. Man erhält als Ergebnis die Partialdrücke der Gasspezies, die Transportwirksamkeit der Gas-

Graphics
☒ Partial pressures
☐ Solubility of components
☐ Transport efficiencies
☐ Migration rates

spezies, die Gasphasenlöslichkeit der Komponenten und die Transportrate der kondensierten Phase (in diesem Zusammenhang auch die Zusammensetzung des transportierten Bodenkörpers) in Abhängigkeit von der Temperatur bzw. der Temperaturdifferenz. Die einzelnen zugehörigen Daten können über das Feld „Graphics“ aufgerufen werden.

Um Berechnungen aufzubereiten, kann man sich die benötigten Dateien (hier z. B. Partialdrücke und Transportwirksamkeit der Gasspezies) als Text-Dateien ausgeben lassen. So können sie von anderen Programmen (z. B. Origin) leicht weiterverarbeitet werden. Dafür klickt man in dem Feld „Write files?“ die gewünschten Kategorien an und drückt erneut „Calculate“. Die .txt-Dateien werden im Verzeichnis C:\Tragmin5\calculation eingegeben.

Write files ?
☒ Partial pressures
☐ Solubility of components
☒ Transport efficiencies
☐ Migration rates

Will man Berechnungen mit bestimmten Parametern nicht bei jedem Programmstart erneut eingeben, kann man auf Jobs zurückgreifen. Nach Eingabe der gewünschten Stoffmengen und Temperaturen, klickt man im linken Menü auf „Save job“ und speichert die angelegte Datei unter C:\Tragmin5\jobs (Dateiformat .jjb wird automatisch erstellt). Zum Aufrufen eines solchen Jobs nutzt man den Button „Load job“.

Save job

Load job