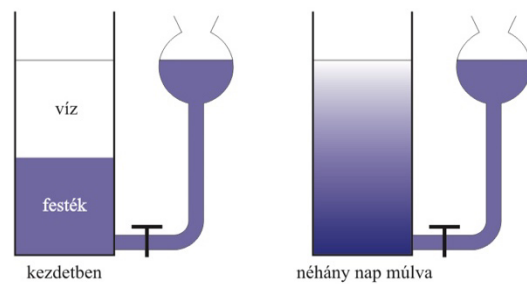
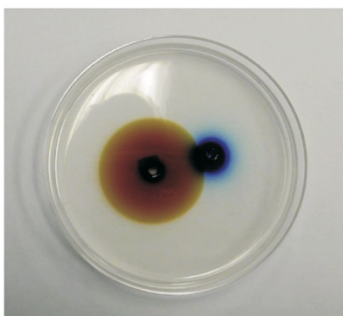
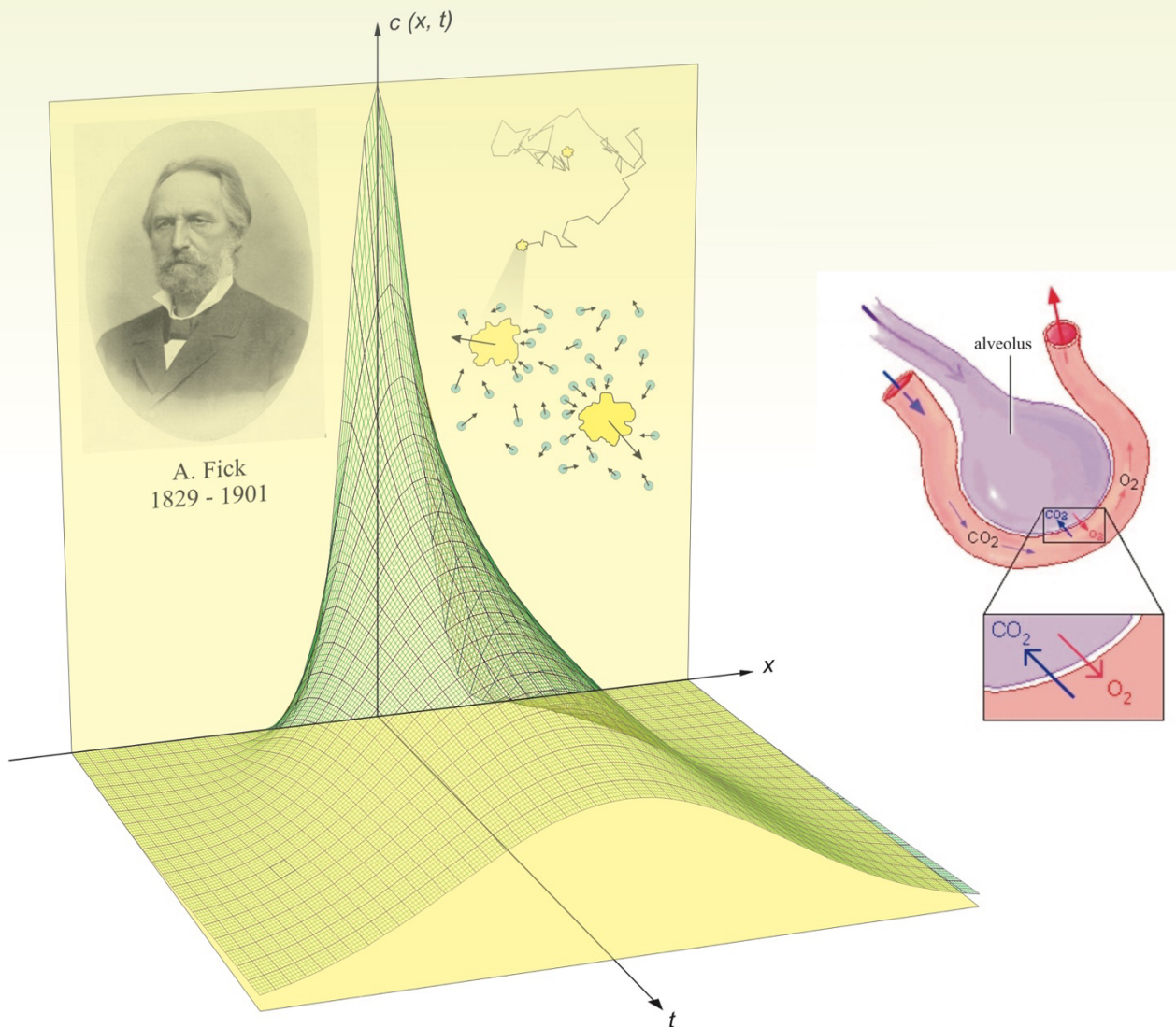


DIFFÚZIÓ

ANYAGTRANSZPORT, DIFFÚZIÓS EGYÜTTHATÓ MEGHATÁROZÁSA



ALAPFOGALMAK

BROWN-MOZGÁS: Brown pollenzuspenzió mikroszkópos vizsgálata során figyelte meg először a vízbe kevert virágporszemcsék szabálytalan, zezugos mozgását. Ez a megfigyelhető mozgás a fénymikroszkópban láthatatlan molekulák szüntelen lökdösődő mozgásának, azaz a hőmozgásnak látható következménye aminek hajtóereje a hőmérsékleti energia.

DIFFÚZIÓ: Ugyanennek a láthatatlan hőmozgásnak a következménye a makroszkopikusan is jól megfigyelhető diffúzió. Ha egy pohár vízbe egy csepp tintát cseppentünk, akkor az lassan szétterjed és egy idő után megfesti az egész folyadékot, minden külső beavatkozás nélkül. Ezt a szétterjedési folyamatot nevezzük diffúciónak, amely termikus egyensúly esetén mindaddig tart, amíg a részecskék eloszlása egyenletes lesz a térfogatban. A részecskék Brown-mozgása ezután is tart, de az egyensúly beállta miatt kialakuló egyenletes részecskeeloszlás miatt makroszkóposan már nem észleljük.

ANYAGÁRAM-SŰRŰSÉG (J_v): Egyszerűen szólva a diffúzió „erősségét”, vagy másként mondva a diffundáló anyag szétterjedését jellemző fizikai mennyiség: azt adja meg, hogy egységnyi idő alatt, egységnyi felületen hány mól anyag halad keresztül a diffúzió következményeként; mértékegysége: mol/(m²·s).

KONCENTRÁCIÓESÉS: A $\Delta c/\Delta x$ mennyiség, amely a helytől függően csökkenő koncentráció változásának mértékét fejezi ki. Egyszerűen mondva az egységnyi távolságra eső koncentrációkülönbségnek felel meg. (Általánosabb esetben a koncentráció gradiens elnevezést is használják)

DIFFÚZIÓS EGYÜTTHATÓ (D): Arányossági tényező, amely megadja az egységnyi idő alatt, egységnyi felületen átdiffundált anyag mennyiségét, ha a koncentrációesés is egységnyi volt. Mértékegysége: m²/s. Értéke függ a hőmérséklettől, a közeg viszkozitásától, a részecske méretétől és alakjától.

FICK I. TÖRVÉNYE: Az anyagáram-sűrűség a koncentrációeséssel arányos: $J_v = -D \cdot \frac{\Delta c}{\Delta x}$, ahol a D arányossági tényező diffúziós együttható.

FICK II. TÖRVÉNYE: A diffúzió során a koncentráció térbeli-időbeli változását írja le:

$$D \cdot \Delta t \frac{\Delta \left(\frac{\Delta c}{\Delta x} \right)}{\Delta x} + c_t = c_{t+\Delta t} ,$$

Megadja a koncentráció térbeli eloszlását egy $t + \Delta t$ időpontban, amennyiben ismerjük az eloszlást a Δt -vel korábbi t időpontban [$c(x, t)$].

A részecskék szétterjedését, anyagvándorlását — a véletlenszerű hőmozgás révén — diffúzióknak nevezzük. Diffúzió útján terjed szét például a cukor a kávéban (keverés nélkül is), vagy a rózsairat a szobában. Ez a folyamat termikus egyensúly esetén mindaddig tart (addig észlelhető), amíg a részecskék eloszlása egyenletes nem lesz az egész térfogatban. A diffúzió rendkívüli jelentőséggel bír az élő szervezetekben. Diffúzióval történik például a légzési gázok (O_2 , CO_2) cseréje az alveolusok és a kapillárisok között, illetve a kapillárisok és a felhasználó sejtek között. A víz, mint igen kis méretű molekula ugyancsak diffúzióval jut át a sejtmembránon.

A **gyakorlat célja** a diffúzióra vonatkozó törvényszerűségek megismerése és egy, a diffúziót jellemző paraméter (a diffúziós együttható) meghatározása.

ELMÉLETI ÖSSZEFOGLALÁS

A FICK-TÖRVÉNYEK

A diffúzióval kapcsolatosan az egyik alapvető kérdés az, hogy mitől függ a diffúzió „erőssége”. Az „erősség” jellemzésére használjuk az anyagáram-sűrűséget:

$$J_v = \frac{\Delta v}{\Delta t \cdot \Delta A} \quad (1)$$

amely azt adja meg, hogy egységnyi idő (Δt) alatt egységnyi felületen (ΔA) hány mólnyi anyag (Δv) [ejtsd: delta nü] jut keresztül. Mértékegysége $\text{mol}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$.

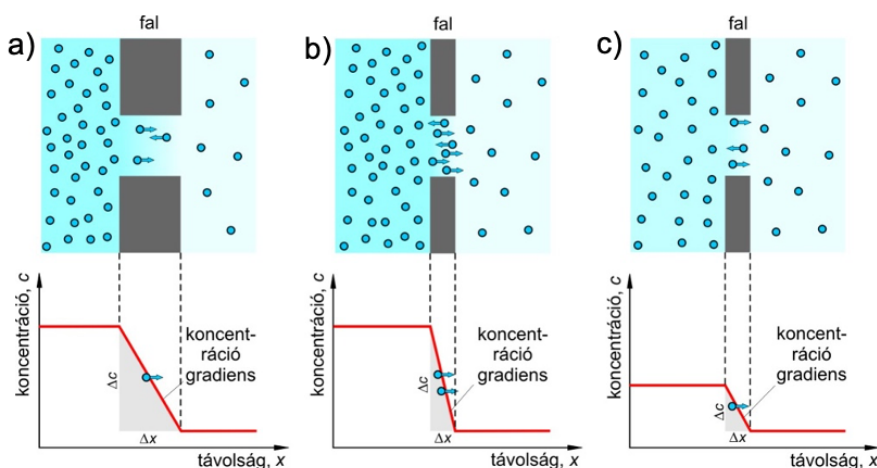
Kérdésünkre a választ Fick I. törvénye adja meg, amely a legegyszerűbb formában a következőképpen írható fel:

$$J_v = -D \cdot \frac{\Delta c}{\Delta x} \quad (2)$$

ahol $\Delta c/\Delta x$ az egységnyi távolságra eső koncentrációváltozás (az x -tengely mentén), más néven koncentrációesés vagy koncentrációgradiens. Tehát az anyagáram-sűrűség a koncentrációeséssel arányos (lásd 1. ábra). A D arányossági tényező a diffúziós együttható. D megadja az egységnyi idő alatt, egységnyi felületen átdiffundált anyag mennyiségét, ha a koncentrációesés is egységnyi. Mértékegysége: m^2/s . A diffúziós együttható függ a diffundáló részecske méretétől, alakjától, a közeg viszkozitásától, és hőmérsékletétől (lásd 1. táblázat). Gömb alakú részecskékre igaz az Einstein-Stokes összefüggés:

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta r} \quad (3)$$




ahol r a részecske sugara, η a közeg viszkozitása, T a közeg abszolút hőmérséklete k pedig a Boltzmann állandó.



1. ábra. Fick I. törvényének szemléltetése: egy adott rendszerben a koncentrációesés ($\Delta c/\Delta x$) szabja meg a diffúzió anyagáram-sűrűségét. Az a) és b) ábrán ugyanakkora a koncentrációkülönbség, de különböző távolságon történik a változás; a b) és c) ábrán ugyanakkora távolságon különböző mértékű a koncentráció változás. Az a) és c) ábra összehasonlításából az látszik, hogy ugyanakkora koncentrációesés (azonos meredekség), ugyanolyan anyagáram-sűrűséget eredményez.

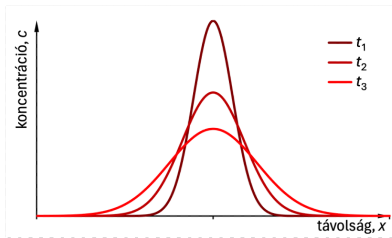
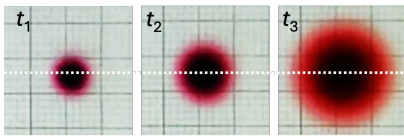
Kapcsolódó részek:
Damjanovich-Fidy-Szóllósi:
III /2.1.

 diffúzió
 diffusion
 Diffusion

 diffúziós együttható
 diffusion coefficient
 Diffusionskoeffizient

diffundáló részecske (mol. tömeg)	közeg	D (m^2/s)
H_2 (2)	levegő	$6,4 \cdot 10^{-5}$
O_2 (32)	levegő	$2 \cdot 10^{-5}$
CO_2 (44)	levegő	$1,8 \cdot 10^{-5}$
H_2O (18)	víz	$2,2 \cdot 10^{-9}$
O_2 (32)	víz	$1,9 \cdot 10^{-9}$
glicin (75)	víz	$0,9 \cdot 10^{-9}$
szérum albumin (69 000)	víz	$6 \cdot 10^{-11}$
tropomiozin (93 000)	víz	$2,2 \cdot 10^{-11}$
dohányozsák vírus (40 000 000)	víz	$4,6 \cdot 10^{-12}$

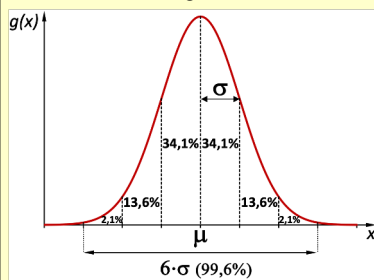
1. táblázat. Néhány anyag diffúziós együtthatója 20°C -on.



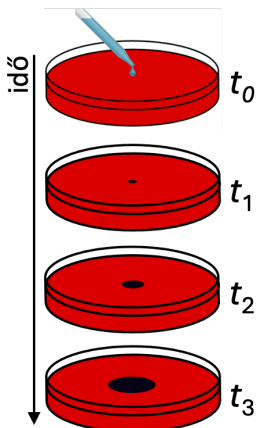
2. ábra. Kálium permanganát diffúziója agar gélben. **Fent:** Az idő előrehaladtával a folt szélessége a diffúzió miatt egyre nő. **Lent:** A foltok közepére húzott szaggatott vonalak mentén felvett koncentrációprofilok az egyes időpontokban normális eloszlásúak.

A normális (Gauss) eloszlás

A 2. ábrán bemutatott koncentrációeloszlások matematikailag a normális vagy Gauss-eloszlással közelíthetők. A harang alakú görbe egy csúccsal rendelkezik és szárai mindkét irányban a végtelenbe nyúlnak. A görbe alakját két paraméter, a μ -vel jelölt várható érték és a σ -val jelölt szórás határozza meg.



A haranggörbe alatti terület felosztható aszerint, hogy hány σ távolságra vagyunk a várható értéktől. Bár elméletileg a görbe végtelen széles, a várható értéktől mindkét irányban $\mu \pm 3\sigma$ széles tartományba esik a terület 99,6 %-a. Így például a 2. ábrán látható K-permanganát foltok szélessége jó közelítéssel $6 \cdot \sigma$.



3. ábra. A mérésben használt kongóvörös indikátorral festett agar gélben a protonok diffúziója színreakcióval követhető.

A diffúzióval kapcsolatos másik fontos kérdés az, hogy milyen gyorsan megy végbe a folyamat, pl. egy koncentrációkiegyenlítés. Fick I. törvénye a koncentráció esetleges időbeli változását nem veszi figyelembe, így a gyakorlatban olyan esetekre alkalmazható, ahol a koncentrációesés időben állandónak tekinthető. Ilyen például a légzési gázok diffúziója az alveólus lumen és a kapilláris között, mert a légzés és a keringés állandó koncentrációesést tart fent a respiratorikus membrán két oldala között. Szintén alkalmazható, ha a megfigyelés annyira rövid idejű, hogy a koncentrációváltozás elhanyagolható. Nem használható viszont közvetlenül, ha a koncentráció időbeli változását is figyelembe akarjuk venni. Fick II. törvénye éppen ezt, nevezetesen a koncentráció térbeli-időbeli változását írja le:

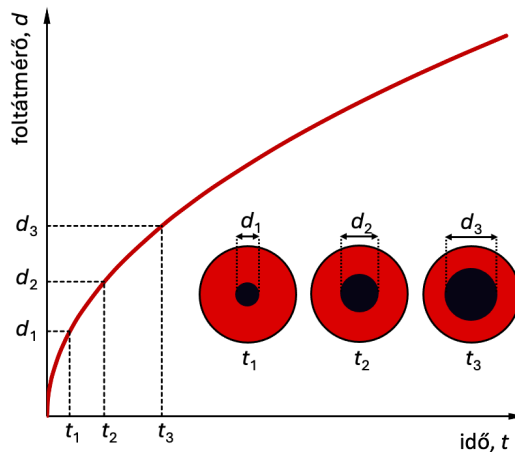
$$D \cdot \Delta t \frac{\Delta \left(\frac{\Delta c}{\Delta x} \right)}{\Delta x} + c_t = c_{t+\Delta t} \quad (4)$$

Ez az összefüggés azt adja meg, hogy amennyiben a koncentráció (térbeli) eloszlását ismerjük egy adott t időpontban $[c(x, t)]$, akkor egy kicsit későbbi $t + \Delta t$ időpontban milyen lesz az új eloszlás.

Példaképpen bemutatjuk a 2. ábrán egy pontból kiinduló K-permanganát diffúzióját agargélben. Az idő előrehaladtával a K-permanganát folt egyre szélesebbre terjed a gélben, ami 2. ábrán látható koncentrációeloszlásokkal jellemezhető.

A DIFFÚZIÓS EGYÜTTHATÓ MEGHATÁROZÁSA

Kísérletünkben Fick II. törvényét használjuk fel H^+ ionok diffúziós együtthatójának meghatározására. Kezdeti lépésként egy vékony agargélkorong közepére sósavat cseppentünk, majd a kezdeti pontból kiindulva nyomon követjük a szabad protonok diffúzióját a gélbe kevert kongóvörös indikátor színreakciójával. A diffundáló protonok okozta pH csökkenés hatására az indikátor vörösből sötétkékbe csap át, ami miatt ugyan a 2. ábrán bemutatott koncentrációeloszlás nem lesz látható, viszont a diffúziós front helyzete pontosan leolvasható (3. ábra). Megfelelő időközönként megmérve a sötétkék folt átmérőjét, lehetőségünk van a diffúziós folyamat kvantitatív követésére. A méréseink során kapott foltátméreket az idő függvényében ábrázolva a következő eredményre jutunk:

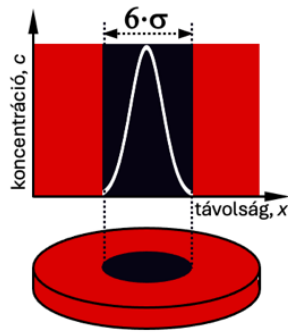


4. ábra. H^+ ionok diffúziója kongóvörös indikátorral festett agargélben. A sötét folt átmérőjének növekedése időben négyzetgyök függvényt követ.

A 4. ábrán látható grafikonból az olvasható le, hogy a folt átmérője (d) idővel egyre lassabban növekszik, azaz a diffúzió sebessége az idő előrehaladtával csökken. A szétterjedő folt átmérő menti koncentráció eloszlása egy normális eloszlás (5. ábra), amelynek szélességét leíró szórás paramétere (σ) a diffúziós állandótól (D) és az eltelt időtől (t) függ az alábbi összefüggés szerint:

$$\sigma = \sqrt{2Dt} \quad (5)$$

Mivel a gél pH-ja az indikátor sötét színét okozó pH érték alatt marad a folt közepétől mindkét irányban három szórásnyi távolságig, ezért kiértékelésünkben a folt átmérőjét $6 \cdot \sigma$ -nak vesszük (5. ábra).



5. ábra. A H^+ ionok koncentrációeloszlása és a megfigyelt színreakció kapcsolata a gélben. A sötét folt szélessége jól közelíthető a koncentrációeloszlást leíró Gauss görbe szórásának hatszorosával.

Ezek alapján a folt átmérőjének időbeli változása az alábbi egyenlettel írható le:

$$d = 6 \cdot \sqrt{2Dt} \quad (6)$$

ahol d a folt átmérője, t a diffúzió ideje és D a diffúziós állandó. Ebből pedig meghatározhatjuk a szabad H^+ ionok agargélre vonatkozó diffúziós állandóját. Ha a folt átmérőjének változását az idő négyzetgyökének függvényében ábrázoljuk, akkor az alábbi egyenlet szerinti egyenest kapjuk:

$$d = \sqrt{72D} \cdot \sqrt{t} \quad (7)$$

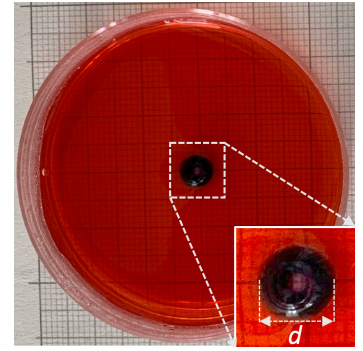
egy olyan lineáris egyenlet, amelynek független változója \sqrt{t} , függő változója d és meredeksége $\sqrt{72D}$. Ez alapján, a meredekség ismeretében a diffúziós állandó könnyen kiszámolható:

$$D = \frac{\text{meredekség}^2}{72} \quad (8)$$

FELADATOK:

A kongóvörössel festett agargél közepében található kis mélyedésbe mikropipettával 5 μl 1M-os HCl oldatot cseppentünk. Az oldat cseppentésekor azonnal megfigyelhető az indikátor átcsapási színreakciója. A cseppentés pillanatában a stoppert elindítva a jegyzőkönyvben javasolt időpontokban a gél alá helyezett milliméterpapír segítségével leolvassuk a folt átmérőjét.

1. Helyezze a kongóvörössel festett agargélkorongot tartalmazó Petri-csészét egy milliméterpapírra úgy, hogy a gél közepén található mélyedés egy jól azonosítható koordinátán legyen.
2. Cseppentsen 5 μl 1M-os HCl oldatot a gél közepén található mélyedésbe. A cseppentés pillanatában a mérőpárja indítsa el a stopperórát!
3. Az Excel jegyzőkönyvben található javasolt időpontokban mérjék meg a folt átmérőjét! Ha az adott időpontokban telefonjával fényképet készít a gélről, a digitális képbe beleszúrva pontosan leolvasható a foltátmérő (6. ábra).
4. Számolja ki a másodpercben mért eltel idők négyzetgyökeit, és a foltátmérőket váltsa át méterbe!
5. Ábrázolja a folt átmérőjét méterben a másodpercekben mért idő négyzetgyökének függvényében pontdiagramon!
6. Illesszen egyenest a pontokra, majd az illesztésből kapott meredekségből a (8) egyenlet felhasználásával számolja ki a diffúziós állandót!
7. A kapott diffúziós állandót és a (7) egyenletet felhasználva számítsa ki, hogy mennyi idő szükséges az Excel fájlban megadott különböző foltátmérők kialakulásához!



6. ábra. A kísérletünk során a folt átmérője a gél alá helyezett milliméterpapír segítségével olvasható le.

A mérési adatok ábrázolása

A (7) egyenlet alapján a folt átmérője az idő négyzetgyökétől függ. Ezért legegyszerűbb, ha a mért folt átmérőket az eltel idő négyzetgyökének függvényében ábrázoljuk, így egy olyan egyenest kapunk, amelynek meredeksége (m) a diffúziós állandó négyzetgyökétől függ. A meredekség ismeretében így a diffúziós állandó kiszámolható a (8) egyenlet segítségével.

