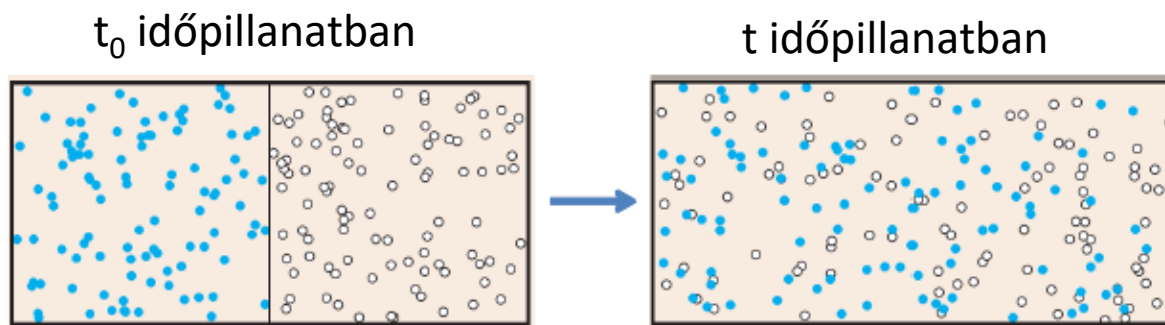


Diffúzió

- Diffúzió jelensége és törvényei
- Kálium permanganát diffúziója
- Képfeldolgozás
- Random Walk (véletlen bolyongás)
- Kutatási alkalmazások

Diffúzió: Nettó (megfigyelhető) anyagtranszport amely a koncentráció térbeli kiegyenlítődéig tart. (termikus egyensúlyban, szabad mozgás esetén)

Brown-féle mozgás: Részecskék véletlenszerű, korrelálatlan mozgása, mely a hőmozgás és véletlen ütközések következménye.



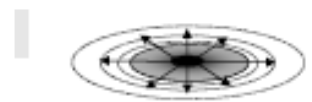
Fick I törvénye (egyirányú diffúzió)

$$J_v = -D \cdot \frac{\Delta c}{\Delta x}$$



Fick II törvénye (radiális diffúzió)

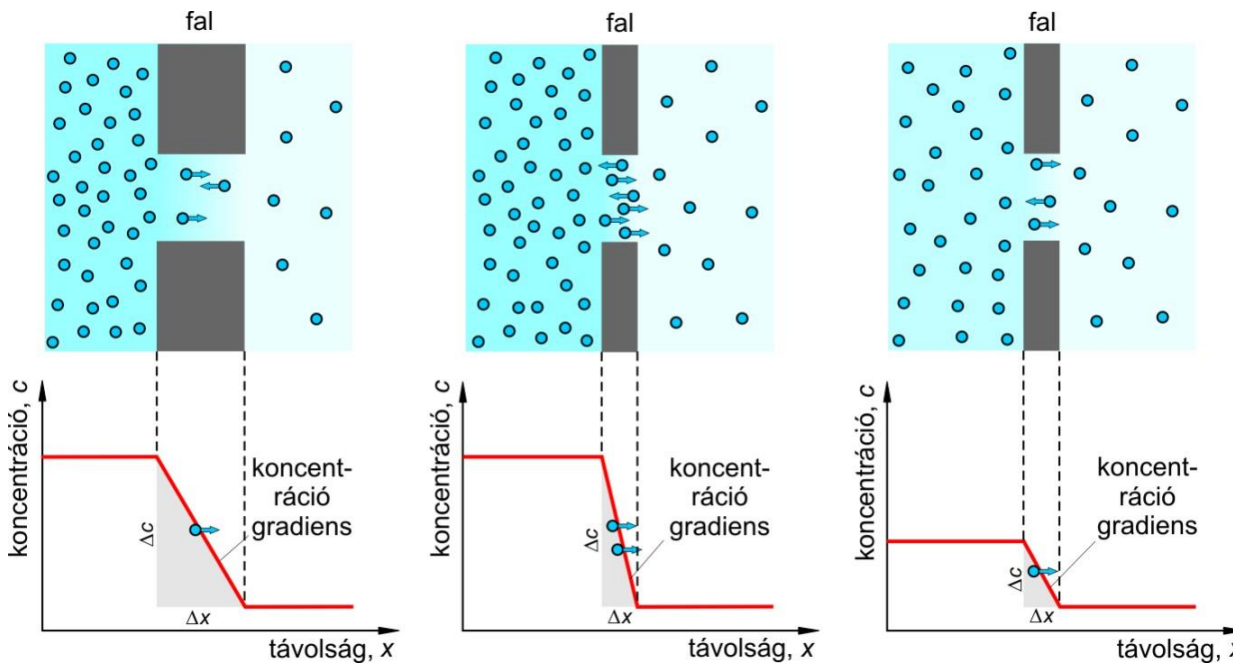
$$D \cdot \frac{\Delta \left(\frac{\Delta c}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = \frac{\Delta c}{\Delta t}$$



Radiális diffúziónál

A D arányossági tényező az ún. diffúziós együttható. D megadja az egységnyi idő alatt, egységnyi felületen átdiffundált anyag mennyiségét, ha a koncentrációesés is egységnyi. Mértékegysége: m^2/s .

Konduktív anyagtranszport-csak a részecskék mozognak



$$J_v = -D \cdot \frac{\Delta c}{\Delta x}$$

Fick I törvény az időbeli változást nem veszi figyelembe (!)

A diffúziós együttható függ a diffundáló részecske méretétől, alakjától, a közeg viszkozitásától, és hőmérsékletétől

→ Stokes Einstein egyenlet

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta r}$$

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

Korlátai: gömb alakú részecske, szabad 3D diffúzió

(A modern részecskeméret meghatározó módszerek ezt használják lásd később.)

A diffúziós együttható kísérleti meghatározása

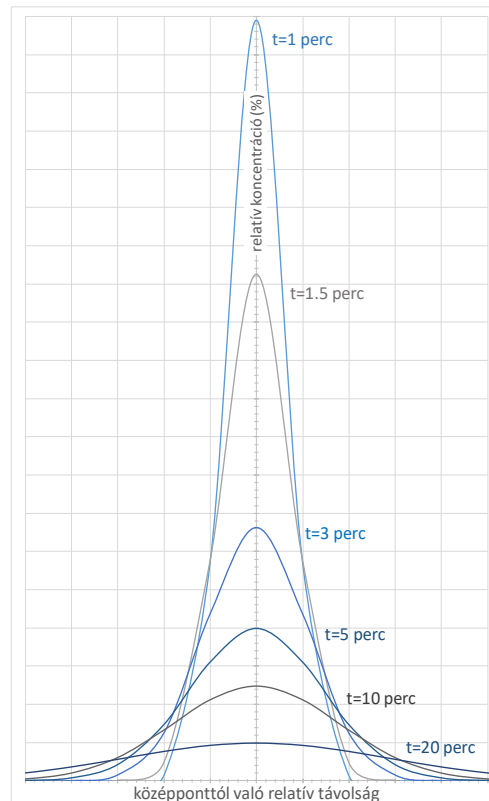
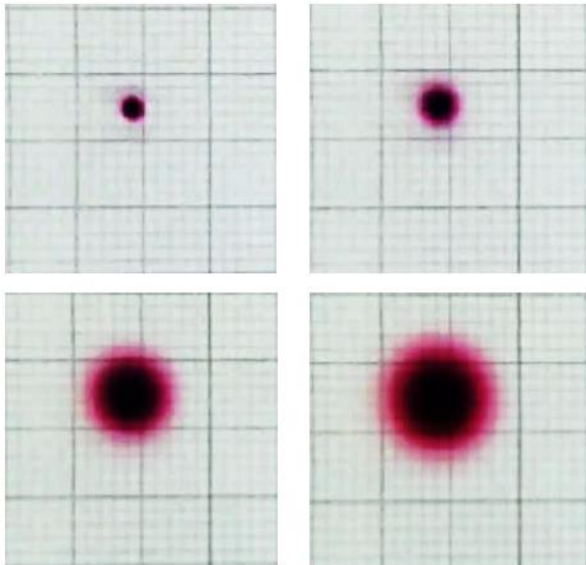
Kísérletünkben Fick II. törvényét használjuk fel K^+ ionok és MnO_4^- ionok diffúziójának egy kétdimenziós felszínen (agag-agar gél felszíne) történő vizsgálatára.



Feltétel, hogy a kísérlet kezdetén a diffundáló anyag egy nagyon kicsi (elhanyagolható méretű) pontban legyen összegyűjtve

Ebben az esetben egy haranggörbe jellegű megoldást kapunk

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



Fick II törvénye felírható az alábbi képlettel:

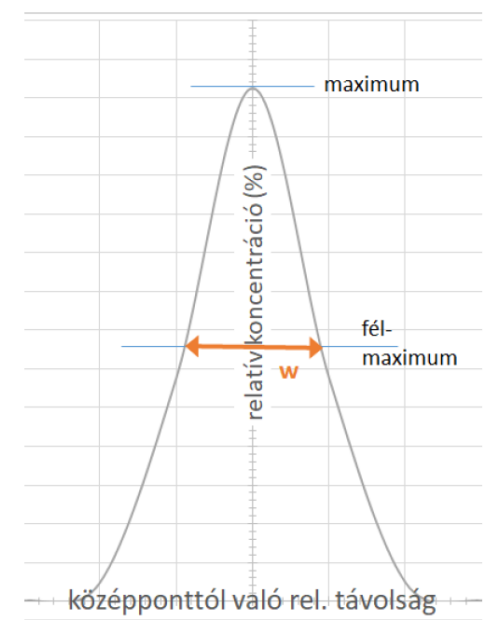
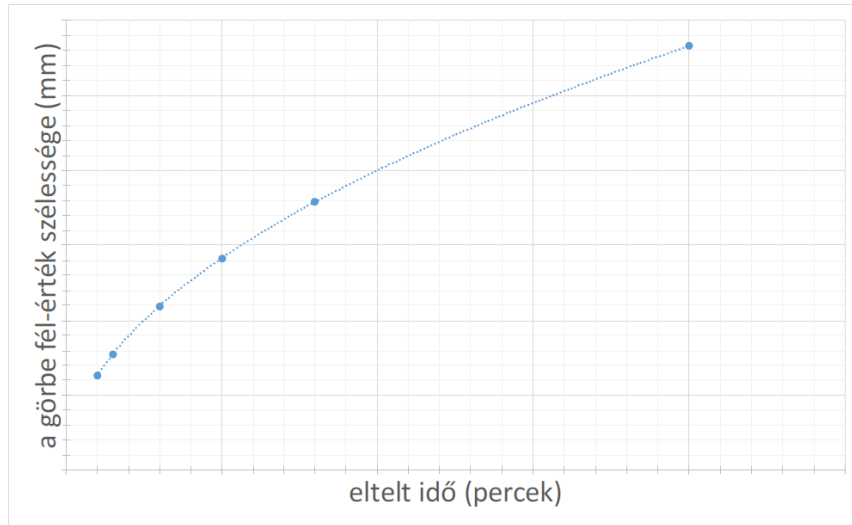


$$c(r, t) = \frac{e^{\left(\frac{-r^2}{4Dt} \right)}}{4\pi Dt}$$

középponttól mért
távolság (r)

A görbe félérték szélességét jellemző σ parameter kiszámítható:

$$\sigma = \sqrt{2D \cdot t}$$



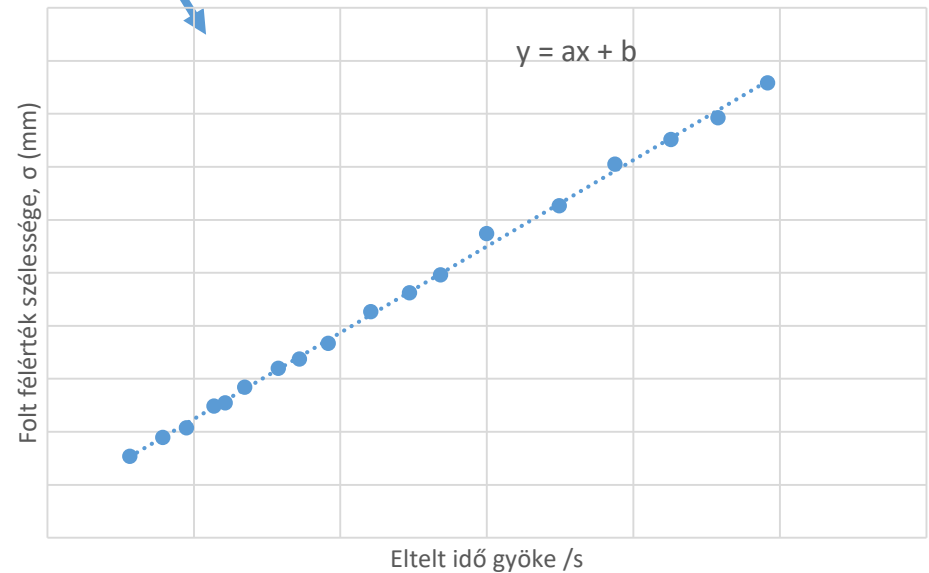
Gyakorlatban \sqrt{t} ábrázolás

Egyenes egyenletéből kiszámítható a D

$$\sigma = \sqrt{2D \cdot t}$$

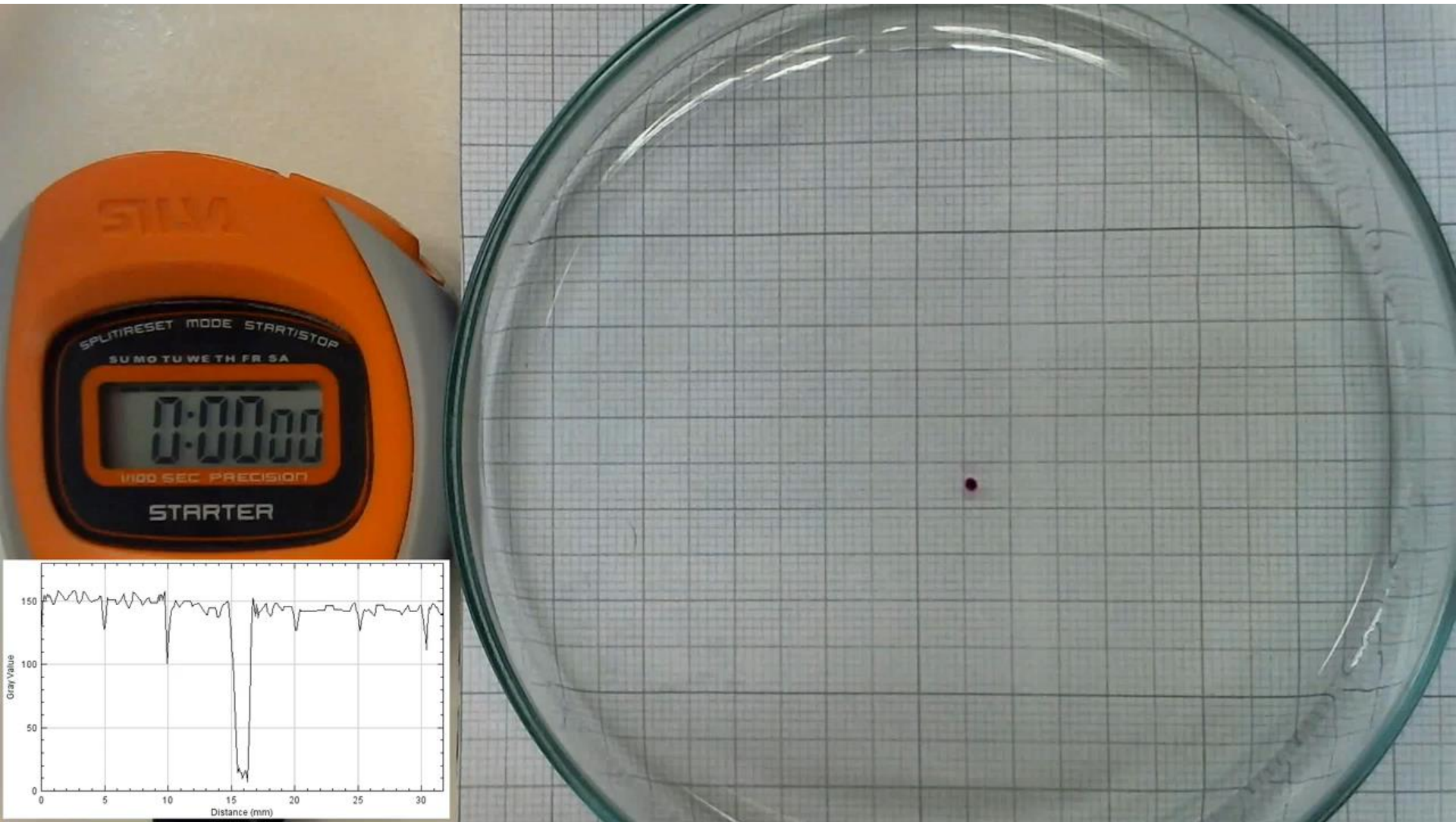


$$D = \text{meredekség}^2 / 2$$



A diffúziós együttható kísérleti meghatározása

→ MnO_4^- ionok diffúziója

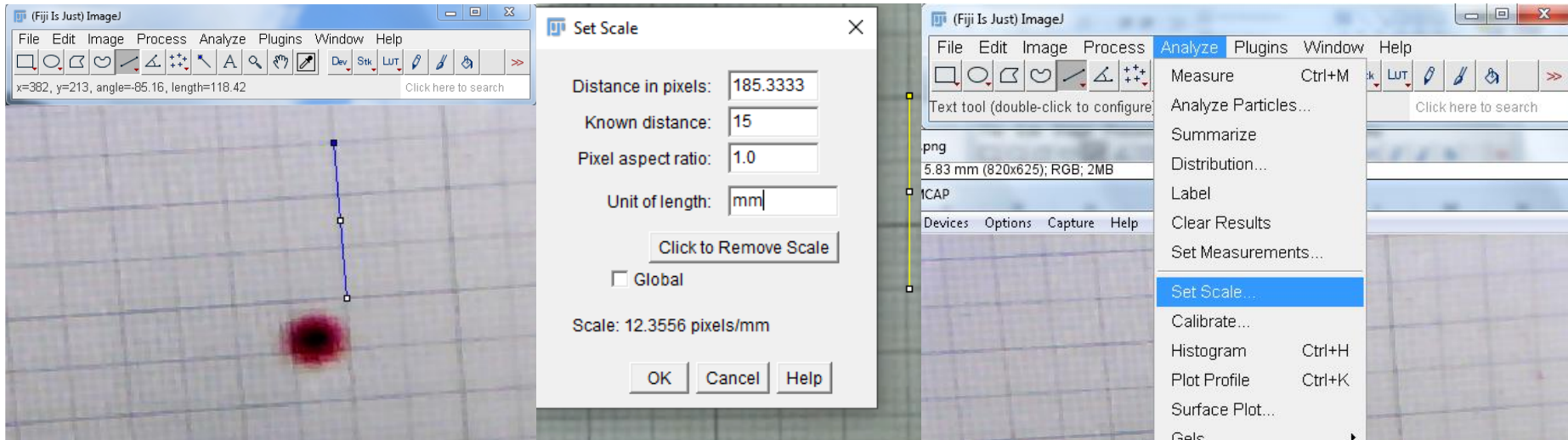


Képfeldolgozás:

1. Kép kalibrációja

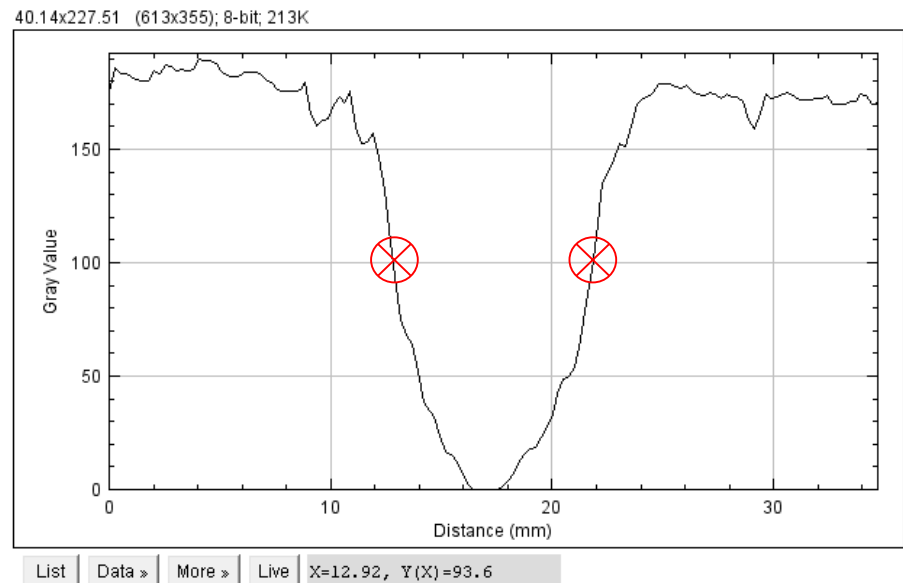
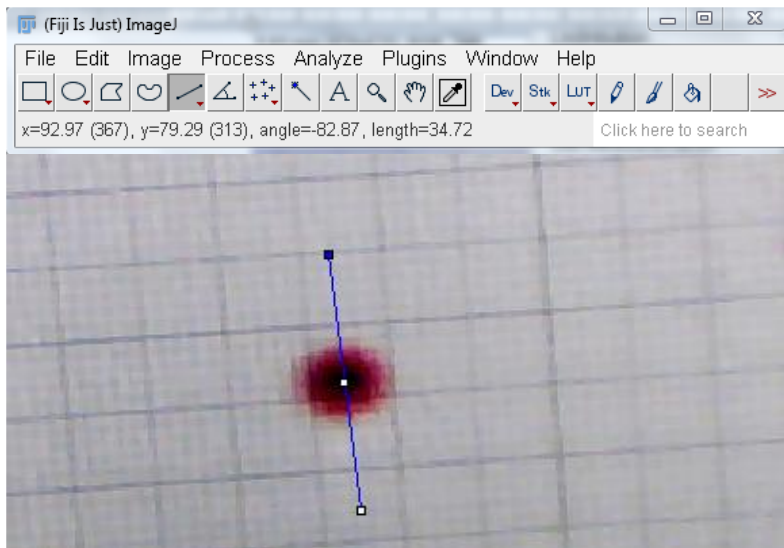
Fiji → ingyenesen letölthető képanalizáló program

Kalibrációhoz → 1 vastag kocka 5 mm

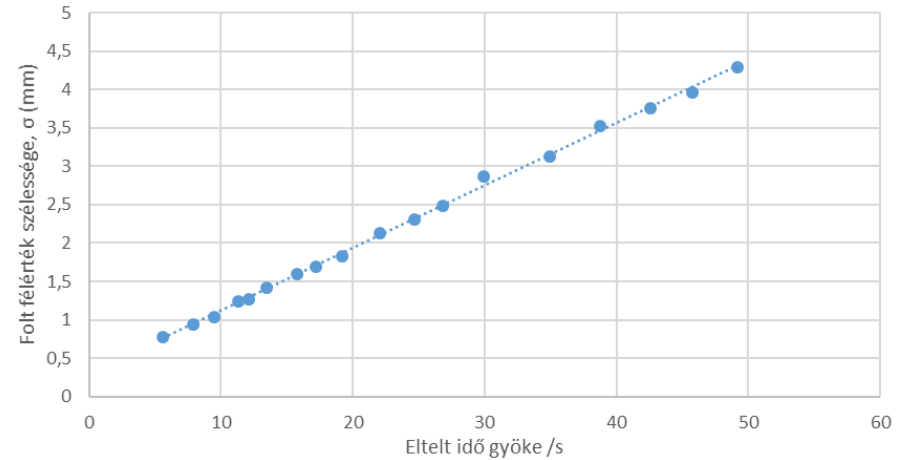


2. Intenzitás profil meghatározása

Minden képet kalibrálni kell, a petri-csésze alatti mm-papír alapján!!!



Eltelt idő	Eltelt idő, s	Eltelt idő gyöke, \sqrt{s}	Félérték szélesség, mm
31 s			
1 min 01 s			
1 min 30 s			
2 min 09 s			
3 min 01 s			
4 min 08 s			
5 min 15 s			
6 min 07 s			
8 min 07 s			
10 min 11 s			
12 min 00 s			
14 min 58 s			
20 min 20 s			
25 min 00 s			
30 min 11 s			
35 min 22 s			
40 min 15 s			



$\sigma \rightarrow$ görbe félérték szélessége

$$\sigma = \sqrt{2D \cdot t}$$



$$D = \text{meredekség}^2 / 2$$

$D \rightarrow$ diffúziós állandó mértékegység!!!!
mm²/s

Gyakorlat célja és feladatai (+1 a későbbi dián):

- A kiadott képeken Fiji program segítségével meghatározni a KMnO_4 diffúziós zónájának átmérőjét a különböző időpillanatokban
- Ezt Fiji program segítségével kirajzolt illesztett Gauss görbéről történő leolvasással valósítjuk meg
- **Táblázatos**an összefoglalni az adatokat
- **Ábrázolni** a félérték szélességet az idő gyökének függvényében
- A kapott adatokra egyenest illeszteni és az egyenes meredekségéből az alábbi képletekkel a **diffúziós állandóját kiszámolni** a KMnO_4 molekulának (tartsuk észbe, hogy igazából az MnO_4^- iont detektáljuk)
- A Stokes Einstein egyenlet segítségével határozza meg az MnO_4^- ionok **hidrodinamikai átmérőjét**

$\sigma \rightarrow$ görbe félérték szélessége

$$\sigma = \sqrt{2D \cdot t}$$



$$D = \text{meredekség}^2 / 2$$

$D \rightarrow$ diffúziós állandó mértékegység!!!!

Stokes Einstein egyenlet

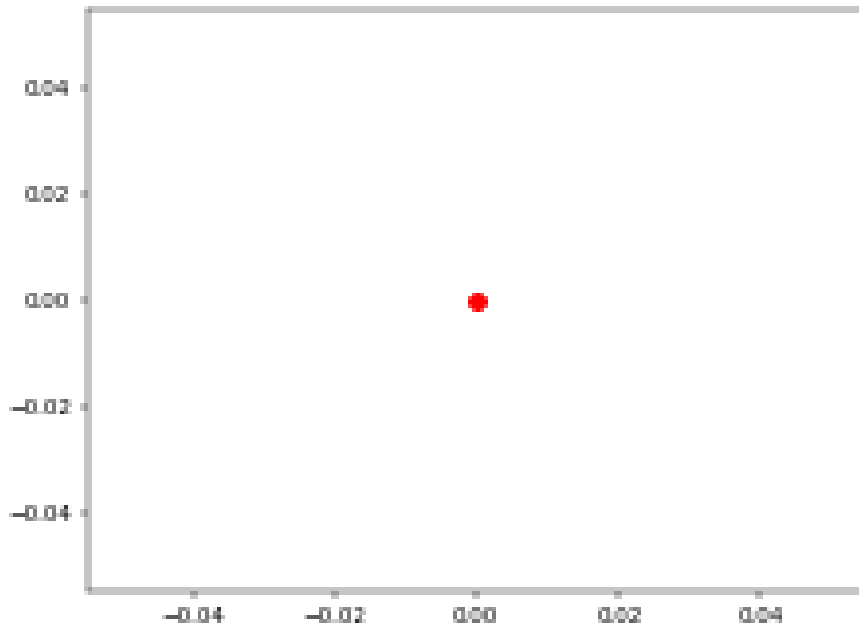
$$D = \frac{kT}{6\pi\eta r}$$



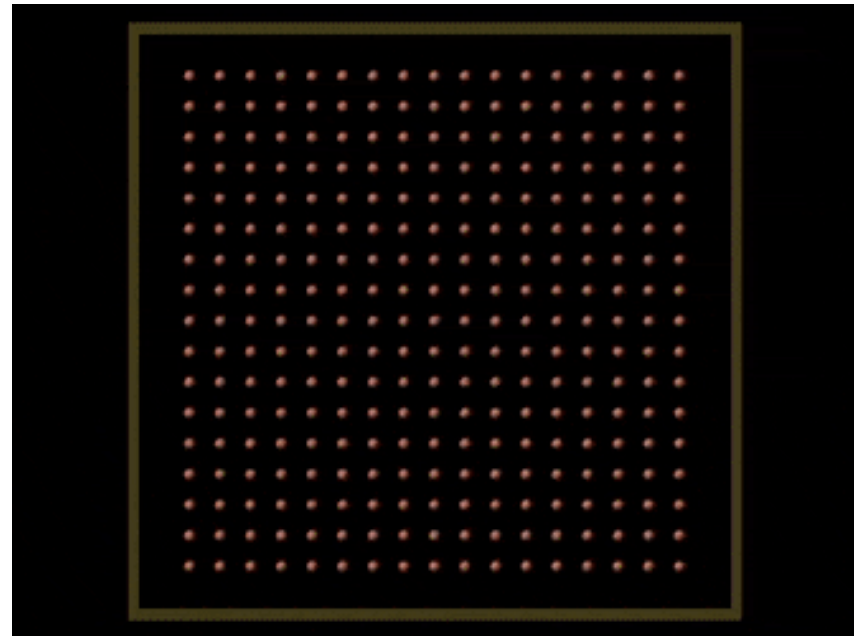
Hidrodinamikai átmérő, nm

$T = 25^\circ\text{C}$; $\eta = 1\text{mPas}$ átváltás SI-re!!!!!!

A random-walk bolyongásos modellből kiszámolható hogy átlagosan milyen messzire jut egy részecske adott idő alatt.



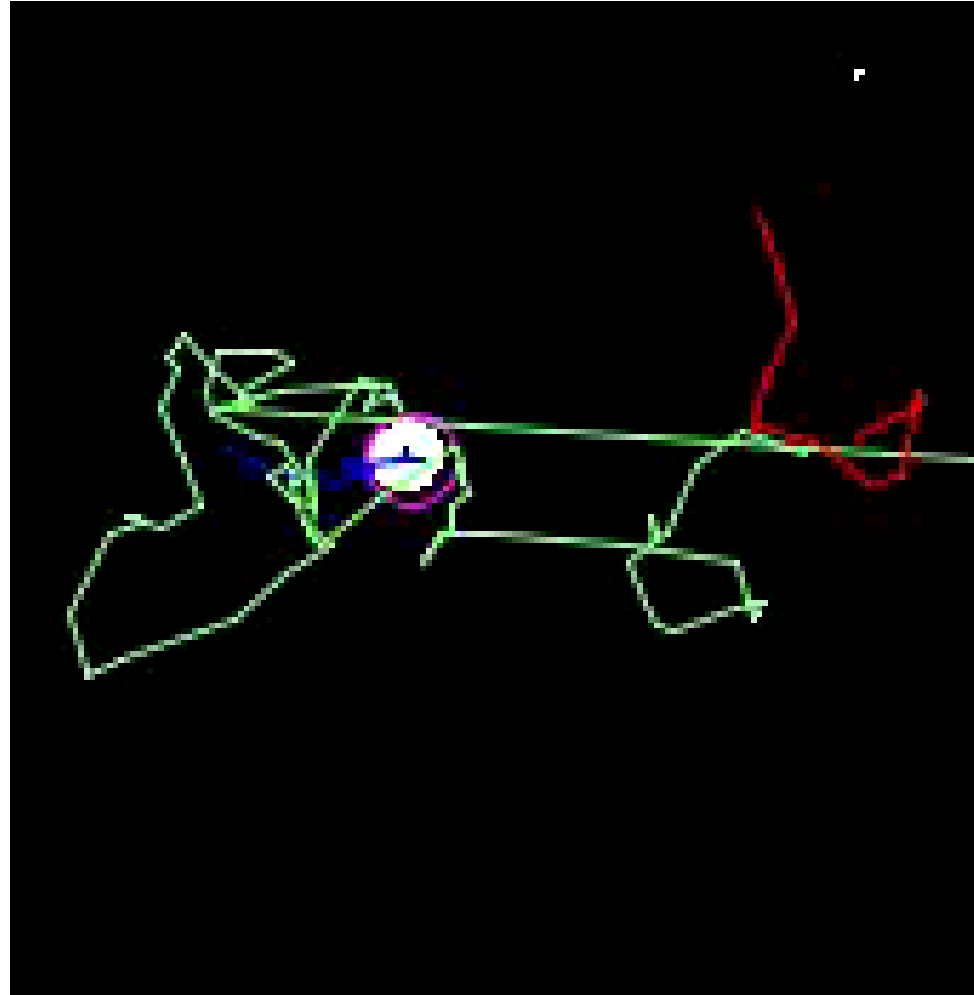
A részecskék véletlenszerű, korrelálatlan mozgást végeznek, minden lépés iránya esetleges. Ebből alakul ki egy zezugos pálya.



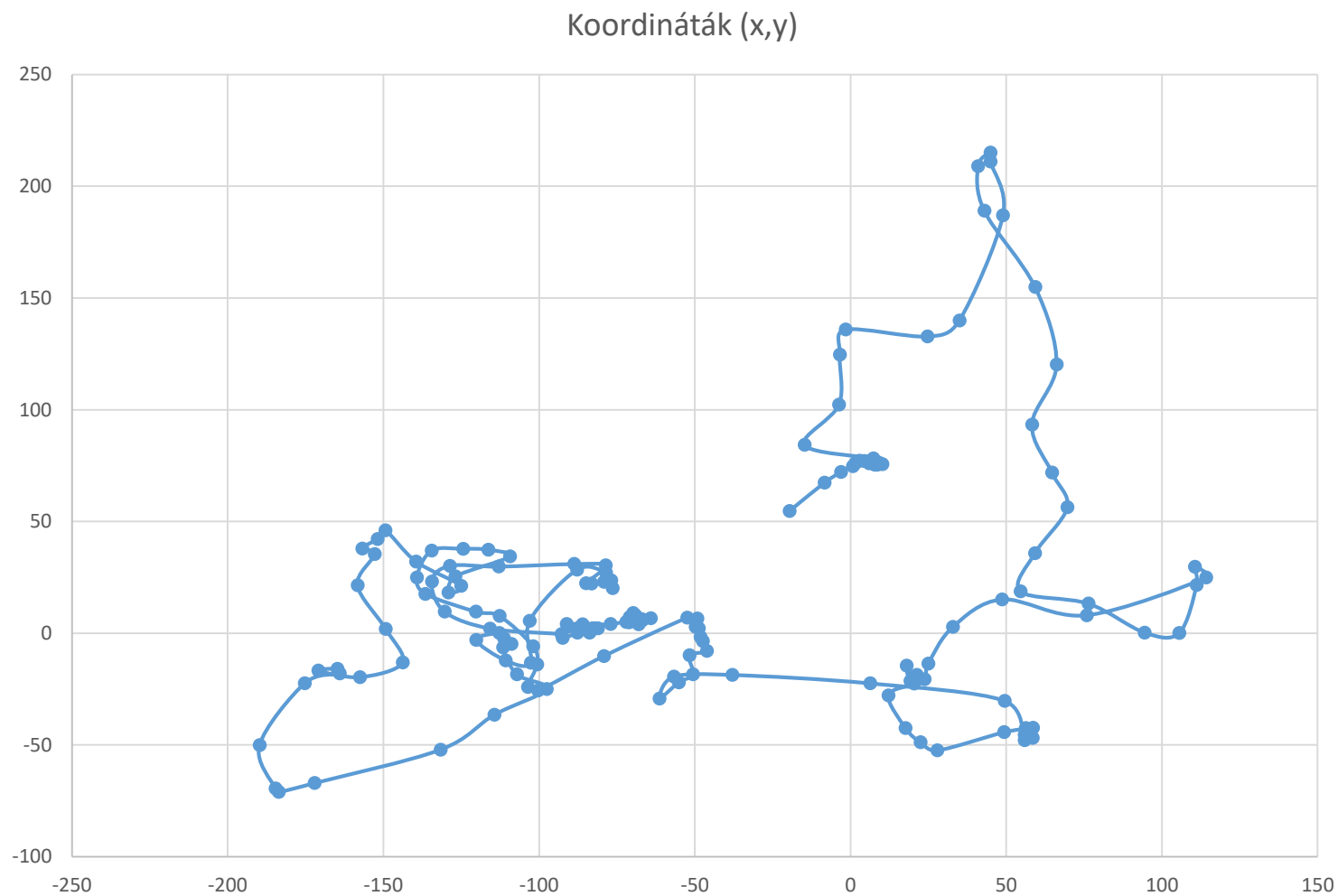
Házilag elkészíthető makroszkópikus, felnagyított modell: mákszemek jelképezik az oldószert, a kicsi fehér hungarocell golyó az oldott molekula.



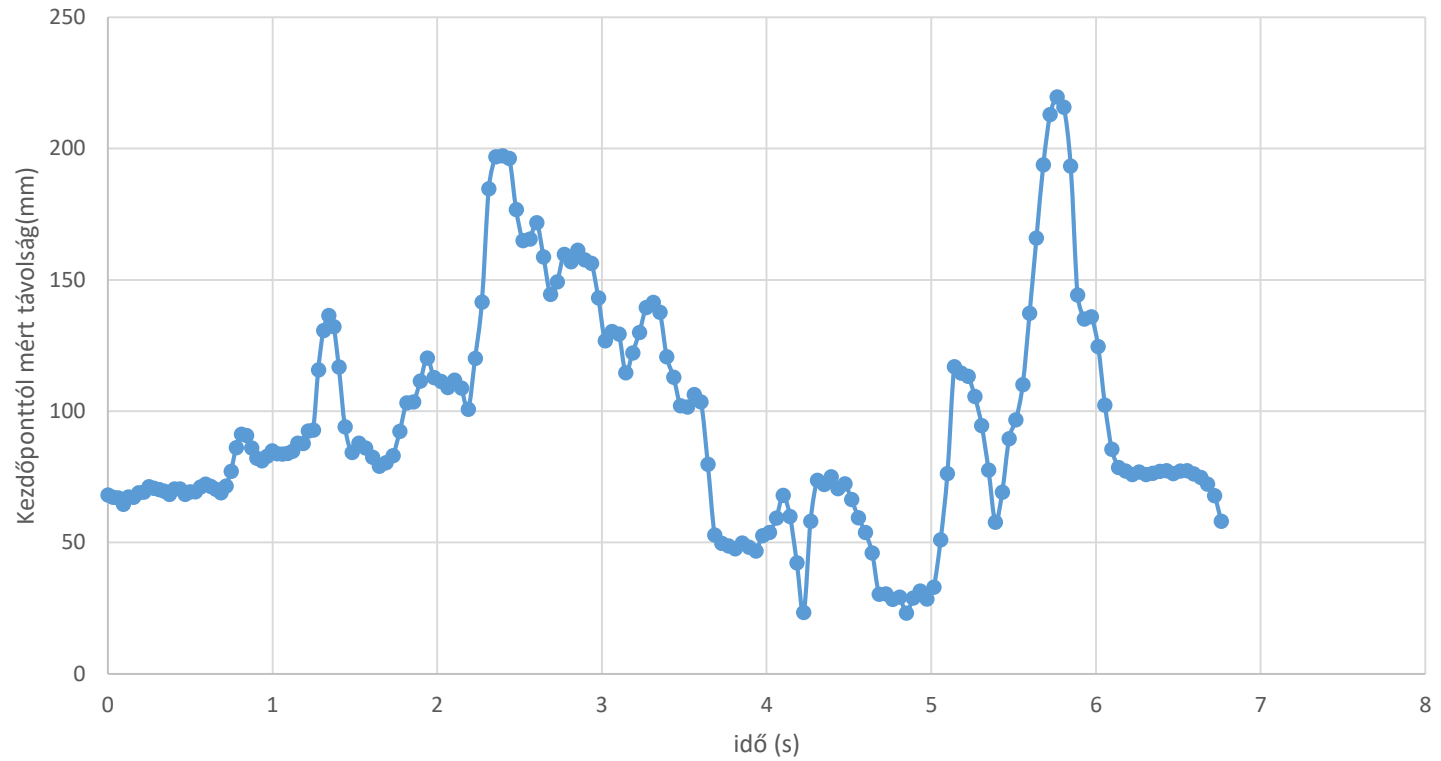
ImageJ programmal a golyócska követhető, kirajzolódik a zezugos útvonal



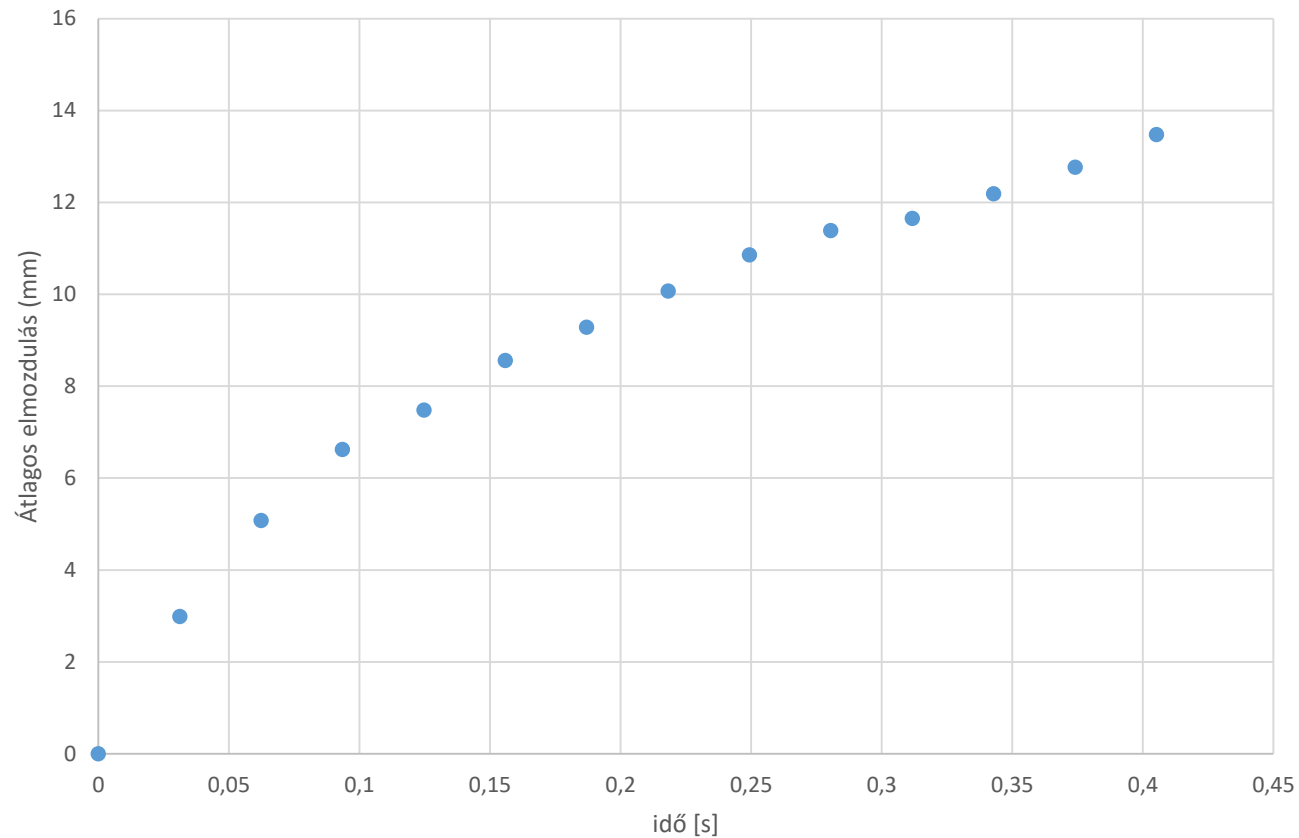
A követés során minden időpillanatban rögzítjük a részecske koordinátáit, melyből felrajzolható az útvonala.



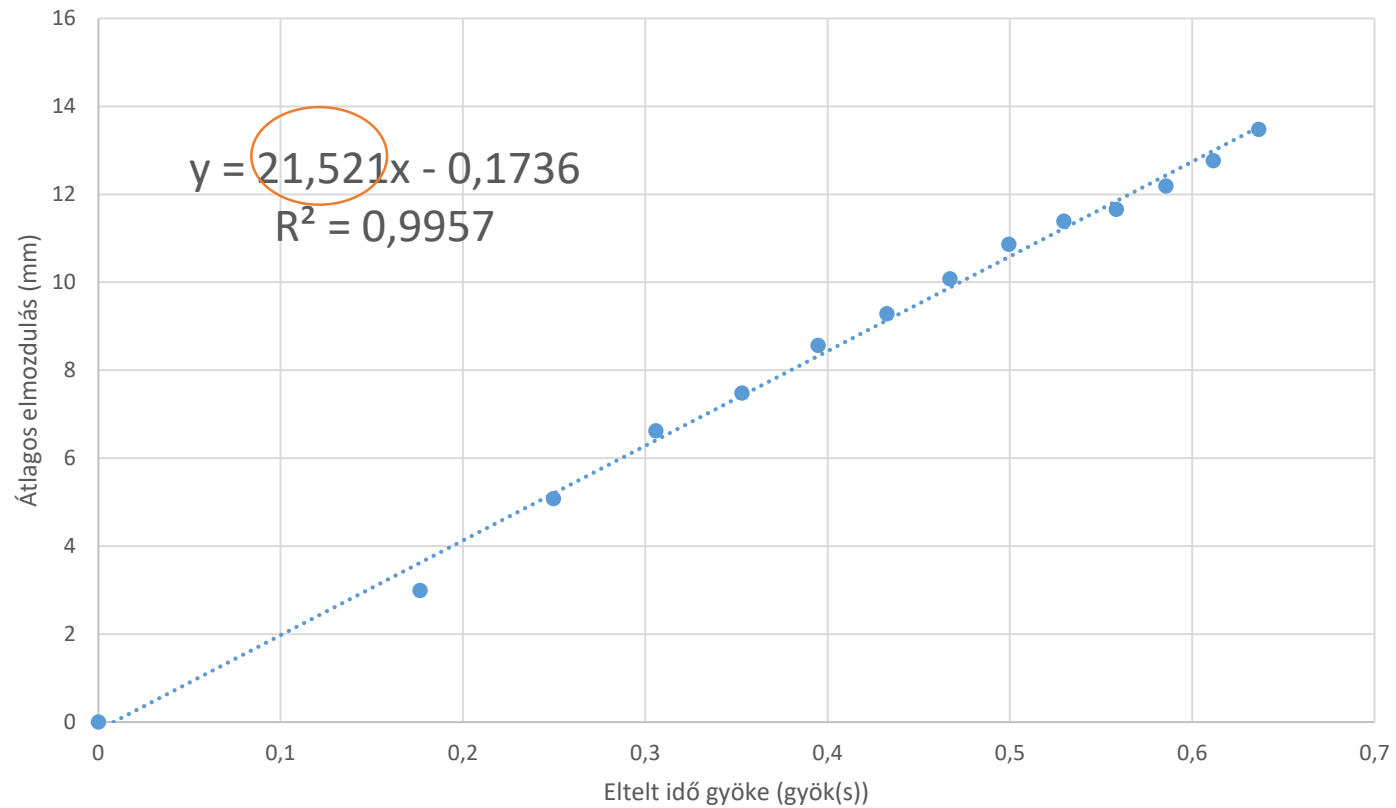
A kezdőponttól mért távolság is fluktuál



Több szakaszból, (és gyakran több kísérletből is) kiszámítható az **átlagos** elmozdulás időfüggése.



$$R_{\text{átlag}} = \sqrt{2 * D * t}$$



$$\sqrt{2 * D} = 21.521 \frac{mm}{\sqrt{s}}$$

$$D = 231 \text{ mm}^2/\text{s}$$

A jegyzőkönyvnek tartalmaznia kell az alábbi számolást is!

**Számolja ki az adott távolságoknál a diffúziós időt,
amennyiben tudott az átlagos távolság és a diffúziós
állandó**

Távolság értékek:

1 mikrométer

1cm

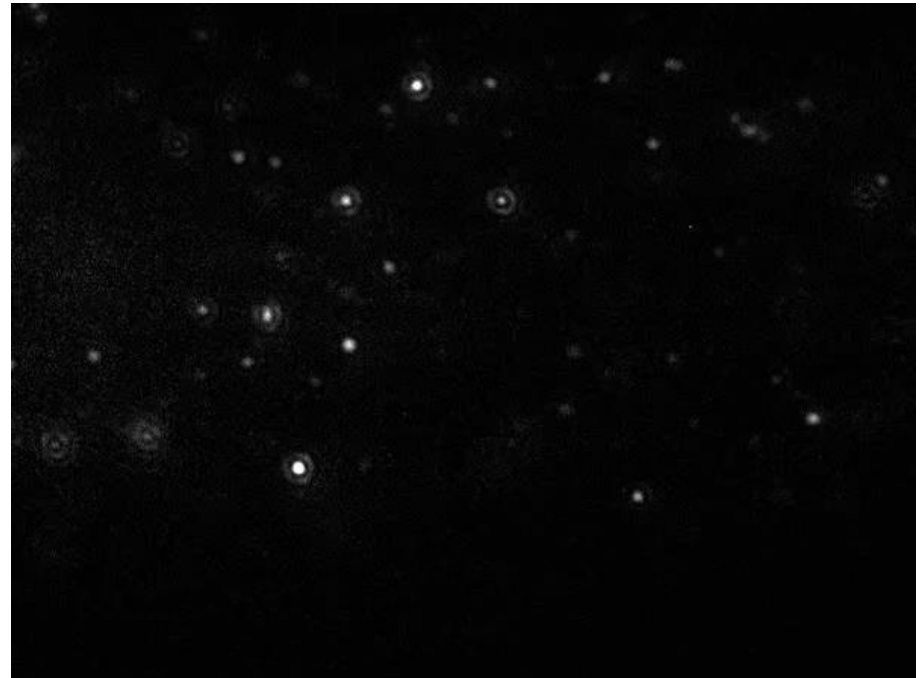
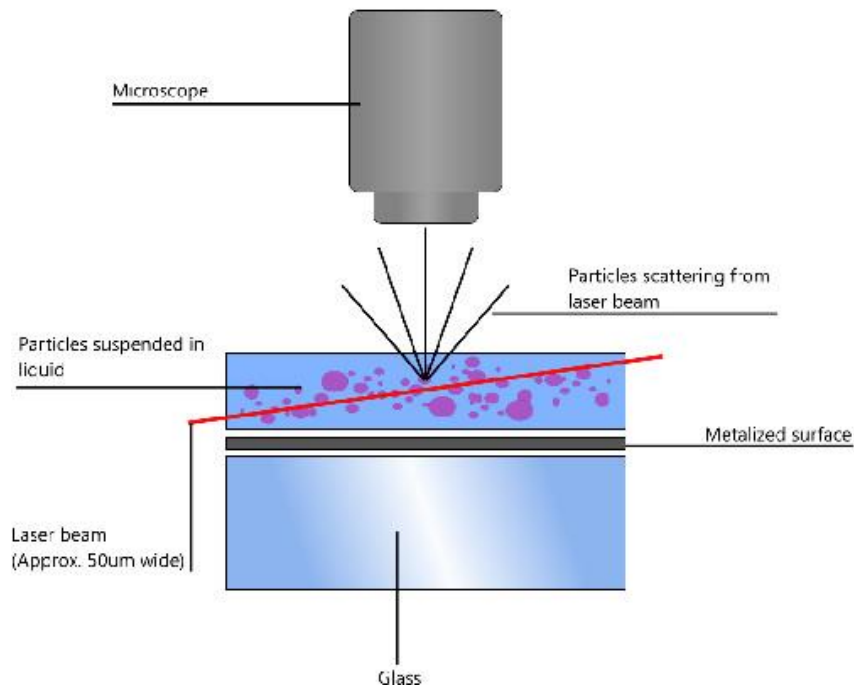
1m

$$R^2 = 6Dt$$

Hány óra, vagy nap szükséges az adott táv megtételéhez az MnO_4^- ionok diffúziós állandóját használva (a korábbi feladatból határoztuk meg)

Nanoparticle tracking analysis (NTA): nanorészecske követéses analízis

Mágneses nanorészecskék (80-100nm) vizes közegben



A diffúziós együttható függ a diffundáló részecske méretétől, alakjától, a közeg viszkozitásától, és hőmérsékletétől

→ Stokes Einstein egyenlet

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta r}$$

Ha meghatározzuk a D-t, akkor r kiszámítható,
DE GÖMB ALAKOT FELTÉTELEZ

Arany nano-gyöngyöket követnek mikroszkópban, melyek egy lipid-membrán felszínéhez kapcsolódva végeznek bolyongó mozgást. A bolyongásból kiszámítható a ***diffúziós állandó***, mely a **környezet mikro-viszkozitását** is jellemzi.

Wu et al, Scientific Reports, Vol 6, 20542 (2016)

