Transzportfolyamatok II.

Áramlás és Diffúzió

Juriga Dávid

Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet, Nanokémiai Kutatócsoport

SEMMELWEIS
EGYETEM 1769

A termodinamikai rendszerek típusai

termodinamikai rendszer

- időben állandó
  - egyensúlyi
  - **stacionárius**
- időben változó
  - **nemegyensúlyi**
  - **reaktív**

stacionárius, nemegyensúlyi → ***transzportfolyamatok***

hővezetés

áramlás

diffúzió

reaktív → ***reakciókinetika***

sebesség

rendűség

mechanizmus

Transzportfolyamatok

- Azokat a folyamatokat, amelyek során energia, anyag, töltés vagy valamilyen más extenzív jellegű mennyiség egyik helyről egy másik helyre jut, **transzportfolyamatoknak nevezzük**.
- A transzportfolyamatok jellemzésénél alapvető fontosságú mennyiségek: **az extenzív mennyiség árama** és az áramot létrehozó hatás, a **termodinamikai hajtóerő**.

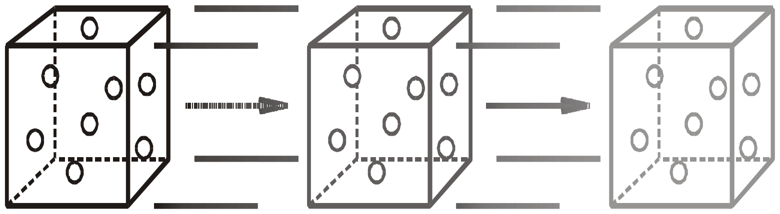
Az *extenzív mennyiségek* transzportját **az árammal** és **az áramsűrűséggel (fluxussal)** jellemezhetjük.

Az áramsűrűség: megadja a szóban forgó mennyiség egységnyi keresztmetszeten történő áthaladásának mértékét egységnyi idő alatt.

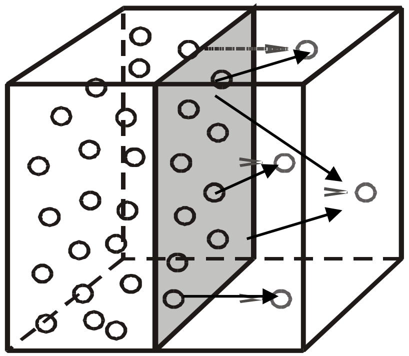
$$I_E = \frac{dE}{dt} \qquad j_E = \frac{1}{A_s}\frac{dE}{dt}$$

ahol A_s és I_E az áram irányára merőleges felület.

A transzportfolyamatokat megkülönböztethetjük aszerint, hogy együtt járnak-e a **közeg makroszkopikus mozgásával, vagy sem**. Eszerint beszélhetünk **áramlásos (konvektív)** és **vezetéses (konduktív)**, vagy nyugvó közegű transzportfolyamatokról.



konvektív anyagtranszport: molekulahalmaz együttes elmozdulása

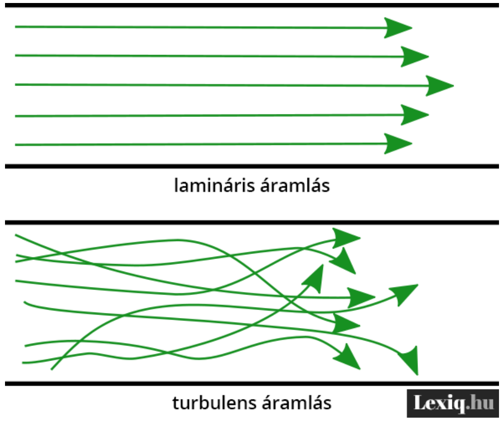


konduktív anyagtranszport: molekulák elmozdulása "nyugvó közegben"

Fluid rendszerekkel kapcsolatos alapfogalmak

Áramlás

- Lamináris
- Turbulens

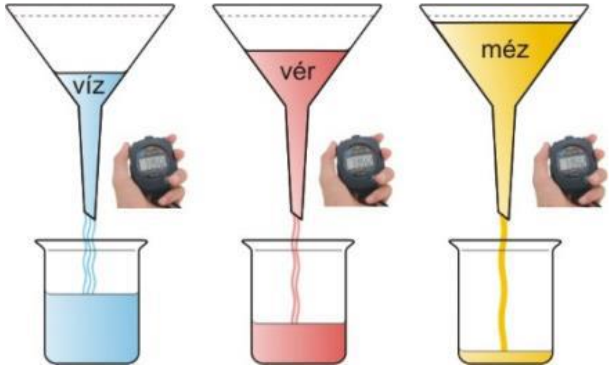


- Összenyomható
- Összenyomhatatlan

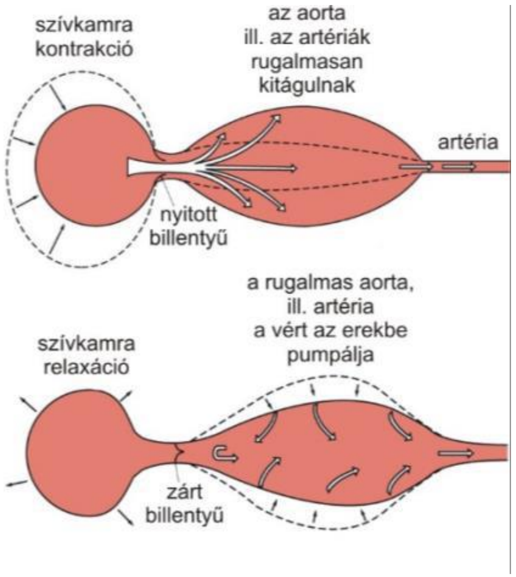
$$v_1 A_1 \neq v_2 A_2$$

$$v_1 A_1 = v_2 A_2 = konst.$$

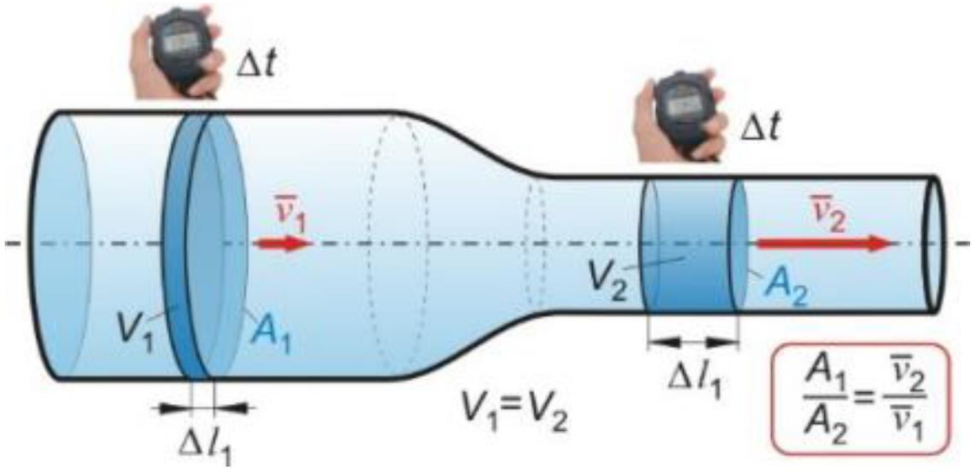
- „Folyékony”
- Viszkózus



- Állandó
- Pulzáló



Az ideális áramlás: Bernoulli-törvény



- **Stacionárius áramlás** esetén az áramlás paraméterei időben állandóak
- Kontinuitás elve: Stacionárius áramlás esetén **térfogatáram állandó:**

$$I_V = A_1 \cdot \overline{v}_1 = A_2 \cdot \overline{v}_2 = konst.$$

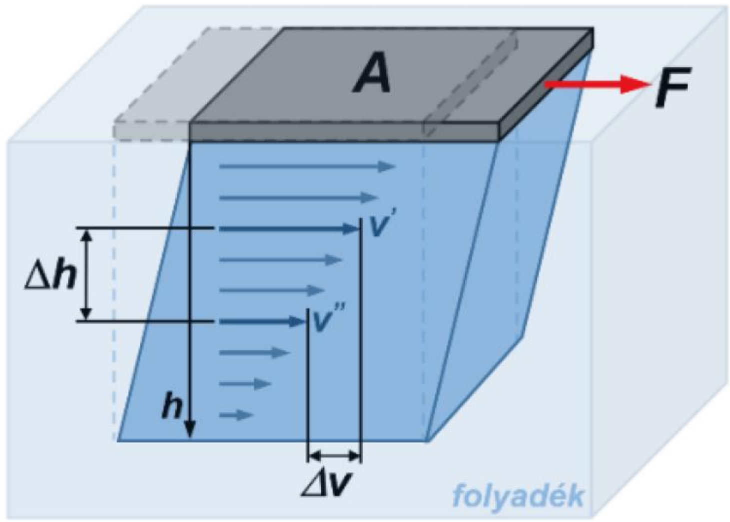
- Ideális, súrlódásmentes áramlás esetén **nincs energiaveszteség**
  - Befektetett energia CSAK a kinetikus energiát növeli
- Az ideális folyadék a mozgatásához szükséges energiát **teljesmértékben megőrzi**

$$p_1 + \frac{1}{2}\rho v_{x,1}^2 + \rho g h_1 = p_2 + \frac{1}{2}\rho v_{x,2}^2 + \rho g h_2$$

P=stacionárius nyomás
ρgh=hidrosztatikai nyomás
$1/2\rho v^2$=kinetikus energia

A kontinuitás elve, lamináris vagy turbulens áramlás

- **Viszkozitás (η):** Fluidumok belső surlódása.

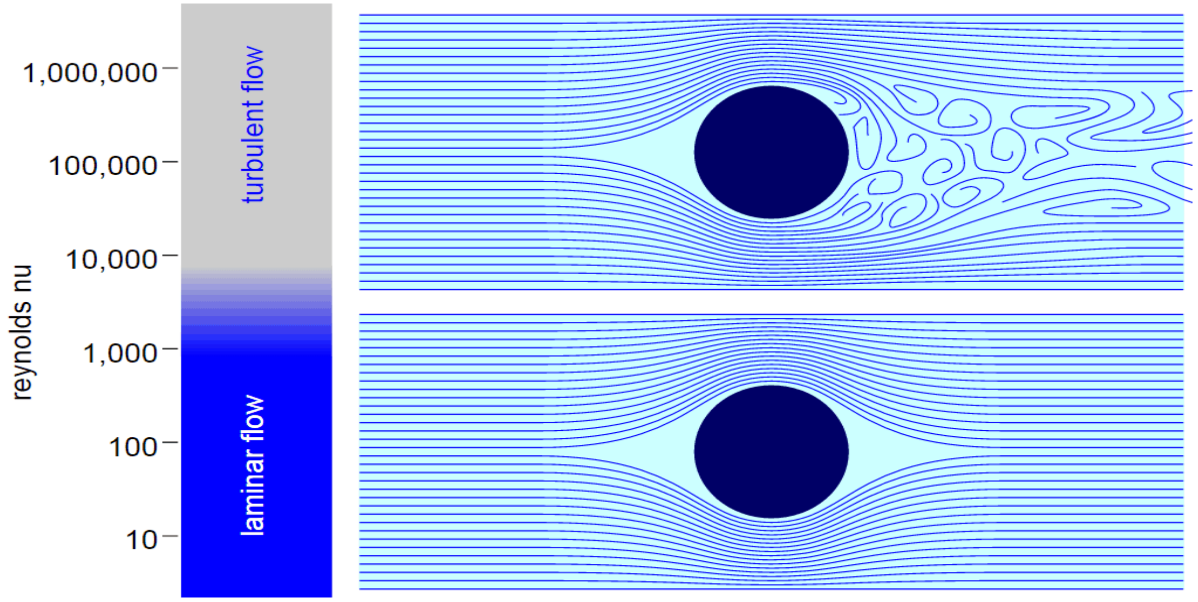


$$F = \eta \cdot A \cdot \frac{\Delta v}{\Delta h}$$

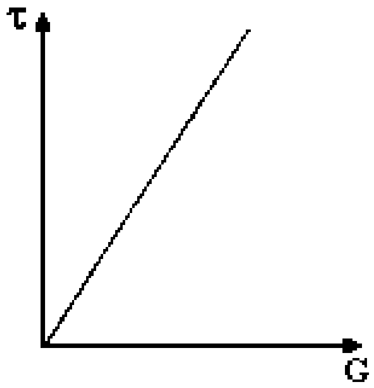
$$\tau = \eta \frac{dv_x}{dy}$$

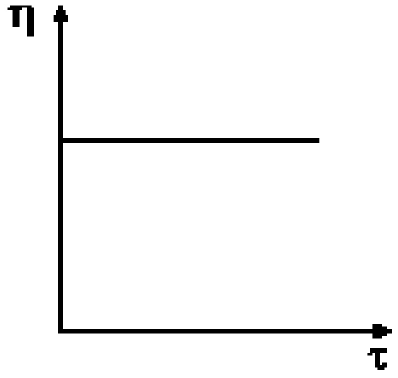
$$\left.R_e = \frac{tehetetlenségi}{viszkózus}\right\} \text{erők}$$

$$\boxed{R_e = \frac{v \cdot \rho \cdot d}{\eta}}$$



Folyás és viszkozitás görbék (newtoni folyadék)





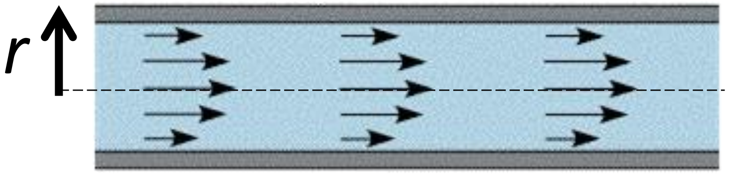
Hagen-Poiseuille törvény, Reális áramlás

- **Newtoni folyadék, stacionárius** és **lamináris áramlása** esetén a térfogatáramot a **Hagen-Poiseuille törvény** írja le.

$$I_V = \frac{\Delta V}{\Delta t} = \frac{\pi}{8} \cdot \frac{r^4}{\eta} \cdot \frac{\boxed{p_1 - p_2}}{l}$$

Az áramlás hajtóereje!

$$R_e = \frac{v \cdot \rho \cdot d}{\eta}$$



ha $R_e < 2100$

Lamináris áramlás

Reális áramlás esetén az energia veszteség miatt a Bernoull-törvény is megváltozik

$$p_1 + \frac{1}{2}\rho v_1^2 + \rho g h_1 = p_2 + \frac{1}{2}\rho v_2^2 + \rho g h_2 + \boxed{\Delta p}$$

$$\Delta p = f_D \frac{\rho V^2}{2} \frac{L}{D}$$

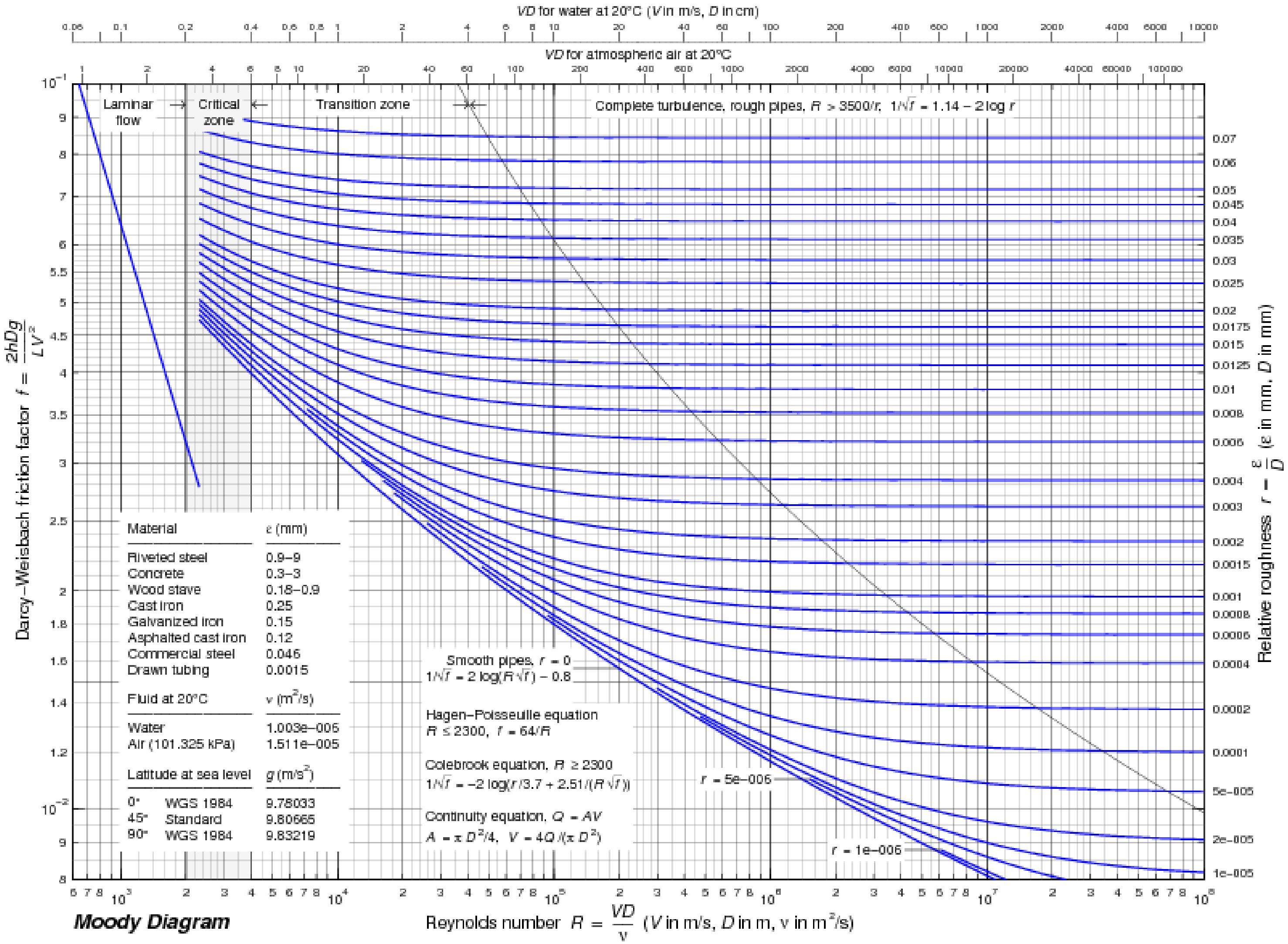
Darcy-Weisbach súrlódási tényező

$$f_D = 64/Re$$

Lamináris áramlás esetén

Milyen paraméterek és hogyan határozzák meg az áramlás típusát?

A csősurlódás, Reynolds-szám és relatív érdesség kapcsolata



$$\boxed{R_e = \frac{v \cdot \rho \cdot d}{\eta}}$$

$$\Delta p = f_D \frac{\rho V^2}{2} \frac{L}{D}$$

Átmeneti tartományt tervezésnél lehetőleg elkerüljük

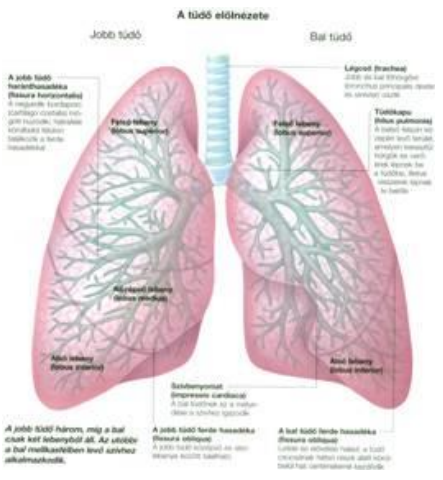
Lamináris eset (Hagen-Poiseuille)

$$f_D = 64/Re$$

Turbulens eset (Corebrook)

$$\frac{1}{\sqrt{f_D}} = -2.0 \log_{10}\left(\frac{\epsilon/D}{3.7} + \frac{2.51}{\mathrm{Re}\sqrt{f_D}}\right)$$

Levegő áramlása a tüdőben

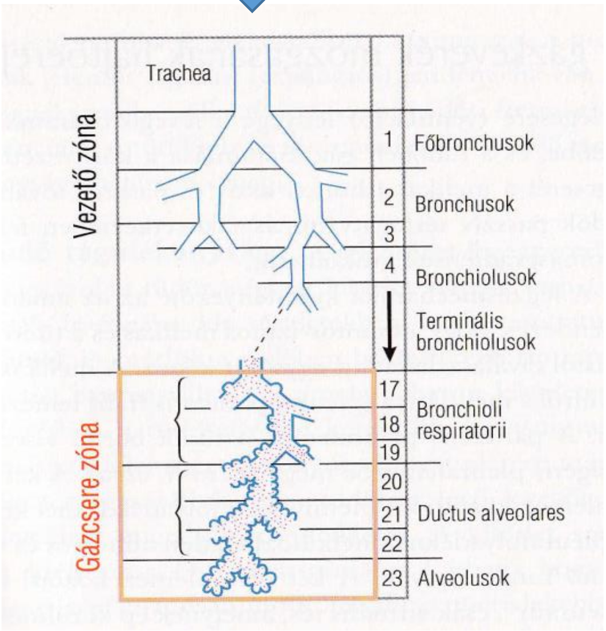


23 generáció a légcsövek átmérőjében

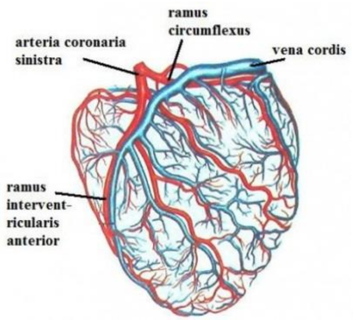
$$I_V = \frac{dV}{dt}$$

átmérő (cm)	Normál légzés 12/perc: v (cm/s)	Normál légzés 12/perc: Re	Heves légzés 30/perc: v (cm/s)	Heves légzés 30/perc: Re
1,8	197	2325	790	**9324**
0,56	250	921	1002	**3684**
0,35	161	369	643	1476
0,13	38	32	151	127

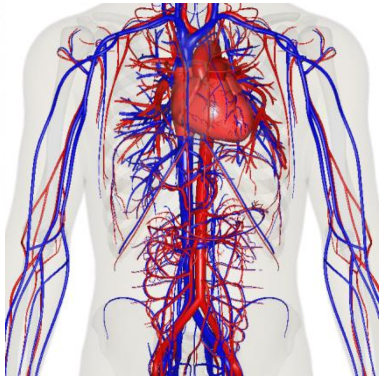
$$\frac{dV_{lev.}}{dt} \approx 5\ \ L/\min \Rightarrow O_2 \approx 2kg/nap$$



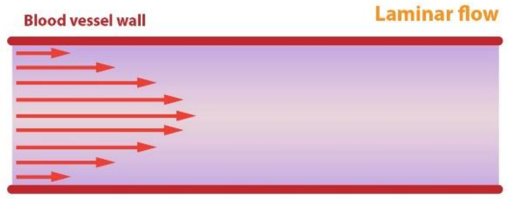
Csak heves légzésnél lép fel turbulencia a vastagabb légcsövekben.

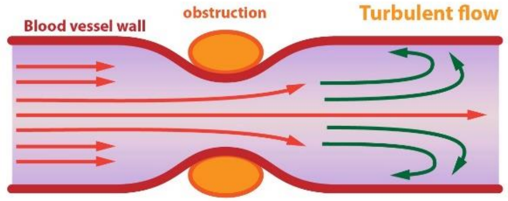


Vér áramlása a szív- és érrendszerben



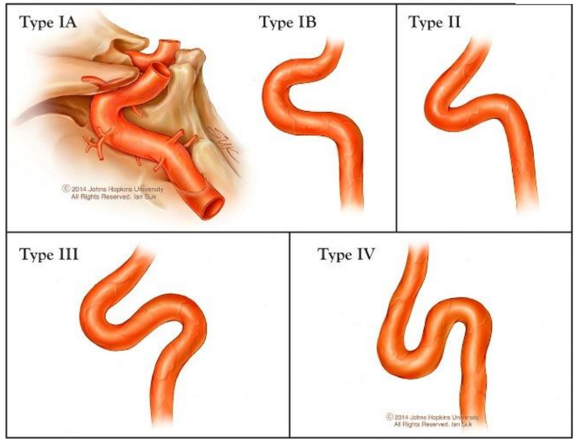
erek	átmérő cm	Max seb. cm/s	Re Max.	Átl. seb. cm/s	Re átlag
↑ aorta	1,5	120	**4500**	20	750
↓ aorta	1,3	105	**3400**	20	648
femorális artéria	0,4	100	1000	10	100
kapilláris	0,0006	7	0,001	0,02	10^{-6}





A keringési rendszer (cardiovascularis) többségében **az áramlás lamináris.** Kivétel a szívből az aortába kilökődő vér áramlása.

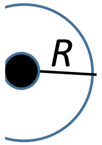
Áramlás görbült csövekben



Állandó keresztmetszetű kapillárisokban az áramlás függ a kapilláris ***r*** sugártól és a ***R*** görbületi sugártól.

A görbület kedvez a turbulencia kialakulásának.

R görbületi sugár

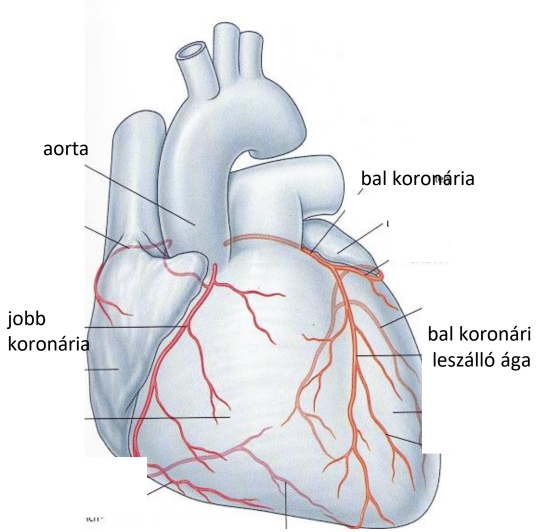


$$\delta = \frac{r}{R} \Rightarrow \boxed{D_e = \sqrt{\delta} \cdot R_e}$$

D_e : Dean szám

R_e : Reynolds szám

Az érfal irányába mutató tehetetlenségi erő a görbület növekedésével növekszik, ami kedvez a turbulencia kialakulásának: $D_e < R_e$



ér	***r/cm***	δ	$\langle R_e \rangle$	D_E
aorta	1,5	0,22	1500	707
bal koronária	0,425	0,10	150	47,4
bal koronária leszálló ág	0,17	0,082	80	22,9
jobb koronária	0,097	0,024	213	36

G.A.Ttruskey, F.Yuan, D.F.Katz:Transport Phenomena in Biological Systems, Pearson Education (2010)

Lamináris áramlás fenntartása: Szélkazán effektus

A vér áramlására nem használható a Hagen-Poisuille törvény:

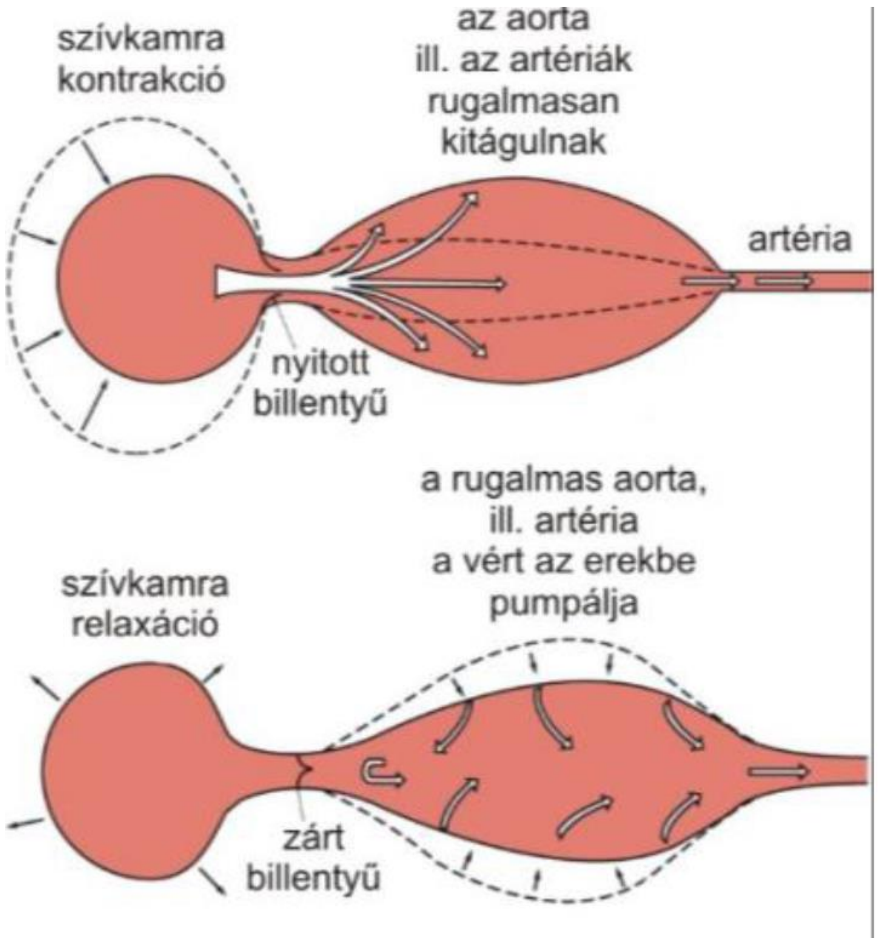
Áramlás nem stacionárius
Vér nem newtoni folyadék
Az érfalak rugalmasak

A keringési rendszer csökkenti a pulzálást: Szisztolés és Diasztolés nyomás

Szisztolés nyomás: Bal kamra összehúzódik → Aortában nyomás nő→ Aorta kitágul

Diasztolés nyomás: Aortabillentyű zár→ Aorta összehúzódik→ véráramlás

Mechanikai Energiák egymásba alakulása:
Kamrai szívizom=Billentyűk nyitása+vér beáramoltatása az aortába
Ennek az energiáknak egy része a rugalmas erekben raktározódik
Diasztolé alatt ez az energia hajtja tovább a vért!



https://www.behance.net/gallery/15054865/3d-animated-blood-flow-Windkessel-effect

Folyadékok áramlása membránon át: Az ozmózis

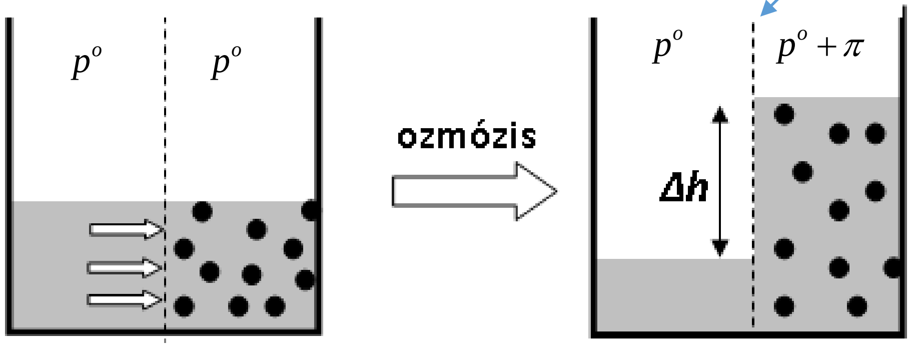
$$\pi_{id} = \frac{RT}{M_2} c_2 \qquad \pi_{id} = RTc_m$$

Ozmotikus folyadéktranszport

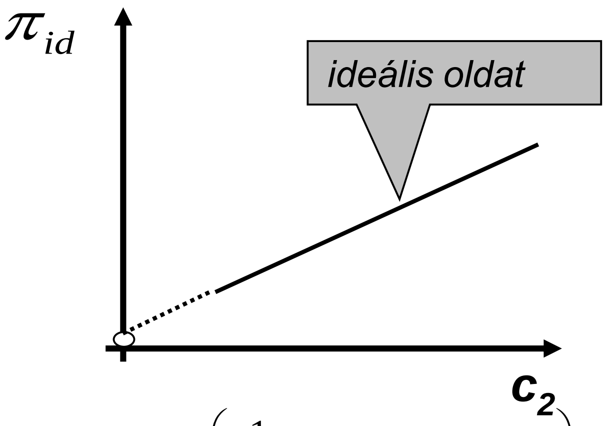
Kolligatív tulajdonság

$$\mu_1^0(T, p^o) = \mu_1(T, p^o + \pi, x_2)$$

Szemipermeábilis membrán

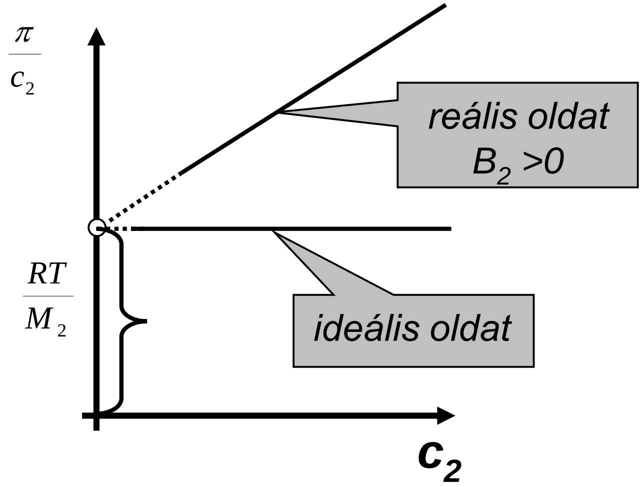


$$\pi = \rho g \Delta h$$



$$\frac{\pi}{c_2} = RT\left(\frac{1}{M_2} + B_2 c_2^2 + C_3 c_2^3 + \ldots\right)$$

$$\Delta\mu_1(x_2) = -\pi V_1 \quad \Rightarrow \quad -\pi V = RT \ln x_1 = RT \ln(1 - x_2)$$



Az ozmózisnyomást az oldószer móltérfogatán és a hőmérsékleten kívül csak a részecskék száma határozza meg: **kolligatív tulajdonság.**

Elektrolit oldatok ozmózis nyomása

Ionos vegyületeknél az elektrolitos disszociáció következtében növekszik az oldatban lévő részecskék száma, így az ozmózisnyomás is.

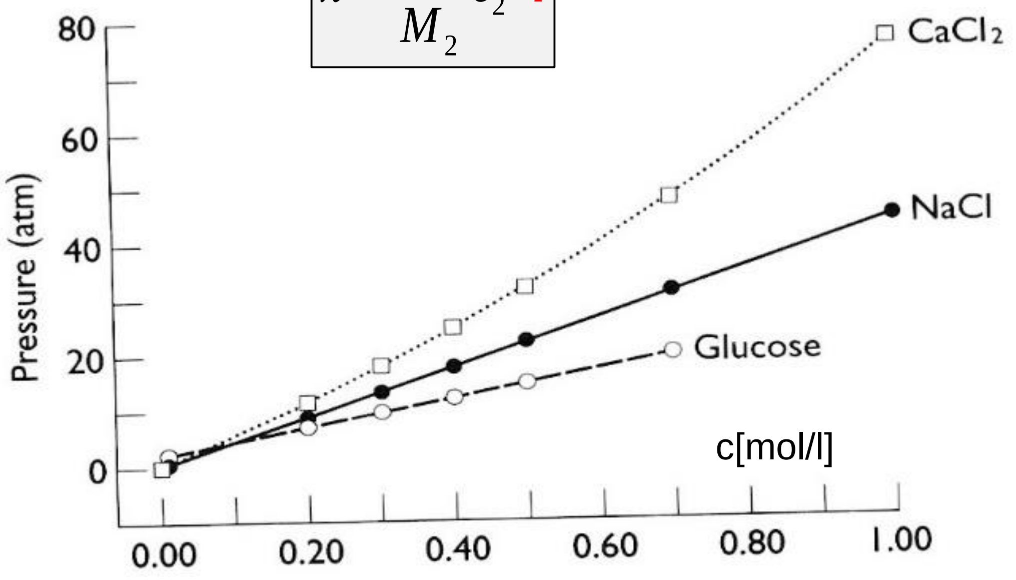
$$M_{\nu+}X_{\nu-} = \nu_+ M^{z+} + \nu_- X^{z-}$$

$$i = \frac{N(1-\alpha) + N\nu\alpha}{N} = 1 - \alpha + \nu\alpha$$

α: *disszociációfok*

i: *van't Hoff paraméter*

$$\boxed{\pi = \frac{RT}{M_2} c_2 \cdot i}$$

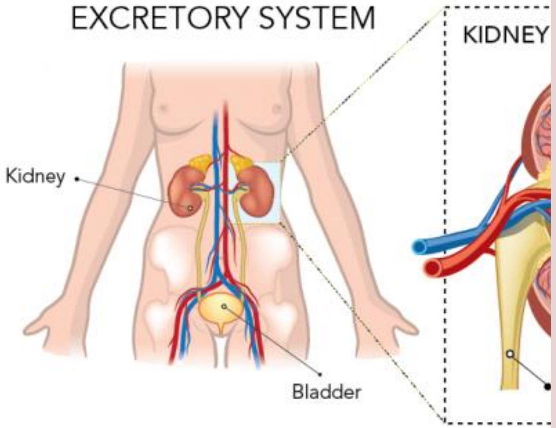


D.T.Haynie: Biological Thermodynamics, Cambridge University Press (2001)

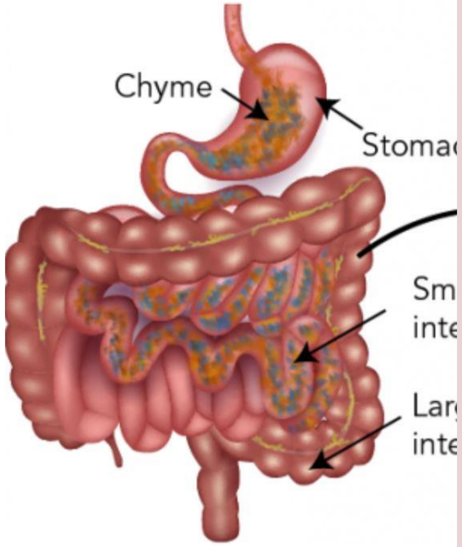
Az ozmózisnyomást az oldószer móltérfogatán és a hőmérsékleten kívül csak a részecskék száma határozza meg: **kolligatív tulajdonság.**

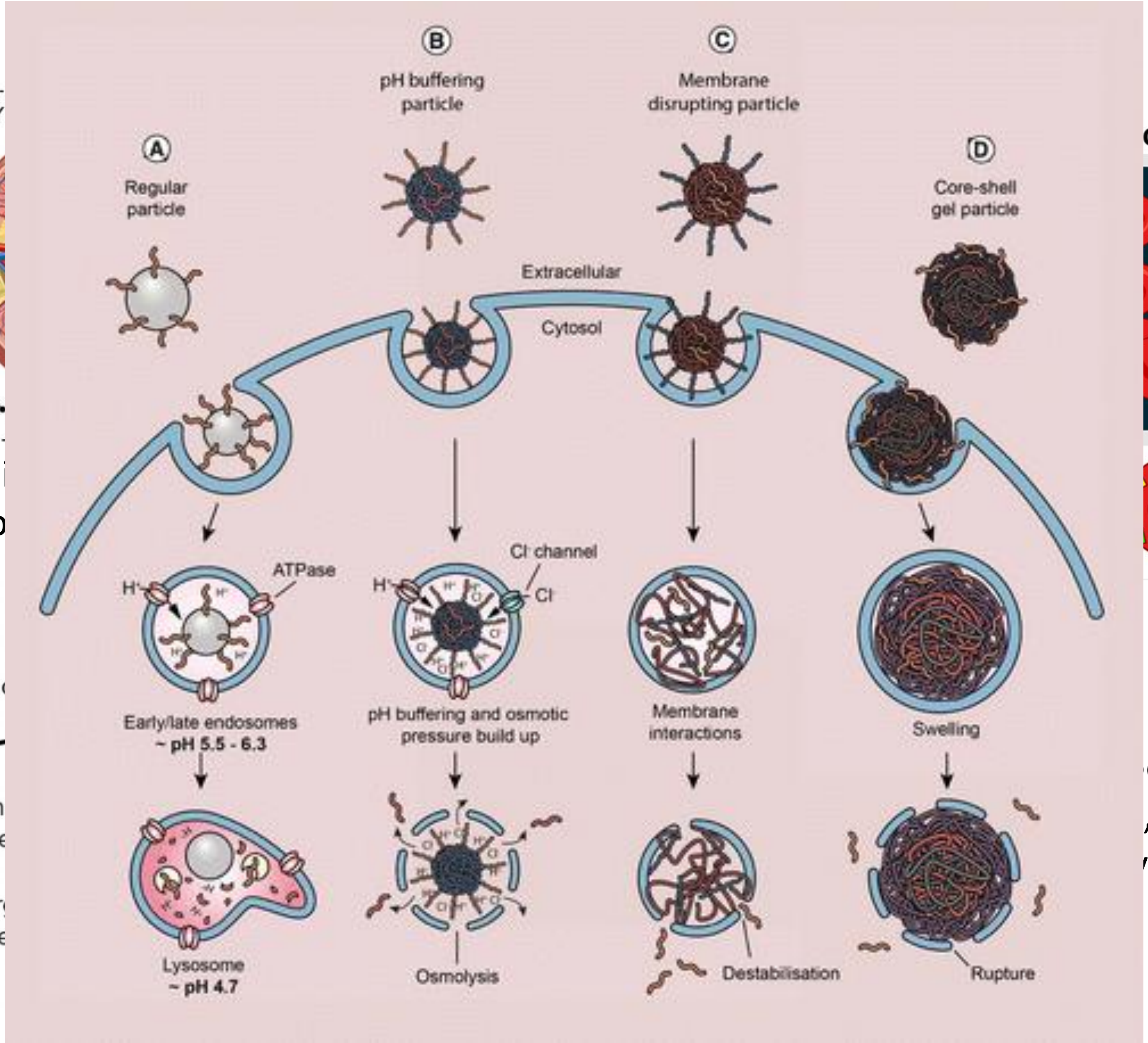
Az ozmózisnyomás nem függ az oldott anyagok kémiai minőségétől, az oldott anyagok együttesen határozzák meg azt.

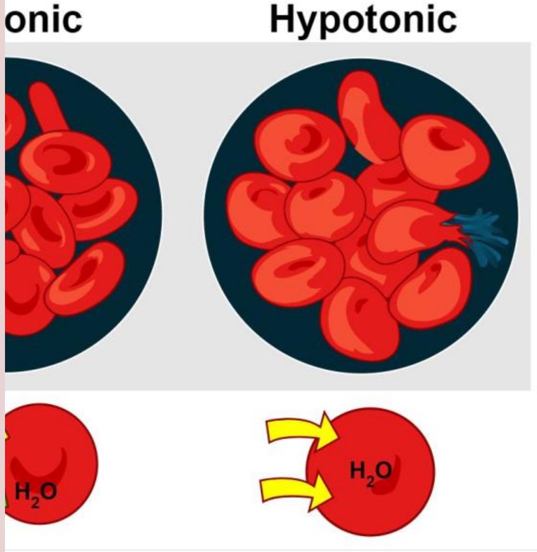
Célszerű az összetétel helyett olyan ozmotikus koncentrációt használni, amelynek egysége a ξ **ozmolalitás** (*osmol/kgH_2O*).



A nefronon belül az ozmózi
visszaáramlik a medulláb







e áramló keveréknek
, ezért víz áramlik az
yal viszi a tápanyagot

A termodinamikai rendszerek típusai

termodinamikai rendszer

- időben állandó
  - egyensúlyi
  - **stacionárius**
- időben változó
  - **nemegyensúlyi**
  - **reaktív**

transzportfolyamatok

hővezetés

áramlás

diffúzió

reakciókinetika

sebesség

rendűség

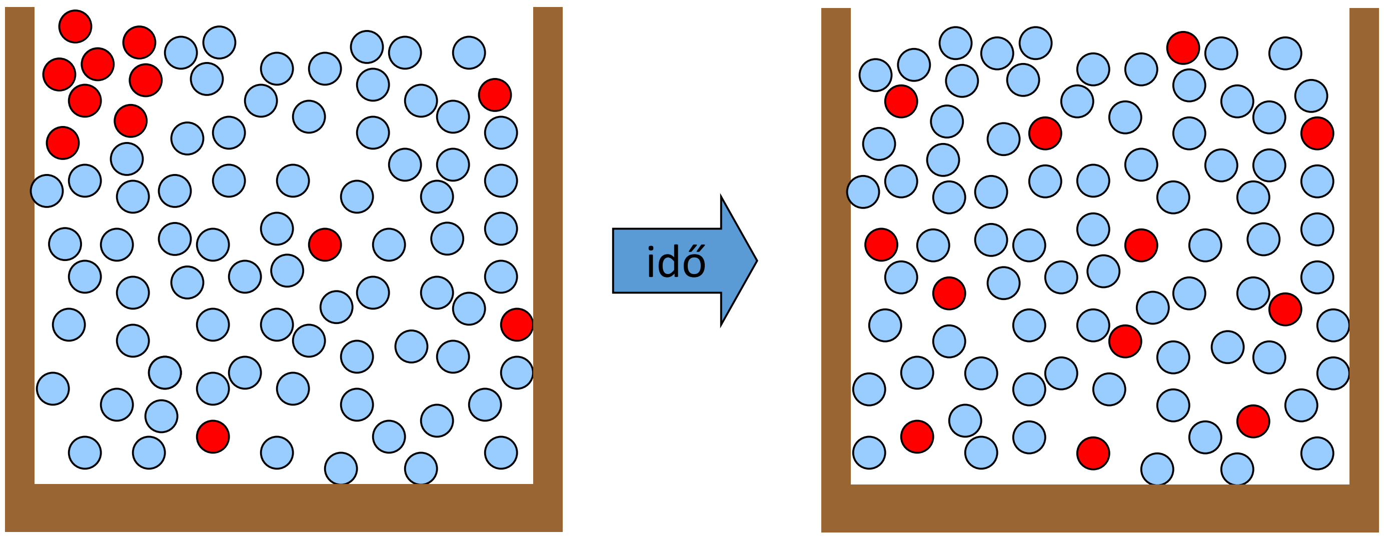
mechanizmus

Konduktív transzportfolyamatok egységes leírása

	diffúzió	hővezetés	reológia
ÁRAM:	komponens áram (*tömeg áram*)	energia áram	impulzus áram
HAJTÓERŐ:	∇c	∇T	∇v
ÁRAMSŰRŰSÉG:	$j_n = -D\nabla c$	$j_Q = -k\nabla T$	$j_i = -\eta\nabla v$
LOKÁLIS VÁLTOZÁS:	$\frac{\partial c}{\partial t} = D\nabla^2 c$	$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha\nabla^2 T$	
	Fick	Fourier	Newton

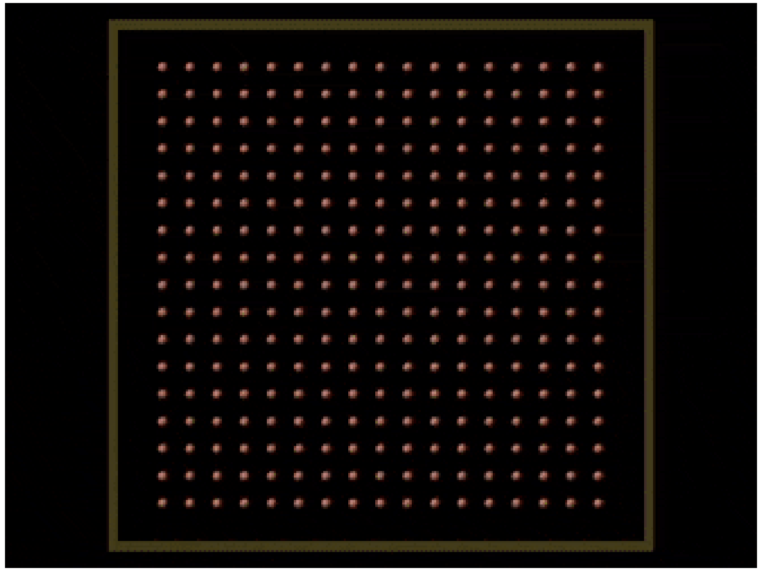
Laplace operátor: $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

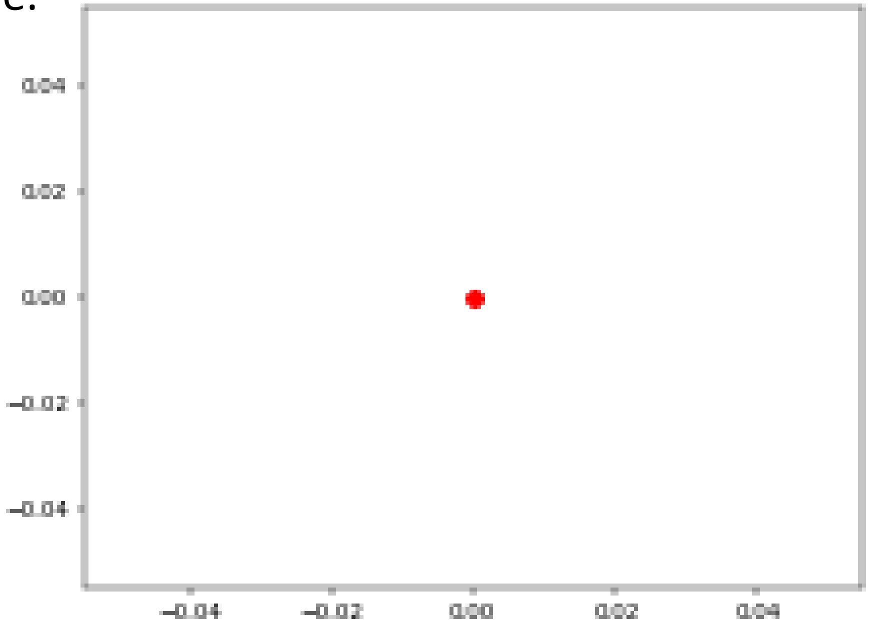
DIFFÚZIÓ



A Brown mozgás és diffúzió

Brown-féle mozgás: Részecskék véletlenszerű, korrelálatlan mozgása, mely a hőmozgás és véletlen ütközések következménye. Egyetlen molekula vagy részecske mozgása!



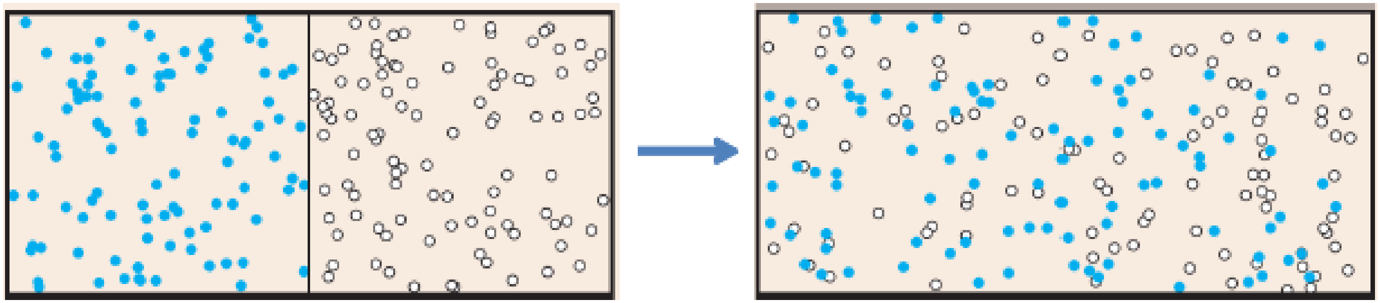


Diffúzió: Nettó (megfigyelhető) anyagtranszport amely a koncentráció térbeli kiegyenlítődéséig tart. (termikus egyensúlyban, szabad mozgás esetén)

Nagy anyagmennyiség mozgásáról beszélhetünk

Kezdeti idő

t idő múlva



A diffúzió elmélete: Fick törvények

A diffúziós folyamatok mikroszkopikus leírása az *N* részecskeszámmal és a makroszkopikus leíráshoz használt *c(x)* lokális koncentráció-eloszlással.

Fick I. törvénye:

$$j = -D \cdot grad\ c$$

$$j = -D \cdot \nabla c$$

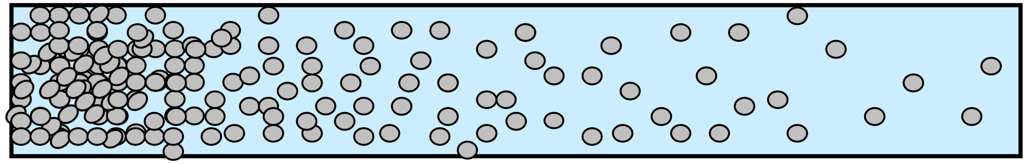
1D →

$$j = -D \cdot \frac{dc}{dx}$$

D: Diffúziós együttható

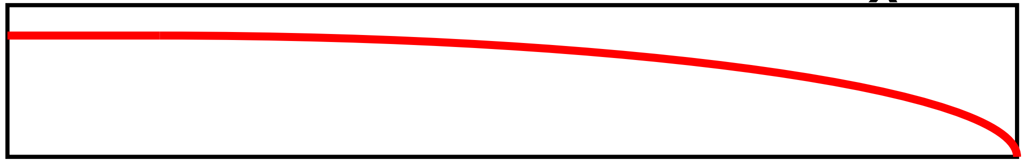
megoldás:
c(x,t)
c(<u>***r***</u>,t)

N(x)

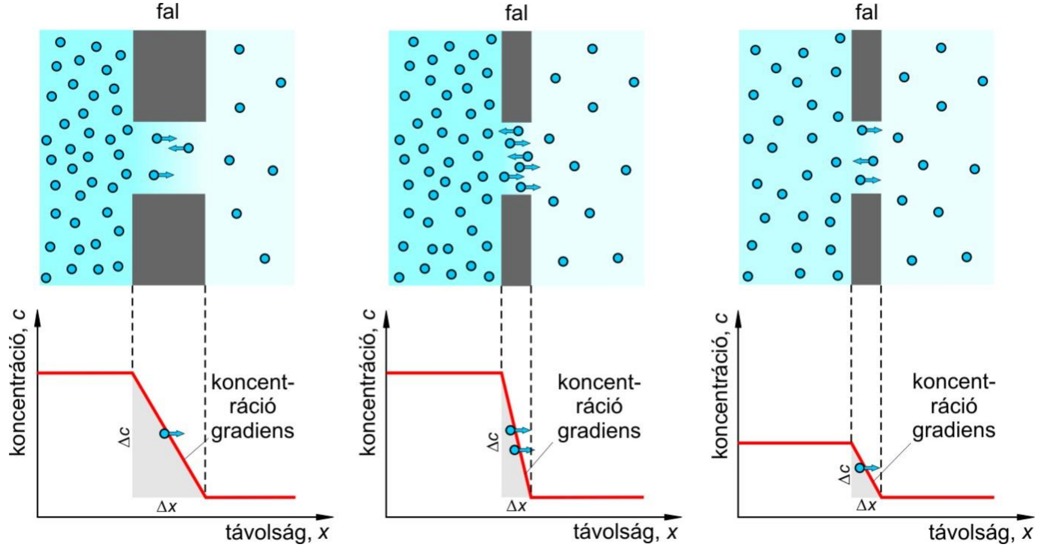


x

c(x)



x



- a diffúziós anyagáram a koncentráció térbeli változásának a meredekségével arányos,
- a diffúziós anyagáram a csökkenő koncentráció irányába folyik,
- *D >0*

Einstein-Stokes egyenlet

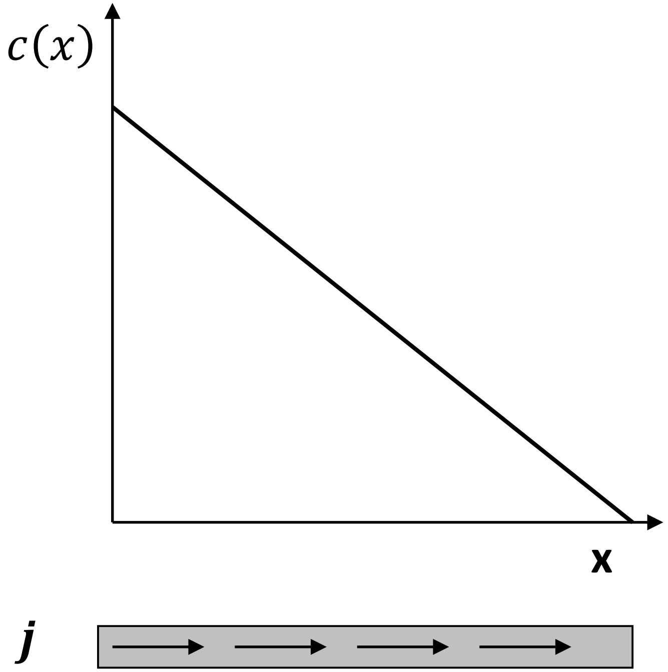
$$D = \frac{kT}{6\pi\eta r}$$

A komponens áramsűrűség és a koncentráció eloszlás kapcsolata

Fick I. törvény

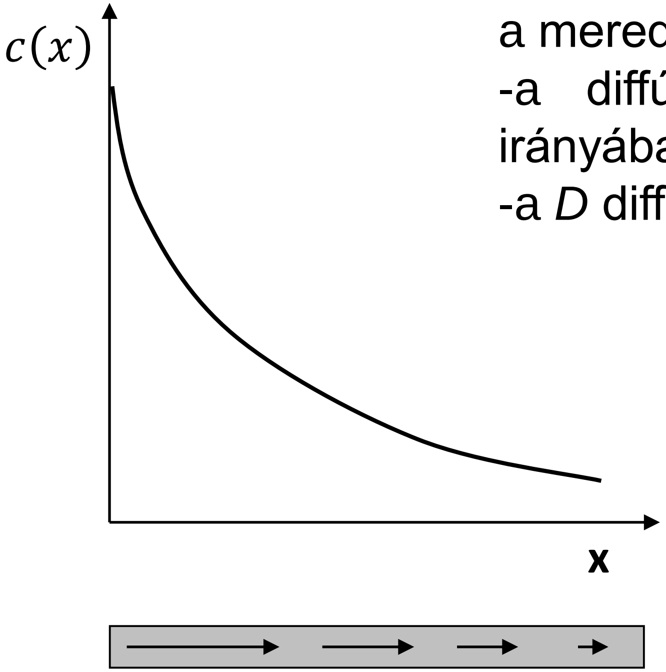
$$j = -D \cdot \frac{dc}{dx}$$

Fick I-es törvénye a következő kísérleti tapasztalatokat foglalja össze:
-a diffúzió anyagáram a koncentráció térbeli változásának a meredekségével, a c(x) függvény deriváltjával arányos,
-a diffúziós áram mindig a csökkenő koncentráció irányába folyik,
-a *D* diffúziós együttható értéke mindig pozitív.



Stacionárius eset

$$\frac{dc}{dt} = 0$$



$$\frac{dc}{dt} > 0$$

A diffúziós áramsűrűség a helykoordinátáktól csak akkor független, ha teljesül a   feltétel, azaz a koncentráció a hely függvényében lineárisan változik Minden más esetben az áramsűrűség maga is függvénye a helynek.

Ebben az esetben Fick II. törvényét használhatjuk a diffúzió leírására

A mérlegegyenlet és a hajtóerő kapcsolata a diffúzió példáján (Fick törvények)

: ***az anyagáramra vonatkozó kontinuitási egyenlet*

$$^{**}\frac{\partial c(\underline{\boldsymbol{r}},t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \boldsymbol{j}_n = -\mathrm{div}\, \boldsymbol{j}_n \longleftarrow \boxed{\boldsymbol{j}_n = -D \cdot \nabla c}$$

Fick I

J_n: komponens áram

C (r,t): lokális koncentráció

$$\frac{\partial c(\underline{\boldsymbol{r}},t)}{\partial t} = -div(-D \cdot grad\ c) = -\nabla \cdot (-D \cdot \nabla c)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \cdot div(grad\ c) = D \cdot (\nabla^2 c)$$

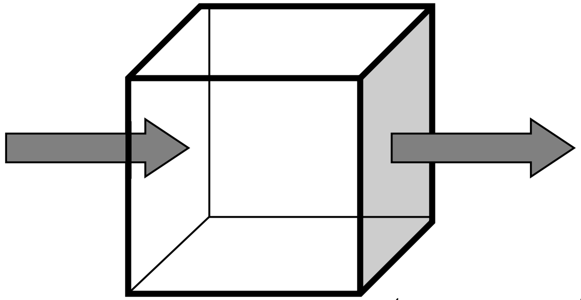
Fick II

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\nabla^2 c \xrightarrow{1D} \boxed{\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_x = D\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\right)_t}$$

görbület

Δx

$j_e(x)$



$j_e(x+\Delta x)$

x

$x+\Delta x$

Adott helyen a koncentráció időbeli változása, a koncentráció-hely szerinti második deriváltjától, a koncentráció eloszlás görbületétől függ.

$$\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_x = D\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\right)_t$$

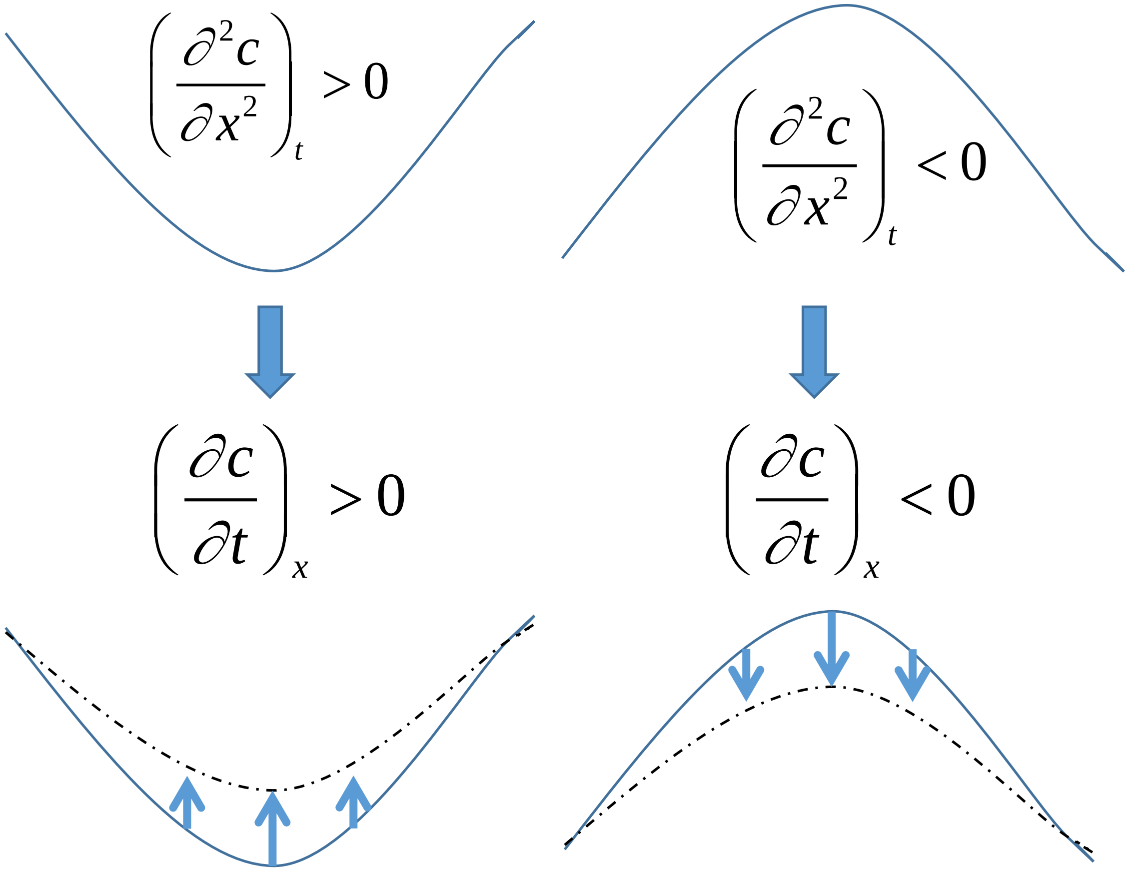
Ez a *c(x)* függvény görbülete

$$j = -D \cdot \frac{dc}{dx}$$

Fick I. törvénye

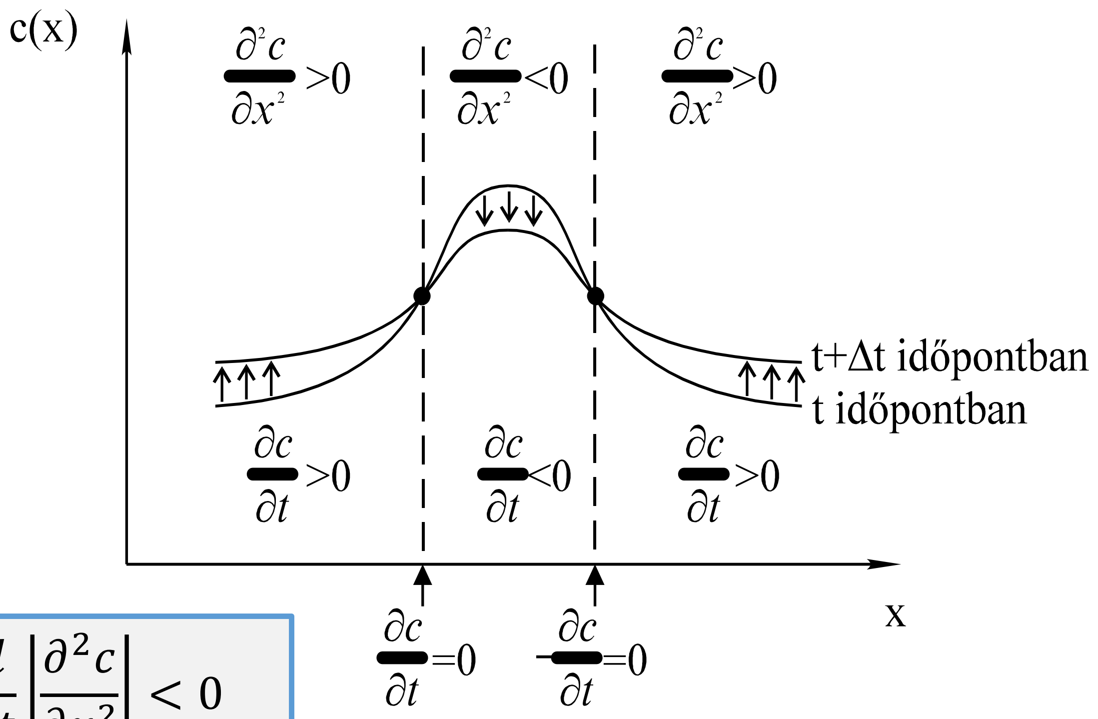
$$\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_x = D\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\right)_t$$

Fick II. törvénye



$$\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\right)_t > 0 \quad\Rightarrow\quad \left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_x > 0$$

$$\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\right)_t < 0 \quad\Rightarrow\quad \left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_x < 0$$



$$\frac{d}{dt}\left|\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\right| < 0$$

A diffúzió nem kedvez a mintázatok kialakulásának!

Fick II. törvénye

Fick II. törvényéből az alábbiak olvashatók ki:

-ott, ahol a c(x) függvény görbülete pozitív („felülről” nézve homorú), a koncentráció az idővel nő,

-ott, ahol a c(x) függvény görbülete negatív (domború), ott a koncentráció csökken,

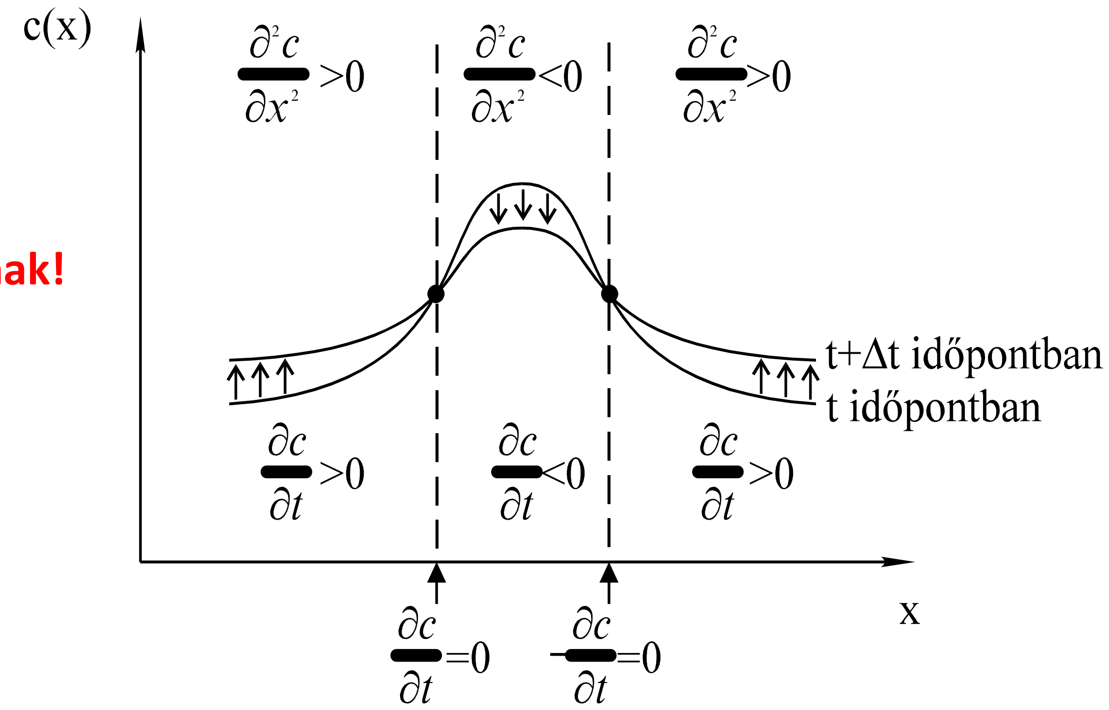
-ott, ahol a c(x) függvénynek inflexiós pontja van, a görbület zérus, a koncentráció időben nem változik.

$$\frac{d}{dt}\left|\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\right| < 0$$

A diffúzió nem kedvez a mintázatok kialakulásának!

$$\frac{d}{dt}\left|\frac{\partial c}{\partial t}\right| < 0$$

A diffúzió sebessége az időben csökken!

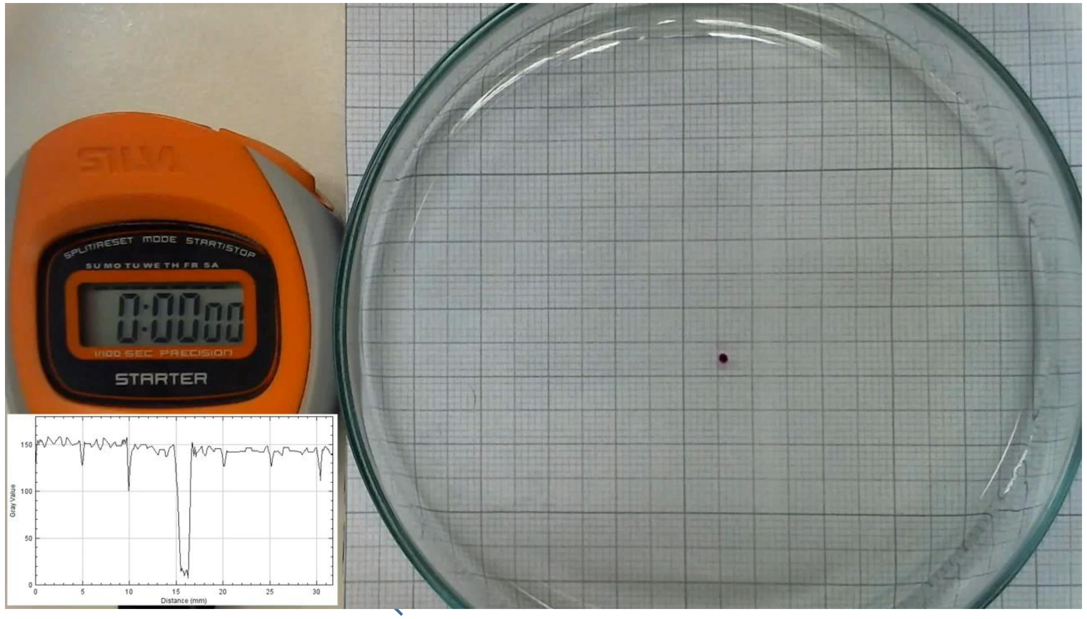


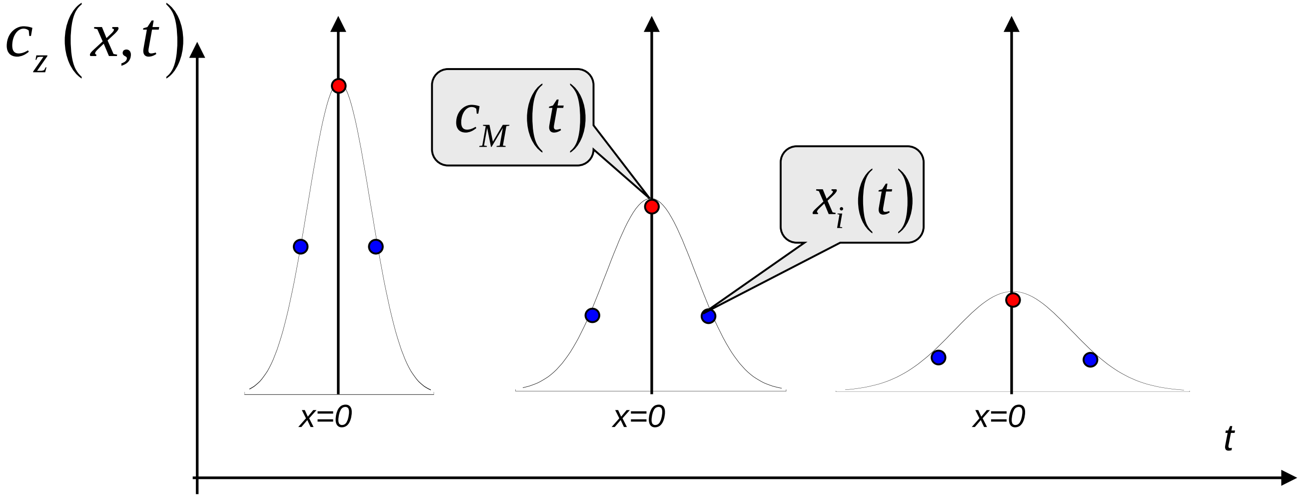
Koncentráció-zóna egydimenziós szabad diffúziója

$$c_M(t) = \frac{c_o \delta_x}{(4\pi D)^{1/2}} \cdot t^{-1/2}$$

$$x_i(t) = \sqrt{2D} \cdot t^{1/2}$$

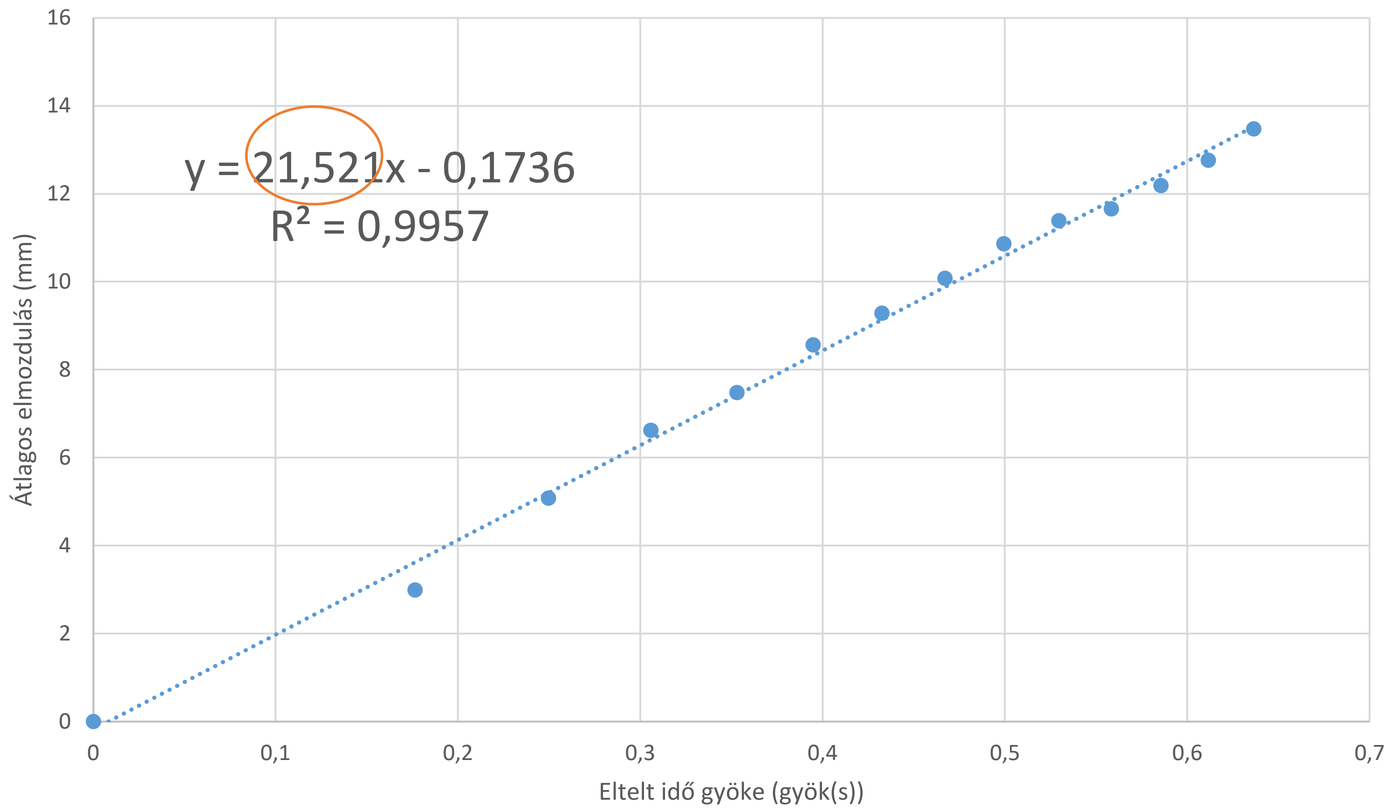
$$c_z(x,t) = \frac{n}{A_s (4\pi D t)^{1/2}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) = \frac{c_o \delta_x}{(4\pi D t)^{1/2}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$





Tisztán diffúziós jelenségeknél a karakterisztikus távolságok az idő négyzetgyökével arányosan változnak!

$$R_{átlag} = \sqrt{2 * D * t}$$

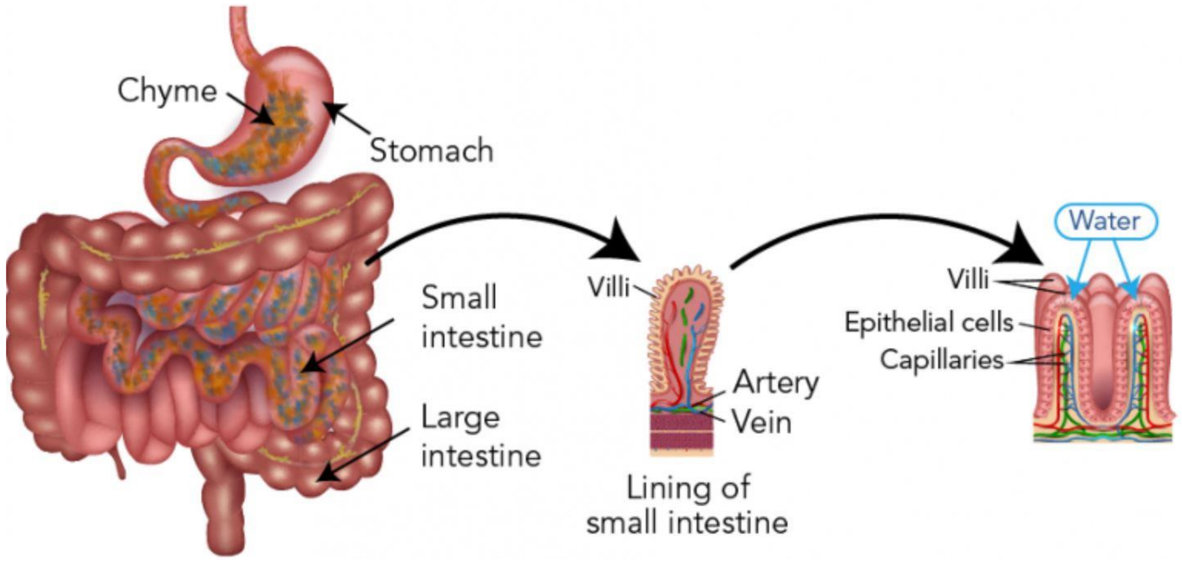


$$\sqrt{2 * D} = 21.521 \ \frac{mm}{\sqrt{s}}$$

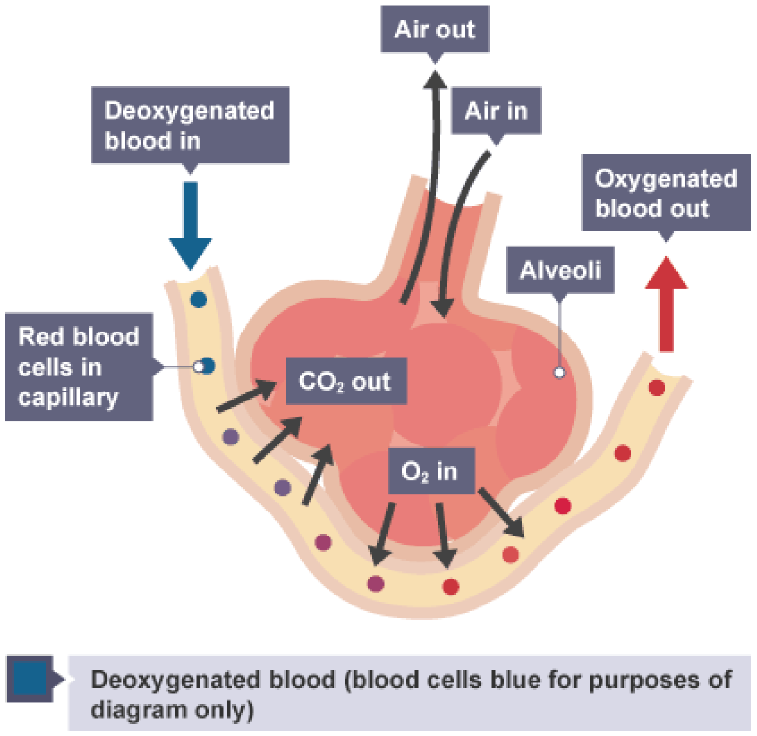
D = 231 mm²/s

Biológiai példák diffúzióra

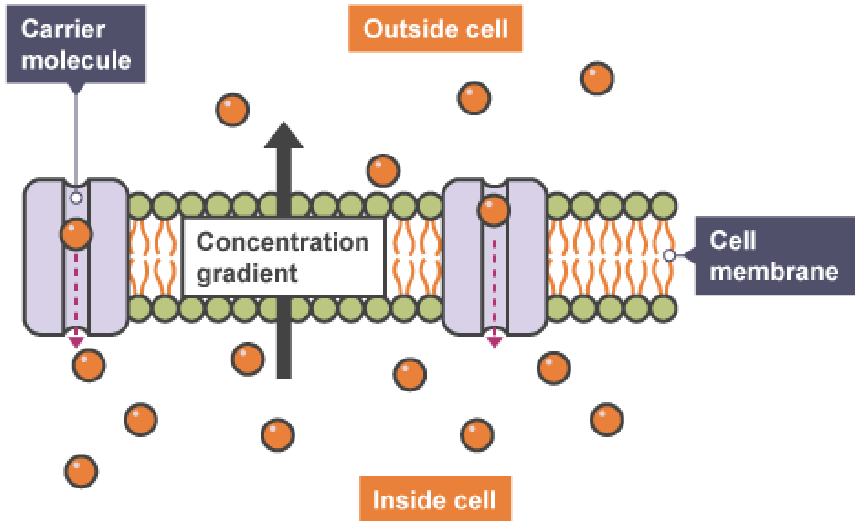
Tápanyagok felszívódása a béltraktusból



Oxigén és szén-dioxid diffúziója a tüdőben



Aktív transzport (facilitált diffúzió)



https://www.bbc.co.uk/bitesize/guides/zc9tyrd/revision/7