

## Transzportjelenségek

### Fizikai kémia előadások biológusoknak 7.



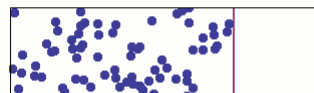
Turányi Tamás  
ELTE Kémiai Intézet

### Diffúzió, konvekció, anyagforrás

**DEF** diffúzió: egy anyag vándorlása a magasabb koncentrációjú helyről az alacsonyabb koncentrációjú hely felé a közeg makroszkopikus áramlása nélkül



**DEF** konvekció: egy anyag vándorlása, mert a közeg makroszkopikus áramlása magával sodorja



**DEF** anyagok forrása és nyelői: anyag megjelenése/eltűnése egy rendszerben, például kémiai reakciók miatt



$f(x,c,t)$  egységnyi térfogatban, időegység keletkező vagy eltűnő anyagmennyiség.

A következőkben az egyszerűség kedvéért a folyamatokat csak az  $x$ -koordináta mentén vizsgáljuk. Hasonló eredményeket kapnánk 2 illetve 3 térbeli dimenzióban is.

2

## Diffúziós áramsűrűség - Fick I. törvénye

**DEF** diffúziós áramsűrűség az az anyagmennyiség, amely a diffúzió irányára merőleges, egységnyi felületen időegység alatt áthalad  
[mol m<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup>]

**TV** Fick I. törvénye: a  $J_d$  diffúziós áramsűrűség arányos a diffundáló anyag koncentrációjának térbeli gradienseivel:

$$J_d = -D \frac{\partial c}{\partial x}$$

**DEF** a  $D > 0$  arányossági tényező a diffúziós együttható

negatív előjelre azért van szükség, mert

$J_d$  pozitív,

$\partial c / \partial x$  negatív (csökken a koncentráció jobbfelé)

$D$  pozitív (így definiáltuk)



Adolf Eugen Fick (1829-1901)  
német orvos

(nem ő találta fel a kontaktlencsét!)

⇒ a diffúzió a csökkenő koncentráció irányába megy

3

## Konvekciós áramsűrűség

**DEF** konvekciós áramsűrűség az az anyagmennyiség, amely az áramlás irányára merőleges, egységnyi felületen időegység alatt áthalad  
[mol m<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup>]

Ha az áramló közeg sebessége  $v_x$ ,

akkor időegység alatt,

az áramlás irányára merőleges egységnyi felületen

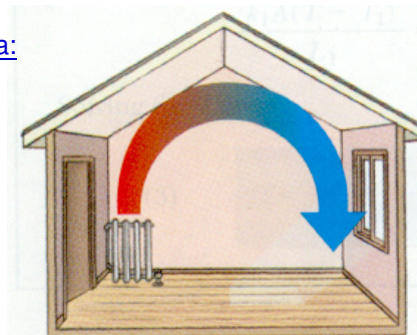
annyi anyagmennyiség halad át, amely

$v_x$  magasságú, egységnyi alapterületű hengerben található.

⇒  $J_k$  konvekciós áramsűrűség számítása:

$$J_k = c v_x$$

$c$  a közeg által szállított  
anyagfajta koncentrációja



## 1D reakció – diffúzió – konvekció rendszer leírása

TV egydimenziós (1D) reakció–diffúzió–konvekció egyenlet:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial c}{\partial x} + f$$

TV Fick II. törvénye ( $v_x = 0$  és  $f = 0$  esetében):  $\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$

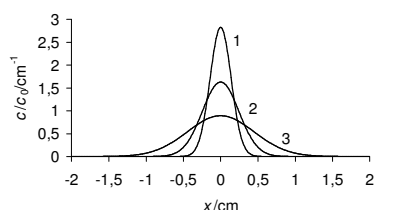
ezek parciális differenciálegyenletek

nemstacionárius eset: peremfeltétel és kezdeti feltétel kell

stacionárius eset: csak peremfeltétel kell

Általában csak numerikusan oldhatók meg. Egy ritka ellenpélda:  
kis térfogatban levő anyag diffúziós szétterjedésének  
leírása térben és időben 1D-ben:

$$c(x, t) = \frac{c_0}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-x^2/4Dt}$$

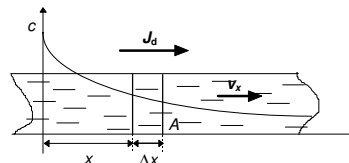


## 1D reakció–diffúzió–konvekció egyenlet levezetése

Vizsgán nem kell tudni, de tanulságos:

sok gondolatmenetnek az a háttére, hogy egy „mérlegegyenletet” írnak fel:

$\Delta x$  hosszúságú,  $A$  felületű szakasza a csőnek.  
Csőszakaszban levő anyagmennyiség  $cA\Delta x$



Ez változhat a  
(1) diffúziótól  
(2) beáramlástól  
(3) kémiai reakciótól:

$$\frac{\partial}{\partial t}(cA\Delta x) = -DA \frac{\partial c}{\partial x}(x, t) - \left[ -DA \frac{\partial c}{\partial x}(x + \Delta x, t) \right] + Av_x c(x, t) - Av_x c(x + \Delta x, t) + fA\Delta x$$

Az előbbi egyenlet átrendezve:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\frac{\partial c}{\partial x}(x + \Delta x, t) - \frac{\partial c}{\partial x}(x, t)}{\Delta x} - v_x \frac{c(x + \Delta x, t) - c(x, t)}{\Delta x} + f$$

$\Delta x \rightarrow 0$  határátmenet után:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial c}{\partial x} + f$$

6

## Hővezetés

**DEF hővezetés:** hőmérsékletkülönbség hatására hő áramlik a magasabb hőmérsékletű helyről az alacsonyabb hőmérsékletű felé.

**DEF hőáram sűrűsége:** hőáram irányára merőlegesen egységnyi felületen, egységnyi idő alatt áthaladó hőmennyiség [ $\text{J m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ]

**TV Fourier-törvénye:** hőáram sűrűsége egyenesen arányos a hőmérséklet térkoordináta szerinti gradiensevel:

$$J_q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}$$

ahol  $\lambda$  a hővezetési együttható [ $\text{J K}^{-1} \text{m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ]

hővezetési és diffúziós feladatok tehát alakilag azonosak matematikailag ugyanúgy kezelhetők



Jean Baptiste Joseph Fourier  
(1768 –1830)

francia matematikus, fizikus és történész

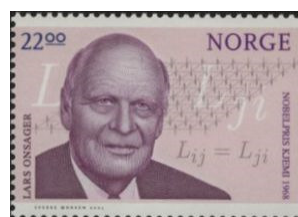


## Transzportfolyamatok keresztteffektusai

Onsager felfedezése:  
Intenzív mennyiségek gradiensek hatására extenzív mennyiségek árama alakulhat ki.

irreverzibilis termodinamika avagy  
nemeqyensúlyi termodinamika:  
a transzportfolyamatok általános elmélete

Transzportfolyamatok keresztteffektusai:  
egy intenzív mennyiség gradiense nem csak a hozzá tartozó extenzív mennyiség mozgását okozza, hanem más extenzív mennyiségeket is:



Lars Onsager (1903–1976)  
norvég-USA fiziko-kémikus  
kémiai Nobel-díj, 1968

	$\frac{\partial c}{\partial x}$	$\frac{\partial T}{\partial x}$
anyagdiffúzió	<b>Fick törvényei</b>	Soret-hatás (termodiffúzió)
hődiffúzió	Dufour-hatás	<b>Fourier-törvény</b>

8

## Termodiffúzió (Soret-hatás)

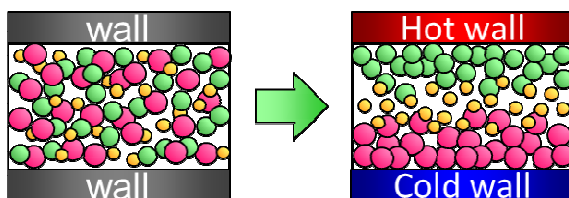
### DEF termodiffúzió:

hőmérsékletkülönbség hatására végbemenő anyagvándorlás

Az edény **melegebb végén** a kisebb moláris tömegű komponens koncentrációja nagyobb az egész elegyre vonatkozó átlagnál, a hidegebb végen pedig fordítva.

Felhasználása például:

- izotópok elválasztása
- gyökök diffúziójának leírása lángokban



Charles Soret (1854-1904)  
svájci fizikus és vegyész

9

## Internetes források

Adolf Fick

[http://de.wikipedia.org/wiki/Adolf\\_Fick](http://de.wikipedia.org/wiki/Adolf_Fick)

Fick's laws of diffusion

[http://en.wikipedia.org/wiki/Fick%27s\\_law\\_of\\_diffusion](http://en.wikipedia.org/wiki/Fick%27s_law_of_diffusion)

Lars Onsager

[http://hu.wikipedia.org/wiki/Lars\\_Onsager](http://hu.wikipedia.org/wiki/Lars_Onsager)

Charles Soret

[http://en.wikipedia.org/wiki/Charles\\_Soret](http://en.wikipedia.org/wiki/Charles_Soret)

**Transzportjelenségek**  
**téma**

**VÉGE**

