4.3 Diffusion

4.3.2 Diffusionsgleichung

$$\boxed{\begin{gathered}\frac{\partial \rho}{\partial t} - D \underline{\nabla}^2 \rho = 0 \\ D = \frac{1}{2d}\frac{l^2}{\Delta t}\end{gathered}} \quad (4.19)$$

.... Diffusionsgleichung

• phänomenolog. Herleitung:

(i) Erhaltung der Teilchenzahl: $\boxed{\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div} \underline{j}_T = 0}$ (4.20)

Teilchenzahl-Stromdichte

(ii) Materialgesetz: $\boxed{\underline{j} = -D\underline{\nabla} c}$ (4.21)

... 1. Ficksches Gesetz

(Strom versucht $\underline{\nabla} c$ auszugleichen)

$\xrightarrow{\text{(ii) in (i)}}$

$\nabla_i j_i = -D \nabla_i \nabla_i c$

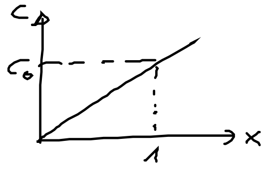
$$\boxed{\frac{\partial c}{\partial t} - D\underline{\nabla}^2 c = 0} \quad (4.22)$$

... 2. Ficksches Gesetz

D... Materialparameter, mikroskop. Ausdruck in (4.19)

• Lösungen: (i) $c(\underline{x},t) = c_0$ ≙ thermodynam. GG

(ii) 1D: $c(\underline{x},t) = c_0 x$ ... stationäres Profil (ständig Zufuhr und Abfließen von Teilchen)



(iii) Greensche Fkt.: $G(\underline{x}-\underline{x}_0, t-t_0)$

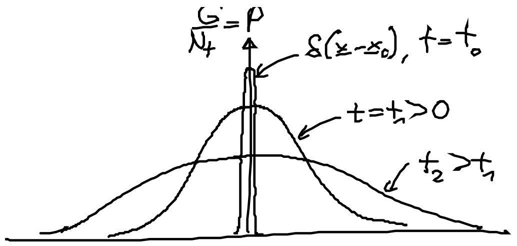
$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - D\underline{\nabla}^2\right) G(\underline{x}-\underline{x}_0, t-t_0) = N_t\, \delta(\underline{x}-\underline{x}_0)\, \delta(t-t_0) \quad (4.23)$$

$\xrightarrow[\text{[Übung]}]{\text{z.B.}}$

$$\boxed{G(\underline{x}-\underline{x}_0, t-t_0) = \frac{N_t}{[4\pi D(t-t_0)]^{3/2}}\, e^{-(\underline{x}-\underline{x}_0)^2/4D(t-t_0)}} \quad (4.24)$$

.... Gaußsche Verteilung

$$\langle(\underline{x}-\underline{x}_0)^2\rangle = 6D(t-t_0)$$



Konz. unterschiede werden ausgeglichen

ideale Polymerkette: $t \sim N$: End-zu-End Vektor $\underline{x}$ .... Gaußsche Verteilung

- Bem.: (i) Diffusion = Zufallsprozeß $\longleftrightarrow$ (4.22)

  $\hat{=}$ deterministisches Gesetz für $c(\underline{x},t) \sim P(\underline{x},t)$???

  statistische Fluktuationen: $c(\underline{x},t) - c_{real}(\underline{x},t) \sim \frac{1}{\sqrt{N_t}} \longrightarrow 0$, $N_t \longrightarrow \infty$ (thermodyn. Limes)

  (ii) Gaußsche Verteilung: gültig für $N \longrightarrow \infty$, $\Delta t \longrightarrow 0$, $L \longrightarrow 0$ so daß $t = N\Delta t$, $D = \frac{1}{2d}\frac{L^2}{\Delta t} = \frac{1}{2d}\frac{NL^2}{t}$ endlich

  .... Kontinuum Limes

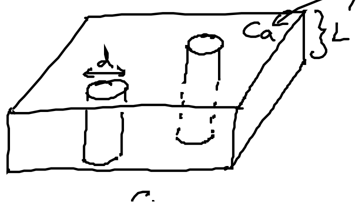
4.4 Diffusion in der Biologie

4.4.1 Durchlässigkeit (Permeabilität) von künstl. Membranen

- Membran-Modell:

  (i) passive Kanäle/Poren:

Mol. Konz. in H_2O, z. B. Zucker



$$\Delta c = c_i - c_a$$

c_i

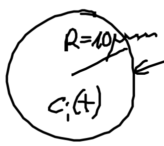
$L \gg d \longrightarrow$ stationäre 1D-Diffusion durch Kanäle: $j_K = -D \dfrac{\Delta c}{L}$

mit α ... Flächenanteil der Poren:

$$\boxed{\begin{aligned} j_M &= -P_s \Delta c \\ P_s &= \alpha \frac{D}{L} \end{aligned}} \quad (4.25)$$

... Permeabilität der Membran für „solute"

<u>Bsp:</u> Diffusion von Alkohol aus Zelle



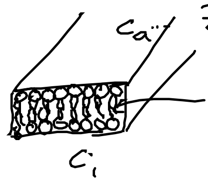
$P_s(\text{Alkohol}) = 20\,\mu m/s$

$c_0 = \text{const}$

$$\frac{d\,V\Delta c}{dt} = j_M A \xrightarrow{(4.25)} \boxed{\begin{aligned} \frac{d\Delta c}{dt} &= -\left(\frac{A P_s}{V}\right)\Delta c \\ \Delta c &= \Delta c(0)\, e^{-t/\tau}, \quad \tau = \frac{V}{A P_s} \end{aligned}} \quad (4.26)$$

hier: $\tau = 0.2\,s$

(ii) <u>keine Poren</u>:



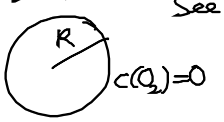
$$\Longrightarrow \boxed{\begin{aligned} j_M &= -P_s \Delta c \\ P_s &= \beta \frac{D}{L} \end{aligned}}$$

D ... Zucker in Öl

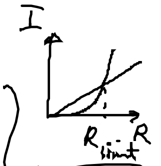
Bsp: Glukose: $P_s = 10^{-3}\,\mu m/s$
Na^+, Cl^-: $P_s = 1 - 100\,\mu m/s$ } Zellen: P_s viel größer $\longrightarrow$ weiterer Mechanismus

4.4.2 Bakterieller Metabolismus [Übung]

Bakterium

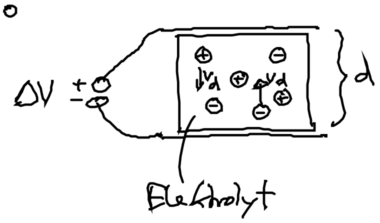


See mit O_2, $c_0(O_2)$ } $\Longrightarrow$ möglicher O_2-Konsum pro Zeit $I \sim R$; tatsächlicher O_2-Konsum $\sim R^3$



$\boxed{R < R_{limit}}$

4.4.3 Nernst-Relation ⟷ Membran-Potential



- $|E| = \frac{\Delta V}{d} \longrightarrow$ elektrophoretischer Fluß ≙ Elektrolyt-Leitung

$$\boxed{\underset{\text{Ionenkonzentration}}{j_e} = c\, \underset{\text{Driftgeschw.}}{v_d} \overset{(4.13)}{=} c\, \frac{q}{\gamma}\, E} \quad (4.29)$$

γ … Reibungskoeff.

& inhom. $c \longrightarrow$ Diffusionsstrom (D) & Einstein $\left(D = \frac{k_B T}{\gamma}\right)$ (4.10)

$\Longrightarrow$ Teilchenstromdichte: $\boxed{j = j_D + j_e = D\left(-\nabla + \frac{q}{k_B T} E\right) c}$ (4.30)

… Nernst-Planck-Formel

- Gleichgewicht: $j = 0$ …. $E \longleftrightarrow$ inhomog. c

$\frac{(4.30)=0}{c} \longrightarrow \underbrace{\frac{\nabla c}{c}}_{\nabla \ln c} = \frac{q}{k_B T} E \;\Big|\; \int_1^2 \dots \cdot ds$

Linienintegral: $\Delta V_{eq} = -\int E \cdot ds$ … Potentialdifferenz

$$\boxed{\Delta(\ln c) = \ln c_2 - \ln c_1 = -\frac{q}{k_B T}\Delta V_{eq}} \quad (4.31)$$

… Nernst Relation

1D: $c_2 = c_{oben}$, $c_1 = c_{unten}$

Bem: (i) (4.31) gültig für kleine c ≙ Ww zwischen Ionen vernachlässigbar

(ii) ⊕ näher bei neg. Elektr.
⊖ " " pos. "

(iii) $e^{(4.31)} \longrightarrow \boxed{\frac{c_2}{c_1} = e^{-\frac{q\Delta V_{eq}}{k_B T}}}$ (4.32)

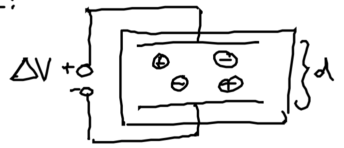
… Boltzmann-Faktor !!
kontrolliert GG-Verteilung
(kein D, da dynam. Größe!)

(iv) Bsp: Na^+: $q = e > 0$ $\quad \frac{c_{oben}}{c_{unten}} = 0{,}1$, $k_B T_r = \frac{1}{40}$ eV !!

$\xrightarrow{(4.32)} \Delta V_{eq} = 62\,mV$ ≙ Membran-Potentiale (aber: im Nicht-GG)

4.4.4. Elektr. Widerstand ⟷ Dissipation

• Elektrolyt-Zelle:



$$\boxed{\begin{aligned} j_L &= q j_e = \sigma E \\ \sigma &= \frac{c q^2}{\gamma} = \frac{D q^2 c}{k_B T} \end{aligned}}$$ (4.33) ... Leitfähigkeit

1D: $\Delta V = E d$
Strom $I_{ion} = j_L A$

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta V &= R\, I_{ion} \\ R &= \frac{1}{\sigma}\frac{d}{A} \end{aligned}}$$ (4.34)

... Ohmsches Gesetz für jede Ionensorte
... elektr. Widerstand

• Merke: Erhaltungsgröße & ungeordnete Bewegung
⟶ diffusive Transportgesetze

(i) Teilchendiffusion: $j = -D \nabla c$

(ii) ~~Energieerhaltung:~~ ⟶
Wärmetransport: $j_Q = -\kappa \nabla T$ (4.35)

... ⟶ ... $\frac{\partial T}{\partial t} - \kappa \nabla^2 T = 0$

Wärmeleitfähigkeit

5. Hydrodynamik in der Nanowelt

• Bio-Frage: Warum bewegen sich Bakterien anders fort als Fische?
Physikal. Idee: Reibung dominiert in der Nanowelt

5.1 Die Navier-Stokes-Gleichung

• zentrale Grundgleichung für Geschw.feld $\underline{v}(\underline{x},t)$ einer viskose, isotrope
= Newtonsche Flüssigkeit