Física Biológica

Transporte. Difusión.

1. *Ecuación de continuidad.* Suponga un medio que contiene n partículas idénticas por unidad de volumen que se mueven con velocidad $\mathbf{v}$. Considere un volumen V dentro de ese medio. ¿Permanece constante el número de partículas, nV, que están contenidas en este volumen? ¿Por qué? Considere un volumen diferencial, uno de cuyos lados tiene la dirección de la velocidad $\mathbf{v}$ y largo $|\mathbf{v}|dt$, donde dt es un intervalo de tiempo infinitesimal. Determine la diferencia entre el número de partículas contenidas en el volumen en el instante t y en el instante $t + dt$. Como primer paso puede hacerlo en una dimensión espacial. En el límite en que el volumen y dt tienden a cero se obtiene la ecuación de continuidad: $\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot n\mathbf{v} = 0$, que se reduce a $\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial (n\mathbf{v})}{\partial x} = 0$ en una dimensión espacial. Se suele definir $\mathbf{j} \equiv n\mathbf{v}$ como el flujo de partículas. Si las partículas tienen masa m, se obtiene una ecuación análoga para la densidad de masa, $\rho_m \equiv mn$ y si tienen carga q, para la densidad de carga, $\rho_e \equiv qn$. En este último caso se llama densidad de corriente, $\mathbf{j} \equiv qn\mathbf{v}$. Esta ecuación es válida aún cuando no todas las partículas tienen la misma velocidad. En ese caso el flujo queda escrito en términos de la velocidad media de las partículas.

2. *Ecuación de difusión. i)* Considere una grilla cuadrada infinita de lado d y una partícula que puede saltar de un sitio a otro de la grilla en ciertos instantes separados entre sí por un intervalo de tiempo τ. Suponga que en cada uno de esos instantes la partícula puede saltar a cualquiera de sus 4 sitios vecinos más próximos con probabilidad 1/4. Encuentre el coeficiente de difusión. Diga cuál es la velocidad media y la velocidad cuadrática media de la partícula (ambos promedios calculados sobre varios saltos entre sitios). *ii)* Suponga que en un instante t hay $N(x, y, t)$ partículas en el punto de grilla (x, y) (note que los puntos de grilla van a ser de la forma $(x, y) = (id, jd)$ con i y j enteros). Escriba una ecuación para la variación $N(x, y, t + \tau) - N(x, y, t)$ como función de los valores de N en el instante t. Tome el límite de esta ecuación para $\tau \to 0$, $d \to 0$, $d^2/\tau \to 0$ (ayuda: va a tener que expandir N hasta segundo orden en d y hasta primero en τ). De este modo obtendrá la ecuación de difusión. *iii)* Para hacer la analogía entre la grilla y un medio continuo podemos pensar que $N(x, y, t)$ es el número total de partículas contenido en un cuadrado de lado d con centro en el punto (x, y). Definiendo la densidad de partículas $n = N/d^2$, puede escribir la ecuación de difusión para n en lugar de N. En general (y en un número cualquiera de dimensiones) esta ecuación es de la forma $\frac{\partial n}{\partial t} = D\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$, donde D es el coeficiente de difusión. Compárela con la ecuación de continuidad. ¿Qué puede decir del flujo de partículas en este caso? ¿Qué situaciones pueden describirse con la ecuación de difusión?

3. Considere un conjunto de partículas de masa m y velocidad cuadrática media $\langle v^2 \rangle$, inmerso en un medio (un solvente) de modo que el tiempo entre colisiones con moléculas del solvente es τ. Suponga que la solución está suficientemente diluida como para suponer que las partículas no chocan entre sí sino sólo con el solvente. Usando análisis dimensional determine cómo el coeficiente de difusión

depende de $\overline{v} \equiv \sqrt{\langle v^2 \rangle}$ y τ. Usando el teorema de equipartición de la energía de acuerdo al cual $\overline{v}^2 \propto kT/m$ (donde k es la constante de Boltzmann, $k = 1.380658 \cdot 10^{-23} J/{}^oK$), determine cómo D puede depender de la temperatura, T.

4. ¿Cómo se modifican las ecuaciones de continuidad y difusión si existe una fuente de partículas que "emite" $f(\mathbf{r}, t)$ partículas por unidad de tiempo y volumen en el punto $\mathbf{r}$ al tiempo t?

5. *Para hacer en la clase práctica:* Considere la ecuación de difusión en una dimensión espacial, $\frac{\partial n}{\partial t} = D\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$ y en un medio infinito. Muestre que $n(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$ satisface la ecuación. Esta es una solución de la ecuación con condición inicial $n(x, t = 0) = \delta(x) = \lim_{t\to 0} \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$ y condición de contorno $n(x,t) \to 0$ para $|x| \to \infty$. Grafique $n(x,t)$ para distintos instantes. Si en lugar de una se consideran d dimensiones espaciales, la solución del problema análogo es $n(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{d/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{4Dt}\right)$, donde $r = |\mathbf{r}|$ es la distancia al origen de coordenadas. Considere la ecuación de difusión en tres dimensiones con una fuente puntual en el origen: $\frac{\partial n}{\partial t} = D\nabla^2 n + \sigma\delta(\mathbf{r})$. Dada la simetría del problema, si usa coordenadas esféricas (r, φ, θ), ¿de qué variable(s) va a depender la solución? Justifique. Muestre que $n(\mathbf{r}, t) = \frac{\sigma}{4\pi Dr}\left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^{r/\sqrt{4Dt}} e^{-u^2} du\right)$ es solución de la ecuación, donde r es la coordenada radial. Recuerde que si n no depende de φ y θ, entonces $\nabla^2 n = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial n}{\partial r}\right)$. Grafique $n(r,t)$ para distintos instantes. Diga a qué condición inicial y de contorno corresponde. Muestre que $n_s(r) = \frac{\sigma}{4\pi Dr}$ es una solución estacionaria (es decir, independiente del tiempo) de la ecuación de difusión con una fuente puntual en el origen. Compare las dos últimas soluciones analizadas. ¿Cómo se modifican si $n(\mathbf{r}, t) \to n_0$ para $|\mathbf{r}| \to \infty$ y $n(\mathbf{r}, t = 0) = n_0$ para la solución no estacionaria?

6. *Un poco de repaso: i)* ¿Cuál es la fuerza que un campo eléctrico, $\mathbf{E}$ ejerce sobre una partícula de carga ze? En el caso electrostático, ¿cómo se escribe en función del potencial eléctrico, Φ? *ii)* Si tengo n partículas por unidad de volumen en un volumen, V, todas de carga ze, ¿cuál es la fuerza que el campo eléctrico ejerce sobre el volumen V? *iii)* Suponga que una partícula de masa m y carga $q = ze$ se mueve en la dirección x bajo la acción de un campo eléctrico uniforme $\mathbf{E} = E\hat{x}$ en un medio que le ejerce una fuerza viscosa $\mathbf{F}_v = -\mu v\hat{x}$, donde $v = \dot{x}$ es la velocidad de la partícula. Si en el instante inicial la partícula se mueve con velocidad $v_0 = 2qE/\mu$, calcule $v(t)$. ¿Cuál es la velocidad límite a la que tiende la partícula? ¿Qué pasa con la energía cinética de la partícula? Suponga que es $E = 0$, ¿qué sucede en este caso?, ¿cómo se compara con el caso anterior?

7. *Difusión y conductividad eléctrica.* Considere una partícula de masa m y carga $q = ze$ moviéndose en un medio unidimensional bajo la acción de un campo eléctrico $\mathbf{E}$ débil (que está en la dirección del medio). Suponga que la partícula choca con alguna molécula del medio en los instantes de la forma $t_\ell = \ell\tau$ (es decir, τ es el tiempo entre colisiones) y que, como consecuencia del choque, la partícula sale con velocidad v_x con probabilidad 1/2 y con velocidad $-v_x$ con probabilidad 1/2. Entre choques la partícula es acelerada por la presencia del campo eléctrico. Si la partícula parte de $x = 0$, calcule $\langle x \rangle(t)$ para $t = \ell\tau$. ¿Cuál es la velocidad media, $\overline{v}$, que adquiere la partícula? Teniendo en cuenta que el campo es débil, calcule la variación de la energía cinética de la partícula en cada choque a primer orden en $E = |\mathbf{E}|$ (cuando ya se puede suponer que la partícula se mueve, en promedio, con la velocidad media $\overline{v}$). ¿Cómo depende $\overline{v}$ de $\mathbf{E}$? Esta misma relación vale para cualquier número de dimensiones. Considerando el caso en tres dimensiones y suponiendo que hay n partículas por

unidad de volumen, determine la relación entre la densidad de corriente, $\mathbf{j} = qn\overline{\mathbf{v}}$, y el campo eléctrico (ley de Ohm). El coeficiente de proporcionalidad entre $\mathbf{j}$ y $\mathbf{E}$ es la conductividad eléctrica, σ. Suponiendo que la variación de energía cinética en cada choque es proporcional a kT, usando la expresión encontrada para D al final del problema 7, determine la relación entre D y σ (a menos de algún factor numérico). Teniendo en cuenta todos los factores numéricos, resulta $\sigma = \frac{z^2e^2n}{kT}D = \frac{z^2Fen}{RT}D$, donde $F = 9.6485309 \cdot 10^4 C/mol$ es la constante de Faraday y $R = 8.314510 J/mol\,^oK$ es la constante de los gases. Un mol de una sustancia corresponde a un número de partículas de esa sustancia igual al número de Avogadro, $N_A = 6.0221367 \cdot 10^{23}$ (es decir $1mol = 6.0221367 \cdot 10^{23}$ partículas). La constante de Faraday se relaciona con la carga del electrón, $e = 1.60218 \cdot 10^{-19} C$ y el número de Avogadro de la forma $F = N_A e/mol$. La constante de los gases se relaciona con la constante de Boltzmann de la forma $R = kN_A/mol$. Por otro lado, si en lugar de trabajar con el número de partículas por unidad de volumen, n, trabajamos con el número de moles por unidad de volumen, c, entonces resulta: $n = c * N_A/mol$. Por lo que la relación la expresión para la conductividad, $\sigma = \frac{z^2Fen}{RT}D$, se puede reescribir como $\sigma = \frac{z^2F^2c}{RT}D$.