I. Flux de particules

Flux de particules

Le flux de particules à travers une surface S correspond au nombre de particules traversant la surface par unité de temps

$$\Phi = \frac{dN}{dt}$$

Vecteur densité de flux

En un point M, on définit le vecteur densité de flux tel que le flux élémentaire à travers une surface dS en M soit :

$$d\Phi = \overrightarrow{j} \cdot \overrightarrow{dS}$$

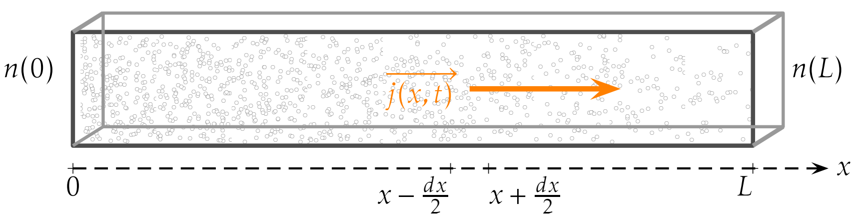
On peut exprimer Φ à travers une surface S en fonction de $\overrightarrow{j}$:

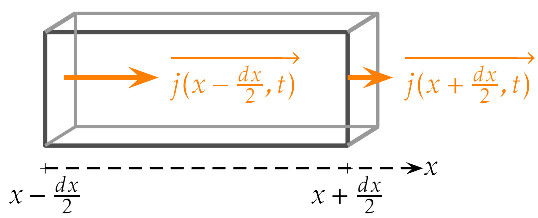
$$\Phi = \iint_S \overrightarrow{j} \cdot \overrightarrow{dS}$$

II. Bilan de particules

Étude de cas : L'exemple étudié comme support de ce cours est le suivant :

- ✓ Le système est cartésien unidimensionnel. En $M(x,y,z)$ la densité volumique de particules diffusantes ne dépend que de x à l'instant t : $n(M,t) = n(x,t)$ et $\overrightarrow{j} = j(x,t).\overrightarrow{e_x}$
- ✓ Le barreau a une section S
- ✓ Il n'y a aucun échange au niveau des parois latérales
- ✓ S'il y a lieu, on nomme N_p le nombre de particules diffusantes produites par le milieu, par unité de temps





Méthode - Bilan global en régime permanent

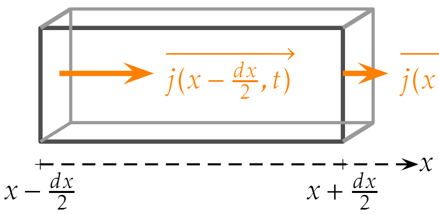
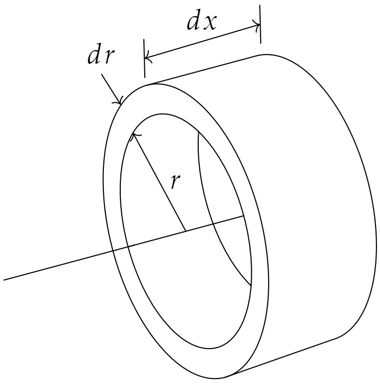
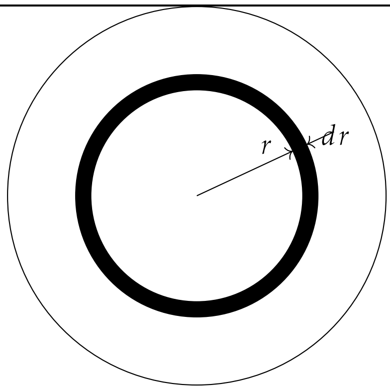
- ✓ Définir un volume en fonction de la géométrie du système, où on peut définir un flux entrant et/ou un flux sortant
- ✓ Exprimer les quantités élémentaires de particules sortantes et/ou entrantes, ainsi qu'éventuellement la quantité de particules crées ou disparues dans le volume par unité de temps
- ✓ Exploiter la conservation de la matière

Méthode - Bilan local en régime quelconque

- ✓ Définir un volume élémentaire le plus grand possible où on peut considérer $n(M,t)$ uniforme.
- ✓ Exprimer les quantités élémentaires de particules sortante et entrante, ainsi qu'éventuellement la quantité de particules crées ou disparues dans le volume pendant la durée dt
- ✓ Exprimer la variation du nombre de particules totales dans le volume pendant la durée dt
- ✓ Exploiter la conservation de la matière

On peut ainsi montrer que pour un système où $\vec{j} = \vec{j}(x,t)$ sans pertes latérales et sans création/disparition de particules diffusantes, $\frac{\partial n}{\partial t} + .\frac{\partial j}{\partial x} = 0$

Choix des volumes selon la géométrie

	Bilan local	Bilan global
$M(x,y,z) : \vec{j} = j(x,t).\vec{e_x}$		$x-\frac{dx}{2} \to x_1$ $x+\frac{dx}{2} \to x_2$
$M(r,\theta,z) : \vec{j} = j(r,t).\vec{e_r}$		$r \to r_1$ $r+dr \to r_2$ $dx \to L$
$M(r,\theta,\varphi) : \vec{j} = j(r,t).\vec{e_r}$		$r \to r_1$ $r+dr \to r_2$

Étude en régime stationnaire en absence de sources

Pour un volume d'épreuve quelconque, on définit le flux entrant de particules Φ_e et Φ_s le flux sortant. On a alors en régime stationnaire, en absence de sources :

$$\Phi_e = \Phi_s$$

III. Loi de Fick

Loi de Fick

Si la répartition des particules diffusantes n'est pas homogène, un courant de particules apparait afin de tendre vers une répartition homogène.

$$\overrightarrow{j} = -D.\overrightarrow{grad}(n)$$

D dépend à la fois des particules diffusantes et du support.

Il s'agit d'un loi phénoménologique qui traduit l'évolution du système vers une répartition uniforme des particules diffusantes.

IV. Équation de la diffusion

Équation de la diffusion

En l'absence de sources, la densité volumique de particules diffusantes vérifie la l'équation

$$\frac{\partial n}{\partial t} + div\,\overrightarrow{j} = 0$$

Partir d'une diffusion pour laquelle $\overrightarrow{j} = j(x,t).\overrightarrow{e_x}$

- ✓ Effectuer un bilan local de particules sur un volume de contrôle bien choisi
- ✓ Reconnaitre l'expression pour le cas particulier de $div\,\overrightarrow{j}$
- ✓ En déduire l'équation de la diffusion

Associée à la loi de Fick, l'équation de la diffusion amène à la relation

$$\frac{\partial n}{\partial t} - D.\Delta n = 0$$

longueur de diffusion

On relie la durée Δt à la longueur L de diffusion en régime transitoire par la relation (à retrouver par analyse dimensionnelle

$$L = \sqrt{D.\Delta t}$$

- ✓ Évaluer en ordre de grandeur $\frac{\partial n}{\partial t}$ en fonction de n et d'un temps caractéristique Δt.
- ✓ Évaluer en ordre de grandeur $\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$ en fonction de n et d'une longueur caractéristique L.
- ✓ Exploiter l'équation de la diffusion pour relier Δt et L

V. Aspect microscopique

On réalise les hypothèses suivantes :

- ✓ Les molécules du support sont considérées comme immobiles
- ✓ Il y a isotropie pour la direction de déplacement des molécules diffusantes à la vitesse v^*

- ✓ S'il existe un disque de section "efficace" σ contenant les centre d'une molécule diffusante et d'une molécule support, il y a alors choc.

Libre parcours moyen

C'est la distance moyenne l^* parcourue par une particule entre deux collisions successives. On note σ la section efficace d'une particule et ρ la densité volumique des particules support

$$l^* = \frac{1}{\sigma.\rho}$$

- ✓ Considérer à l'instant initial qu'un choc vient de se produire.
- ✓ Exprimer le volume minimum sans molécules support entourant la molécule diffusante dans lequel elle se déplace entre jusqu'au choc suivant, en fonction de l^* et σ.
- ✓ Le choc ayant lieu, combien de molécule(s) support a-t-on dans ce volume ? En déduire l^*.

Coefficient de diffusion

Une approche microscopique du phénomène de diffusion permet d'évaluer le coefficient de diffusion

$$D \equiv \frac{l^*.v^*}{6}$$

On étudie le système pour une durée dt entre deux chocs (on considère que les chocs pour toutes les particules se produisent au même instant)

- ✓ Considérer une section S orthogonale au déplacement des molécules diffusantes.
- ✓ Exprimer $\delta N_{g\to d}$ le nombre de particules traversant S vers la droite, pendant dt, en fonction de S, dt, v^* et l^*
- ✓ De même, exprimer $\delta N_{d\to g}$.
- ✓ En déduire l'expression du flux total de particules à travers S
- ✓ Retrouver l'expression de D et exploitant la loi de Fick.