Diffusion des particules

PC Lycée Dupuy de Lôme

Flux de particules

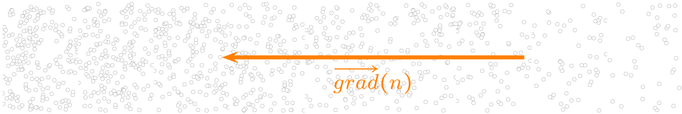
Le flux de particules à travers une surface S correspond au nombre de particules traversant la surface par unité de temps

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

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 :

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

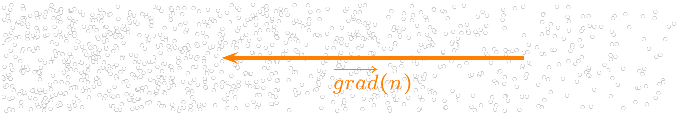


D'un point de vue empirique :

- Le flux de particule se fait
- L'intensité du flux de particules est liée

Principe d'homogénéisation

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

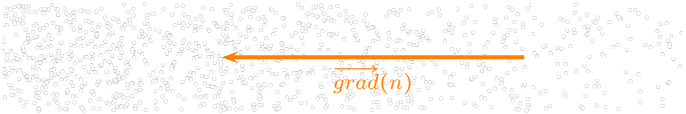


D'un point de vue empirique :

- Le flux de particule se fait dans le sens opposé au gradient de particules
- L'intensité du flux de particules est liée

Principe d'homogénéisation

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



D'un point de vue empirique :

- Le flux de particule se fait dans le sens opposé au gradient de particules
- L'intensité du flux de particules est liée à la norme du gradient.

Principe d'homogénéisation

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

Loi de Fick

Cette loi empirique relie en un point M la densité de flux de particules au gradient de concentration, en fonction du coefficient de diffusion D

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

D dépend des particules diffusantes et du milieu.

Phase	Gaz	Gaz	Gaz	Liquide	Liquide	Solide
Particules diffusantes	H_2	O_2	D_2	H_2	O_2	Al
Support	Air	Air	H_2	H_2O	H_2O	Cu
D en $m^2.s^{-1}$	$7,12.10^{-5}$	$2,06.10^{-5}$	$1,24.10^{-4}$	$5,13.10^{-9}$	$1,80.10^{-9}$	$1,30.10^{-30}$

Bilan de particules

Il s'agit de relier l'évolution des particules $N(t+dt) - N(t)$ dans un volume de contrôle en fonction des flux entrant et sortant, pour une durée dt.

- Définir un volume "de contrôle" V
- Caractériser la surface d'entrée Σ_e et/ou de sortie Σ_s
- Effectuer un bilan de particules pour une durée dt

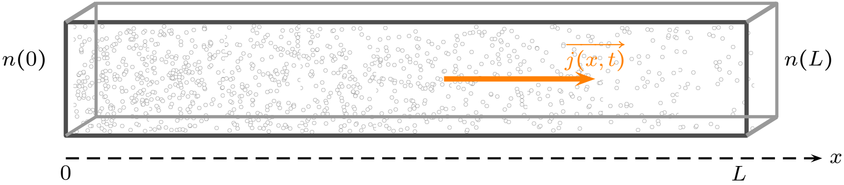
On pourra définir les grandeurs

- $N(t)$ (resp. $N(t)$) : particules dans V à t (resp. $t+dt$)
- δN_e (resp. δN_s) traversant Σ_e (resp. Σ_s) pendant dt
- δN_c (resp. δN_d) les particules crées (resp. disparues) pendant dt

Enfin δN_e (resp. δN_s) pourra être relié à Φ_e (resp. Φ_s)

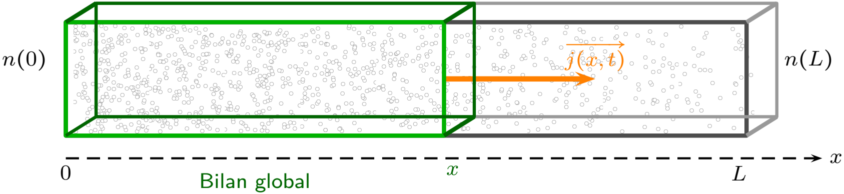
Diffusion unidimensionnelle axiale en l'absence de sources

$$\overrightarrow{j(x,t)} = j(x,t).\overrightarrow{e_x}$$



Diffusion unidimensionnelle axiale en l'absence de sources

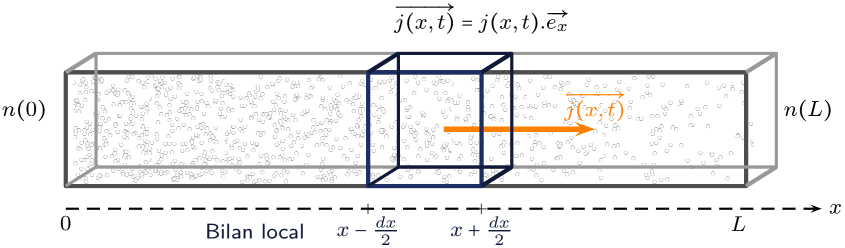
$$\overrightarrow{j(x,t)} = j(x,t).\overrightarrow{e_x}$$



- Bilan global sur le volume entre 0 et x, de section S :

$$N(t+dt) - N(t) = [j(0,t) - j(x,t)].S.dt$$

Diffusion unidimensionnelle axiale en l'absence de sources



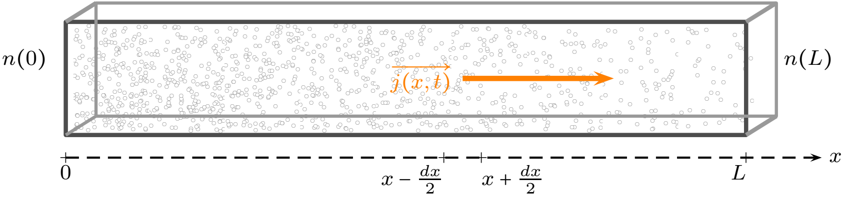
- Bilan global sur le volume entre 0 et x, de section S :

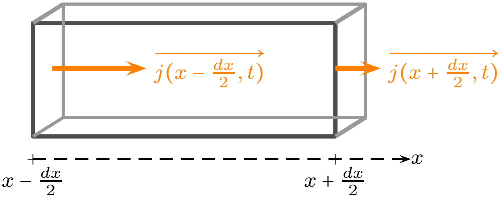
$$N(t+dt) - N(t) = [j(0,t) - j(x,t)].S.dt$$

- Bilan local sur le volume entre $x = x - \frac{dx}{2}$ et $x = x + \frac{dx}{2}$, de section S :

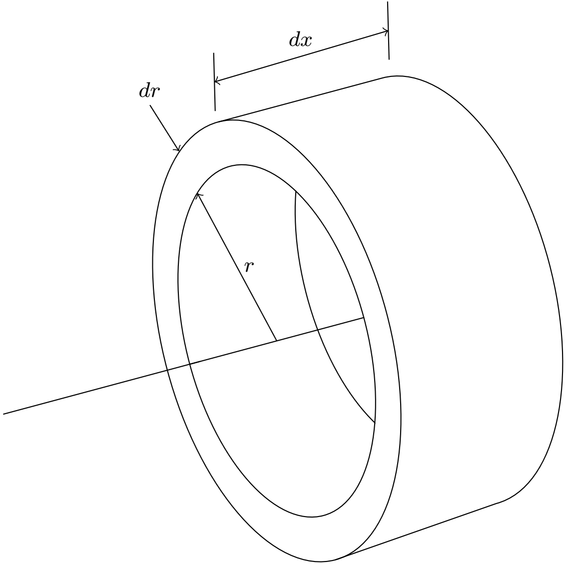
$$N(t+dt) - N(t) = \left[j\left(x - \frac{dx}{2}, t\right) - j\left(x + \frac{dx}{2}, t\right)\right].S.dt = -\frac{\partial j(x,t)}{\partial x}.dx.S.dt$$

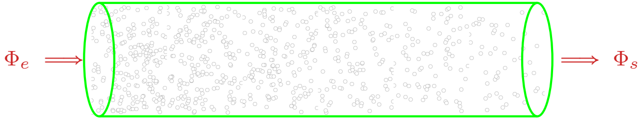
Diffusion unidimensionnelle axiale





Diffusion unidimensionnelle radiale





Bilan de particules en régime stationnaire

En régime stationnaire, le flux total de particules entrant Φ_e est égal au flux total de particules sortant Φ_s

- Φ_e : le vecteur $\overrightarrow{dS_e}$ est dirigé vers le volume étudié.
- Φ_s : le vecteur $\overrightarrow{dS_s}$ est dirigé vers l'extérieur.

Dans le cas particulier étudié de la diffusion axiale

$$\frac{\partial j(x,t)}{\partial x} = div\left(j(x,t).\overrightarrow{e_x}\right)$$

L'équation de la diffusion s'écrit alors $\dfrac{\partial n}{\partial t} + div\left(j(x,t)\right) = 0$

On généralise cette expression, *ce qui ne constitue pas une démonstration.*

Équation de la diffusion

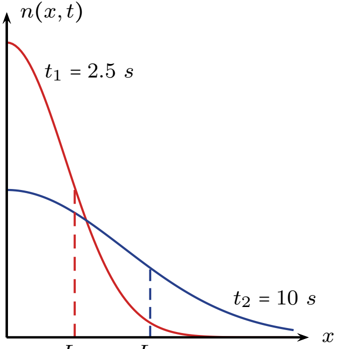
Dans le cas unidimensionnel, en l'absence de sources :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + div\left(j(x,t)\right) = 0$$

En exploitant la loi de Fick, on obtient

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

On raisonne ici à partir d'une analyse dimensionnelle



Pour une durée Δt, les particules se seront diffusées sur une distance L. En ordre de grandeur, on peut considérer que :

- $\dfrac{\partial n}{\partial t} \equiv \dfrac{\Delta n}{\Delta t}$
- $\dfrac{\partial^2 n}{\partial x^2} \equiv \dfrac{\Delta n}{L^2}$

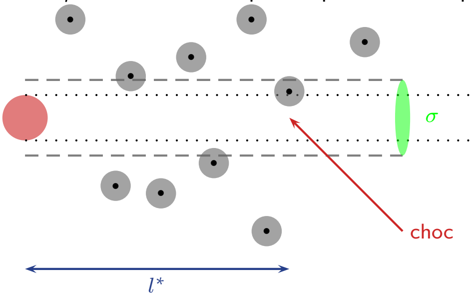
longueur de diffusion

On relie la durée Δt à la longueur L de diffusion en régime transitoire par la relation

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

$n(x,t)$
x

On note ρ la densité volumique des particule du support de diffusion.



Sauf mention contraire :
$\sigma = \pi.\left(r_{part\ dif.} + r_{part\ sup.}\right)^2$

$$l^*.\sigma.\rho = 1$$

Libre parcours moyen

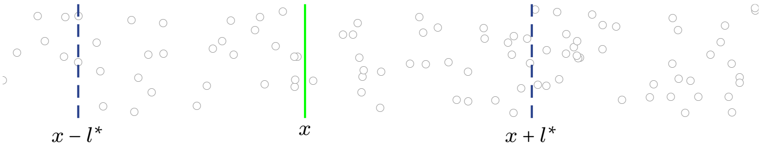
C'est la distance moyenne parcourue par une particule entre deux collisions successives

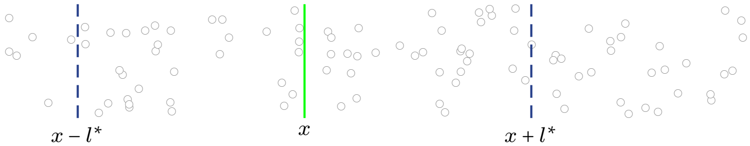
$$l^* = \frac{1}{\sigma.\rho}$$

Hypothèses d'étude

- On considère trois directions orthogonales de mouvement des particules, avec une équiprobabilité pour chacun des sens à l'issue d'une collision (mouvement Brownien)
- On considère une vitesse uniforme v^* d'agitation
- On suppose que toutes les collisions ont lieu aux mêmes instants

On va alors effectuer un bilan de particules traversant une surface dS pendant la durée τ séparant deux collisions.


$x - l^*$
x
$x + l^*$



- $\delta N_{g\to d} = \frac{1}{6} n\left(x - \frac{l^*}{2}, t\right).l^*.dS$
- $\delta N_{d\to g} = \frac{1}{6} n\left(x + \frac{l^*}{2}, t\right).l^*.dS$

$$\delta N = \delta N_{g\to d} - \delta N_{d\to g}$$

$$d\Phi = \frac{\delta N}{\tau} = -\frac{1}{6.\tau}.\frac{\partial n(x,t)}{\partial x}.l^{*2}.dS = -\frac{1}{6}.l^*.v^*.\frac{\partial n(x,t)}{\partial x} dS$$

Coefficient de diffusion

Par identification à la loi de Fick, on obtient le coefficient de diffusion

✍ $$D \equiv \frac{l^*.v^*}{6}$$

- Mouvement Brownien : http ://www2.cndp.fr/themadoc/mouvbrown/mouvbrown.htm