

TD de diffusion de particules

1. Diffusion de neutrons – aspect probabiliste

Des neutrons sont répartis sur des sites B_n situés en $x_n = na$. Un neutron met en une durée τ pour sauter d'un site B_n à l'un de ses plus proche voisin B_{n-1} ou B_{n+1} avec la même probabilité et on suppose de plus qu'un neutron peut être absorbé (et donc disparaître) au cours d'un saut entre deux sites, avec la probabilité $\alpha\tau$.

1. Soit $p(x_n, t)$ la probabilité pour un neutron d'être en x_n à l'instant t . Exprimer $p(x_n, t + \tau)$ en fonction de $p(x_{n-1}, t)$, de $p(x_{n+1}, t)$, de α et de τ .

2. Comme a est très faible devant les dimensions macroscopiques, on admet qu'on peut définir une fonction $p(x, t)$ coïncidente avec $p(x_n, t)$ pour tout n , définie pour tout x . Montrer alors que $p(x, t)$ vérifie l'équation :

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\alpha p(x, t) + D' \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$$

Donner l'expression de D' .

2. Diffusion de neutrons

On étudie la diffusion unidirectionnelle de neutrons dans un barreau de plutonium cylindrique d'axe Ox et de section S , s'étendant entre les abscisses $x = 0$ et $x = L$. On note $n(M, t)$ le nombre de neutrons par unité de volume. Cette diffusion satisfait la loi de Fick, avec un coefficient de diffusion $D = 22 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$.

Par ailleurs, du fait de réactions nucléaires entre les neutrons et la matière, des neutrons sont produits. Pendant une durée dt , dans un élément de volume $d\tau$, il apparaît $\delta N_p = Kn(M, t)d\tau dt$ neutrons, où $K = 3,5 \cdot 10^4 \text{ s}^{-1}$ est une constante.

On admettra, en première approximation, que n doit s'annuler à tout instant aux extrémités du cylindre ($x = 0$ et $x = L$). En revanche, on supposera que $n(x, t)$ ne s'annule pas à l'intérieur du cylindre.

1. Montrer que $n(x, t)$ est solution de l'équation :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + K \times n$$

2. Déterminer $n(x)$ à une constante multiplicative près en régime stationnaire. Montrer que ce régime n'est possible que pour une valeur particulière L_s de la longueur L du barreau et calculer L_s .

3. En régime quelconque, on cherche une solution de la forme : $n(x, t) = h(x) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$

Déterminer $h(x)$ et τ . En déduire que $n(x, t)$ diverge si L est supérieure à L_s .

3. Évaporation de l'éther

Un tube cylindrique de hauteur totale L est rempli sur une hauteur h d'éther liquide. À la surface de l'éther, la pression partielle d'éther est égale à la pression de vapeur saturante à la température ambiante $T_0 = 293 \text{ K}$. À la sortie du tube, la pression partielle de l'éther est négligeable.

Données : masse molaire de l'éther $M = 74,1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$; masse volumique de l'éther $\mu = 626 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$;
coefficient de diffusion de l'éther dans l'air $D = 1,50 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$;
pression de vapeur saturante de l'éther à T_0 : $P_{sat} = 5,83 \cdot 10^{-1} \text{ bar}$.

1. On suppose que la durée caractéristique de variation de la hauteur $h(t)$ (évaporation) est beaucoup plus grande que la durée caractéristique de diffusion de l'éther dans l'air, de telle sorte que l'on puisse considérer que la diffusion de l'éther dans l'air se fait en régime quasi-permanent. En déduire la densité moléculaire $n(z, t)$ de la vapeur d'éther dans l'air en fonction de L , $h(t)$ et z . L'axe Oz sera pris dirigé vers le bas avec son origine en haut du tube.

2. Exprimer le nombre de molécules d'éther qui s'évaporent entre t et $t + dt$.

3. Déterminer l'équation différentielle vérifiée par la hauteur d'éther $h(t)$.

4. Montrer que : $h(t) = L + (h_0 - L) \sqrt{1 + \frac{t}{\tau}}$ avec $\tau = \frac{\mu RT_0 (h_0 - L)^2}{2P_{sat} DM}$ est solution de cette équation.

En déduire le temps nécessaire à l'évaporation de l'éther contenu sur une hauteur de 15 cm dans un tube de 20 cm.

5. Vérifier l'hypothèse de régime quasi-permanent effectuée à la première question.

4. Catalyse hétérogène

Une réaction chimique totale $A \rightarrow B$ est catalysée par le catalyseur solide C . Si on note $n(M, t)$ la densité moléculaire de A en un point M du catalyseur, le nombre de molécules A disparaissant dans l'élément de volume δV du catalyseur centré en M entre les instants t et $t + dt$ vaut :

$$\delta N = \frac{n(M, t)}{\tau} \delta V dt$$

où τ est une durée caractéristique de la cinétique chimique. Par ailleurs, les molécules A diffusent dans un catalyseur solide avec un coefficient de diffusion D . Aucune réaction chimique ne se produit en phase gazeuse. Enfin, on suppose la diffusion en phase gazeuse suffisamment rapide pour considérer que la densité moléculaire en A dans la phase gazeuse y est uniforme et notée $n_g(t)$.

1. On se place en géométrie cartésienne unidirectionnelle où le catalyseur occupe un cylindre d'axe Ox et de section S et où $n(M) = n(x, t)$. Justifier que $n(x, t)$ est solution de l'équation :

$$\tau \frac{\partial n}{\partial t} = \delta^2 \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - n \quad \text{avec } \delta = \sqrt{D\tau}$$

2. Dans toute la suite, le catalyseur est une boule de centre O et de rayon R et la densité $n(r, t)$ est à symétrie sphérique. On admet que l'équation précédente s'écrit alors :

$$\tau \frac{\partial n}{\partial t} = \delta^2 \Delta n - n \quad \text{avec } \Delta n = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 (r n)}{\partial r^2}$$

Montrer que la fonction $g(r, t) = r n(r, t)$ est solution à t fixé d'une équation différentielle linéaire homogène du deuxième ordre à coefficients constants. Donner la forme générale de $n(r, t)$ en faisant apparaître deux "constantes" d'intégration $A(t)$ et $B(t)$ à t fixé.

3. Montrer que pour que $n(r, t)$ soit borné en $r = 0$ on a nécessairement : $n(r, t) = \frac{B(t)}{r} \text{sh}\left(\frac{r}{\delta}\right)$

Comment déterminer $B(t)$?

4. On montre alors que le nombre Φ de molécules A qui passent de la phase gazeuse au catalyseur par unité de temps s'écrit :

$$\Phi = \frac{4\pi n_g(t) R^3 F(u)}{3\tau} \quad \text{avec } u = \frac{R}{\delta} \quad \text{et } F(u) = \frac{3 \text{ch}(u)}{u \text{sh}(u)} - \frac{3}{u^2}$$

Donner le principe du calcul de Φ à partir de $n(r, t)$.

5. On divise désormais le catalyseur en q sphères de même rayon $R_q = R q^{-1/3}$ de telle sorte que le volume total de catalyseur soit conservé et on disperse les grains obtenus de telle sorte que la distance moyenne entre deux grains soit nettement supérieure à leur rayon. Ceci autorise à utiliser les résultats précédents pour chaque grain. Montrer que le nombre total ϕ_q de molécules de A disparaissant par unité de temps vaut :

$$\phi_q = \frac{4\pi n_g R^3}{3\tau} F(u_q) \quad \text{avec } u_q = \frac{R_q}{\delta} = \frac{R}{\delta q^{1/3}}$$

Sachant que $F(u \leq 3) \approx 1$ et $F(u > 3) \approx 3/u$, déterminer le meilleur choix industriel du rayon R_q des grains.