TD diffusion de particules

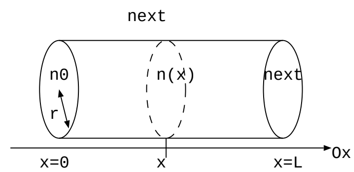
I. Diffusion à travers une cellule: ordres de grandeur

On considère une macromolécule de coefficient de diffusion dans l'eau $D = 7,0.10^{-11}\ SI$.

Rappeler l'unité de D et calculer le temps moyen nécessaire à cette macromolécule pour traverser de part en part une cellule vivante assimilée à une sphère de diamètre 20 μm et constituée essentiellement d'eau.

II. Diffusion de particules par une paroi poreuse

Soit un long cylindre d'axe Ox, de longueur L et de rayon r contenant des particules qui diffusent selon l'axe du cylindre avec un coefficient de diffusion D. On note $n_0 = n(x = 0)$ et $n_{ext} = n(x = L)$. Ces densités volumiques de particules aux extrémités du cylindre sont maintenues constantes.



Les particules peuvent s'échapper au travers de la surface latérale du tube cylindrique avec un vecteur densité de courant $j(x) = K(n(x) - n_{ext})$. On se place en régime stationnaire.

1. Faire un bilan de matière en régime stationnaire sur un système infinitésimale compris entre x et $x + dx$.

2. En déduire que $n(x)$ vérifie l'équation différentielle de la forme $\frac{d^2n}{dx^2} - \frac{n}{\delta^2} = -\frac{n_{ext}}{\delta^2}$. Exprimer δ en fonction de D, r et K. Préciser l'unité de δ.

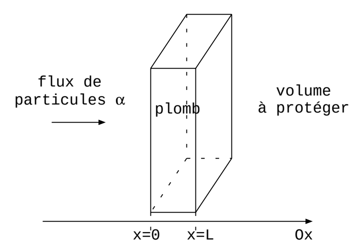
3. En déduire $n(x)$ dans l'hypothèse où L est très grand soit $n(L \to \infty) = n_{ext}$.

4. Exprimer le nombre de particules qui s'échappent au travers de la surface latérale du tube cylindrique de longueur L pendant le temps Δt.

Réponse: $n(x) = n_{ext} + (n_0 - n_{ext})e^{-x/\delta}$ *avec* $\delta = \sqrt{\frac{Dr}{2K}}$

III. Protection nucléaire

Pour protéger un lieu (contenu dans demi espace $x > L$) d'un flux ϕ constant de particules α en $x = 0$, on place entre $x = 0$ et $x = L$ un écran de plomb de surface S. Un volume élémentaire dV de plomb est capable d'absorber durant une durée dt une quantité $\delta N_{abs} = \frac{n(x)}{\tau} dtdV$ où $n(x)$ est la densité particulaire de particules α et τ une constante positive. La protection n'est pas parfaite car les particules α diffusent dans le plomb avec un coefficient de diffusion D.



1. Déduire d'un bilan de matière en régime stationnaire sur un système infinitésimale de plomb de surface S compris entre x et $x + dx$ que $\frac{dj_D(x)}{dx} = -\frac{n(x)}{\tau}$.

2. En déduire l'équation différentielle vérifiée par la densité particulaire $n(x)$ de particules α dans le plomb en fonction intervenir $\delta = \sqrt{D\tau}$. Préciser l'unité de δ.

3. ϕ est le nombre de particules α qui traversent la surface de plomb par unité de temps en $x = 0$. Ecrire la relation entre $j_D(x = 0)$ et ϕ. On note $n_0 = n(x = 0)$. Déduire de ces deux conditions aux limites en $x = 0$ l'expression de $n(x)$.

Réponse: $n(x) = (n_0 - \frac{\phi\delta}{SD})\frac{e^{\frac{x}{\delta}}}{2} + (n_0 + \frac{\phi\delta}{SD})\frac{e^{\frac{-x}{\delta}}}{2}$.

IV. **Noyau sphérique en régime stationnaire**

1. On considère un système élémentaire de section S compris entre x et $x+dx$. Il est le siège d'un phénomène de diffusion de neutrons selon Ox et d'une production de neutrons. On note D le coefficient de diffusion de neutrons, $\overrightarrow{j_D}(x) = j_D(x)\overrightarrow{e_x}$, le vecteur densité de courant de neutrons et p le nombre de neutrons produits par unité de temps et de volume. Montrer qu' en régime stationnaire l'équation de diffusion $\frac{d^2n}{dx^2} = -\frac{p}{D}$. Comment s'écrit l'équation de diffusion généralisée à 3 dimensions?

2. Un noyau sphérique, de centre O et de rayon R, est le siège d'une production de neutrons : p, supposé constant, est le nombre de neutrons produits par unité de volume et de temps. Le coefficient de diffusion est noté D. Le problème est étudié en régime stationnaire.

On donne le laplacien en coordonnées sphériques : $\Delta V = \frac{1}{r}\frac{\partial^2(rV)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial V}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 V}{\partial\phi^2}$.

Déduire de l'équation de diffusion établie précédemment, l'équation vérifiée par $n_i(r)$, densité de neutrons dans le noyau, soit pour $r < R$. La résoudre pour exprimer $n_i(r < R)$ en fonction d'une constante d'intégration A à interpréter.

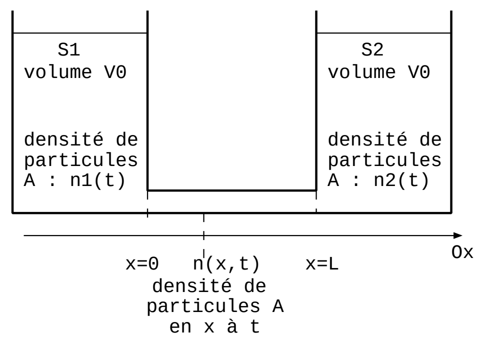
3. A l'extérieur du noyau, soit pour $r > R$, il n'y a ni production, ni absorption de neutrons. Que devient l'équation de diffusion? En déduire l'équation vérifiée par la densité de neutrons $n_e(r)$ à l'extérieur du noyau, soit pour $r > R$. La résoudre pour exprimer de $n_e(r)$ en fonction d'une constante d'intégration B en supposant que $n_e(r- > \infty) = 0$.

4. Ecrire la continuité de la densité de particules et du vecteur densité de courant en $r = R$ et en déduire A et B.

Réponses : $n_i(r) = \frac{pR^2}{2D}(1 - \frac{r^2}{3R^2})$ *et* $n_e(r) = \frac{pR^3}{3Dr}$

V. **Transfert de soluté**

On considère deux colonnes cylindriques S_1 et S_2, géométriquement identiques, de rayon R, la première contient une solution aqueuse d'un soluté A de densité moléculaire n_0 et la deuxième de l'eau pure. Les liquides occupent le même volume V_0 dans les deux colonnes. Ces deux colonnes sont mises en contact à $t = 0$ par l'intermédiaire d'un tube cylindrique, de longueur L et de section S rempli d'eau pure et dont le volume est très inférieur à celui des colonnes de liquide.



Les deux colonnes sont agitées en permanence de sorte que les densités moléculaires $n_1(t)$ et $n_2(t)$, en soluté A dans les deux colonnes sont supposées uniformes, en revanche il n'y a pas de convection dans le tube. On $n(x,t)$ la concentration en A dans le tube et D le coefficient de diffusion de A dans l'eau.

1. Donner l'équation différentielle à laquelle obéit $n(x,t)$.

2. On fait l'approximation des régimes permanents dans le tube, cela signifie que $n(x,t)$ varie très lentement au cours du temps donc on suppose que $n(x,t)$ vérifie l'équation de diffusion en régime stationnaire. Exprimer alors $n(x,t)$ en fonction de $n_1(t)$, $n_2(t)$, L et x.

3. En déduire le nombre de molécules de soluté A qui traversent la section S du tube en $x = 0$ pendant dt ainsi que le nombre de molécules de soluté A qui traversent la section S du tube en $x = L$.

4. Déduire d'un bilan de matière entre les instants t et $t + dt$ aux molécules de soluté A dans le récipient $S1$ que $\frac{dn_1}{dt} = -DS\frac{n_1 - n_2}{V_0}$.

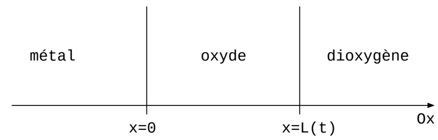
5. Donner la relation simple entre $n_1(t)$, $n_2(t)$ et n_0. En déduire l'équation différentielle vérifiée par $n_1(t)$ et exprimer $n_1(t)$. En déduire $n_2(t)$.

6. Calculer le temps caractéristique de variation du nombre de molécules de soluté A dans les récipients et le temps caractéristique de diffusion du soluté dans le tube. Commenter. Données : $D = 1,5.10^{-9}\ m^2/s$, $V_0 = 40\ cm^3$, $L = 0,5\ cm$ et $S = 1\ mm^2$.

Réponses : $n(x,t) = \frac{n_2 - n_1}{L}x + n_1$, $\frac{dn_1}{dt} = DS\frac{n_2 - n_1}{V_0 L}$, $n_1 + n2 = n_0$, $n_1(t) = \frac{n_0}{2}(1 + e^{-t/\tau})$ *avec* $\tau = \frac{V_0 L}{2DS}$, $\tau = 770\ jours$

VI. **Oxydation d'un métal**

Si l'on met une surface métallique (métal M) en présence d'oxygène, il se forme une pellicule d'oxyde dont l'épaisseur $L(t)$ croit au cours du temps, les atomes M diffusant dans l'oxyde avec un coefficient de diffusion D supposé constant.



Si l'on admet que la diffusion est le phénomène limitant, les concentrations en métal aux deux interfaces de l'oxyde peuvent être considérées comme indépendantes du temps:

- c_0 est le nombre d'atomes de métal par unité de volume en $x = 0$
- c_1 est le nombre d'atomes de métal par unité de volume en $x = L(t)$

1. Soit j_D la densité de courant d'atomes dans l'oxyde. Montrer que si l'on considère le régime quasi-stationnaire, j_D est indépendant de x et l'exprimer en fonction de C_0, C_1 et $L(t)$.

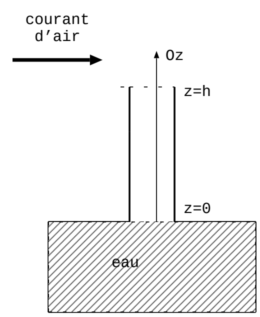
2. L'épaisseur de la couche d'oxyde croit avec l'arrivée d'atomes de métal à l'interface oxyde/dioxygène. On désigne par Ω le volume d'oxyde formé par l'atome de métal atteignant l'interface. Montrer que $L(t)$ vérifie l'équation différentielle $\frac{dL}{dt} = \frac{\Omega D(C_0 - C_1)}{L}$ et déterminer $L(t)$ si $L(0) = 0$.

3. Les hypothèses précédentes supposent un régime quasi-stationnaire. Etablir en fonction de $L(t)$ et D un temps caractéristique de diffusion, puis en fonction de $L(t)$, C_0, C_1, D et Ω un temps caractéristique de croissance de la couche. En déduire un critère permettant de considérer le régime comme quasi-stationnaire.

Réponses : 1- $j_D = \frac{D(C_0 - C_1)}{L(t)}$, *2-* $L(t) = \sqrt{2\Omega D(C_0 - C_1)t}$

VII. **Mesure du coefficient de diffusion**

Un long tube vertical ouvert aux deux extrémités, de section S, est maintenu sur une cuve à eau (fermée) à température constante T. L'extrémité supérieure du tube est à la hauteur h au-dessus de la surface libre de l'eau. Lors de l'évaporation de l'eau, un courant d'air entretenu au dessus du tube permet d'établir dans le tube un régime stationnaire de diffusion de la vapeur d'eau dont on désigne par D le coefficient de diffusion dans l'air. Cette expérience permet de mesurer D.



On note $\vec{j} = j(z)\vec{e_z}$, le vecteur densité de courant et $n^* = n^*(z)$ la densité particulaire.

Données: $R = 8,31\ SI$ et $\mathcal{N}_a = 6,0.10^{23}\ mol^{-1}$.

1. Ecrire la loi de Fick et expliquer à l'aide de cette loi cette expérience.

2. A la température T (constante) de l'expérience, la pression de vapeur saturante de l'eau est P_s (c'est la pression d'équilibre liquide-vapeur). En supposant qu'en $z = 0$ l'eau liquide est à l'équilibre avec sa vapeur, exprimer $n^*(z = 0)$ en fonction de P_s, R, $\mathcal{N}_a$ et T.

Le courant d'air maintenu au dessus du tube permet d'éliminer complètement l'eau évaporée au sommet du tube tout en maintenant l'état stationnaire soit $n^*(z = h) = 0$.

3. Un régime permanent s'établit dans le tube. Montrer, par un bilan de matière sur un système bien choisi que j ne dépend pas de z et en déduire l'expression de $n^*(z)$ dans le tube.

4. Exprimer $j(z)$ et le nombre δN de molécules d'eau qui s'évaporent pendant l'intervalle de temps dt.

5. On pose l'ensemble du dispositif sur une balance et on mesure l'évolution de la masse avec le temps. On note $\frac{dm}{dt}$ la perte de masse par unité de temps. Exprimer D en fonction de h, R, T, $\frac{dm}{dt}$, P_s, S et $M(H_2O)$.

AN: calculer D pour $M(H_2O) = 18\ g.mol^{-1}$, $T = 300\ K$, $P_s = 5,07.10^3\ Pa$, $h = 0,72\ m$, $S = 10\ cm^2$, $\frac{dm}{dt} = 4,0\ mg.h^{-1}$.

Réponses: $n^*(z) = \frac{P_s\mathcal{N}_a}{RT}(1 - \frac{z}{h})$ *et* $D = \frac{dm}{dt}\frac{RTh}{P_sSM(H_2O)}$