

Chapitre th 3 : diffusion de particules

Il y a deux façons de transporter des particules d'un point à un autre:

- le transport par déplacement macroscopique de matière: c'est la convection.
- le transport à l'échelle microscopique, sans déplacement macroscopique de matière: c'est la diffusion. La diffusion se produit dans un système où la concentration d'un constituant n'est pas homogène, le constituant migre des zones de forte concentration vers les zones de basse concentration, le phénomène est très lent et cesse lorsque la concentration est uniforme. La diffusion est un phénomène microscopique dont le moteur est l'agitation thermique.

Exemples:

saucer dans le café : avec cuillère : convection
 sans cuillère : diffusion
 on ouvre une bouteille de parfum : avec courant d'air : convection
 sans courant d'air : diffusion

I. Bilan de particules

Le nombre total de particules dans un système peut varier pour plusieurs raisons:

- Le système peut échanger des particules avec le milieu extérieur
- Il peut y avoir des particules créées ou des particules qui disparaissent du système (particules produites ou absorbées par des réactions chimiques ou des réactions nucléaires)

On note:

$N(t)$: nombre de particules dans le système à l'instant t

$N(t + dt)$: nombre de particules dans le système à l'instant $t + dt$

δN_s : nombre de particules qui sortent du système entre t et $t + dt$

δN_e : nombre de particules qui entrent dans le système entre t et $t + dt$

δN_c : nombre de particules qui sont créées dans le système entre t et $t + dt$

δN_a : nombre de particules qui sont absorbées dans le système entre t et $t + dt$

En régime variable, la conservation du nombre de particules s'écrit:

$$N(t + dt) = N(t) + \underbrace{\delta N_e + \delta N_c}_{\text{les particules gagnées par le système sont comptées}} - \underbrace{\delta N_a - \delta N_s}_{\text{les particules perdues par le système sont comptées}}$$

En régime stationnaire, la conservation du nombre de particules s'écrit:

$$N(t) = N(t + dt)$$

Le nombre de particules dans le système ne varie pas au cours du temps
 donc le nombre de particules gagnées par le système est égal au
 nombre de particules perdues par le système entre t et $t + dt$.

$$\delta N_e + \delta N_c = \delta N_s + \delta N_a$$

II. Les grandeurs physiques

1. La densité particulaire

Sa notation: $n(M, t)$: nombre de particules par unité de volume

$$[n] = \text{particules} \cdot \text{m}^{-3} \quad (\text{à préférer à : } \text{m}^{-3})$$

Remarque: la relation entre concentration et densité particulaire s'écrit:

$$c = \frac{n}{N_A} : \text{valeur de moles par unité de volume}$$

|| Son utilité: La densité particulaire sert à calculer le nombre de particules présentes dans un volume. On distingue les cas où le volume est élémentaire (volume $d\tau$) ou fini (volume V).

volume

 $dN(t) = n(M, t) d\tau$

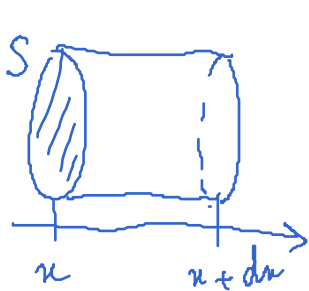


$$N(t) = \iiint_V n(M, t) d\tau$$

Rq: $N = n \times V$ uniquement si n est uniforme

Exemples en coordonnées cartésiennes: on note $n = n(x, t)$.

Le nombre de particules présentes à l'instant t_1 dans un cylindre de section S compris entre x et $x+dx$ s'écrit:

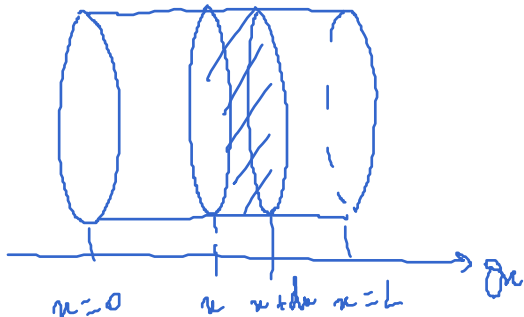


dx est suffisamment petit pour que la densité de particules entre x et $x+dx$ soit uniforme et égale à $n(x, t)$
 soit $dN(t) = n(x, t) \underbrace{S dx}_{\text{volume } d\tau}$

Le nombre de particules présentes à l'instant t_2 dans un cylindre de section S compris entre x et $x+dx$ s'écrit:

$$dN(t_2) = n(x, t_2) S dx$$

Le nombre de particules présentes à l'instant t_1 dans un cylindre d'axe Ox , de section S compris entre $x = 0$ et $x = L$ s'écrit:



Δ $n(x, t_1)$ n'est pas uniforme

$$N(t_1) = \int_{x=0}^L \underbrace{n(x, t_1) S dx}_{\substack{\text{valeur de particules} \\ \text{entre } x \text{ et } x+dx}}$$

2. Le flux particulaire et le vecteur densité de particules

Définition: le flux de particules est le nbr de particules qui traversent la section S par unité de temps
 $[\phi] = \text{particules} \cdot \text{s}^{-1}$

Pour exprimer le flux de particules, on définit une grandeur vectorielle appelée vecteur densité de courant et notée $\vec{j}_D(M, t)$ dont le sens et la direction sont le sens et la direction du m^{vt} des particules

dont la norme est en $\text{particules} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$

Expression: Le flux particulaire à travers une surface S s'écrit:

$$\phi = j_D(x, t) S$$

Le nombre de particules qui traversent une surface S entre les instants t et $t + dt$ s'écrit: $\phi \times dt$

$$\text{Soit } j_D(x, t) \times S \times dt$$

Remarque: la relation entre $\vec{j}_D(M, t)$, $n(M, t)$ et $\vec{v}$, vitesse des particules s'écrit:

$$[j_D] = \text{particules} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1} \quad [n] = \text{m} \cdot \text{s}^{-1} \quad \vec{j}_D(M, t) = n(M, t) \vec{v}(M, t)$$

$$[n] = \text{particules} \cdot \text{m}^{-3}$$

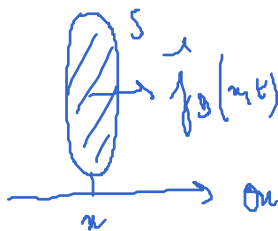
Le vecteur densité de courant de particules est d'autant plus grand que

les particules sont vite
les particules sont nombreuses

♥ // Son utilité: Le vecteur densité de courant de particules sert à calculer le nombre de particules qui traversent une surface S entre deux instants.

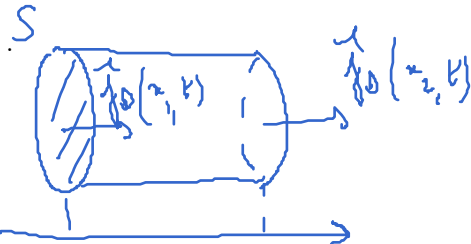
Exemples en coordonnées cartésiennes: on note $\vec{j}_D(x, t) = j_D(x, t) \vec{e}_x$.

Le nombre de particules qui traversent une surface S placée en x entre les instants t et $t + dt$ s'écrit:



$$\delta N = j_D(x, t) S dt$$

Soit le cylindre d'axe Ox , de section S compris entre x_1 et x_2 .



les particules entrent en x_1
entre t et $t + dt$ s'écrit:

$$\delta N_e = j_D(x_1, t) S dt$$

Le nombre de particules qui sortent du cylindre entre t et $t + dt$ s'écrit:

les particules sortent en x_2

$$\delta N_s = j_D(x_2, t) S dt$$

⚠ on représente j_D avec une projection > 0 !
Le nombre de particules qui entrent dans le cylindre

III. Loi de Fick

La loi de Fick est une loi phénoménologique (c'est une loi qui décrit le phénomène sans chercher à l'expliquer), elle s'écrit : $\vec{j}_D = -D \text{grad } n$

où D est un coefficient positif appelé coefficient de diffusion ou diffusivité, il dépend des particules qui diffusent et du support dans lequel elles diffusent.

Unité de D :

$$[j_D] = \text{particules} \cdot m^{-2} \cdot s^{-1} \quad [\text{grad}] = \left[\frac{d}{dx} \right] = m^{-1}$$

$$[n] = \text{particules} \cdot m^{-3} \quad [D] = \left[\frac{\|j_D\|}{\|\text{grad } n\|} \right] = \frac{\text{particules} \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}}{\text{particules} \cdot m^{-4}} = m^2 \cdot s^{-1}$$

Ordres de grandeur de D :

diffusion de particules dans un gaz : $D \approx 10^{-5} m^2 \cdot s^{-1}$

diffusion de particules dans un liquide : $D \approx 10^{-10} m^2 \cdot s^{-1}$

diffusion de particules dans un solide : $D \approx 10^{-15} m^2 \cdot s^{-1}$ à $10^{-30} m^2 \cdot s^{-1}$

+ le milieu est dense, plus c'est difficile aux particules de diffuser. $\rightarrow$ petit

A une dimension, lorsque la diffusion se produit selon l'axe Ox , la loi de Fick s'écrit:

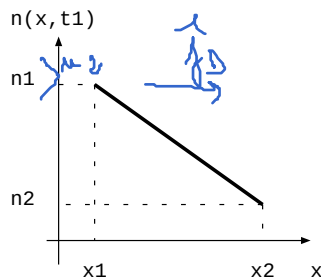
$$n = n(x, t) \quad \vec{j}_D = -D \frac{\partial n}{\partial x}(x, t) \hat{e}_x$$

Quel est le sens physique de cette loi?

La diffusion se produit en présence d'inhomogénéités de concentrations et cesse lorsque la concentration est uniforme.
 La diffusion se produit des fortes vers les faibles concentrations (sens de $-\text{grad } n$)
 La diffusion est d'autant + efficace que D est grand et que les inhomogénéités de concentrations sont importantes

Illustration graphique: $j_D(x, t) = -D \frac{\partial n}{\partial x}(x, t)$ où $\frac{\partial n}{\partial x}(x, t)$ représente la pente de la tangente à la courbe $n(x, t)$

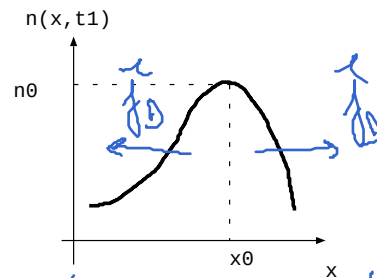
La diffusion se fait des fortes vers les faibles concentrations



$$\text{ici } j_D(x, t) > 0$$

$$j_D = -D \frac{\partial n}{\partial x} = -D \frac{n_1 - n_2}{x_1 - x_2}$$

(cas particulier quand j_D est uniforme, n est une fonction affine de x)



$$j_D(x < x_0, t) < 0 ; \quad j_D(x > x_0, t) > 0$$

$$j_D(x_0, t) = 0$$

+ la pente de la tangente est grande et plus la valeur absolue de $j_D(x, t)$ est grande

IV. Bilan local de particules

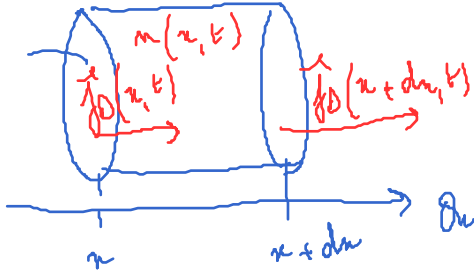
L'objectif de ce paragraphe est d'apprendre à établir l'équation locale traduisant la conservation du nombre de particules en présence de diffusion et éventuellement en présence de sources internes de productions de particules, pour des situations où la densité particulaire ne dépend que d'une coordonnée d'espace.

1. Cas où la diffusion se produit selon Ox

La diffusion se produit selon Ox dans un système de section S (surface perpendiculaire à la direction Ox). On note $n(x, t)$ la densité particulaire en x à l'instant t et $\vec{j}_D(x, t) = j_D(x, t)\vec{e}_x$. On note p le nombre de particules produites par unité de volume et de temps.

On considère le système élémentaire

section S



de section S compris entre x et $x + dx$:

Rq1: on représente $\vec{j}_D$ avec une projection j_D selon (Ox)

Rq2: $n(x, t)$ est uniforme dans le système car dx est petit

Le nombre de particules présentes dans le système à l'instant t s'écrit: $N(t) = n(x, t) S dx$

Le nombre de particules présentes dans le système à l'instant $t + dt$ s'écrit: $N(t + dt) = n(x, t + dt) S dx$

Le nombre de particules qui entrent dans le système entre t et $t + dt$ s'écrit: $\delta N_e = j_D(x, t) S dt$

Le nombre de particules qui sortent du système entre t et $t + dt$ s'écrit: $\delta N_s = j_D(x + dx, t) S dt$

Le nombre de particules produites dans le système entre t et $t + dt$ s'écrit: $\delta N_p = p \times S dx \times dt$

$$[p] = \text{particules} \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$$

La conservation du nombre de particules s'écrit:

$$N(t + dt) = N(t) + \delta N_e - \delta N_s + \delta N_p$$

$$[n(x, t + dt) - n(x, t)] S dx = - [j_D(x + dx, t) - j_D(x, t)] S dt + p S dx dt$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} S dx dt = - \frac{\partial j_D}{\partial x} S dx dt + p S dx dt$$

$$\boxed{\frac{\partial n}{\partial t} = - \frac{\partial j_D}{\partial x} + p}$$

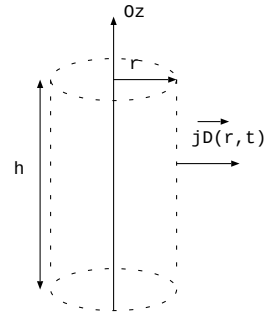
équation locale de conservation de la matière

Remarque: dans le cas où la diffusion se produit selon Ox , Oy et Oz soit $n = n(x, y, z, t)$ et $\vec{j}_D(x, y, z, t) = j_{Dx}\vec{e}_x + j_{Dy}\vec{e}_y + j_{Dz}\vec{e}_z$, l'équation de conservation du nombre de particules devient:

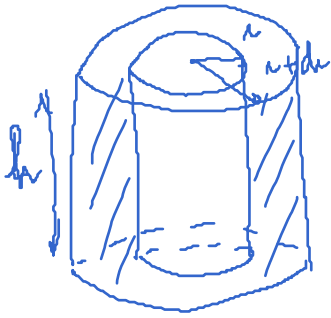
$$\frac{\partial n}{\partial t} = - \frac{\partial j_{Dx}}{\partial x} - \frac{\partial j_{Dy}}{\partial y} - \frac{\partial j_{Dz}}{\partial z} + p \quad \text{soit} \quad \boxed{\frac{\partial n}{\partial t} = - \operatorname{div} \vec{j}_D + p}$$

2. Cas où la diffusion est radiale dans un cylindre

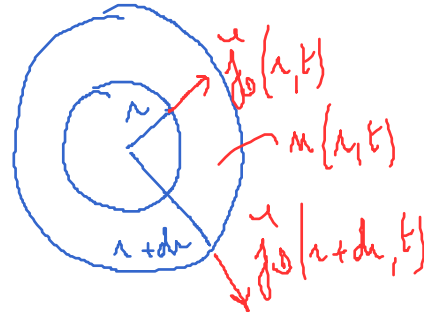
On note $n(r, t)$ la densité particulaire en r à l'instant t et $\vec{j}_D(r, t) = j_D(r, t)\vec{e}_r$. On note p le nombre de particules produites par unité de volume et de temps.



On considère le système élémentaire *compris entre les cylindres de rayons r et $r+dr$:*



Volume du système
 $\pi(r+dr)^2 h - \pi r^2 h$
 $\approx 2\pi r h dr$



! on représente $\vec{j}_D$ selon $\vec{e}_r$
 $n(r, t)$ est uniforme dans le système car le petit

Le nombre de particules présentes dans le système à l'instant t s'écrit: $dN(t) = n(r, t) 2\pi r h dr$

Le nombre de particules présentes dans le système à l'instant $t + dt$ s'écrit: $dN(t+dt) = n(r, t+dt) 2\pi r h dr$

Le nombre de particules qui entrent dans le système entre t et $t + dt$ s'écrit: $\delta N_e = j_D(r, t) 2\pi r h dt$

Le nombre de particules qui sortent du système entre t et $t + dt$ s'écrit: $\delta N_s = j_D(r+dr, t) 2\pi(r+dr) h dt$

Le nombre de particules produites dans le système entre t et $t + dt$ s'écrit: $\delta N_p = p \times 2\pi r h dr \times dt$

$[p] = \text{particules} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$

La conservation du nombre de particules s'écrit:

$$dN(t+dt) = dN(t) + \delta N_e - \delta N_s + \delta N_p$$

$$[n(r+dr, t) - n(r, t)] 2\pi r h dr = - [j_D(r+dr, t) 2\pi(r+dr) - j_D(r, t) 2\pi r] h dt + p 2\pi r h dr dt$$

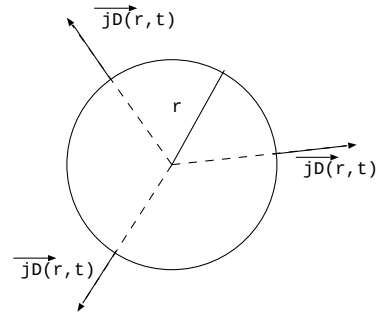
$$\frac{\partial n}{\partial t} 2\pi r h dr dt = - \frac{j_D(r) 2\pi r}{\partial r} h dt dr + p 2\pi r h dr dt$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} r = - \frac{\partial}{\partial r} (j_D(r) r) + p r$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = - \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial r} (j_D(r) r)}_{\text{div } \vec{j}_D \text{ en cylindriques}} + p$$

3. Cas où la diffusion est radiale dans une sphère

On note $n(r, t)$ la densité particulaire en r à l'instant t et $\vec{j}_D(r, t) = j_D(r, t)\vec{e}_r$. On note p le nombre de particules produites par unité de volume et de temps.



On considère le système élémentaire

Le nombre de particules présentes dans le système à l'instant t s'écrit:

Le nombre de particules présentes dans le système à l'instant $t + dt$ s'écrit:

Le nombre de particules qui entrent dans le système entre t et $t + dt$ s'écrit:

Le nombre de particules qui sortent du système entre t et $t + dt$ s'écrit:

Le nombre de particules produites dans le système entre t et $t + dt$ s'écrit:

La conservation du nombre de particules s'écrit:

V. Equation de diffusion en régime variable sans production de particules

L'équation de diffusion est l'équation différentielle aux dérivées partielles vérifiées par la densité particulaire. On la trouve en combinant la loi de Fick et l'équation de conservation du nombre de particules (dite équation bilan local de particules).

1. Cas de la diffusion à 1D selon Ox .

La loi de Fick s'écrit:

Le bilan local de particules s'écrit (en absence de production de particules):

On a donc:

2. Cas général à 3D

La loi de Fick s'écrit:

Le bilan local de particules s'écrit (en absence de production de particules):

On a donc:

Le Laplacien en coordonnées cartésiennes:

Le Laplacien en coordonnées cylindriques ou sphériques:

3. Commentaires sur l'équation de diffusion

Que devient cette équation lorsqu'on change t en $-t$? Commenter.

Calculer un ordre de grandeur du temps de diffusion: on note L la distance de diffusion des particules pendant un temps τ :

AN: temps de diffusion d'un parfum dans l'air sur une distance $d = 1 \text{ m}$

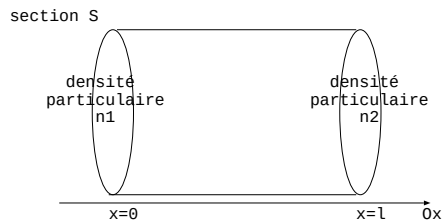
AN: temps de diffusion d'une solution de permanganate de potassium dans l'eau sur une distance $d = 10 \text{ cm}$:

Que devient cette équation en régime stationnaire?

VI. Cas du régime stationnaire

1. Sans production de particules :

Soit un cylindre d'axe Ox de section S compris entre $x = 0$ et $x = l$. On note $n(x)$ la densité particulaire dans ce cylindre avec $n(x = 0) = n_1$ et $n(x = l) = n_2$, ces densités particulières sont maintenues constantes au cours du temps aux extrémités du cylindre.

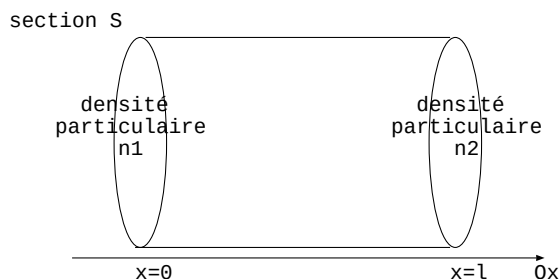


Commentaires préliminaires sur ce dispositif:

Recherche de $j(x)$ et $n(x)$.

2. Avec production de particules :

Soit un cylindre d'axe Ox de section S compris entre $x = 0$ et $x = l$. On note $n(x)$ la densité particulaire dans ce cylindre avec $n(x = 0) = n_1$ et $n(x = l) = n_2$, ces densités particulières sont maintenues constantes au cours du temps aux extrémités du cylindre. Il y a dans ce dispositif production de particules par une réaction chimique, on note p le nombre de particules produites par unité de temps et de volume (p constante positive).



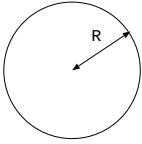
Recherche de $j(x)$ et $n(x)$

.

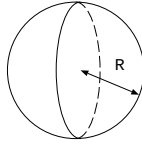
VII. Outils mathématiques indispensables

Surfaces:

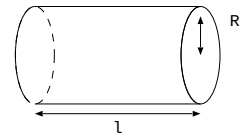
d'un disque



d'une sphère



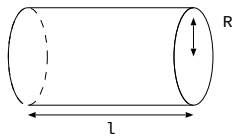
latérale d'un cylindre



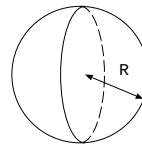
.

Volumes:

d'un cylindre

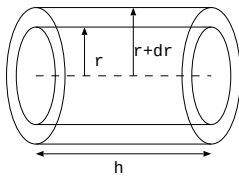


d'une sphère

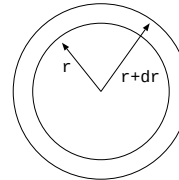


.

entre 2 cylindres de rayons r et $r + dr$



entre 2 sphères de rayons r et $r + dr$



.

Développements limités:

On rappelle que $f(x + \epsilon) \approx f(x) + \epsilon f'(x)$ pour ϵ petit ou encore $f(x + \epsilon) - f(x) \approx \epsilon f'(x)$.

pour dx petit : $f(x + dx) - f(x) \approx$

pour dt petit : $g(t + dt) - g(t) \approx$

pour dx petit : $f(x + dx, t) - f(x, t) \approx$

pour dt petit : $g(x, t + dt) - g(x, t) \approx$