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.

sucre dans le café: avec cuillère: convection sans cuillère: desprison on ouve une loutielle de perfur: avec comont d'ain: convection sans coment d'air : defunor

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)

N(t) the de patientes dans le système à l'intant t On note: t , dt N(t+dt)relie de particules qui sortent du système entre t'et t'e dt qui entrert dans le δN_e qui sont créées dans le qui sont alrabées δN_c δN_a

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

N(t+dt) = N(t) + SNe + SNc - SNa - SNS les paticules gamées par le les paticules perdues par systeme sont comprés + le système sont conflées -

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

N/t)= N/t + dt) Le volu de particules dans le ropteure une vaire pas au cours du temps donc le voulre de particules gaquées par le système est égal au noulre de particules pendues par le système entre t et t, dt. SNe+ 8Nc= 8Ns + 8Na

II. Les grandeurs physiques

1. La densité particulaire $Sa \ notation: \ n(M,t): \ Manuel de particules par unité de volume <math>\{M, t\}: \ particules, M^{-3} \ a \ préprie \ a : M^{-3} \}$

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

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 de la contraction de la contraction de la contraction (volume de la contraction de la contraction de la contraction (volume de la contraction de la contracti distingue les cas où le volume est élémentaire (volume $d\tau$) ou fini (volume V).

2 N(A= w (n, E)di

N(H) m(M, t) di Rg: N = M x V wignement 8 M est winforme

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:

n + dr n

du est suffiscement jetet son que la deinte de jouticules entre u et 2 4 de soit vinforme et égale à 11 (21t) soit diff M(x,tr) Solve

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

 $dN(t_2) = M(n_1t_2) S dn$

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

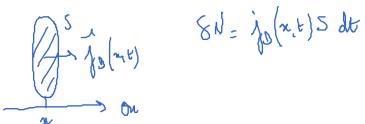
W-0

I m (nut;) went for unsure N(t) = Sh(r,t) Sohn

n=0 she de particules

Onte n et n + dn

	2. Le flux particulaire et le vecteur densité de particules
	Définition: le flux de particules est le vive de joutroiles que havenur le section
	2. Le flux particulaire et le vecteur densité de particules Définition: le flux de particules est le volu de particules qui travairent le vecteur S [p] - particules . A - 1
	Pour exprimer le flux de particules, on définit une grandeur vectorielle appelée vecteur densité de courant et notée $\overrightarrow{j_D}(M,t)$ dont le sens et la direction sont le sur la direction du met des particules
	dont la norme est en A^{-2} , A^{-1} Expression: Le flux particulaire à travers une surface S s'écrit: $\phi = \int_{\mathcal{D}} \left(\kappa, \xi \right) S$
	Le nombre de particules qui traversent une surface S entre les instants t et $t+dt$ s'écrit:
	Sol Jo(z,t) x S x dk
	Remarque: la relation entre $\overrightarrow{j_D}(M,t)$, $n(M,t)$ et \overrightarrow{v} , vitesse des particules s'écrit:
	[10] = particular. m-2 s-1 [v] = m. 1-1 [m] = m (m,t) v (m)t)
	Le vecteur densite de courant de particules est d'autant plus grand que
1	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 $\overrightarrow{j_D}(x,t) = j_D(x,t) \overrightarrow{e_x}$.
	Le nombre de particules qui traversent une surface S placée en x entre les instants t et $t+dt$ s'écrit:



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

3

S comprisentre x_1 et x_2 .

entre t et t+dt s'écrit: $SN_e = \int_{\mathbb{R}} (n, t) S dt$

Le nombre de particules qui sortent du cylindre entre t et t+dt s'écrit: les particules sortent en \mathbf{x}_{2}

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 : $\overline{j_D} = -D \operatorname{grad} n$

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.

[fo] = patroles. m - s-1

Ordres de grandeur de D:

[] = [|] [] = factionles.m. s-1 = M s-1 diffusion de particules dans un gaz : $D\approx 10^{-5}~m^2.s^{-1}$

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

diffusion de particules dans un solide : $D \approx 10^{-15} \ m^2.s^{-1}$ à $10^{-30} \ m^2.s^{-1}$ A une dimension, lorsque la diffusion se produit selon l'axe Ox, la loi de Fick s'écrit:

[aran $\int = \left(\frac{d}{d} \right) = M^{-\frac{1}{2}}$

$$M = M(n,b)$$
 $\sqrt{b} = -D \frac{\partial M}{\partial u}(u,b) \stackrel{\text{def}}{=} 0$

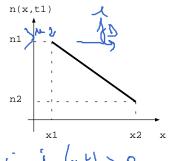
La diffusion se produit en présence d'inhangerités de concentrations et cere longue la concentration est enforme. longue la concentration est estipues.

O 11 La diffuir se produit des fortes sous les failles concentrations (seus de - grad en)

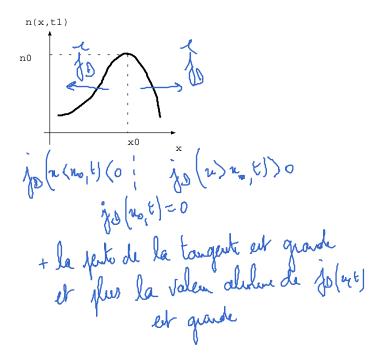
La diffusion ent d'autant + efficace que Det grand et que les inhomogénêtes

de concentrations sont impotontes

Illustration graphique: $j_D(x,t) = -D\frac{\partial n}{\partial x}(x,t)$ où $\frac{\partial n}{\partial x}(x,t)$ représente la part de la bagente à la la difference se fait des fortes vous les failles conentations



Nu /s (n,t) > 0 cas particular quand for extrapper, in est une



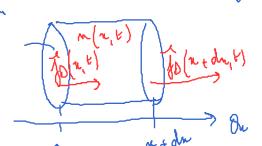
IV. Bilan local de particules

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 $\overrightarrow{j_D}(x,t) = j_D(x,t) \overrightarrow{e_x}$. On note p le nombre de particules produites par unité de volume et de temps.

On considère le système élémentaire



de section S compres entre u et n + dre: Rg1: on referente fo ourse une purjetion do Schon (On) Rg2: m(x,t) est imprise dans le option can de set petit

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

Le nombre de particules présentes dans le système à l'instant t + dt s'écrit: dN(t + dt) = M(u, t + dt) 5 du

Le nombre de particules qui entrent dans le système entre t et t+dt s'écrit: $\{x \in \mathcal{A}_{t} \mid x \in \mathcal{A}_{t} \mid x \in \mathcal{A}_{t}\}$

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

ENs= 10 (n+dn,t) Solt

Le nombre de particules produites dans le système entre t et t+dt s'écrit: $\{\{j\}\}=\{j\}\}$ $\{\{j\}\}=\{\{j\}\}$

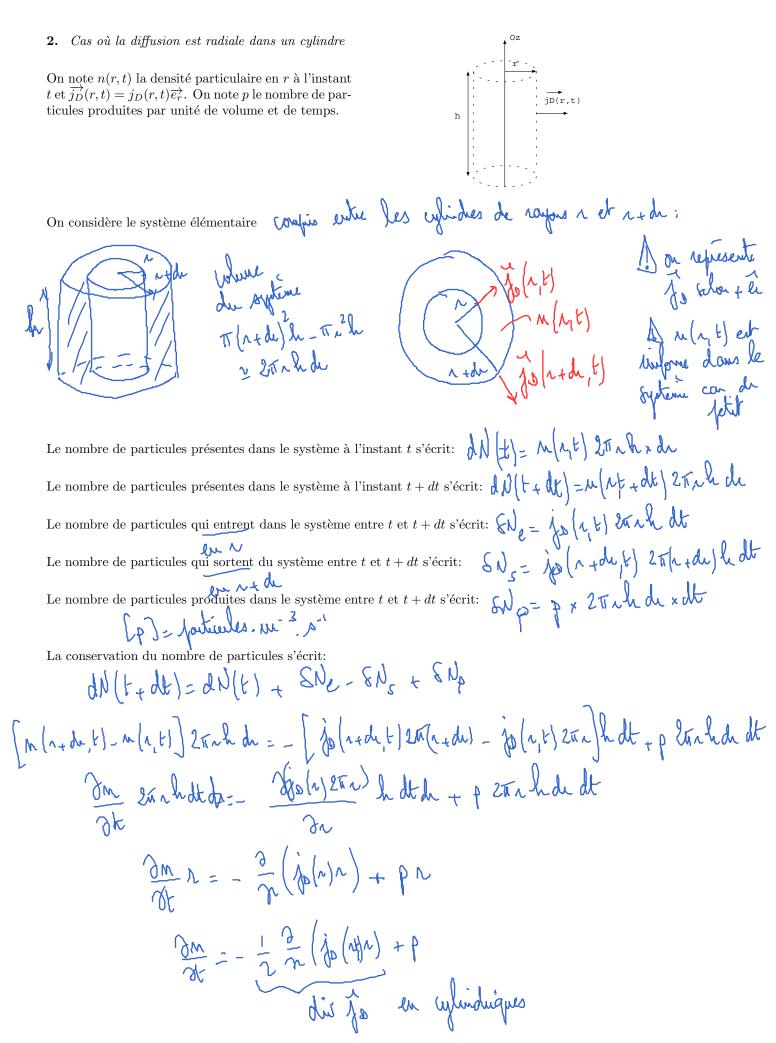
La conservation du nombre de particules s'écrit:

IN(t+ H) = dN(t) + 8Ne - 8Ns + 8Np [m(n,t+dt)-m(n,t)]Sdn=-[jo(n+dyt)-jo(n,t])Sdt+pSdudt 3m Sdn dt = - 100 Sdn dt + P Sdn dt

Tot Son I'm = - 270 + P equation locale de la matière

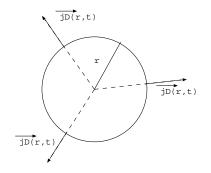
The son I'm = - 270 + P (omeration de la matière

Remarque: dans le cas où la diffusion se produit selon Ox, Oy et Oz soit n = n(x, y, z, t) et $\overrightarrow{j_D}(x, y, z, t) =$ $j_{Dx}\overrightarrow{e_x} + j_{Dy}\overrightarrow{e_y} + j_{Dz}\overrightarrow{e_z}$, l'équation de conservation du nombre de particules devient:



3. Cas où la diffusion est radiale dans une sphère

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



On considère le système élémentaire Compis entre les spieres de rayons r et r, de: Le volume de ce reptime est dé= 4 Tre2 x du.

de est sufframent ptit pour que M(1, 6) soit virgne Lous le système

En représente le verteur j's ulon : le pre la deux, le rendlet est valable su n la défigien a fait solor ée

Le nombre de particules présentes dans le système à l'instant t s'écrit: $\mathcal{N}(t) = \mathcal{M}(\lambda_1 t)$, $\mathcal{N}(t) = \mathcal{M}(\lambda_1 t)$, $\mathcal{N}(t) = \mathcal{M}(\lambda_1 t)$

Le nombre de particules qui entrent dans le système entre t et t+dt s'écrit: $\delta \mathcal{N}_{e} = \int_{\mathcal{S}} \begin{pmatrix} \iota_{+} \iota_{+} \end{pmatrix} \times \int_{\mathcal{S}} \int_{\mathcal{S}} \langle \iota_{+} \iota_{+} \rangle dt$ elles entret en traverset la ptin plieu. Le nombre de particules qui sortent du système entre t et t+dt s'écrit: $\delta \mathcal{N}_{s} = \int_{\mathcal{S}} \langle \iota_{+} \iota_{+} \rangle dt \times \int_{\mathcal{S}} \langle \iota_{+} \iota_{+} \rangle dt$ Le nombre de particules produites dans le système entre t et t+dt s'écrit: $\delta \mathcal{N}_{s} = \rho \times \langle \iota_{+} \iota_{+} \rangle dt \times dt$

p et un ule de particules par vinté de temp et de volume

La conservation du nombre de particules s'écrit: N(+, dr) = N(t) + 8Ne + 8Np - 8Ns

[m(n,t+dr)-m(n,t))4Tr2de=-[jo[r+de,t]xp+de)-jo(n,t)x2)x4Tdt+p4Te2dedt 3 (jo (a,t) x 2) de an (ne) dt

 $\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial n} \left(n^2 j_0(n,t) \right) \times \frac{1}{n^2} + P$ on we put pas solin n^2 de la derivée

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: $\vec{f}_{s} = -D$ grad M(n,t) = -D $\frac{\partial M}{\partial n}$ en $\int \int \frac{\partial M}{\partial n} dn$ $\int \int \frac{\partial M}{\partial n} dn$

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

On a donc: $\frac{\partial h}{\partial t} = D \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}$ en alme de pertudes

2. Cas général à 3D

La loi de Fick s'écrit: The Darid M

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

On a donc: $\left[\frac{\partial n}{\partial x} = - \text{dir}\left(-D \text{ grad } n\right) = D D n\right]$ go, de diffusi à 10 Le Laplacien en coordonnées cartésiennes: $\Delta M = \frac{3^2 M}{m^2} + \frac{3^4 M}{m^2} + \frac{3 M}{38^2}$

Le Laplacien en coordonnées cylindriques ou sphériques et done par l'évous

3. Commentaires sur l'équation de diffusion

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

 $\frac{\partial n}{\partial (-t)} = D D n$ soit $-\frac{\partial n}{\partial t} = D D n$ quand on drange then the life of diffusion est substitution of considerations of the prenomine of the constant of the prenomine of the constant of the c ellet drange ten-t revient à dranger le sens du temps

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

 $\frac{\partial m}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial t^2}$ for analyze dimensionalle devient: $\frac{m}{r} = D \frac{m}{L^2}$

Foit $T = L^2$ on $L = \sqrt{DT}$: la dispuis n'est pas linéaire (quand on x la distance par 2, le temps est x par 4) c'est lié au fait que + elle se produit, - il y a d'inhomogénistes de concentrations et - elle est efficace C countries = =

AN: temps de diffusion d'un parfum dans l'air sur une distance d=1 mAN: temps de diffusion d'une solution de permanganate de potassium dans l'eau sur une distance d=10 cm:

Dlip = 10 20 m 20-1 7 dd = de = 012 = 108 V

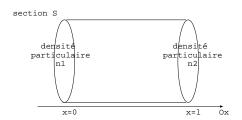
Que devient cette équation en régime stationnaire?

m me defend pas du temps sont on -s

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 particulaires sont maintenues constantes au cours du temps aux extrémités du cylindre.



Commentaires préliminaires sur ce dispositif:

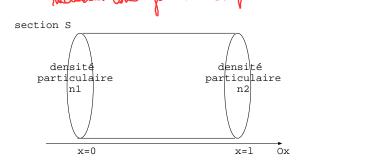
Si M, > M 2: la diffuien va se produir des lotes vas les failles devides soit elle se produit volon (On).

Aini des particules dispurament en n=o et apparament en n=L, donc M, devait des systèmes qui maintienent en no devait des systèmes qui maintienent à cause du seut on a l'agen 20 m, et M, et M, cott. Ext: vent à l'eur vayon eur l'agen 20 mointiere de j(x) et n(x).

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

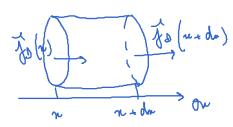
2. Avec production de particules :

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 particulaires 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)

On comidére le reptaire élémentaire de section S compin entre re et 2 4 du:



En réquire stationnair, les vhes de jarticules reçues par le soytème et perdues par le repteme entre r et t dt sont égoup: Sil reçue = Et perdues Jo(n)S dt = Jo(n + dn) S dt

Love jo me depend pas de n

loi de Fide: $j_0 = -D \frac{dn}{dn}$ soit $\frac{dn}{dn} = -\frac{j_0}{D}$ et $\mu(n) = -j_0 \frac{n}{D} + A$

C.L.
$$M(n=0) = M_1 = A$$

 $M(n=L) = M_2 = -\frac{1}{30} \frac{L}{D} + A \rightarrow$

$$\int_{\mathbb{R}^{2}} \int_{\mathbb{R}^{2}} \int_{$$

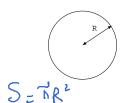
 $\frac{dy_0}{dn} = 0 \quad \text{et} \quad \dot{y}_0 = -0 \quad \frac{dn}{dn} \quad \text{done} \quad \left| \frac{d^2n}{dn^2} = \right| = 0 \quad \text{de diffuor}$ (or M (n) = An + B C.L. M(n=0) = M1 = B M(n=L) = M2 = AL + B $\int M(u) = \frac{M_2 - M_1}{L} n + M_1$ Soit le roystème démentaire de section S compirante ne et n+dn: En régime stationnaire, le noulre de particules The second of th Lous le reptine est cot donc le ule de patientes reçues est égale au ules de patientes pendues entre l'est tout. 8Ne+8Ne=8Ns entrantes pudites solbertes polusdr + p Sdndt = jola+dus Sdr d'où [jo (n.du)-jo (n) Solr = p Solr dr = p la de tide: jo = - D du d'où d'u = - f du = - fr + A M = - P 20 + An + B on trove A et B avec les CK: $|M(n=0)=M_1=B$ $|M(n=L)=M_2=-\frac{PL^2}{2D}+AL+B$

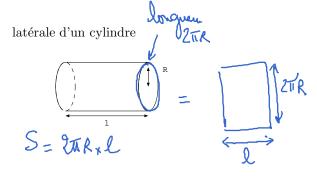
VII. Outils mathématiques indispensables

Surfaces:

d'un disque

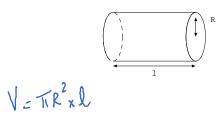
d'une sphère



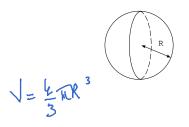


Volumes:

d'un cylindre

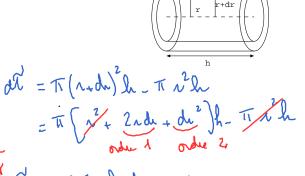


d'une sphère



entre 2 cylindres de rayons r et r + dr

entre 2 sphères de rayons r et r + dr



 $d\Omega' = \frac{k_{2}}{3} \pi \left(n_{+} dn_{1} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{1} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{1} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{1} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} - k_{2}$ $= \frac{k_{2} \pi v^{3}}{3} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} + k_{2} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} + k_{2} \left(1_{+} dn_{2} \right)^{3} + k_{2} \left(1_{$

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 : $f(x+dx)-f(x)\approx \begin{cases} (u) & \text{d} \\ (t) & \text{d} \end{cases}$ pour dt petit : $g(t+dt)-g(t)\approx \begin{cases} (t) & \text{d} \\ (t) & \text{d} \end{cases}$ pour dx petit : $f(x+dx,t)-f(x,t)\approx \begin{cases} (t) & \text{d} \\ (t) & \text{d} \end{cases}$ pour dt petit : $g(x,t+dt)-g(x,t)\approx \begin{cases} (t) & \text{d} \\ (t) & \text{d} \end{cases}$