DM n° 3 — Diffusion de particules

À rendre à partir du 12 novembre, jusqu'au 16 novembre

Détermination d'un coefficient de diffusion (EA3 PSI)

1 Diffusion et loi de Fick

Au sein d'un milieu homogène, on considère un ensemble de particules dont la concentration n'est pas uniforme. Ces particules peuvent être des molécules, des atomes ou des ions, des défauts ponctuels, des électrons libres, etc. Dans l'hypothèse d'une ***diffusion unidirectionnelle****, leur densité (ou concentration) particulaire $n(x,t)$ dépend de leur position le long de la direction Ox.*
En 1885, dans le cadre de ses travaux sur les mélanges de gaz et de liquides, Adolf Fick proposa la loi phénoménologique de diffusion . Cette loi introduit le coefficient de diffusion D et relie le vecteur densité volumique de particule $\vec{\jmath}_D$ au gradient de concentration particulaire n.

1. Rappeler la loi de Fick, en expliquant son caractère « phénoménologique ». Justifier l'existence d'un flux de particules et son orientation relative vis-à-vis du gradient de concentration.

La loi de Fick ne faisant apparaître que les variations spatiales de la concentration particulaire à un instant t, il convient de la compléter par une équation de bilan lorsque le flux de particules varie au cours du temps. Considérons un cylindre infiniment long, de section S constante, parallèle à la direction Ox de la diffusion.

2. Effectuer un bilan de matière sur un système que l'on explicitera, pour établir une relation traduisant la conservation du nombre de particule. En déduire l'équation de la diffusion

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}.$$

3. Par une analyse dimensionnelle, établir une relation qualitative exprimant la longueur caractéristique L du phénomène de diffusion en fonction de l'ordre de grandeur τ de sa durée et du coefficient de diffusion D.

4. Réécrire l'équation de la diffusion dans le cas où le coefficient de diffusion varie avec la concentration de l'espèce diffusante.

Pour illustrer la diffusion, considérons la situation expérimentale du dopage d'un semi-conducteur d'arsénure de gallium (GaAs), avec du silicium. À l'instant $t = 0$, on introduit brusquement en $x = 0$, à la surface d'une plaquette de GaAs, N_0 atomes de silicium par unité de surface. La plaquette est considérée comme un milieu semi-infini. L'analyse du régime instationnaire montre que le nombre d'atomes de silicium $n(x,t)$ par unité de volume à l'abscisse x et à l'instant t s'écrit

$$n(x,t) = \frac{K}{\sqrt{t}}\exp\left(-\frac{ax^2}{t}\right).$$

5. Établir la relation entre a et D pour que la répartition d'atomes $n(x,t)$ soit solution de l'équation de la diffusion établie en **2.**
Traduire la conservation du nombre d'atomes introduits et, par le changement de variable $u = \dfrac{x}{2\sqrt{Dt}}$, en se référant aux compléments mathématiques en fin d'énoncé, déterminer la valeur de K en fonction de N_0 et D.

Le schéma suivant (figure 1) traduit le résultat du dopage de la plaquette de GaAs : l'évolution de la distribution des atomes de silicium est tracée en fonction de l'abscisse x à différents instants :

6. Analyser la forme des courbes obtenues. Que vaut l'aire sous chacune des courbes ? Déterminer, à un instant t donné (en adoptant par exemple $t = 1$ h) la profondeur d'implantation L des atomes de silicium qui correspond à la moitié de la concentration présente en $x = 0$ à cet instant (il s'agit due la demi-largeur à mi-hauteur).

7. Proposer un mode de détermination du coefficient de diffusion D du silicium dans GaAs.
Estimer l'ordre de grandeur du coefficient de diffusion D.

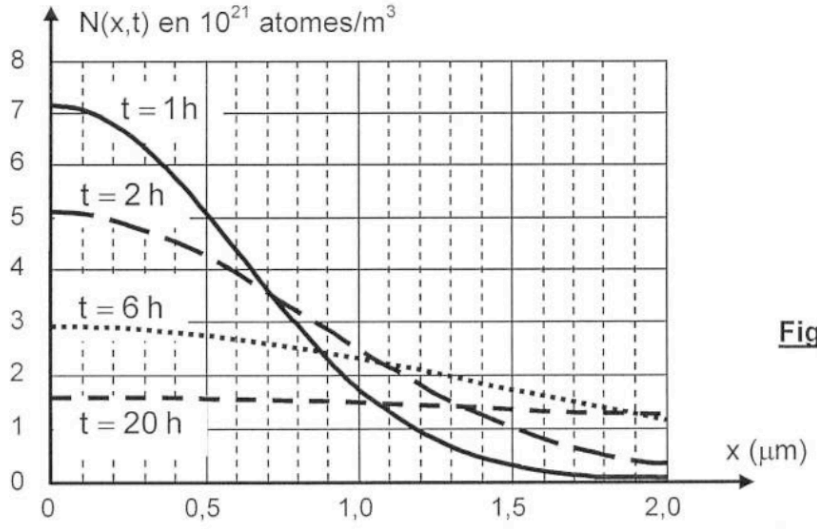


Figure 1

2 Diffusion des molécules d'un colorant entre deux solutions

On étudie la diffusion de molécules de colorant entre deux solutions aqueuses qui, à l'instant initial, ne possèdent pas la même concentration volumique. Une cuve d'épaisseur d et de grandes dimensions dans les deux autres orientations, est constituée de deux bacs de même volume remplis d'une solution contenant des molécules d'un même colorant, et séparés par une mince cloison située en $z = 0$. De part et d'autre de ce plan de séparation, les concentrations sont uniformes et valent respectivement C_1 pour $z < 0$ et $C_2 < C_1$ pour $z > 0$ (figure 2).

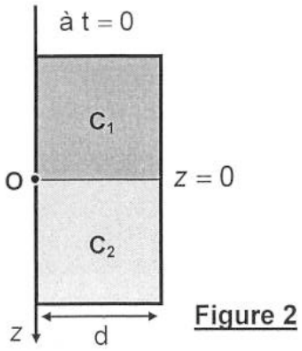


Figure 2

À l'instant $t = 0$, la cloison est brusquement retirée et les molécules diffusent, conduisant à une concentration $C(z,t)$ en un point de cote z et à l'instant t. Très loin du plan $z = 0$, et pour des temps élevés, les concentrations conservent leurs valeurs initiales :

$$C(-\infty, t) = C_1 \quad et \quad C(+\infty, t) = C_2\,.$$

*L'équation de la diffusion, étudiée dans la partie précédente, admet ici pour solution la **fonction erreur** (détaillée en fin d'énoncé) :*

$$\mathrm{erf}(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^u \exp(-s^2)\,\mathrm{d}s \quad avec \quad u = \frac{z}{2\sqrt{Dt}},$$

où D est le coefficient de diffusion des molécules de colorant dans la solution, supposé indépendant de la concentration.

8. Comparer la variation d'énergie potentielle d'une molécule de colorant, de masse molaire M_c, lors d'un déplacement dans le champ de pesanteur de l'ordre de la hauteur h de la cuve, à l'énergie d'agitation thermique $k_B T$ de cette molécule.

En tirer la conclusion utile pour la suite du problème, en utilisant les données suivantes ;

$M_c = 100\ \mathrm{g\cdot mol^{-1}}$, $h = 10$ cm, $g \approx 10$ m, $\mathcal{N}_A = 6 \times 10^{23}\ \mathrm{mol^{-1}}$, $k_B = 1{,}33 \times 10^{-23}\ \mathrm{J\cdot K^{-1}}$ et $T = 300$ K.

9. Présumer, dans effectuer de calcul, de la concentration attendue à l'interface des deux bacs lorsque le phénomène de diffusion est achevé.

Par continuité en $z = 0$, la concentration dans chaque domaine peut être décrite par une expression de la forme $C(z,t) = A\,\mathrm{erf}(u) + B$, A et B étant deux constantes.

10. Déterminer les constantes A et B à parti des conditions aux limites, puis écrire la loi de répartition de la concentration $C(z,t)$.

11. Tracer l'allure du profil de concentration $C(z,t)$ à trois instants successifs : $t = 0$, t_1, puis $t_2 > t_1$.

Commenter ces tracés.

3 Détermination expérimentale du coefficient de diffusion

L'indice de réfraction n d'une solution est, en première approximation, une fonction affine de la concentration du colorant en solution et peut s'écrire $n(z,t) = n_0 + K\,C(z,t)$, n_0 et K étant des constantes positives.

12. Exprimer la constante K en fonction des indices n_1, n_2 et des concentrations C_1 et C_2 des deux solutions, sachant qu'à la limite on a $n(C = C1) = n_1$ et $n(C = C_2) = n_2$.

13. Déterminer le gradient d'indice $\overrightarrow{\text{grad}}\,n$ associé aux variations de l'indice n dns la cuve, puis sa composante sur l'axe Oz en fonction de n_1, n_2, D, z et t. EN quelle position cette composante est-elle maximale? Donner sa valeur correspondante.

14. Représenter l'allure de cette fonction à trois instants successifs : t_0, t_1, puis $t_2 > t_1$. Commenter ces tracés.

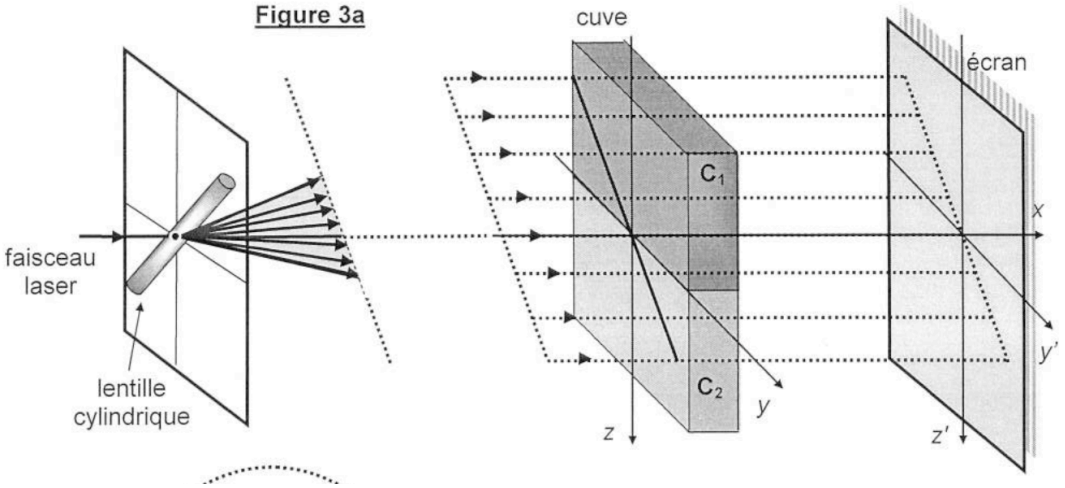
Un faisceau laser est élargie grâce à une lentille cylindrique inclinée à 45 ° *par rapport à la verticale pour former une nappe laser allongée. Ces rayons lumineux sont envoyés perpendiculairement à une face de la cuve de façon que les différentes hauteurs dans la solution soir traversées par les rayons le long d'une diagonale de la face d'entrée. Cette diagonale est inclinée à* 45 ° *par rapport au plan horizontal.*
Un écran, parallèle à la cuve, récupère les impacts des rayons après la traversée de la cuve. Selon l'optique des milieux inhomogènes, les rayons lumineux sont déviés dans la cuve et suivent une trajectoire courbe, dont le rayon de courbure R s'exprime comme

$$\frac{1}{R} \approx \frac{1}{n}\frac{\partial n(z,t)}{\partial z}.$$

Lors de sa traversée dans la solution, le rayon lumineux est donc dévié d'un angle α tel que

$$\alpha \approx \tan\alpha \approx \frac{d}{R}.$$

Figure 3a



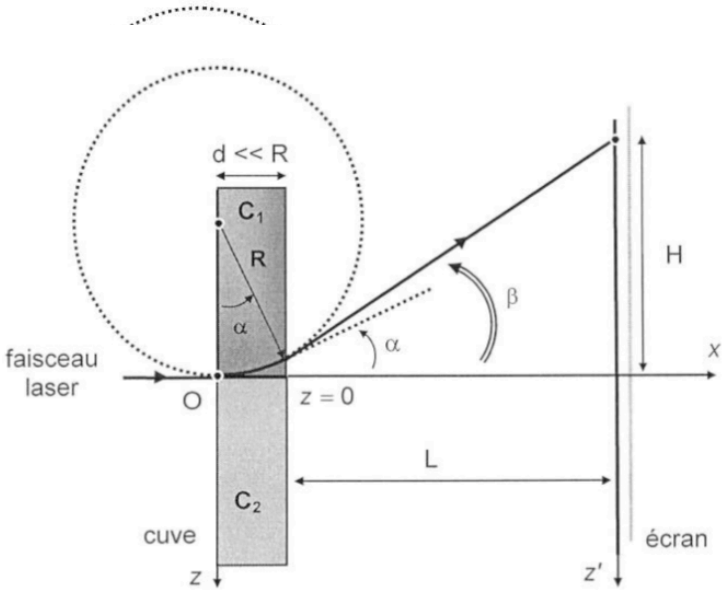


Figure 3b

15. Préciser pour quelle valeur de z se réalise la déviation maximale du rayon lumineux sur l'écran.

Le rayon lumineux subit une déviation à la traversée de la paroi de sortie de la cuve dont l'épaisseur en verre est négligeable. Le rayon émerge de la cuve pour passer dans l'air (d'indice optique $n_a = 1$) avec un angle de réfraction β.

16. Réaliser un schéma illustrant la trajectoire du rayon lumineux à la traversée de la paroi de la cuve en verre d'épaisseur supposée nulle ; faire apparaître les angles α et β, puis évaluer l'angle β en sortie de cuve.

En déduire la déflexion verticale globale H du rayon en fonction de d, L et $\dfrac{\partial n(z,t)}{\partial z}$ en se plaçant dans l'approximation des petits angles.

17. Exprimer la déflexion verticale maximale $H_{\max}$ observée sur l'écran en fonction de D, L, d, n_1, n_2 et du temps t.

Préconiser, en décrivant l'expérimentation et en représentant l'aspect sur l'écran, une méthode de détermination du coefficient de diffusion D.

Quel(s) paramètre(s) influe(nt) majoritairement sur la précision de détermination du coefficient de diffusion ?

Annexe mathématique

➤ Définition de la **fonction erreur** (*error function*) : $\operatorname{erf}(x) = \dfrac{2}{\sqrt{\pi}} \displaystyle\int_0^x \exp\left(-s^2\right) \mathrm{d}s$.

➤ Propriétés de $\operatorname{erf}(x)$:

$$\operatorname{erf}(x) = -\operatorname{erf}(-x)\ ;\ \operatorname{erf}(0) = 0\ ;\ \operatorname{erf}(\pm\infty) = \pm 1$$

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} \exp\left(-s^2\right) \mathrm{d}s\ ;\ \frac{\mathrm{d}[\operatorname{erf}(x)]}{\mathrm{d}x} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-x^2\right)$$

➤ Intégrale d'Euler : $\displaystyle\int_0^{\infty} \exp\left(-s^2\right) \mathrm{d}s = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$.

➤ Représentation de la fonction erreur :

