

**D1-TD**

# Diffusion de particules

## D1 – 01 Petits exercices indépendants

- 1) Donner les caractéristiques d'un phénomène de diffusion et en proposer des exemples.
- 2) Décrire des trajectoires microscopiques de particules. Que représente la densité de flux  $\vec{j}$  ?
- 3) Que représente le signe « $-$ » dans la loi de Fick ? Quelle est la dimension de  $\vec{j}$  ? de  $D$  ? de  $\overrightarrow{\text{grad}} n$  ?
- 4) On considère un milieu unidimensionnel qui crée  $\sigma$  particules par unité de volume et de temps. Construire l'équation de conservation avec ce terme source supplémentaire.
- 5) Une cheminée libère des particules qui diffusent dans l'atmosphère environnante. On étudie un régime stationnaire et on utilise un repère sphérique centré sur la pointe de la cheminée. En utilisant la conservation du flux de particules, déterminer la forme la densité de flux  $\vec{j}$  en considérant qu'il prend la forme  $j(r) \vec{e}_r$ .
- 6) Retrouver la forme de la densité de flux  $\vec{j}$  en utilisant cette fois l'équation de conservation locale et la formule, valable pour un champ  $\vec{A}$  de la forme  $A(r) \vec{e}_r$  en coordonnées sphériques

$$\text{div } \vec{A} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 A)}{\partial r}$$

- 7) Rappeler l'ordre de grandeur de la masse molaire de gaz habituels (air, diazote, hélium,...). Par des considérations microscopiques, retrouver l'ordre de grandeur du coefficient d'auto-diffusion des gaz dans les conditions normales de température et de pression ( $T = 293 \text{ K}$ ). Où intervient la pression ?

## D1 – 02 Taille critique d'une bactérie aérobie



Une bactérie est modélisée par une sphère de centre  $O$  fixe, de rayon  $R$  et de masse volumique  $\mu = 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ . La bactérie évolue dans l'eau d'un lac et on note  $n(r)$  le nombre de molécules de dioxygène dissous par unité de volume à la distance  $r > R$ . Dans l'eau, le dioxygène diffuse avec un coefficient  $D = 2 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  et le régime est stationnaire. Loin de la bactérie, la concentration volumique molaire en dioxygène dissous vaut  $c_\infty = 0,2 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$ .

- 1) Exprimer le nombre  $\phi(r)$  de molécules de dioxygène traversant la sphère de centre  $O$  et de rayon  $r > R$  dans le sens des  $r$  croissants par unité de temps. Justifier que  $\phi(r)$  ne dépend pas de  $r$ . En déduire l'expression de  $n(r)$  en fonction de  $\phi$ ,  $D$ ,  $R$ ,  $c_\infty$  et du nombre d'Avogadro  $\mathcal{N}_A$ .
- 2) La consommation en dioxygène de la bactérie est proportionnelle à sa masse avec un taux massique horaire  $\mathcal{A} = 0,02 \text{ mol} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ . Exprimer  $\phi$  en fonction de  $\mu$ ,  $R$ ,  $\mathcal{A}$  et  $\mathcal{N}_A$ .
- 3) En déduire l'expression de  $n(R)$  en fonction de  $\mu$ ,  $D$ ,  $R$ ,  $c_\infty$ ,  $\mathcal{A}$  et  $\mathcal{N}_A$ . Montrer que la bactérie ne peut survivre que si son rayon est inférieur à un rayon critique  $R_c$ . Application numérique.

## D1 – 03 Réacteur nucléaire



On considère des neutrons de densité volumique  $n(x, t)$  à l'intérieur d'un réacteur nucléaire. Leur coefficient de diffusion dans le milieu est noté  $D$ . Les neutrons subissent un grand nombre de chocs avec les atomes du milieu. On modélise le réacteur par un cylindre d'axe  $(Ox)$ , de section  $S$ , semi-infini (occupant la partie  $x > 0$ ). On suppose le phénomène unidimensionnel.

- 1) En considérant un volume élémentaire compris entre  $x$  et  $x + dx$ , démontrer l'équation de la diffusion.
- 2) Lors des chocs, les neutrons peuvent être absorbés par les atomes du milieu. On suppose qu'entre  $t$  et  $t + dt$ , chaque neutron a une probabilité  $dt/\tau$  d'être absorbé. Reprendre la question précédente et trouver la nouvelle équation aux dérivées partielles vérifiée par  $n(x, t)$ .
- 3) En  $x = 0$ , le cylindre est au contact d'un combustible nucléaire dégageant  $j_0$  neutrons par unité de temps et de surface. Calculer  $n(x)$  en régime permanent pour  $x > 0$ . On introduira la grandeur  $d = \sqrt{D\tau}$  dont on expliquera le sens physique.

## D1 – 04 Diffusion d'un pic de concentration

On considère un tube de longueur infinie. Le tube est suffisamment fin (section  $S$ ) pour qu'on considère que le problème est unidimensionnel. Le tube est initialement vide de particules diffusantes. À  $t = 0$ , on injecte  $N$  particules diffusantes en  $x = 0$ . On note  $D$  leur coefficient de diffusion.

1) Montrer que la densité de particules

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

est solution de l'équation de diffusion pour une valeur particulière de  $a$  que l'on déterminera.

- 2) Déterminer la constante  $A$ . Tracer l'allure de  $n(x, t)$  en fonction de  $x$  pour différents temps  $t$ .
- 3) Donner la distribution  $p(x, t) dx$  de probabilité pour une particule d'être en  $x$  à l'instant  $t$ .
- 4) Calculer la valeur moyenne  $\langle x \rangle$  et la valeur quadratique moyenne  $\langle x^2 \rangle$  de la distribution de probabilité.
- 5) On donne  $D = 2 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ . Estimer le temps typique nécessaire pour que la diffusion atteigne une distance de 1 cm.

**Calcul d'intégrales gaussiennes :**

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-u^2) du = \sqrt{\pi} \quad \text{et} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \exp(-u^2) du = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

## D1 – 05 Relation d'Einstein

On cherche à obtenir la dépendance en température  $T$  du coefficient de diffusion de particules colloïdales de masse  $m$  et de rayon  $R$  dans un liquide. On étudie pour cela un cylindre d'axe vertical ( $Oz$ ) ascendant, de section  $S$ . Le problème est considéré unidimensionnel, et on considère le régime stationnaire.

1) Sous l'effet de leur poids, les particules sédimentent. Leur densité à l'équilibre prend alors la forme

$$n(z) = n_0 \exp\left(-\frac{mgz}{k_B T}\right)$$

avec  $g = 9,81 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$  l'accélération de la pesanteur et  $k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$  la constante de Boltzmann. Déduire la densité de flux diffusif  $\vec{j}_d(z)$  en appliquant la loi de Fick.

2) On observe une particule « moyenne ». Celle-ci est soumise à son poids, et les chocs avec les particules du milieu sont modélisés par une force moyenne de frottement fluide  $\vec{f} = -6\pi\eta R \vec{v}$ , avec  $\eta$  la viscosité du liquide. En appliquant le principe fondamental de la dynamique à cette particule moyenne, déterminer la vitesse moyenne  $\vec{v}_m$  de sédimentation des particules colloïdales en régime stationnaire.

3) Cette vitesse moyenne conduit à une densité de flux convectif  $\vec{j}_c(z) = n(z) \vec{v}_m$ . En régime statique, les particules ne bougent pas en moyenne. En déduire une relation entre  $\vec{j}_c$  et  $\vec{j}_d$ .

4) Exprimer alors le coefficient de diffusion des particules colloïdales  $D$  en fonction de  $k_B$ ,  $T$ ,  $\eta$  et  $R$ .

5) Cette expression de  $D$ , due à Einstein (1905), est assez bien vérifiée même pour les très petites particules. Faire l'application numérique pour  $R = 1 \text{ nm}$  et  $\eta = 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$  (valeur typique pour l'eau) et commenter.

**D1 – 09** Dissolution d'un cristal de sel dans l'eau

On place un cristal de forme sphérique de centre  $O$  dans de l'eau (volume d'eau très grand). Le cristal se dissout progressivement ; dans l'eau, on note  $n(r)$  le nombre de molécules dissoutes par unité de volume en régime stationnaire. Le problème est à symétrie sphérique.

On note  $D$  le coefficient de diffusion des molécules dans l'eau. À la surface du cristal de rayon  $a$ ,  $n$  est constant égal à  $n_0$ . À l'infini,  $n$  tend vers 0.

- 1) Donner l'équation de conservation des molécules dissoutes.
- 2) En déduire le vecteur densité de courant de molécules.
- 3) En déduire la densité de molécules  $n(r)$ .
- 4) La diffusion se traduit par une perte de masse du cristal. Déterminer  $dm/dt$ , le taux de variation temporel de la masse du cristal connaissant  $M$  la masse molaire des molécules du cristal.
- 5) En déduire  $da/dt$  connaissant la masse volumique du cristal  $\mu$ .
- 6) Déterminer le temps au bout duquel le cristal s'est complètement dissous.

**Données :** On donne la divergence en sphérique pour un vecteur de la forme  $\vec{A} = A(r) \vec{e}_r$

$$\operatorname{div} \vec{A} = \frac{1}{r^2} \frac{d(r^2 A)}{dr}$$

ainsi que le gradient en sphérique pour un champ scalaire de la forme  $f(r)$

$$\vec{\operatorname{grad}} f(r) = \frac{df}{dr} \vec{e}_r$$

**D1 – 06** Diffusion dans un tuyau poreux

On s'intéresse à l'état stationnaire de diffusion gazeuse dans un tube cylindrique de rayon  $a$ , de très grande longueur  $L$ , les concentrations des molécules diffusantes étant maintenues constantes en  $x = 0$  à  $n_0$  et en  $x = L$  à  $n_1$ . On note  $D$  le coefficient de diffusion correspondant.

De plus le tube est légèrement poreux et des molécules diffusent vers l'extérieur à travers la paroi latérale du tube, d'épaisseur  $e \ll a$ , caractérisée par un coefficient de diffusion  $D' \ll D$ .

- 1) Effectuer le bilan de flux de molécules à l'état stationnaire dans une tranche  $(x, x + dx)$  ; en déduire une relation entre la densité locale de courant  $j_n$  dans le tube et la concentration  $n$ . On fera l'hypothèse qu'on peut approximer la loi de Fick à travers les parois latérales à l'aide d'une différence finie, et que la concentration de particules diffusantes à l'extérieur du tube peut être considérée nulle.

- 2) Écrire l'équation de diffusion qui régit  $n(x)$  à l'état stationnaire. La résoudre en tenant compte des conditions aux limites ; on posera

$$\alpha = \sqrt{\frac{2 D'}{a e D}}$$

On étudiera le cas  $\alpha L \gg 1$ .

**D1 – 07** Réacteur nucléaire 2

On étudie un réacteur nucléaire à une dimension : la densité volumique de neutrons est  $n(x, t)$ . En moyenne,  $n/\tau$  neutrons sont absorbés par unité de temps et de volume ; et, pour un neutron absorbé,  $K$  neutrons sont produits ( $K > 1$ ). Par ailleurs, leur diffusion dans le milieu satisfait à la loi de Fick, le coefficient de diffusion étant noté  $D$ . Le réacteur est situé entre les plans d'abscisses  $x = -a$  et  $x = +a$ . On impose  $n(\pm a, t) = 0$ .

- 1) Déterminer l'équation aux dérivées partielles vérifiée par  $n(x, t)$ .
- 2) Déterminer  $n(x)$  en régime permanent sachant que  $n(0) = n_0$ .
- 3) En régime quelconque, on cherche la solution sous la forme

$$n(x, t) = f(x) \exp\left(-\frac{t}{T}\right)$$

Déterminer  $f(x)$  et  $T$ . Discuter la stabilité du réacteur en fonction de sa taille  $L = 2a$ .

## D1 – 08 Évaporation d'éther

Un bécher cylindrique de hauteur  $H = 8$  cm contient de l'éther liquide. À l'instant initial l'éther remplit une hauteur  $h_0 = 5$  cm. À l'interface  $h(t)$ , la pression partielle en éther est égale à sa pression de vapeur saturante à la température ambiante  $T = 293$  K et à la sortie du bécher, la pression partielle de l'éther est négligeable (il est évacué par l'air); les vapeurs d'éther sont assimilées à un gaz parfait.

La durée caractéristique de diffusion de l'éther dans l'air étant très inférieure à la durée caractéristique de la vaporisation de l'éther, elle s'effectue en régime quasi-permanent.

- 1) Déterminer la densité particulaire  $n(z)$  d'éther entre l'interface  $z = h(t)$  et l'extrémité  $z = H$ .
- 2) En déduire le flux  $\Phi$  d'éther à l'interface, en notant  $S$  la section du bécher.
- 3) Établir l'équation différentielle vérifiée par la hauteur d'éther  $h(t)$  et l'intégrer.
- 4) En déduire le temps  $\tau$  nécessaire à l'évaporation totale de l'éther, et commenter. L'hypothèse du régime quasi-permanent est-elle justifiée?

**Données :** masse molaire de l'éther  $M = 74,1$  g·mol<sup>-1</sup>; masse volumique de l'éther  $\mu = 626$  kg·m<sup>-3</sup>; coefficient de diffusion de l'éther dans l'air  $D = 1,5 \times 10^{-5}$  m<sup>2</sup>·s<sup>-1</sup>; pression de vapeur saturante de l'éther à  $T = 293$  K  $P_{\text{sat}} = 0,58$  bar.