

# Diffusion des particules

PC Lycée Dupuy de Lôme

- 1 Phénomène de diffusion
  - Observation
  - Flux de particules
  - Densité de flux de particules
  - Loi de Fick
- 2 Régime stationnaire - Bilan Global de particules
  - Conservation du flux
  - Étude de cas
- 3 Régime quelconque - Bilan local de particules
- 4 Équation de la diffusion
  - Cas unidimensionnel axial en l'absence de sources
  - Longueur de diffusion
- 5 Aspect microscopique
  - Mouvement brownien
  - Libre parcours moyen
  - Coefficient de diffusion

## 6 Sitographie





## Flux de particules

Le flux de particules à travers une surface  $S$  correspond au nombre de particules traversant la surface par unité de temps



$$\Phi = \frac{dN}{dt}$$

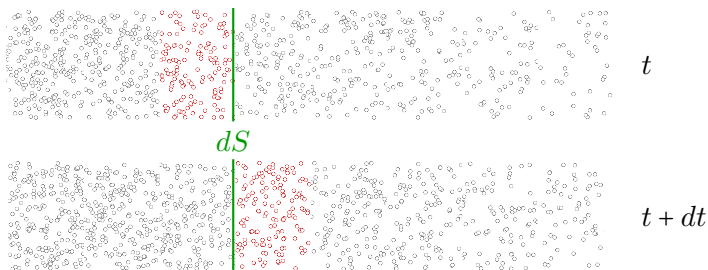
## Vecteur densité de flux

En un point  $M$ , on définit le vecteur densité de flux tel que le flux élémentaire à travers une surface  $dS$  en  $M$  soit :



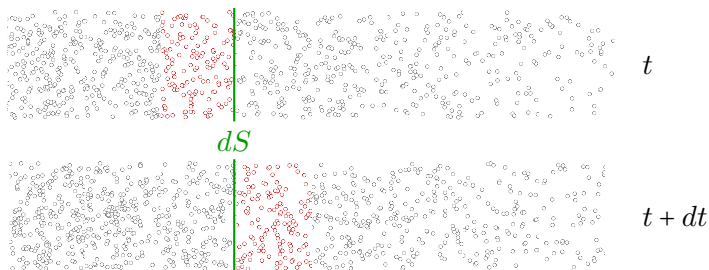
$$d\Phi = \vec{j} \cdot \vec{dS}$$

$n(x, t)$  : densité volumique de particules diffusantes



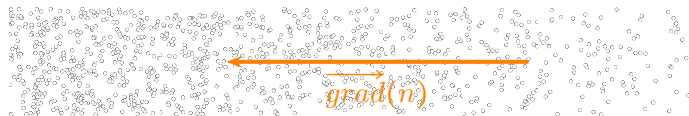
En comptant le nombre de particules traversant  $dS$  pendant la durée  $dt$ ,  
on peut en déduire l'expression de  $\vec{j}(x, t)$

$n(x, t)$  : densité volumique de particules diffusantes



En comptant le nombre de particules traversant  $dS$  pendant la durée  $dt$ , on peut en déduire l'expression de  $\vec{j}(x, t)$

$$\Rightarrow \vec{j} = n(x, t) \cdot \overrightarrow{v(x, t)}$$



D'un point de vue empirique :

- Le flux de particule se fait
- L'intensité du flux de particules est liée

### Principe d'homogénéisation

Si la répartition des particules diffusantes n'est pas homogène, un courant de particules apparaît afin de tendre vers une répartition homogène.



D'un point de vue empirique :

- Le flux de particule se fait dans le sens opposé au gradient de particules
- L'intensité du flux de particules est liée

### Principe d'homogénéisation

Si la répartition des particules diffusantes n'est pas homogène, un courant de particules apparaît afin de tendre vers une répartition homogène.





D'un point de vue empirique :

- Le flux de particule se fait dans le sens opposé au gradient de particules
- L'intensité du flux de particules est liée à la norme du gradient.

### Principe d'homogénéisation

Si la répartition des particules diffusantes n'est pas homogène, un courant de particules apparaît afin de tendre vers une répartition homogène.

## Loi de Fick

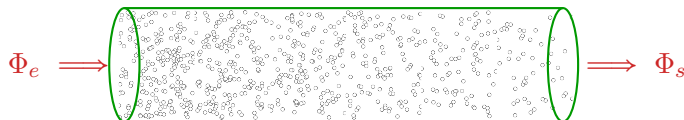
Cette loi empirique relie en un point  $M$  la densité de flux de particules au gradient de concentration, en fonction du coefficient de diffusion  $D$



$$\vec{j} = -D \cdot \overrightarrow{\text{grad}}(n)$$

$D$  dépend des particules diffusantes et du milieu.

Phase	Gaz	Gaz	Gaz	Liquide	Liquide	Solide
Particules diffusantes	$H_2$	$O_2$	$D_2$	$H_2$	$O_2$	$Al$
Support	Air	Air	$H_2$	$H_2O$	$H_2O$	$Cu$
$D$ en $m^2 \cdot s^{-1}$	$7, 12 \cdot 10^{-5}$	$2, 06 \cdot 10^{-5}$	$1, 24 \cdot 10^{-4}$	$5, 13 \cdot 10^{-9}$	$1, 80 \cdot 10^{-9}$	$1, 30 \cdot 10^{-30}$



## Bilan de particules en régime stationnaire

En régime stationnaire, le flux total de particules entrant  $\Phi_e$  est égal au flux total de particules sortant  $\Phi_s$

- $\Phi_e$  : le vecteur  $\vec{dS}_e$  est dirigé vers le volume étudié.
- $\Phi_s$  : le vecteur  $\vec{dS}_s$  est dirigé vers l'extérieur.

## Diffusion unidimensionnelle axiale

## Diffusion unidimensionnelle radiale

Cas particulier unidimensionnel axial :  $n(M, t) = n(x, t)$



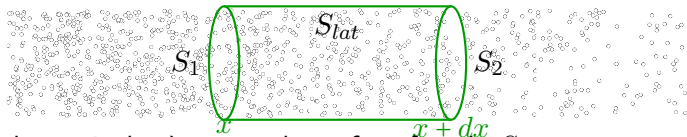
Flux entrant de particules à travers la surface fermée  $S$

- Au niveau de  $S_1$ , entrent pendant  $dt$  :  $\delta N_1 =$
- Au niveau de  $S_2$ , sortent pendant  $dt$  :  $\delta N_2 =$
- Au niveau de  $S_{lat}$ , sortent pendant  $dt$  :  $\delta N_{lat} =$

Évolution du nombre de particules dans le volume :

- A l'instant  $t$  :  $N(t) =$
- A l'instant  $t + dt$  :  $N(t + dt) =$

Cas particulier unidimensionnel axial :  $n(M, t) = n(x, t)$



Flux entrant de particules à travers la surface fermée  $S$

- Au niveau de  $S_1$ , entrent pendant  $dt$  :  $\delta N_1 = j(x, t) \cdot S_1 \cdot dt$
- Au niveau de  $S_2$ , sortent pendant  $dt$  :  $\delta N_2 =$
- Au niveau de  $S_{lat}$ , sortent pendant  $dt$  :  $\delta N_{lat} =$

Évolution du nombre de particules dans le volume :

- A l'instant  $t$  :  $N(t) =$
- A l'instant  $t + dt$  :  $N(t + dt) =$

Cas particulier unidimensionnel axial :  $n(M, t) = n(x, t)$



Flux entrant de particules à travers la surface fermée  $S$

- Au niveau de  $S_1$ , entrent pendant  $dt$  :  $\delta N_1 = j(x, t) \cdot S_1 \cdot dt$
- Au niveau de  $S_2$ , sortent pendant  $dt$  :  $\delta N_2 = j(x + dx, t) \cdot S_2 \cdot dt$
- Au niveau de  $S_{lat}$ , sortent pendant  $dt$  :  $\delta N_{lat} =$

Évolution du nombre de particules dans le volume :

- A l'instant  $t$  :  $N(t) =$
- A l'instant  $t + dt$  :  $N(t + dt) =$



Cas particulier unidimensionnel axial :  $n(M, t) = n(x, t)$



Flux entrant de particules à travers la surface fermée  $S$

- Au niveau de  $S_1$ , entrent pendant  $dt$  :  $\delta N_1 = j(x, t) \cdot S_1 \cdot dt$
- Au niveau de  $S_2$ , sortent pendant  $dt$  :  $\delta N_2 = j(x + dx, t) \cdot S_2 \cdot dt$
- Au niveau de  $S_{lat}$ , sortent pendant  $dt$  :  $\delta N_{lat} = 0$

Évolution du nombre de particules dans le volume :

- A l'instant  $t$  :  $N(t) =$
- A l'instant  $t + dt$  :  $N(t + dt) =$

Cas particulier unidimensionnel axial :  $n(M, t) = n(x, t)$



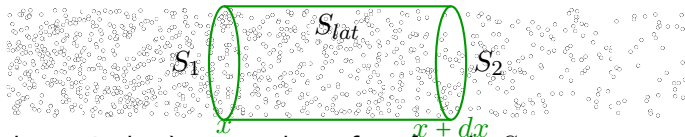
Flux entrant de particules à travers la surface fermée  $S$

- Au niveau de  $S_1$ , entrent pendant  $dt$  :  $\delta N_1 = j(x, t) \cdot S_1 \cdot dt$
- Au niveau de  $S_2$ , sortent pendant  $dt$  :  $\delta N_2 = j(x + dx, t) \cdot S_2 \cdot dt$
- Au niveau de  $S_{lat}$ , sortent pendant  $dt$  :  $\delta N_{lat} = 0$

Évolution du nombre de particules dans le volume :

- A l'instant  $t$  :  $N(t) =$
- A l'instant  $t + dt$  :  $N(t + dt) =$

Cas particulier unidimensionnel axial :  $n(M, t) = n(x, t)$



Flux entrant de particules à travers la surface fermée  $S$

- Au niveau de  $S_1$ , entrent pendant  $dt$  :  $\delta N_1 = j(x, t) \cdot S_1 \cdot dt$
- Au niveau de  $S_2$ , sortent pendant  $dt$  :  $\delta N_2 = j(x + dx, t) \cdot S_2 \cdot dt$

Évolution du nombre de particules dans le volume :

- A l'instant  $t$  :  $N(t) =$
- A l'instant  $t + dt$  :  $N(t + dt) =$

Cas particulier unidimensionnel axial :  $n(M, t) = n(x, t)$



Flux entrant de particules à travers la surface fermée  $S$

- Au niveau de  $S_1$ , entrent pendant  $dt$  :  $\delta N_1 = j(x, t) \cdot S_1 \cdot dt$
- Au niveau de  $S_2$ , sortent pendant  $dt$  :  $\delta N_2 = j(x + dx, t) \cdot S_2 \cdot dt$

Évolution du nombre de particules dans le volume :

- A l'instant  $t$  :  $N(t) = n(x, t) \cdot S \cdot dx$
- A l'instant  $t + dt$  :  $N(t + dt) =$

Cas particulier unidimensionnel axial :  $n(M, t) = n(x, t)$



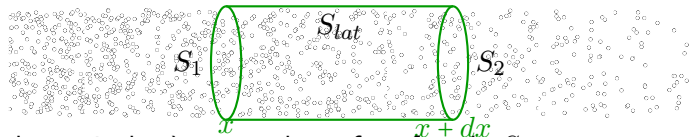
Flux entrant de particules à travers la surface fermée  $S$

- Au niveau de  $S_1$ , entrent pendant  $dt$  :  $\delta N_1 = j(x, t) \cdot S_1 \cdot dt$
- Au niveau de  $S_2$ , sortent pendant  $dt$  :  $\delta N_2 = j(x + dx, t) \cdot S_2 \cdot dt$

Évolution du nombre de particules dans le volume :

- A l'instant  $t$  :  $N(t) = n(x, t) \cdot S \cdot dx$
- A l'instant  $t + dt$  :  $N(t + dt) = n(x, t + dt) \cdot S \cdot dx$

Cas particulier unidimensionnel axial :  $n(M, t) = n(x, t)$



Flux entrant de particules à travers la surface fermée  $S$

- Au niveau de  $S_1$ , entrent pendant  $dt$  :  $\delta N_1 = j(x, t) \cdot S_1 \cdot dt$
- Au niveau de  $S_2$ , sortent pendant  $dt$  :  $\delta N_2 = j(x + dx, t) \cdot S_2 \cdot dt$

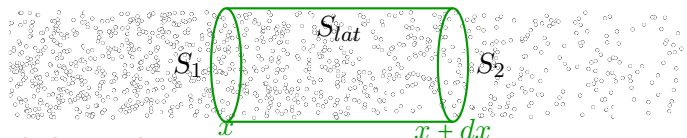
Évolution du nombre de particules dans le volume :

- A l'instant  $t$  :  $N(t) = n(x, t) \cdot S \cdot dx$
- A l'instant  $t + dt$  :  $N(t + dt) = n(x, t + dt) \cdot S \cdot dx$

Conservation de la matière :

$$N(t + dt) = N(t) + \delta N_e - \delta N_s - \delta N_{lat}$$

Cas particulier unidimensionnel axial :  $n(M, t) = n(x, t)$



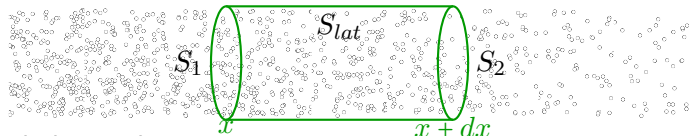
Conservation de la matière :

$$N(t + dt) = N(t) + \delta N_e - \delta N_s - \delta N_{lat}$$

$$n(x, t + dt) \simeq n(x, t) + \frac{\partial n}{\partial t} \cdot dt$$

$$j(x + dx, t) \simeq j(x, t) + \frac{\partial j}{\partial x} \cdot dx$$

Cas particulier unidimensionnel axial :  $n(M, t) = n(x, t)$



Conservation de la matière :

$$N(t + dt) = N(t) + \delta N_e - \delta N_s - \delta N_{lat}$$

bilan local

Dans le cas unidimensionnel, en l'absence de sources :

$$\Rightarrow \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0$$



En l'absence de sources, on a :

- Le bilan local :  $\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial j(x,t)}{\partial x} = 0$

- La loi de Fick :  $\vec{j} = -D \cdot \overrightarrow{\text{grad}}(n) = -D \cdot \frac{\partial n}{\partial x} \cdot \vec{e}_x$

## Équation de la diffusion

Dans le cas unidimensionnel et en l'absence de sources, la densité volumique de particules vérifie la l'équation

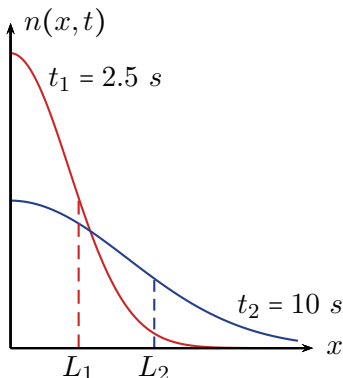
$$\triangleq \quad \frac{\partial n}{\partial t} - D \cdot \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = 0$$

On raisonne ici à partir d'une analyse dimensionnelle

Pour une durée  $\Delta t$ , les particules se seront diffusées sur une distance  $L$ .

En ordre de grandeur, on peut considérer que :

- $\frac{\partial n}{\partial t} \equiv \frac{\Delta n}{\Delta t}$
- $\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \equiv \frac{\Delta n}{L^2}$



longueur de diffusion

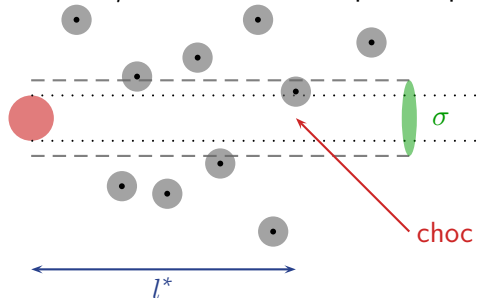
On relie la durée  $\Delta t$  à la longueur  $L$  de diffusion en régime transitoire par la relation

$$\Rightarrow L = \sqrt{D \cdot \Delta t}$$





On note  $\rho$  la densité volumique des particule du support de diffusion.



Sauf mention contraire :

$$\sigma = \pi \cdot (r_{part\ dif.} + r_{part\ sup.})^2$$

$$l^* \cdot \sigma \cdot \rho = 1$$

## Libre parcours moyen

C'est la distance moyenne parcourue par une particule entre deux collisions successives

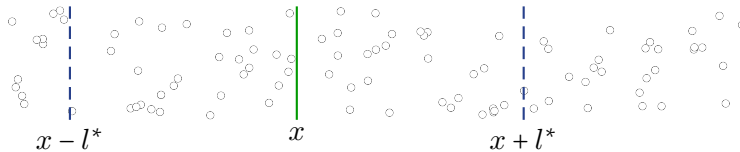


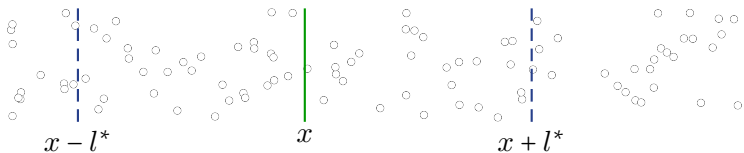
$$l^* = \frac{1}{\sigma \cdot \rho}$$

## Hypothèses d'étude

- On considère trois directions orthogonales de mouvement des particules, avec une équiprobabilité pour chacun des sens à l'issue d'une collision (mouvement Brownien)
- On considère une vitesse uniforme  $v^*$  d'agitation
- On suppose que toutes les collisions ont lieu aux mêmes instants

On va alors effectuer un bilan de particules traversant une surface  $dS$  pendant la durée  $\tau$  séparant deux collisions.





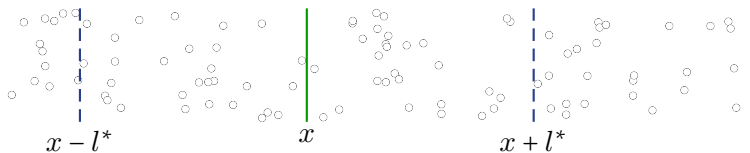
$$\bullet \delta N_{g \rightarrow d} = \frac{1}{6} n \left( x - \frac{l^*}{2}, t \right) \cdot l^* \cdot dS$$

$$\bullet \delta N_{d \rightarrow g} = \frac{1}{6} n \left( x + \frac{l^*}{2}, t \right) \cdot l^* \cdot dS$$

$$\delta N = \delta N_{g \rightarrow d} - \delta N_{d \rightarrow g}$$

$$d\Phi = \frac{\delta N}{\tau} = -\frac{1}{6 \cdot \tau} \cdot \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} \cdot l^{*2} \cdot dS = -\frac{1}{6} \cdot l^* \cdot v^* \cdot \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} dS$$





## Coefficient de diffusion

Par identification à la loi de Fick, on obtient le coefficient de diffusion

$$\Rightarrow D \equiv \frac{l^* \cdot v^*}{6}$$

- Mouvement Brownien :

[http ://www2.cndp.fr/themadoc/mouvbrown/mouvbrown.htm](http://www2.cndp.fr/themadoc/mouvbrown/mouvbrown.htm)