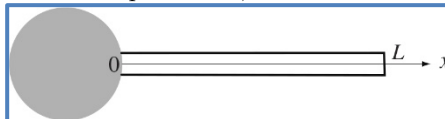


TH2 – Diffusion de particules

A - Travaux dirigés

TH21 – Diffusion de particules dans un axone

On considère une cellule sphérique, créatrice de particules, liée à un axone assimilé à un tuyau de longueur L.



Cette diffusion de particules est caractérisée par le coefficient de diffusion D. Il y a consommation de particules le long du tuyau avec le coefficient α , en moles par secondes et par mètres, uniforme et constant.

La concentration c en particules dans l'axone vérifie $c(x = 0) = c_0$.

1. Qu'est-ce qu'une loi phénoménologique ? Citer des exemples.
2. Établir l'équation de diffusion vérifiée par $c(x,t)$.
3. Quelle est la longueur maximale de l'axone en régime permanent ?

Rép : 1. Fick, Fourier, Arrhenius... 2. $\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \alpha$ 3°) $L_{max} = \frac{2SDc_0}{\alpha}$

TH22 – Diffusion dans un cylindre

On considère un cylindre d'axe Oz, de longueur L très grande devant le rayon R_2 . On creuse dans ce cylindre une cavité cylindrique de même axe, de rayon R_1 , remplie d'un gaz avec une densité particulaire n_1 maintenue constante. On néglige les effets de bord ce qui revient à considérer la diffusion radiale entre $r = R_1$ et $r = R_2$. On note D le coefficient de diffusion. L'opérateur laplacien en coordonnées cylindriques s'écrit :

$$\Delta f = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$$

1. Démontrer l'équation aux dérivées partielles sur n dans le cas à une dimension (variable notée x) en régime variable. En déduire la généralisation de cette équation avec l'opérateur laplacien.
2. On se place en régime stationnaire. Exprimer la densité particulaire $n(r)$ pour r compris entre R_1 et R_2 en fonction de n_1, r, D, R_1 et j_{D1} (densité de flux de particules pour $r = R_1$). En déduire le vecteur densité de flux de particules en fonction de j_{D1}, R_1 et r.

Rép : 1. $\frac{\partial n}{\partial t} = D \Delta n$ 2. $\vec{j}_D = j_{D1} \frac{R_1}{r} \vec{u}_r$

B – Exercices supplémentaires

TH23 – Perturbation sinusoïdale de concentration

Le coefficient de diffusion du sucre dans l'eau est noté D ; il est supposé indépendant de la concentration. Une solution sucrée possède, à l'instant $t = 0$, une concentration en sucre dépendant de l'abscisse x selon une loi de la forme :

$$c(x, t = 0) = c_0 + c_1 \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right)$$

où c_0, c_1 avec $c_1 < c_0$ et λ , sont des constantes.

L'évolution ultérieure, pour $t > 0$, de la concentration est cherchée sous la forme :

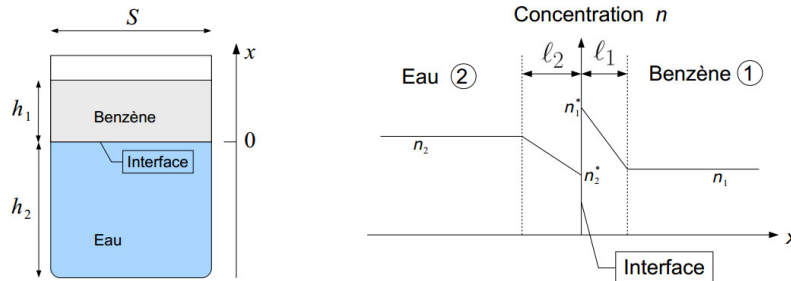
$$c(x, t) = c_0 + f(t) \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right)$$

1. Démontrer, à l'aide d'un bilan de particules, l'équation aux dérivées partielles vérifiée par la concentration $c(x, t)$ appelée équation de la diffusion.
2. Déterminer, en fonction de D et λ , l'équation différentielle du premier ordre vérifiée par la fonction $f(t)$. Résoudre cette équation en tenant compte des conditions initiales. Exprimer $f(t)$ en fonction de c_1, t et d'un temps caractéristique τ à écrire en fonction de D et λ . Vérifier l'unité de τ . Quel sens concret donnez-vous au paramètre τ ?
3. Représenter graphiquement, pour $t > 0$ donné, l'évolution de la concentration $c(x, t)$ en fonction de x à deux instants différents. Tracer également la distribution limite $c(x, \infty)$.

Rép : 1. ... 2. $f(t) = C_1 e^{-\frac{t}{\tau}}$ où $\tau = \frac{\lambda^2}{4\pi^2 D}$ 3. ...

TH24 – Partage entre deux solvants

Un b cher de section d'aire S contient de l'eau sur une hauteur h_2 et du benz ne sur une hauteur h_1 et on propose un mod le simplifi  pour l' tude cin tique du transfert vers le benz ne de l'iode I_2 contenu initialement dans l'eau. A un instant quelconque, on assimile la concentration de l'iode $n(x)$ en fonction de x au profil indiqu  ci-dessus : les concentrations dans l'eau et dans le benz ne sont not es respectivement n_2 et n_1 , et elles sont suppos es uniformes hormis dans une mince couche de diffusion appel e couche limite ; les  paisseurs de ces couches limites sont not es l_2 dans l'eau et l_1 dans le benz ne. Dans ces couches limites, la concentration varie affinement en fonction de x et l'on note n_1^* et n_2^* les concentrations dans le benz ne et dans l'eau au niveau de l'interface   un instant quelconque t .



Concentrations   un instant t

On suppose que la quantit  d'iode dans les couches limites est n gligeable devant celle contenue dans le reste du solvant et on n gligera  galement le volume de ces couches limites devant les volumes V_2 de l'eau et V_1 du benz ne.

Les coefficients de diffusion de l'iode dans l'eau et dans le benz ne sont not s respectivement D_2 et D_1 . La pesanteur est suppos e n gligeable.

1. R solution de l' quation de la diffusion en r gime permanent

- a) La loi de Fick s' crit : $\vec{j} = -D \frac{\partial n}{\partial x} \vec{u}_x$, en d duire l' quation de la diffusion en fonction de n et D .
- b) Dans le cas d'un r gime permanent, donner l'expression de $n(x)$ et du flux de mati re ϕ en fonction de $n(0) = n_1$, $n(l) = n_2$, D , S (surface travers e par les mol cules), l (longueur o  r gne la diffusion).

2. Justification du profil des concentrations

- a) On donne $n_1(t=0) = 0$ et $n_2(t=0) = n_0$. A l'aide d'un bilan de mati re, donner une relation entre n_1, n_2, n_0, h_1 & h_2 .
- b) On suppose que l'expression du flux de mati re ϕ ,  tablie en r gime permanent, est valable   chaque instant t . Donner deux expressions de la quantit  d'iode qui passe par unit  de temps de l'eau vers le benz ne.

3. Calcul du temps caract ristique de diffusion

Dans toute la suite, afin d'all ger l' criture, on prendra $D = D_1 = D_2$, $\frac{h_2}{h_1} = \frac{l_2}{l_1} = \alpha = 10$, et on ne conservera que

$D, h = h_1, l = l_1$ comme param tres.

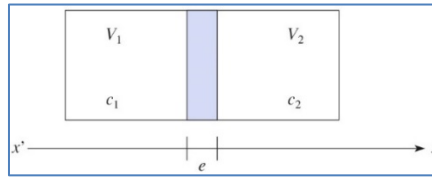
- a) On suppose que seul le ph nom ne de diffusion limite la vitesse de transfert et que l' quilibre chimique est r alis    chaque instant au niveau de l'interface : alors $n_1^* = Kn_2^*$, K est la constante de partage. D terminer n_1^* et n_2^* en fonction de n_2 .
- b) Donner l' quation diff rentielle v rifi e par $n_2(t)$. Montrer qu'il appara t une constante de temps τ que l'on donnera en fonction des param tres.
- c) Calculez τ . Conclure

Donn es : $D = 2,0 \cdot 10^{-9} m^2 s^{-1}, l = 2,0 mm, K = 500, h = 5,00 cm$.

R p : 1. a) $D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = \frac{\partial n}{\partial t}$ b) $\phi = \frac{DS}{l} \cdot (n_1 - n_2)$ 2. a) $n_0 h_2 = n_1 h_1 + n_2 h_2$ b) De l'interface vers le benz ne $\phi = \frac{D_1 S}{l_1} (n_1^* - n_1)$ et de l'eau vers l'interface $\phi = \frac{D_2 S}{l_2} (n_2 - n_2^*)$. 3. a) $n_2^* = \frac{\alpha^2 (n_0 - n_2) + n_2}{1 + \alpha K}$ et $n_1^* = Kn_2^*$ b) $\frac{dn_2}{dt} + \frac{n_2}{\tau} = \frac{D}{hl} \frac{n_0}{1 + \alpha K}$ o  $\tau = \frac{ahl}{D} \frac{1 + \alpha K}{\alpha + K}$ c) $\tau = 57j$

TH25 – Diffusion de molécules à travers une membrane

La diffusion de molécules à travers une membrane est très utilisée dans des domaines très divers, en médecine par exemple. On considère le dispositif représenté ci-dessous :



Les deux compartiments, séparés par une membrane verticale poreuse, contiennent une même solution moléculaire, mais à des concentrations molaires différentes C_1 & C_2 ($C_1 > C_2$). Leurs volumes constants seront notés respectivement V_1 & V_2 . La membrane, de surface S , d'épaisseur e , comporte par unité de surface n pores cylindriques d'axe horizontal normal à la paroi. Les pores sont supposés identiques. Dans chacun d'eux s'établit un flux macroscopique de molécules suivant Ox , de densité moléculaire j_D , tendant à égaliser les concentrations. On admettra que j_D est donné par la loi de Fick : $j_D = -D \frac{\partial c}{\partial x}$. A une date t les concentrations, maintenues homogènes sur les volumes V_1 & V_2 , sont donc $C_1(t)$ & $C_2(t)$. On notera $\Delta C = C_1(t) - C_2(t)$.

1. En admettant que dans un pore la concentration soit une fonction affine de x , montrer que la densité de flux molaire J_m des molécules à travers toute la membrane est de la forme :

$$\vec{J}_m = K \Delta c \vec{e}_x$$

On donnera K , appelée perméabilité de la membrane, en fonction de n , D , e et r , rayon d'un pore.

2. Calculer r numériquement.

Données : $K = 10^{-6} \text{ms}^{-1}$, $n = 10^6 \text{pores par cm}^2$, $e = 10 \mu\text{m}$, $D = 10^{-9} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$.

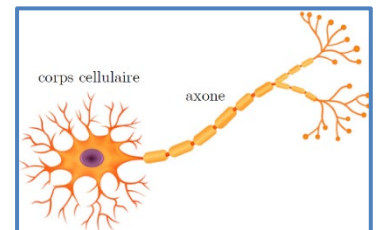
3. Etablir l'équation différentielle donnant $\Delta C(t)$. On pourra poser $\frac{1}{\tau} = KS \left(\frac{1}{V_1} + \frac{1}{V_2} \right)$
4. Intégrer cette équation. Au bout de quelle durée la différence des concentrations est-elle égale au dixième de sa valeur initiale ?

Données : $V_1 = 2L$, $V_2 = 1L$, $S = 200 \text{cm}^2$.

Rép : 1. $K = \frac{n \pi r^2 D}{e}$ 2. $r = 0,56 \mu\text{m}$ 3. $\frac{d\Delta C}{dt} + \frac{\Delta C}{\tau} = 0$ 4. $t = 21,3 \text{h}$

TH26 – Transport diffusif de glucose dans l'axone

Un neurone est une cellule constituée d'un corps cellulaire, où se situent le noyau et les principales structures actives, et d'un axone, partie en forme de long tube transmettant les signaux électriques vers d'autres cellules. Cette transmission nécessite la diffusion de diverses substances le long de l'axone : on s'intéresse ici à cette diffusion (en considérant l'axone comme un simple tube, sans ramifications).



1. Le glucose noté G est consommé par des éléments actifs le long de l'axone. Il est fourni à l'entrée de l'axone par le corps cellulaire, où sa concentration $[G]_0$ est maintenue constante. On note α ($\alpha > 0$) la quantité de glucose consommée par unité de temps et par unité de longueur de l'axone : un bon fonctionnement nécessite que soit uniforme le long de l'axone et constant au cours du temps. Montrer que cela impose une longueur maximale pour l'axone, et évaluer cette longueur.
2. Pour d'autres substances chimiques il existe un processus différent. La diffusion d'une substance A le long de l'axone est parfois ralentie par une réaction chimique entre A et des sites actifs (notés B) situés sur les parois intérieures du neurone. Une molécule A peut se fixer sur un site B pour former un complexe AB sur la paroi : $A + B = AB$ (constante d'équilibre K). Cette réaction est réversible, et sa cinétique est beaucoup plus rapide que les phénomènes diffusifs. Enfin, les molécules A étant en solution très diluée, les sites B sont toujours en grand excès dans un volume donné du tube. Montrer que l'existence de cet équilibre chimique revient à remplacer, dans l'équation de la diffusion sans consommation, le coefficient de diffusion D de la substance A par un coefficient effectif D' que l'on exprimera.

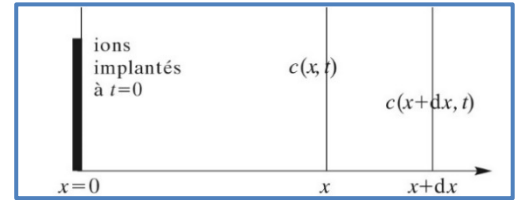
Données :

- Diamètre moyen d'un axone : $1 \mu\text{m}$;
- Concentration du glucose dans le corps cellulaire $[G]_0 = 1,2 \cdot 10^{-3} \text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$.
- Consommation linéique du glucose dans l'axone $\alpha = 4,8 \cdot 10^{14} \text{mol} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.
- Coefficient de diffusion du glucose dans ce milieu $D = 2,0 \cdot 10^{-10} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$.

Rép : 1. $L > \sqrt{\frac{2DS[G]_0}{\alpha}}$ 2. $D' = \frac{D}{1+K[B]}$

TH27 – Diffusion d'atomes dans un solide

On utilise très souvent les phénomènes de diffusion pour la fabrication des transistors dans l'industrie microélectronique. La diffusion d'atomes tels que le Bore dans un substrat de silicium permet, par exemple, de modifier considérablement les propriétés électriques de ce dernier. Le plus souvent, les processus de diffusion ont lieu à des températures élevées. Ainsi, les atomes se trouvent « figés » lorsque le dispositif est ramené à température ambiante. La longévité du dispositif est ainsi assurée. On se propose ici d'établir les lois expliquant la diffusion des atomes dans les solides.



On suppose que la diffusion a lieu uniquement suivant la direction (Ox). Soit deux plans situés en x et en $x+dx$ où existent, à l'instant t , respectivement les concentrations de particules $c(x, t)$ et $c(x + dx, t)$.

1. Donner l'expression de la loi de Fick, liant le flux de particules $J(x)$ et la concentration particulière $c(x, t)$. Donner la dimension de $J(x)$ et du coefficient de diffusion D .
2. Établir, grâce à une loi de conservation, une autre relation liant J et c .
3. En déduire l'équation de diffusion.
4. À l'instant initial, la concentration d'atomes est nulle partout sauf sur une faible épaisseur située en $x=0$. Soit Q le nombre de moles de particules implantées à la surface du matériau par unité de surface sur cette très faible épaisseur. Au cours du processus de diffusion, la quantité de particules Q présentes dans le matériau reste constante (aucun atome ne quitte le matériau). On montre alors que la concentration de particules dans le matériau au cours de la diffusion est :

$$c(x, t) = B(t)e^{-\frac{x^2}{A(t)}}$$

À l'aide de l'équation de la diffusion, en utilisant les conditions initiales et la conservation de la quantité d'atomes pendant la diffusion, montrer que l'on peut écrire :

$$A = 4Dt \text{ et } B(t) = \frac{K}{\sqrt{t}}$$

Où l'on exprimera K en fonction de Q et D . On rappelle que :

$$\int_0^{\infty} e^{-u^2} du = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

5. Déterminer la profondeur de diffusion h pour laquelle $c(h, t) = \frac{c(0,t)}{e^1}$. Au bout d'un temps $t=1$ heure, la profondeur de diffusion des atomes considérés est $h=5\mu\text{m}$. Donner la valeur du coefficient de diffusion D des atomes de bore dans le silicium.

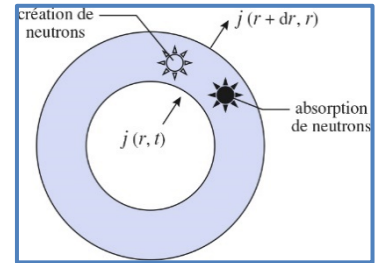
Rép : 1. $J = -D \frac{\partial c}{\partial x}$ 2. $-\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial J}{\partial x}$ 3. $\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$ 4. $B(t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}}$ 5. $D = 1,7 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

TH28 – Diffusion de neutrons dans un réacteur nucléaire

On étudie la diffusion de neutrons dans la matière fissile (du plutonium 239 par exemple) d'un réacteur. On suppose que le milieu dans lequel évoluent les neutrons est homogène et contient N_p atomes de plutonium par unité de volume. N_p est supposé uniforme et indépendant du temps.

On désigne par :

- $n(M, t)$ le nombre de neutrons par unité de volume en un point M, à l'instant t ;
- $\vec{j}(M, t)$ le vecteur densité de courant de neutrons en M, à t .
- D le coefficient de diffusion.



Le réacteur est sphérique, de centre O, de rayon a, et on admet que le vecteur \vec{j} s'écrit $\vec{j} = j \vec{e}_r$ (\vec{e}_r vecteur unitaire radial) et que n et j ne dépendent que de la distance r et de t. On suppose pour simplifier que tous les neutrons ont des vitesses de même module moyen v et qu'ils parcourent une distance l entre deux chocs avec des noyaux de plutonium.

1. Au cours des collisions, une fraction α des neutrons peut être absorbée par les noyaux ; en outre, certains neutrons absorbés conduisent à la fission du noyau de plutonium qui produit des neutrons appelés neutrons secondaires. Pour simplifier, on admet, qu'en moyenne, il y a K ($K > 1$) neutrons créés pour un neutron absorbé, et on suppose que les neutrons secondaires ont même vitesse v que les neutrons initiaux.

Pour retrouver l'équation de diffusion on va faire un bilan de matière en coordonnées sphériques. En tenant compte du fait que la surface d'une sphère dépend de r, démontrer que la différence de flux entre la surface en r et la surface en r+dr peut s'écrire :

$$\phi(r, t) - \phi(r + dr, t) = - \frac{\partial(4\pi r^2 j)}{\partial r} dr$$

Montrer, alors que le nombre n de neutrons par unité de volume vérifie l'équation différentielle :

$$\frac{1}{D} \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial n}{\partial r} \right) + B^2 n$$

et exprimer le coefficient constant B^2 en fonction de D, l, α , v et K.

2. On se place en régime indépendant du temps.
 - a) En remarquant que $\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial n}{\partial r} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 (rn)}{\partial r^2}$ déterminer la fonction n(r).

On appellera n_0 le nombre de neutrons par unité de volume pour r=0.

- b) On montre en théorie de la diffusion, qu'une condition simple rendant compte de la discontinuité du milieu pour r=a est d'imposer à n de s'annuler à une « distance extrapolée » égale à $b = a + 0,7 l$ où l est la distance entre deux chocs. Montrer que ce régime de fonctionnement ne peut exister que si a possède une valeur critique a_0 qu'on exprimera en fonction de B et l.
- c) Application numérique :
 - $D = 20 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$; $\frac{1}{lN_p} = \sigma = 5,9 \cdot 10^{-28} \text{ m}^2$ (section efficace de collision neutron, noyau de plutonium) ;
 - $v = 2000 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$; $K = 2,75$; $a = 0,3$.
 - Masse volumique du plutonium : $\rho = 19,74 \cdot 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$; Masse atomique du plutonium $A = 239 \text{ g mol}^{-1}$;
 - Nombre d'Avogadro $N_a = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

Calculer l, a_0 et la masse critique de plutonium qui correspond à a_0 .

3.
 - a) Prévoir qualitativement l'évolution en fonction du temps du flux de neutrons lorsque a est supérieur ou inférieur à la valeur critique a_0 .
 - b) On cherche une solution de l'équation de diffusion en régime dépendant du temps sous la forme d'une fonction à variables séparées $n(r, t) = f(t) \frac{g(r)}{r}$. Cette fonction vérifie la condition $n(b, t) = 0$. Déterminer n(r,t) en fonction de n_0 densité de neutrons en r=0 à t=0. Retrouver le résultat du 3a)

Rép : 1. $B^2 = (K - 1) \frac{\sigma v}{lD}$ 2. a) $n(r) = \frac{n_0}{Br} \sin(Br)$ b) $a_0 = \frac{\pi}{B} - 0,7l$ c) $a_0 = 5,62 \text{ cm}$ 3. a) $a < a_0$: réacteur instable et arrêt et si $a > a_0$ réacteur instable et divergence (explosion) b) $n(r, t) = n_0 \frac{\sin(\frac{\pi r}{b})}{r} e^{D\beta t}$