

Diffusion de Particules

EX 1 – Diffusion de neutrons dans un réacteur cylindrique

On considère un réacteur cylindrique de neutrons de rayon R , d'axe Oz et de très grande longueur h , qui fonctionne en régime stationnaire. En $r > R$, un dispositif externe absorbe les neutrons de sorte que l'on peut supposer la densité volumique de neutrons nulle à la périphérie : $n(R) \approx 0$. À l'intérieur du réacteur, on modélise la production de neutrons par un taux de production volumique par unité de temps uniforme par morceaux : $\sigma(r) = \sigma_0$ si $r < r_0 < R$ et $\sigma(r) = 0$ sinon. Les électrons diffusent selon la loi de Fick, avec un coefficient de diffusion D .

1. Établir l'expression de la densité volumique $n(r)$ en régime stationnaire sur le domaine $[0, R]$.
2. Comment doit-on modifier cette expression si en fait le terme source est constitué de deux couches de production distinctes, d'épaisseur r_0 et $r_1 - r_0$ avec $r_0 < r_1 < R$: $\sigma(r) = \sigma_0$ si $r < r_0$, $\sigma(r) = \sigma_1 < \sigma_0$ si $r \in [r_0, r_1]$, et $\sigma(r) = 0$ si $r > r_1$?

EX 2 – Diffusion dans un tuyau poreux

Soit un tube cylindrique, d'axe Oz , de longueur ℓ , de rayon a , contenant des molécules. Les concentrations des molécules sont maintenues constantes aux deux extrémités $n(0) = 0$ et $n(\ell) = n_1$. Soit D le coefficient de diffusion dans le tube. On se place en régime stationnaire. Le tube est légèrement poreux donc des molécules peuvent s'échapper vers l'extérieur à travers la paroi latérale d'épaisseur e . Cette diffusion est caractérisée par le coefficient $D' \ll D$. On supposera que la densité de particules varie linéairement selon r dans l'épaisseur du tube et qu'elle est nulle hors du tube : $n_{\text{ext}} = 0$. Quant à l'intérieur du tube, la densité est supposée indépendante de r .

1. Exprimer les projections $j_z(z)$ et $j_r(z, r = a)$ du vecteur densité de courant $\vec{j}$ en fonction de n .
2. En déduire que l'équation différentielle vérifiée par $n(z)$ à l'intérieur du tube est $\frac{d^2 n}{dz^2}(z) - \frac{n(z)}{\delta^2} = 0$. On donnera l'expression de δ .
3. Résoudre l'équation différentielle et étudier le cas où $D' \ll D$.

EX 3 – Loi de Graham et séparation isotopique

On considère la diffusion au sein d'un gaz parfait chimiquement pur, de densité particulière n , dans une géométrie monodimensionnelle selon la direction de l'axe Ox . On note u leur vitesse quadratique moyenne, et τ la durée moyenne entre deux chocs mutuels. On note σ la *section efficace* de collision, c'est-à-dire la section maximale du cylindre dans lequel une molécule doit se trouver pour atteindre de façon certaine une autre molécule supposée fixe. Dit autrement, si les molécules sont assimilées à des sphères dures de rayon R , alors $\sigma = 4\pi R^2$.

1. Montrer que le libre parcours moyen des molécules vaut $\ell = \frac{1}{\sqrt{2}n\sigma}$.
On pourra commencer par trouver une relation simple entre la vitesse relative quadratique moyenne entre deux particules $u_r = \sqrt{(\vec{v}_2 - \vec{v}_1)^2}$ et u .
2. En s'appuyant d'une part sur la loi de Fick, et d'autre part sur une distribution statistique simplifiée des vitesses, avec six vitesses possibles équiprobables $\pm u \vec{u}_x$, $\pm u \vec{u}_y$ et $\pm u \vec{u}_z$, montrer que le coefficient de diffusion vérifie : $D \approx \frac{\ell u}{3}$.
3. En déduire que le coefficient de diffusion dépend de la masse m des molécules selon la *loi de Graham*

$$D = \frac{f(T, P)}{\sqrt{m}}$$

où f est une fonction de la température T et de la pression P que l'on explicitera.

4. Pour séparer l'isotope d'uranium 235, très fissile, de l'isotope d'uranium 238 beaucoup plus stable et très abondant (99,28%), on fabrique de l'hexafluorure d'uranium 235 et 238 que l'on force à diffuser¹ à travers des membranes poreuses. En répétant des cycles on parvient à enrichir le gaz en uranium 235. Calculer le rapport des temps caractéristiques de diffusion à travers une épaisseur δ fixée de chaque isotope. On donne $A_F = 19$ (nombre de nucléons du Fluor). Commenter.

EX 4 – Sédimentation et formule de Stokes-Einstein

On considère un récipient contenant un solvant de masse volumique μ et des particules microscopiques en mouvement, de densité volumique particulière n . Ces particules sont supposées identiques, sphériques de rayon r , de masse m , de masse volumique ρ . Elles sont soumises au poids, à la poussée d'Archimède et à une force de frottement visqueux satisfaisant la loi de Stokes : $\vec{F} = -\alpha \vec{v}_i$ avec $\alpha = 6\pi\eta r$, où $\vec{v}_i$ est la vitesse de la particule i et η la viscosité du solvant. Au voisinage du point M , on décompose leur en un *mouvement d'ensemble* $\vec{v} = \langle \vec{v}_i \rangle$ (moyenne statistique sur toutes les particules), et un *mouvement aléatoire* $\vec{v}'_i$ de distribution statistique isotrope en raison des collisions aléatoires : $\vec{v}_i = \vec{v} + \vec{v}'_i$ avec $\langle \vec{v}'_i \rangle = \vec{0}$. Comme $\vec{v}'_i$ change très vite, elle est supposée insensible aux forces citées ci-dessus.

1. On admet que les particules sont suffisamment légères pour que le mouvement d'ensemble puisse être considéré en régime stationnaire. En déduire l'expression de la vitesse $\vec{v}$ en fonction du champ de pesanteur $\vec{g} = -g\vec{u}_z$.
2. Exprimer le vecteur densité volumique de courant de sédimentation $\vec{j}_s$ associé à ce mouvement d'ensemble, ainsi que le courant de diffusion supposé vérifier la loi de Fick pour un coefficient de diffusion D .
3. Quelle relation doit vérifier le courant total en régime stationnaire ? En déduire l'expression de $n(z)$ à un facteur près.
4. Déterminer complètement $n(z)$ en prenant comme paramètres le nombre total N de particules présentes dans le récipient, supposé cylindrique, le volume total V et la hauteur totale H de la solution.

1. On parle aussi d'effusion gazeuse.

- Quelle loi retrouve-t-on dans la forme particulière que prend l'expression de $n(z)$? En déduire la *formule de Stokes-Einstein*, reliant D à la température.
- À la température de 293 K, on mesure² le rapport de la vitesse de sédimentation de l'hémoglobine dans l'eau sur le champ de pesanteur : $T_s = \frac{v}{g} \approx 4,4 \times 10^{-13}$ s. Sachant que la masse volumique de l'hémoglobine est $\rho = 1330 \text{ kg.m}^{-3}$ et que le coefficient de diffusion de cette molécule dans l'eau est $D = 63 \times 10^{-12} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$, calculer la masse molaire de l'hémoglobine. Rappel : $\mu \approx 1,00 \times 10^3 \text{ kg.m}^{-3}$.
- Pour l'étude de macromolécules, une autre approche consiste à mesurer $n(z)$ par une méthode optique utilisant le lien entre l'indice de réfraction et $n(z)$. À 25°C, on mesure un rapport $\frac{n_0}{n_2} \approx 2,0$ entre les cotes $z = 0$ et $z = 2 \text{ cm}$ pour des macromolécules telles que $\frac{\mu}{\rho} \approx 0,80$. Trouver leur masse molaire et leur rayon moyen r .

EX 5 – Stabilité d'un réacteur nucléaire

On étudie la diffusion de neutrons dans la matière fissile d'un réacteur (du plutonium 239 par exemple). La densité particulière n_p en atomes de plutonium est supposée uniforme. On suppose qu'il s'agit de neutrons thermiques³ ayant tous la même vitesse $v \approx 2 \times 10^3 \text{ m.s}^{-1}$. On note D le coefficient de diffusion des neutrons. Le réacteur est sphérique de rayon a , et on s'intéresse exclusivement à des solutions à symétrie sphérique.

- Lors de leur diffusion, les neutrons subissent des collisions avec les atomes de plutonium, au cours desquels ces derniers restent quasiment immobiles en raison de leur masse. On note σ la *section efficace* de collision, c'est-à-dire la section maximale du cylindre dans lequel un neutron doit se trouver pour atteindre de façon certaine une cible donnée. Dit autrement, si le noyau et le neutron sont assimilés à des sphères dures de rayons respectifs R et r_n , alors $\sigma = \pi(R + r_n)^2$. Montrer que le libre parcours moyen des neutrons vaut $\ell = \frac{1}{n_p \sigma}$.
- En déduire que le nombre de collisions par unité de temps et de volume s'écrit $A = \frac{nv}{\ell}$.
- Au cours de la collision, une fraction α des neutrons est absorbée par les noyaux, ce qui peut conduire à la fission du noyau de plutonium et donc à l'émission de nouveaux neutrons. Pour simplifier, nous considérons que pour un neutron absorbé, en moyenne K neutrons secondaires sont émis, avec la même vitesse v . En pratique $K \in [2, 4; 3]$. Établir l'équation de diffusion vérifiée par la densité de neutrons $n(r, t)$, et montrer que le terme source volumique peut s'écrire $\sigma_n = B^2 n$ où B est une constante qu'on exprimera.
- Déterminer $n(r)$ en régime stationnaire, en fonction de $n_0 = n(0)$ supposée connue. On pourra remarquer que $\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial n}{\partial r}) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 (rn)}{\partial r^2}$.

2. En réalité cette mesure est réalisée dans une ultracentrifugeuse, permettant d'augmenter le champ d'accélération local d'un facteur 10^5 pour plus de précision.

3. À ne pas confondre avec les neutrons rapides directement issus de la fission, dont l'énergie est de l'ordre de 2 MeV. Les neutrons thermiques ont été ralentis par le milieu modérateur.

- Quelle valeur critique a_0 doit prendre le rayon a pour que la densité de neutrons s'annule au bord du réacteur ?
- On admet qu'en réalité comme ℓ est du même ordre que a_0 , un calcul plus précis conduit à annuler n en $a_0 + 0,7\ell$ et non en a_0 . En déduire la masse critique m_0 de plutonium correspondant au rayon critique a_0 . Calculer ℓ , a_0 et m_0 avec les données suivantes.
Données : $D = 20 \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$, $\sigma = 5,9 \text{ barn}$ (1 barn = 10^{-28} m^2), $K = 2,75$, $\alpha = 0,3$, masse volumique du Plutonium $\rho = 19,7 \times 10^3 \text{ kg.m}^{-3}$, masse molaire du Plutonium $M = 239 \text{ g.mol}^{-1}$, nombre d'Avogadro $\mathcal{N}_A = 6,02 \times 10^{23}$.
- Prévoir qualitativement l'évolution temporelle du flux de neutrons lorsque a est supérieur ou inférieur à a_0 , sachant que la contrainte $n(a + 0,7\ell) = 0$ est toujours imposée par le dispositif.

EX 6 – Diffusion du Bore dans du Silicium dopé

On fait diffuser du bore dans du silicium dopé de type N dans le but de réaliser une jonction P-N. Le problème est supposé monodimensionnel, le silicium occupant le demi-espace $x \geq 0$. La concentration (ou densité particulière) en bore est notée $p(x, t)$. La loi de Fick est supposée valable, avec un coefficient de diffusion D . On impose la condition limite $p(0, t) = p_0 = 5 \times 10^{24} \text{ atomes.m}^{-3}$ à partir de l'instant initial $t = 0$.

- Établir l'équation de diffusion portant sur $p(x, t)$ pour $x \geq 0$.
- Montrer que la fonction

$$g(x, t) = f(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y e^{-u^2} du \quad \text{avec} \quad y = \frac{ax}{\sqrt{t}} \quad \text{pour} \quad x \geq 0$$

est solution de cette équation à condition de choisir pour la constante a une valeur que l'on précisera. Représenter l'allure de $g(x, t)$ en fonction de x pour plusieurs dates t croissantes. On donne $\lim_{y \rightarrow \infty} f(y) = 1$.

- On souhaite construire une solution au problème posé qui vérifie les conditions aux limites imposées en $x = 0$ et $x \rightarrow \infty$. Montrer que $p(x, t) = Af(y) + B$ convient pour des constantes A et B bien choisies qu'on explicitera.

On désire qu'à la profondeur $x_1 = 2,7 \mu\text{m}$, la concentration p en bore soit égale à la densité en électrons de conduction n_e du silicium dopé N à température ambiante.

- Sachant que dans ce milieu, à $T_1 = 300 \text{ K}$, la mobilité des électrons est $\mu = 0,13 \text{ m}^2.\text{V}^{-1}.\text{s}^{-1}$, et la résistivité est $\rho = 0,005 \Omega.\text{m}$, calculer n_e .
- On réalise l'expérience de diffusion à la température $T_2 = 1400 \text{ K}$. On constate qu'il faut une durée $t_1 = 2,0 \text{ h}$ pour que l'opération soit réalisée. En exploitant le graphe ci-contre, calculer le coefficient de diffusion D à cette température.

