Approche microscopique de la diffusion

Marche au hasard

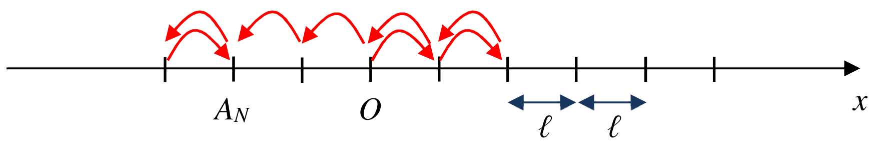
Objectif ✔

On cherche ici à relier le ***coefficient de diffusion D*** aux grandeurs caractéristiques du phénomène de diffusion à l'échelle mésoscopique, ***libre parcours moyen ℓ*** et ***vitesse quadratique moyenne u***.

L'analyse dimensionnelle fournit immédiatement la réponse mais on souhaite ici présenter un modèle statistique extrêmement simplifié ayant le mérite de fournir un ordre de grandeur littéral.

Modèle

On considère un atome ou une molécule astreinte à se déplacer par sauts de longueur **ℓ** *fixée* selon une seule direction Ox avec une *même probabilité* de saut dans un sens ou dans l'autre. Le temps moyen entre deux sauts est τ.
Dans ces conditions, ℓ est donc le libre parcours moyen. Si on note ***u*** la vitesse quadratique moyenne, on a : $\tau =$ (1).



Méthode

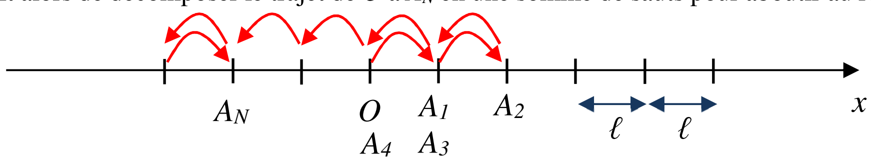
On cherche à déduire l'expression du coefficient D de la relation $\delta_\tau \approx \sqrt{D\tau}$ en calculant la distance moyenne δ_τ parcourue après N sauts effectués pendant la durée τ.
On a donc : $N =$ (2).

On note A_N le point atteint au bout de N sauts. De même que la vitesse quadratique u est la grandeur pertinente pour évaluer la vitesse des molécules (analogue aux valeurs efficaces en électronique pour les signaux à moyenne nulle), la distance moyenne sera évaluée à partir de :

$$\delta = \sqrt{\left\langle \overrightarrow{OA_N}^2 \right\rangle}$$

Calcul

Il suffit alors de décomposer le trajet de O à A_N en une somme de sauts pour aboutir au résultat.



$\overrightarrow{OA_N} = \sum_{i=1}^{N} \overrightarrow{A_{i-1}A_i}$ (en notant $A_0 = O$).

D'où $\overrightarrow{OA_N}^2 = \overrightarrow{OA_N} \cdot \overrightarrow{OA_N} = \left(\sum_{i=1}^{N} \overrightarrow{A_{i-1}A_i} \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{N} \overrightarrow{A_{i-1}A_i} \right) = \sum_{i=1}^{N} A_{i-1}A_i^2 + \sum_{i \neq j} \overrightarrow{A_{i-1}A_i} \cdot \overrightarrow{A_{j-1}A_j}$.

Évaluons les 2 termes de cette somme (qui comporte N^2 termes) :

$\sum_{i=1}^{N} A_{i-1}A_i^2 =$

$\sum_{i \neq j} \overrightarrow{A_{i-1}A_i} \cdot \overrightarrow{A_{j-1}A_j}$

D'où $\left\langle \overrightarrow{OA_N}^2 \right\rangle =$

Et enfin : $\delta = \sqrt{\left\langle \overrightarrow{OA_N}^2 \right\rangle}$

Par identification avec $\delta = \sqrt{D\tau}$, on obtient

Ordres de grandeur

- ✓ À pression et température ambiante, le libre parcours moyen dans un gaz est $\ell \approx 100$ nm.
- ✓ La vitesse quadratique moyenne peut-être estimée dans le cadre de la théorie cinétique du gaz parfait : $u = \sqrt{\frac{3k_BT}{m}} \approx 500$ ms^{-1}.
- ✓ D'où $D \approx$

Ce modèle, quoiqu'extrêmement simplifié, fournit néanmoins un ordre de grandeur correct pour le coefficient de diffusion d'un gaz dans un autre gaz.