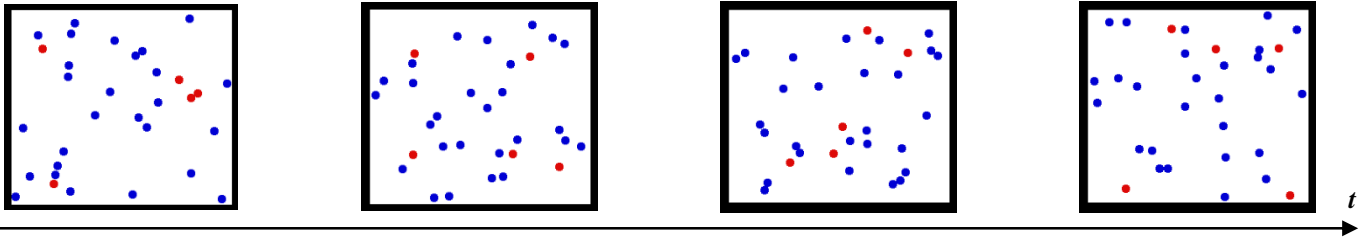


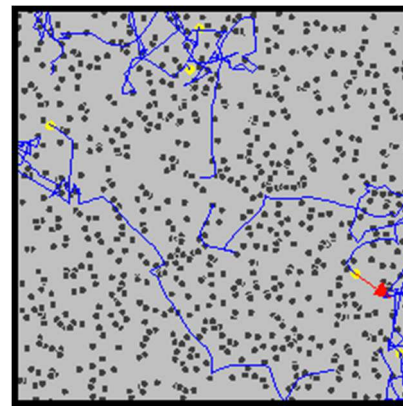
Diffusion particulaire

Equilibre – Chaos et chocs moléculaires – Marche aléatoire – Mouvement Brownien

Simulation microscopique d'un système de N particules dans un récipient. Les collisions font évoluer le système. Certaines particules sont colorées en rouge pour un meilleur suivi.



Simulation de mouvement brownien pour cinq particules (jaunes) qui entrent en collision avec un lot de 800 particules. Les cinq chemins bleus représentent leur trajet aléatoire dans le fluide.



Libre parcours moyen ℓ : distance moyenne parcourue entre deux chocs successifs.
Ordre de grandeur : $\ell_{\text{gaz}} \approx 100 \text{ nm}$, $\ell_{\text{liquide}} \approx \ell_{\text{gaz}} / 1000$.

Echelle mésoscopique – Approximation des milieux continus

A l'échelle **microscopique** du libre parcours moyen ℓ , la structure de la matière est fondamentalement **discontinue** (atomes, molécules...) : la vitesse par exemple varie brutalement au gré des chocs.

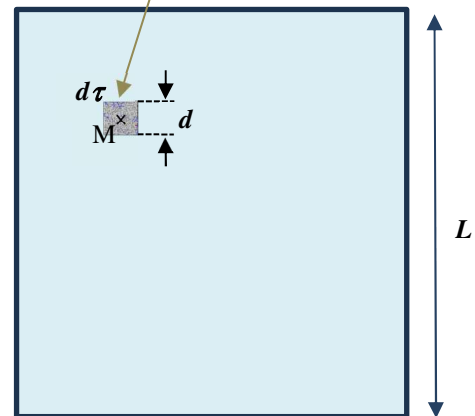
A l'échelle **macroscopique** L du système de particules (dimension du « récipient »), on souhaite pouvoir définir la masse volumique $\rho(M)$, la température $T(M)$ par exemple comme des fonctions **continues** en tout point M du système.

Se pose alors la dimension du volume $d\tau$ à considérer dans la définition

$$\text{de la masse volumique par exemple : } \rho(M) = \frac{dm}{d\tau}.$$

Ce volume doit être :

- ✓ suffisamment grand pour lisser les fluctuations microscopiques en effectuant une moyenne sur un nombre suffisant de particules ;
- ✓ suffisamment petit afin que la grandeur définie puisse varier d'un point à l'autre du système.



On choisit donc une échelle intermédiaire, dite **échelle mésoscopique**, de dimension caractéristique d telle que $\ell \ll d \ll L$.

Le volume élémentaire à considérer à cette échelle est $d\tau \approx d^3$.

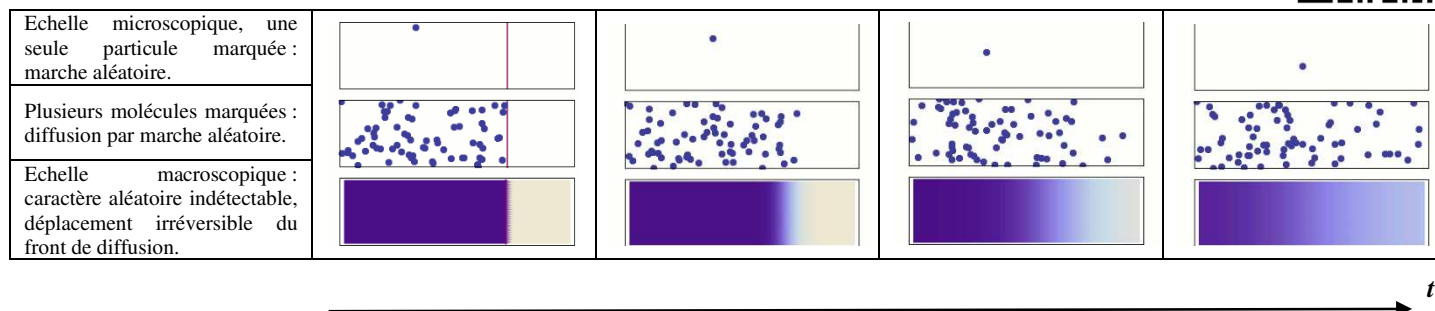
La marche aléatoire des molécules due aux collisions constitue le fondement de la théorie cinétique des gaz et permet également de décrire les phénomènes de diffusion.

Théorie cinétique du gaz parfait monoatomique – Vitesse quadratique moyenne : $u = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}$

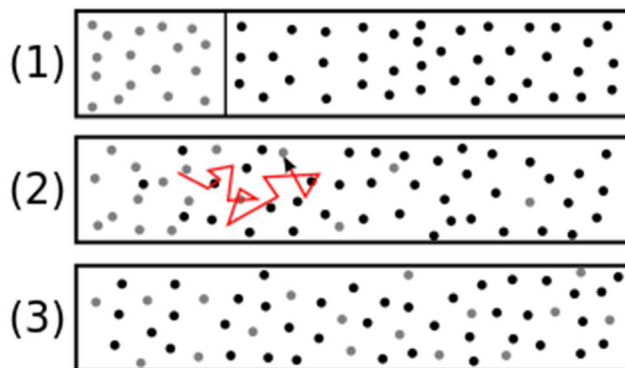
Où $k_B = \frac{R}{N_A}$ est la constante de Boltzmann, T la température thermodynamique en **K** et m la masse d'un atome en **kg**.



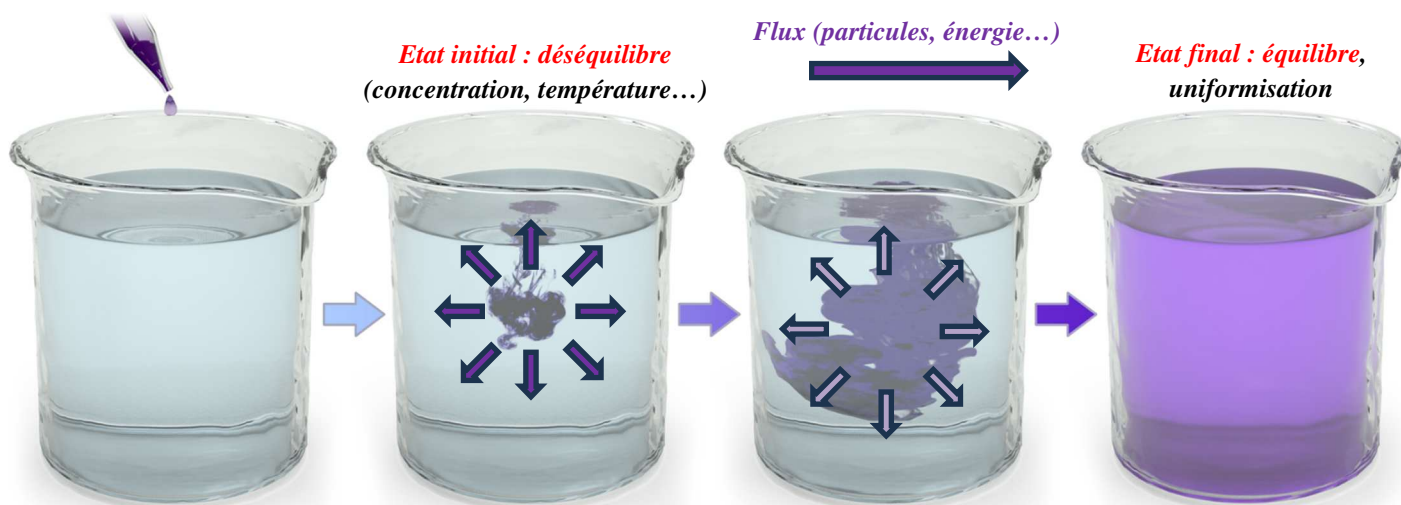
Simulation de la diffusion d'un gaz ou d'un soluté (particules bleues) dans un autre gaz ou dans un solvant (fond blanc) au cours du temps.



💡 Les particules marquées (en bleu ci-dessus, en gris clair ci-contre) diffusent dans les molécules du fluide support et réciproquement. Il n'y a donc pas de transport global de matière, la densité volumique totale (le nombre de particules par unité de volume) reste constante.



Caractéristiques des phénomènes diffusifs



By BruceBlaus - Own work, CC BY 3.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=29452222>

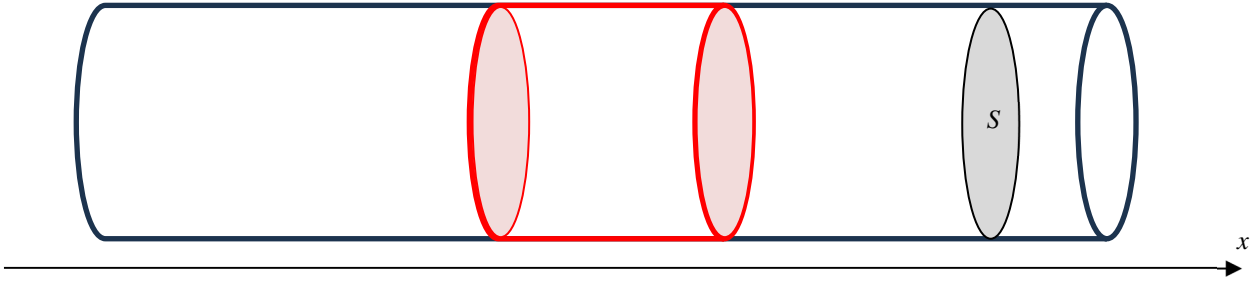
Phénomènes de transports

On distingue différents modes de transport de matière.

- La **diffusion**, phénomène d'origine thermodynamique (chocs moléculaires) ; exemple : goutte d'encre dans un verre d'eau.
- La **convection**, phénomène d'origine mécanique, désordonné ; exemples : goutte d'encre dans une casserole chauffée, vent.
- L'**advection**, phénomène d'origine mécanique, « ordonné » (mouvement global) ; exemples : goutte d'encre dans un filet d'eau, conduction électrique.

Le transport diffusif est beaucoup plus lent que les transports convectifs et advectifs. Dans toute la suite, on considère des situations où seul le transport diffusif existe.

Pour fixer les idées, considérons un transport unidimensionnel, dans un tuyau de section S par exemple.



- ✓ La densité particulaire au point M à l'instant t notée $n(M, t)$ (ou la concentration $c(M, t)$) permet de caractériser le déséquilibre initial ou l'équilibre final ($n(M, t)$ uniforme ou indépendant du temps dans le cas d'un déséquilibre entretenu).

La **densité particulaire**, nombre de particules par unité de volume, en \mathbf{m}^{-3} , est définie par :

- ⚠ Ne pas confondre densité particulaire et nombre de moles ; s'il existe un risque de confusion on note $n^*(M, t)$ la densité particulaire.

- ✓ Le déséquilibre initial engendre un transport de matière ou **flux de particules** à travers la surface S , en \mathbf{s}^{-1} , défini :
 - en termes de débit par :
 - en termes de flux par :