Diffusion de particules

Diffus° et convection

↳ Il existe 2 moyens d'effectuer des transports de matière, l'un a son origine au niveau microscopique et l'autre au niveau macroscopique.

- diffus° transport de matière d'origine microscopique
- convect° " " " associé à un mvt macroscopique

Courant de particules

Soit le flux de particules $\phi_S(t)$ à travers une surface S le débit de particules à travers cette surface à l'instant t. Le nbre de particules traversant S pendant la durée dt est donc :

$$dN = \phi_S(t)\,dt$$

Soit le vecteur de densité de courant de particules $\vec{j}(M,t)$ dont le flux à travers S est égal au flux de particules à travers cette surface.

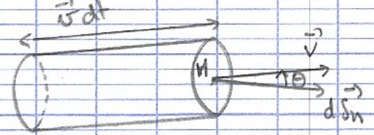
Si S est une surface orientée, le flux de particules à travers S à t est :

$$\phi_S(t) = \iint_{n \in S} \vec{j}(M,t)\, d\vec{S}_n$$

$$\rightarrow \boxed{dN = \phi_S(t)\,dt = \iint_{n \in S} \vec{j}(M,t) \cdot d\vec{S}_n\, dt}$$

Vecteur densité de courant de particules

Soit des particules de vitesse $\vec{v}$ traversant un élément de surface $d\vec{S}_n$ faisant un angle θ avec $\vec{v}$. Soit $n(M,t)$ le nombre de ces particules par unité de volume en M à l'instant t.



Volume : $d\tau = dS_M \cdot v\,dt\cos\theta$

$= \vec{v} \cdot d\vec{S}_n$

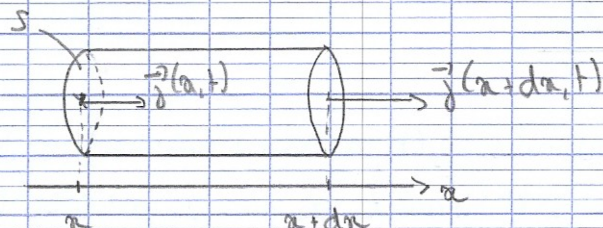
Alors $dN = n\,d\tau = (n\vec{v}) \cdot d\vec{S}_n\,dt$

On a alors en M

$$\boxed{\vec{j}(M,t) = n(M,t)\,\vec{v}(M,t)}$$

Bilan de particules

Cas à une dimension



Soit $\vec{j}(x,t) = j_x(x,t)\,\vec{u}_x$

Soit le bilan de particules présentes dans le cylindre de sect° S, de longueur dx et de volume $d\tau = S\,dx$, noté Σ dans la suite, entre t et $t+dt$.

dx petit devant la distance caractéristique de variat° $n(x,t)$

dt " " la durée caractéristique de variat°

↳ Ni product°, ni disparit° de particules

- le nbre de particules entrant par la face en x est :

$$\delta N_x = \vec{j}(x,t) \cdot (S\vec{u}_x)\,dt = j_x(x,t)\,S\,dt$$

- le nbre de particules entrant en $x+dx$:

$$\delta N_{x+dx} = \vec{j}(x+dx,t) \cdot (-S\vec{u}_x)\,dt = -j_x(x+dx,t)\,S\,dt$$

On a alors dans le volume Σ entre t et $t+dt$:

$$\delta N_{ext \to \Sigma} = \delta N_x + \delta N_{x+dx} = (j_x(x,t) - j_x(x+dx,t))\,S\,dt$$

Soit au premier ordre en dx

$$\delta N_{ext \to \Sigma} = - \frac{\partial j_x(x,t)}{\partial x} S\,dx\,dt$$

Le nbre de particules dans Σ a varié entre t et $t+dt$:

$$dN = (n(x,t+dt) - n(x,t))\,S\,dx$$

Au 1er ordre en dt

$$dN = \frac{\partial n(x,t)}{\partial t} S\,dx\,dt$$

Cette variat° s'explique uniquement par le transfert de particules qui ont traversé la surface :

$$dN = \delta N_{ext \to \Sigma}$$

$\Rightarrow$ équat° de conservat° de la matière $\boxed{\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = - \frac{\partial j_x(x,t)}{\partial x}}$

b) <u>Avec product° ou disparit°</u>

Soit $\delta N_{prod} = p(x,t)\,S\,dx\,dt$

$$\to dN = \delta N_{ext \to \Sigma} + \delta N_{prod}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = - \frac{\partial j_x(x,t)}{\partial x} + p(x,t)}$$

<u>Cas à trois dimens°</u>

$$\boxed{\begin{array}{ll} \frac{\partial n(M,t)}{\partial t} + \mathrm{div}\,\vec{j}(M,t) = 0 & \text{sans product°} \\ \frac{\partial n(M,t)}{\partial t} + \mathrm{div}\,\vec{j}(M,t) = p(M,t) & \text{avec product°} \end{array}}$$

↳ Bilan global

Le bilan global de particules s'écrit : $N(t+dt) - N(t) = dN_{ext \to \Sigma}$

DL au 1er ordre en dt : $\boxed{\frac{dN}{dt} = \phi_{ext \to \Sigma}}$

Loi de Fick

La loi de Fick relie le vecteur densité de courant de particules au gradient de la densité particulaire. Il s'agit d'une loi phénoménologique qui se constate expérimentalement et ne se démontre pas.

$$\boxed{\vec{j}(M,t) = -D\, \vec{\text{grad}}\, n(M,t)}$$

D coeff de diffusion
↳ $m^2 s^{-1}$

Equat° de diffus°

↳ Cas à 1 dimension

$$\boxed{\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2}}$$

↳ Cas à 3 dimensions

$$\boxed{\frac{\partial n(M,t)}{\partial t} = D\, \Delta n(M,t)}$$

Equat° de diffus° typiques ! → diffus° thermique
diffus° qtité de mvt
effet de peau dans les conducteurs

Un phénomène qui est régi par une équat° de diffus° est un phénomène irréversible

Longueur et temps caractéristiques

On va chercher une relat° entre la durée caractéristique T^* des variat° temporelles de $n(x,t)$ et la distance caractéristique L^* de ses variat° spatiales. Soit n^* l'ordre de grandeur de $n(x,t)$ et on note $n(x,t) \sim n^*$.

1er pt de vue : Soit $\frac{\partial n}{\partial t} \sim \frac{n^*}{T^*}$ et $\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \sim \frac{n^*}{L^{*2}}$

$$\Rightarrow \frac{n^*}{T^*} \sim D \frac{n^*}{L^{*2}} \Rightarrow L^* \sim \sqrt{DT^*}$$

2e pt de vue : Soit $n_a = n/n^*$; $t_a = t/T^*$ et $x_a = x/L^*$

$$\Rightarrow \frac{\partial n_a}{\partial t_a} = \frac{DT^*}{L^{*2}} \frac{\partial^2 n_a}{\partial x_a^2}$$

Les grandeurs T^* et L^* sont bien les grandeurs caractéristiques si les dérivées partielles intervenant dans cette équat° st du m̂ ordre de grandeur.

$$\Rightarrow \boxed{L^* \sim \sqrt{DT^*} \quad \text{et} \quad T^* \sim \frac{L^{*2}}{D}}$$

Cas du régime stationnaire

En régime permanent la densité particulaire vérifie l'équat° de Laplace :

$$\boxed{\Delta n(M) = 0}$$

En régime permanent, l'équat° locale de conservat° du nombre de particules devient :

$$\boxed{\operatorname{div} \vec{j}(M) = 0}$$

↳ le vecteur densité de courant de particules est donc à flux conservatif

Express° du coeff de diffus°

Un atome A se déplace selon l'axe Ox, que l'on décrit par une chaîne unidimensionnelle infinie de sites B_n d'abscisse $x_n = na$ où n entier relatif. L'atome met une durée τ pour sauter d'un site B_n à l'un de ses deux plus proches voisins B_{n-1} ou B_{n+1} avec la m̂ proba égale à $1/2$.

Soit $p(x_n, t)$ la proba pour A d'être en x_n à l'instant t en étant partie de O.

Si à l'instant $t+\tau$, la particule est en x_n, c'est qu'à l'instant t, elle était soit en x_{n-1}, soit en x_{n+1}, avec une m̂ probabilité

$$\rightarrow p(x_n, t+\tau) = \frac{1}{2}\left(p(x_{n-1}, t) + p(x_{n+1}, t)\right)$$

Soit a très faible devant les dimens° macroscopiques. On peut définir $p(x,t)$ coïncidant avec $p(x_n, t)$ pour tout n, définie pour tout x.

Alors,

$$p(x_{n+1}, t) \simeq p(x_n, t) + \frac{\partial p}{\partial x}(x_n, t)\, a + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(x_n, t)\, a^2$$

$$p(x_{n-1}, t) \simeq p(x_n, t) - \frac{\partial p}{\partial x}(x_n, t)\, a + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(x_n, t)\, a^2$$

$$p(x_n, t+\tau) \simeq p(x_n, t) + \frac{\partial p}{\partial t}(x_n, t)\, \tau$$

$p(x_n, t)$ solut° de l'équat° : $\dfrac{\partial p}{\partial t}(x_n, t) = \dfrac{a^2}{2\tau}\dfrac{\partial^2 p}{\partial x^2}(x_n, t)$

La proba de trouver la particule à l'instant t à l'abscisse x est de solut° d'une eq. de la diffus° avec le coeff de diffus° $D = \dfrac{a^2}{2\tau}$

Pour un grand nbr d'atomes, de densité volumique $n(x,t)$ on a

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{a^2}{2\tau} \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$$

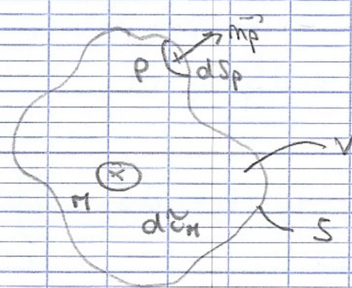
Le coefficient de diffus° moléculaire est relié au libre parcours moyen l et à la vitesse quadratique moyenne u par

$$\boxed{D \simeq ul}$$

Diffus° thermique

Flux thermique - Vecteur densité de courant thermique

Flux thermique surfacique



Soit un syst. Σ de volume V et délimité par une surface fermée S

Le flux thermique reçu de l'extérieur par le système Σ à travers la surface élémentaire dS_P s'écrit :

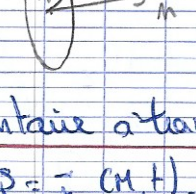
$$\boxed{d\Phi_{ext \to \Sigma} = \varphi_{ext \to \Sigma}(P,t)\, dS_P}$$

où $\varphi_{ext \to \Sigma}$ est le flux thermique surfacique (W/m^2)
Le flux thermique total reçu de l'extérieur par Σ est alors

$$\boxed{\Phi_{ext \to \Sigma}(t) = \oiint_{P \in S} \varphi_{ext \to \Sigma}(P,t)\, dS_P}$$

Vecteur densité de courant thermique

La puissance qui traverse une surface élémentaire s'écrit comme le flux d'un vecteur, appelé vecteur densité de courant thermique et noté $\vec{j_Q}$ à travers cette surface



Le transfert thermique élémentaire à travers $d\vec{S}_M$ entre les instants t et $t+dt$:

$$\boxed{\delta Q = \vec{j_Q}(M,t) \cdot d\vec{S}_M\, dt}$$

On a aussi : $\boxed{\varphi_{\vec{n}}(M,t) = \vec{j_Q}(M,t)\,\vec{n}}$

où $\varphi_{\vec{n}}$ est le flux surfacique dans le sens du vecteur $\vec{n}$

Flux thermique traversant une surface

Soit une surface orientée S. Le flux thermique traversant S dans le sens vecteurs surface élémentaire $d\vec{S_P} = dS_P\,\vec{n_P}$ est :

$$\boxed{\phi(t) = \iint_{P\in S} \varphi_{\vec{n_P}}(P,t)\,dS_P = \iint_{P\in S} \vec{j_Q}(P,t)\,d\vec{S_P}}$$

Généralités sur les bilans énergétiques

↳ Product° d'énergie

Il peut exister à l'intérieur du syst. un processus qui dégage ou absorbe de l'énergie. On appelle $\mathcal{P}_{prod}$ la puissance produite dans le syst.
La product° d'énergie a lieu dans le volume du syst. Elle est caractérisée par une puissance volumique produite $\mathcal{P}_v$ telle que la puissance produite dans le volume élémentaire $d\tau_M$ autour de M est :

$$\boxed{d\mathcal{P}_{prod} = \mathcal{P}_v(M,t)\,d\tau_M} \qquad \mathcal{P}_v\ (W.m^{-3})$$

↳ Bilan énergétique

Régime variable : 1er principe appliqué à Σ entre t et $t+dt$:

$$U_\Sigma(t+dt) - U_\Sigma(t) = dU_\Sigma = \delta Q_{ext\to\Sigma} + \mathcal{P}_{prod}\,dt$$

$$\to \frac{dU_\Sigma}{dt} = \phi_{ext\to\Sigma} + \mathcal{P}_{prod}$$

$$\Leftrightarrow \frac{dU_\Sigma}{dt} = \oint\!\!\!\oint_{P\in S} \varphi_{ext\to\Sigma}(P,t)\, dS_P + \iiint_{M\in V} \mathcal{P}_v(M,t)\, d\tau_M$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\text{STOCKAGE} = \text{TRANSFERT} + \text{PRODUCTION}}$$

Régime permanent

$\hookrightarrow dU_\Sigma = 0$

En régime permanent, lorsqu'il y a product° (ou consommat°) d'énergie au sein d'un système Σ, la totalité de l'énergie produite (ou consommée) à l'intérieur du syst. est entièrement évacuée (ou récupérée) par transfert thermique vers (ou venant de) l'extérieur.

En régime permanent, la somme des puissances thermiques reçues par un syst. dans lequel il n'y a ni product° ni consommat° d'énergie est nulle.

Continuité du flux thermique surfacique

A l'interface entre 2 milieux, il y a continuité du flux thermique surfacique :

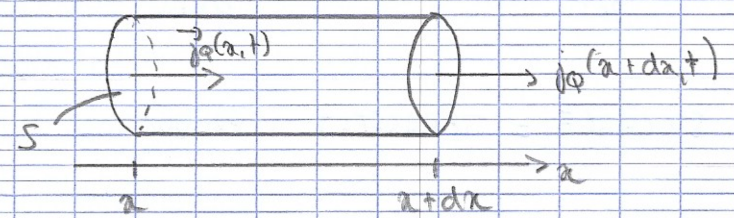
$$\boxed{\vec{j}_{Q_2}(A)\cdot\vec{n}_{12} = \vec{j}_{Q_1}(A)\cdot\vec{n}_{12}}$$

Équat° locale de bilan thermique

Soit un matériau de volume constant.
Une éventuelle product° d'énergie à l'intérieur du matériau est caractérisé par la densité volumique de puissance $\mathcal{P}_v(M,t)$.
Le 1er principe pour un échantillon de matériau s'écrit sous la forme

$$\boxed{dU = \delta Q + \mathcal{P}_{prod}\, dt}$$

↳ Bilan énergétique local à une dimension



La variat° d'énergie interne du syst. Σ entre t et $t+dt$ est :

$$dU = U(t+dt) - U(t) = \delta m \underbrace{c}_{\text{capacité thermique}}(T(x,t+dt) - T(x,t))$$

où $\delta m = \rho S dx$ masse de Σ

Au 1er ordre en $dx dt$ on a

$$dU = \rho c S \frac{\partial T}{\partial t}(x,t)\, dt\, dx$$

Le transfert thermique reçu par le syst. entre t et $t+dt$ est :

- à travers la face en x :

$$\delta Q_x = \vec{j}_Q(x,t) \cdot (S\vec{u}_x)\, dt = \vec{j}_Q(x,t)\, S dt$$

- à travers la face en $x+dx$

$$\delta Q_{x+dx} = \vec{j}_Q(x+dx,t) \cdot (-S\vec{u}_x) = -j_Q(x+dx,t)\, S dt$$

↳ "−" car c'est le transfert thermique reçu par le syst.

Le transfert thermique total est alors :

$$\delta Q_{ext \to \Sigma} = \delta Q_x + \delta Q_{x+dx} = (j_Q(x,t) - j_Q(x+dx,t))\, S dt$$
$$\simeq -\frac{\partial j_Q(x,t)}{\partial x} S dx dt \quad \text{au 1er ordre}$$

L'énergie produite dans le cylindre est :

$$\mathcal{P}_{prod} = \mathcal{P}_v(x,t)\, S dx$$

Le 1er principe s'écrit finalement :

$$\rho c \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} S dx dt = -\frac{\partial j_Q(x,t)}{\partial x} S dx dt + \mathcal{P}_v(x,t) S dx dt$$

L'équat° locale traduisant le bilan énergétique s'écrit

$$\boxed{\rho c \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial j_Q(x,t)}{\partial x} = \mathcal{P}_v(x,t)}$$

En l'absence de sources internes, il se simplifie en :

$$\boxed{\rho c \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial j_Q(x,t)}{\partial x} = 0}$$

b) Bilan thermique local 3D

Les équat° précédentes s'écrivent :

$$\boxed{\rho c \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j_Q}(M,t) = 0}$$ sans sources internes

$$\boxed{\rho c \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j_Q}(M,t) = \mathcal{P}_v(M,t)}$$

Loi de Fourier - Conductivité thermique

La loi de Fourier exprime une relat° linéaire entre le vecteur densité de courant thermique et le gradient du champ de température $T(M,t)$

$$\boxed{\vec{j_Q}(M,t) = -\lambda \, \vec{\operatorname{grad}}\, T(M,t)}$$ λ (W/mK)

Équat° de la diffusion thermique

b) Cas 1D :

$$\boxed{\rho c \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} + \mathcal{P}_v(x,t)}$$

↳ équat° de la diffus° thermique unidimensionnelle avec terme de source

↳ Cas d'une géométrie quelconque

$$\boxed{\rho c \frac{\partial T(M,t)}{\partial t} = \lambda \Delta T(M,t) + \mathcal{P}_v(M,t)}$$

↳ éq de la diffus° thermique avec terme de source

↳ Cas sans sources internes

$$\boxed{\frac{\partial T(M,t)}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho c} \Delta T(M,t)}$$

avec $a = \dfrac{\lambda}{\rho c}$ diffusivité thermique ($m^2.s^{-1}$)

Longueur et temps caractéristique

$$\boxed{L \sim a\tau \quad \text{et} \quad \tau \sim \frac{L^2}{a}}$$

Résistance thermique

Soit $\phi_{1\to 2} = j_Q S$ où $j_Q = -\lambda \dfrac{dT}{dx} = \lambda \dfrac{T_1 - T_2}{L}$

↳ $\phi_{1\to 2} = \dfrac{T_1 - T_2}{L} \lambda S$

On définit la résistance thermique : $\boxed{R_{th} = \dfrac{T_1 - T_2}{\phi_{1\to 2}}}$ ($K.W^{-1}$)

Conductance thermique $\boxed{G_{th} = \dfrac{1}{R_{th}} = \dfrac{\phi_{1\to 2}}{T_1 - T_2}}$

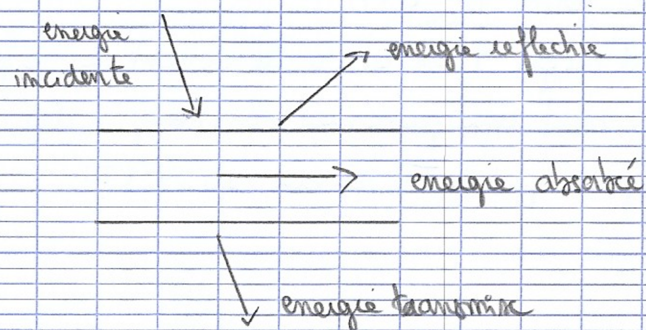
Dans le cas unidimensionnel on a

$$\boxed{R_{th} = \frac{L}{\lambda S}}$$

Pour un matériau de taille L, de diffusivité thermique a, si la durée τ d'évolut° des condit° aux limites est très grande devant la durée caractéristique de la diffus° thermique dans le matériau, à savoir $\tau_{diff} = \frac{L^2}{a}$, alors, dans le matériau, tt se passe comme si le régime était permanent.

Approche descriptive du rayonnement thermique

Corps noir



Lorsqu'un corps reçoit un rayonnement electromag. on observe 3 phénomènes :
- la reflexion
- la transmission
- l'absorption

Un corps noir est un corps qui absorbe l'intégralité du rayonnement electromag. qu'il reçoit

Rayonnement d'equilibre thermique

Def : Le rayonnement d'equilibre à la temperature T est le rayonnement du champ electromag. qui existe dans une enceinte fermée vide dont la paroi est opaque et maintenue à une temperature cste T. Chaque element de surface de la paroi emet dans l'enceinte un rayonnement thermique et absorbe aussi une partie du rayonnement qu'il reçoit. Il s'établit ainsi un equilibre entre la paroi et le champ electromag.

Densité d'energie et flux surfacique

Def : Le champ electromag. dans l'enceinte est caracterisé par sa densité volumique d'energie et par son flux surfacique d'energie

La densité volumique d'energie u_{em} (ou energie volumique) sera definie comme étant l'energie electromag. contenue dans un volume $d\tau$ → $dU_{em} = u_{em} \, d\tau$

A l'interieur de l'enceinte, elle est uniforme et ne dépend que de la temperature d'équilibre T et sera notée $u^{o}_{em}(T)$

Le flux surfacique d'energie φ est tel qu'un element de surface dS d'un corps placé dans l'enceinte recoit une puissance electromag. $d\phi = \varphi \, dS$

↳ ce flux ne depend que de T et sera noté $\varphi^{o}(T)$

Densités spectrales

↳ donnent la repartit° des photons par fréquence ou longueur d'onde

La densité spectrale en longueur d'onde d'energie volumique $u^{o}_{\lambda}(\lambda, T)$ est telle que la contribut° à la densité volumique d'energie des photons de longueur d'onde appartenant à l'intervalle $[\lambda, \lambda + d\lambda]$ est :

$$\boxed{du^{o}_{em} = u^{o}_{\lambda}(\lambda, T) \, d\lambda}$$

La densité volumique d'energie totale est :

$$\boxed{u^{o}_{em}(T) = \int_{0}^{\infty} u^{o}_{\lambda}(\lambda, T) \, d\lambda}$$

Loi de Planck

La densité spectrale d'energie volumique est donnée par la loi de Planck :

$$u^{o}_{\lambda}(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^{5}} = \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_B T}\right) - 1}$$

avec energie du photon $E = h\frac{c}{\lambda}$ et l'energie d'agitat° thermique $k_B T$

frequence $\nu = \frac{c}{\lambda}$

Loi de Stefan - Boltzmann

↳ On peut exprimer le flux surfacique de rayonnement d'équilibre, c'est la loi de Stefan-Boltzmann :

$$\boxed{\varphi^0(T) = \sigma T^4}$$ avec $\sigma = 5{,}67 \cdot 10^{-8}\ W\,m^{-2}\,K^{-4}$

Loi du deplacement de Wien

↳ La densité spectrale en longueur d'onde de l'energie volumique passe par un maximum pour une longueur d'onde λ_m dependant de T.

↳ Loi de Wien $$\boxed{\lambda_m T = 2898\ \mu m\cdot K}$$

Flux surfacique emis par un corps noir

Le flux surfacique φ_e^{cn} emis par un corps noir en équilibre thermodynamique, à la temperature T, est égal au flux du rayonnement d'équilibre $\varphi^0(T)$:

$$\boxed{\varphi_e^{cn} = \varphi^0(T) = \sigma T^4}$$