UNIVERSITE TOULOUSE III

Licence Mention Physique Parcours Sciences Physiques et Chimiques

2nd semestre 2011-2012

Thermodynamique Statistique

TD5 : Diffusion de particules

I - Diffusion de porteurs dans un semi-conducteur

On considère un barreau semi-conducteur cylindrique d'axe Ox, de rayon a et de longueur L (L>>a). On étudie la diffusion des porteurs de charges électrons ou trous, dans la direction Ox. Soit n(x, t) leur nombre par unité de volume.

On demande d'évaluer entre les instants t et t+dt la variation dN du nombre de porteurs compris entre les sections d'abscisses x et x+dx. On suppose à cet effet que :

- des porteurs peuvent être créés dans le matériau; leur nombre par unité de volume et de temps est supposé constant et noté $\frac{n_0}{\tau}$ (n_0 et τ constantes)
- des porteurs peuvent disparaitre à cause des recombinaisons, leur nombre par unité de volume et de temps est proportionnel à n et noté $-\frac{n}{\tau}$.

1. Enoncer la loi de Fick et en déduire l'équation satisfaite par n(x, t).
2. On suppose le régime stationnaire atteint, déterminer n(x). On l'exprimera en fonction de n_0, n(0) valeur de n à l'abscisse 0 et de la longueur de diffusion L_P. L_P est définie par la relation $L_P = (D\tau)^{1/2}$ où D est le coefficient de diffusion des porteurs. En déduire l'intensité I(x) du courant de diffusion des charges q à travers le barreau.

II. Diffusion de neutrons dans un réacteur nucléaire en régime stationnaire

On considère un milieu dans lequel se produit la diffusion d'un espèce chimique caractérisée en un point de vecteur position $\vec{r}$ et à l'instant t par la densité particulaire $n_V(\vec{r},t)$. Un processus de production fait apparaître σ_n particules par unité de volume et par unité de temps.

1. En considérant un volume quelconque, établir la relation liant σ_n, $\dfrac{\partial n_V}{\partial t}$ et la divergence du vecteur courant de particules ou densité de flux $\vec{J}_n$. Quelle est, en régime stationnaire, l'équation différentielle vérifiée par $n_v(\vec{r},t)$?

On considère, dans un réacteur nucléaire fonctionnant en régime stationnaire, un boulet sphérique de rayon R jouant le rôle de source de neutrons. Cette source est supposée seule et l'on admet que la fonction σ_n est constante à l'intérieur du boulet et nulle à l'extérieur de celui-ci. En transformant l'intégrale portant sur la divergence du vecteur courant de particules $\vec{J}_n$, étendue à un volume sphérique concentrique avec le boulet, en une intégrale portant sur le flux de $\vec{J}_n$ étendue à la surface de la sphère :

2. Exprimer en fonction de R, r, σ_n et du coefficient de diffusion D, la densité particulaire $n_V(\vec{r})$ de neutrons, à la distance r du centre du boulet (on utilisera la propriété de continuité de $n_V(\vec{r})$ en r=R).

3. Faire une représentation graphique de la variation de n_V et de la norme du vecteur $\vec{J}_n$ en fonction de r lorsque r varie entre 0 et l'infini.

III. Diffusion de molécules à travers une membrane.

Soit une membrane poreuse de surface S, de faible épaisseur L, comportant p pores cylindriques identiques par unité de surface. Cette membrane sépare deux compartiments 1 et 2 cylindriques de même axe Ox et de volume constant respectif V_1 et V_2 contenant la même solution moléculaire mais à des concentrations différentes n_1 et n_2 avec $n_1 > n_2$. Dans chacun des pores de la membrane s'établit un flux de molécules suivant Ox, donné par la loi de Fick. On note $n(x,t)$ la concentration moléculaire à travers un pore à l'abscisse x et à l'instant t et D le coefficient de diffusion supposé uniforme.

On admet que dans un pore la concentration moléculaire est une fonction affine de l'abscisse x : $n(x,t) = A(t)\, x + B(t)$. A chaque instant t, les concentrations $n_1(t)$ et $n_2(t)$ restent uniformes dans chacun des compartiments. On note $\Delta n(t) = n_1(t) - n_2(t)$ l'écart des concentrations au temps t.

1. Déterminer le flux de molécules Φ_p à travers un pore de longueur L et de rayon R. L'épaisseur L de la membrane étant considérée comme très faible, à quelle expression peut-on assimiler $dn_V(x, t)/ \; dx$?

2. Montrer que le flux de molécules Φ_m à travers toute la membrane a pour expression : $\Phi_m = -K \, \Delta n(t) \, S$ où K est la perméabilité de la membrane ? Déterminer l'expression de K en fonction de p, D et L. Calculer numériquement le rayon R d'un pore en µm, on donne $K = 10^{-6}$ m s^{-1}, $D = 10^{-9}$ SI, $L = 10$ µm, $p = 10^6$ pores cm^{-2}.

3. Donner les variations des nombres de particules $dN_1(t)$ et $dN_2(t)$ respectivement dans les compartiments 1 et 2 entre les instants t et $t + dt$.

4. Etablir l'équation différentielle de diffusion à laquelle obéit $\Delta n(t)$ en posant $1/\tau = (1/V_1 + 1/V_2) \, K \, S$. On notera $\Delta n(t=0) = \Delta n_0$. Intégrer cette équation et montrer que $\Delta n(t)$ est de la forme $C \exp(-\alpha t)$. Expliciter C et α. Calculer le temps t_1 au bout duquel $\Delta n(t=t_1) = \Delta n_0/10$.