DM N°2 - DIFFUSION
A rendre le 6 novembre 2023

PARTIE I : ETUDE THERMIQUE D'UN CONDUCTEUR (Mines-Ponts MP extrait)

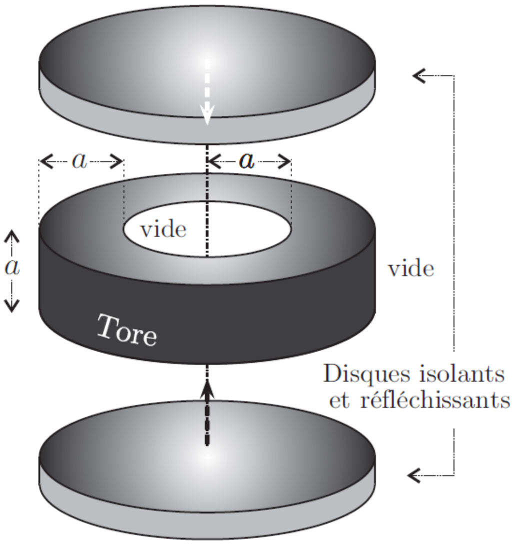


FIGURE 5 – Vue éclatée du système. L'axe (O,z) est celui du tore

Un tore de section carrée $a \times a$ et de rayon intérieur a (donc de rayon extérieur $2a$) est fabriqué dans un matériau de masse volumique μ, de capacité calorifique massique c et de conductivité thermique λ.

Le profil des températures possède la symétrie cylindrique : T ne dépend que du rayon r et du temps t soit $T(r,t)$. La face intérieure ($r = a$, $\theta \in [0,2\pi[$, $z \in [0,a]$) et la face extérieure ($r = 2a$, $\theta \in [0,2\pi[$, $z \in [0,a]$) sont placées dans le vide.

Sur les faces parallèles ($z = 0$ ou $z = a$), on pose deux disques parfaitement isolants thermiquement et de surface parfaitement réfléchissantes.

❑ **19** — En effectuant un bilan thermique sur la portion torique définie par l'intervalle $[r,r+dr]$, montrer que le champ des températures vérifie l'équation

$$\xi r \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial \left(r \frac{\partial T}{\partial r}\right)}{\partial r}$$

où l'on exprimera ξ en fonction des grandeurs caractéristiques du matériau et l'on précisera son unité.

❑ **20** — On cherche, pour cette équation, une solution stationnaire à variables séparées sous la forme $T(r,t) = \rho(r)\eta(t)$. Établir les deux équations différentielles vérifiées respectivement par $\rho(r)$ et $\eta(t)$ en faisant apparaître une constante χ commune à ces deux équations.

❑ **21** — Déterminer l'expression de $\eta(t)$ sans chercher à caractériser la ou les constantes d'intégration. Quel est le signe de χ ?

❑ **22** — Pour la fonction $\rho(r)$, on cherche une solution développable en série entière sous la forme $\rho(r) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n r^n$. Après avoir rapidement justifié cette recherche, déterminer les expressions des α_{2p} et des α_{2p+1} pour tout entier p positif ou nul.

❑ **23** — En examinant tous les transferts thermiques possibles sur la face interne, justifier le fait que $\left.\frac{d\rho}{dr}\right|_{r=a} = 0$.

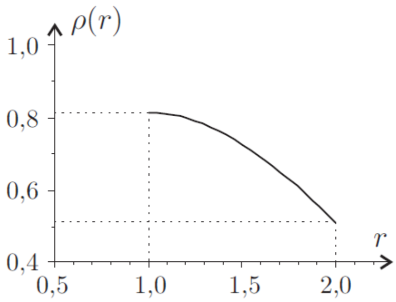


FIGURE 6 – La fonction $\rho(r)$

La fonction $\rho(r)$ qui admet le développement en série déterminé à la question 22 et qui vérifie la condition aux limites imposée par la question 23 s'exprime en utilisant les fonctions de Bessel de première (J) et de deuxième (Y) espèces. Elle s'écrit

$$\rho(r) = K\left[J_0(r) - \frac{J_1(a)}{Y_1(a)}Y_0(r)\right]$$

où K est une constante d'intégration. La courbe représentative de cette fonction sur le domaine d'étude et pour $K = 1$ et $a = 1$ fait l'objet de la figure 6.

❑ **24** — À un instant t donné, on suppose que la face externe, assimilée à un corps noir, est en quasi équilibre thermique. En utilisant la loi de Stefan-Boltzmann, établir la deuxième condition aux limites vérifiée par ρ en $r = 2a$. Montrer que l'on arrive alors à une contradiction. Quelle hypothèse doit-elle être remise en question ?

Loi de STEFAN-BOLTZMAN : La puissance surfacique rayonnée par un corps noir en équilibre thermique est donnée par la relation $j_{rayonnée} = \sigma T^4$, où $\sigma = 5{,}8\ 10^{-8}$ W.m^{-2}.K^{-4} est la constante de Stefan-Boltzmann et T la température (en K).

❑ **25** — En admettant que la solution précédente convienne malgré tout, décrire l'évolution de la température dans le tore au cours du temps en traçant sur un même graphique les profils des températures à diverses dates. Justifier en particulier le fait que T tend uniformément vers zéro.

PARTIE II : e3a PSI – extrait ; dopage d'un semi-conducteur

Au sein d'un milieu homogène, considérons un ensemble de particules dont la concentration n'est pas uniforme. Ces particules peuvent être des molécules, des atomes ou des ions, des défauts ponctuels, des électrons libres, etc … Dans l'hypothèse d'une diffusion unidirectionnelle, leur densité (ou concentration) particulaire n(x,t) dépend de leur position le long de la direction Ox. En 1885, dans le cadre de ses travaux, Adolf Fick proposa la loi phénoménologique de diffusion. Cette loi introduit le coefficient de diffusion (ou diffusivité) D et relie le vecteur densité volumique de particules $\vec{j}_D$ au gradient de concentration particulaire n.

A1. Citer la loi physique sur laquelle, à votre avis, Fick s'est appuyé pour élaborer sa théorie.

A2. Rappeler la loi de Fick ; expliquer le caractère « phénoménologique » de cette loi. Justifier l'existence d'un flux de particules et son orientation relative vis à vis du gradient de concentration.

La loi de Fick ne faisant apparaître que les variations spatiales de la concentration particulaire à un instant t, il convient de la compléter par une équation de bilan lorsque le flux de particules varie au cours du temps. Considérons un cylindre infiniment long, de section S constante, parallèle à la direction Ox de la diffusion.

A3. Effectuer un bilan de matière sur un volume élémentaire de section S et d'épaisseur dx pour établir une relation traduisant la conservation du nombre de particules. En déduire l'équation de la diffusion : $\dfrac{\partial n}{\partial t} = D\dfrac{\partial^2 n}{\partial x^2}$.

A4. Par une analyse dimensionnelle, établir une relation qualitative exprimant la longueur caractéristique L du phénomène de diffusion en fonction de l'ordre de grandeur τ de sa durée et du coefficient de diffusion D.

A5. Réécrire l'équation de la diffusion dans le cas où le coefficient de diffusion varie avec la concentration de l'espèce diffusante. Proposer un mode de résolution de cette équation.

En réalité, l'écoulement des particules dans une direction donnée peut avoir deux origines : l'une est la conduction induite par le gradient de concentration, l'autre est la convection provoquée par l'action d'une force extérieure (dite force de transport) qui déplace les particules avec une vitesse moyenne v constante.

A6. Exprimer le vecteur densité volumique de particules $\vec{j}_T$ pour la seule convection en fonction de v et n(x,t). Compléter la loi de Fick pour obtenir une nouvelle équation de la diffusion dans le cas particulier où D et v sont indépendants de la densité de particules.

Pour illustrer la diffusion, considérons la situation expérimentale du dopage d'un semi-conducteur d'arséniure de gallium (AsGa) avec du silicium. A l'instant $t = 0$, N_0 atomes de silicium par unité de surface sont brusquement introduits en $x = 0$, à la surface d'une plaquette d'AsGa considérée comme un milieu semi-infini.
L'analyse du régime instationnaire montre que le nombre d'atomes de silicium N(x,t) par unité de volume à l'abscisse x et à l'instant t s'écrit :

$$N(x,t) = \frac{K}{\sqrt{t}} \exp\left(-\frac{ax^2}{t}\right).$$

A7. Etablir la relation entre a et D, pour que la répartition d'atomes N(x,t) soit solution de l'équation de diffusion établie en A3. Traduire la conservation du nombre d'atomes introduits et, par le changement de variable $u = \frac{x}{2\sqrt{Dt}}$ se référant aux compléments mathématiques en fin d'épreuve, déterminer la valeur de K en fonction de N_0 et D.

Le schéma ci-dessous (Figure 1) traduit le résultat du dopage de la plaquette d'AsGa : l'évolution de la distribution des atomes de silicium est tracée en fonction de l'abscisse x, à différents instants.

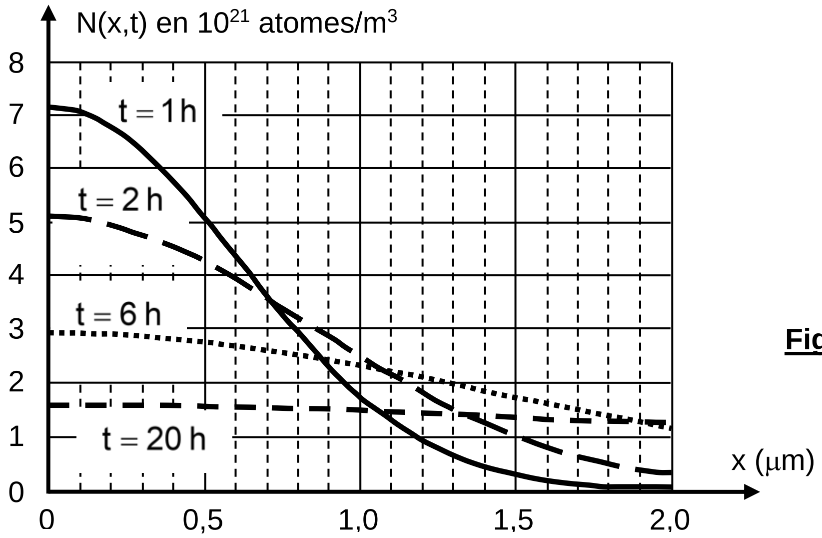


Figure 1

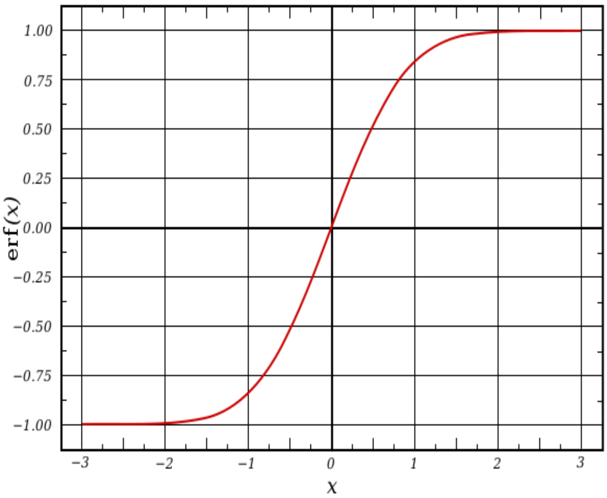
A8. Analyser la forme des courbes obtenues. Que vaut l'aire sous chacune de ces courbes ? Déterminer, à un instant t donné (en adoptant par exemple $t = 1\,h$), la profondeur d'implantation L des atomes de silicium correspondant à une concentration moitié de la concentration injectée en $x = 0$ (il s'agit de la demi-largeur à mi-hauteur).

A9. Proposer un mode de détermination du coefficient de diffusion D du silicium dans AsGa. Estimer l'ordre de grandeur du coefficient de diffusion D.

► *Définition de la **fonction erreur** (error function) :* $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-s^2)\,ds$

▶ *Propriétés de erf(x) :* $\mathrm{erf}(x) = -\mathrm{erf}(-x)$; $\mathrm{erf}(0) = 0$; $\mathrm{erf}(\pm\infty) = \pm 1$

$$\mathrm{erfc}(x) = 1 - \mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} \exp(-s^2)\, ds \; ; \; \frac{d}{dx}\left[\mathrm{erf}(x)\right] = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2)$$



Représentation de la fonction erreur

▶ *Intégrale d'Euler :* $\int_0^{\infty} \exp(-s^2)\, ds = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$

PARTIE III : Centrale PC – extrait ; bombe nuclaire

On rappelle par ailleurs les expressions d'analyse vectorielle :

- En coordonnées sphériques :

$$\Delta f(r) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r}\right)$$

- En coordonnées cylindriques :

$$\Delta f(r) = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial f}{\partial r}\right)$$

$$\overrightarrow{\mathrm{rot}}(\vec{U}) = \left(\frac{1}{r}\frac{\partial U_z}{\partial \theta} - \frac{\partial U_\theta}{\partial z}\right)\vec{e_r} + \left(\frac{\partial U_r}{\partial z} - \frac{\partial U_z}{\partial r}\right)\vec{e_\theta} + \frac{1}{r}\left(\frac{\partial (r U_\theta)}{\partial r} - \frac{\partial U_r}{\partial \theta}\right)\vec{e_z}$$

L'élément uranium se présente essentiellement sous la forme de deux isotopes ; le plus répandu à l'état naturel, U^{238}, possède 92 protons et 146 neutrons ; l'autre isotope est U^{235} dit isotope « fissile ». Lorsqu'un noyau U^{235} est heurté par un neutron (noté n), il peut « fissionner », suivant la réaction suivante : ${}^{235}U_{92} + n \to X + Y$ + plusieurs neutrons + énergie, où X et Y sont deux noyaux le plus souvent radioactifs.

Le nombre moyen de neutrons émis dans la désintégration d'un noyau d'U^{235} est $\nu \approx 2,5$. On voit ainsi la possibilité d'une réaction en chaîne, utilisable de manière contrôlée dans une centrale nucléaire, ou de manière explosive dans une bombe. L'énergie libérée par la désintégration d'un noyau d'U^{235} est en moyenne de $170 \cdot 10^6 eV$ $(1 eV = 1,6 \cdot 10^{-19} J)$. Lorsque la masse du bloc d'uranium devient supérieure à une valeur critique, la réaction en chaîne s'emballe et devient explosive.

I.A - Diffusion de neutrons

I.A.1) Quelle serait l'énergie libérée par la désintégration totale d'un kilogramme d'U^{235} ?

I.A.2) L'énergie libérée par l'explosion d'une tonne de trinitrotoluène, un explosif chimique classique encore dénommé TNT, est de $4,2 \cdot 10^9 \text{Joule}$. En déduire l'énergie libérée par la désintégration supposée totale d'un kilogramme d'U^{235}, exprimée en équivalent tonnes de TNT. Commenter le résultat.

I.A.3) Soit $N(x, y, z, t)$ le nombre de neutrons par unité de volume, et $\vec{J}$ le vecteur densité de flux de neutrons, tel que $\vec{J} \cdot \overrightarrow{dS}\ dt$ représente le nombre de neutrons traversant la surface $\overrightarrow{dS}$ pendant l'intervalle de temps dt. On donne l'équation fondamentale de la neutronique :

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\operatorname{div} \vec{J} + \left(\frac{\nu - 1}{\tau}\right) N(x, y, z, t) .$$

On rappelle de plus la loi de Fick $\vec{J} = -D\overrightarrow{\text{grad}}N$ et la relation $\operatorname{div}(\overrightarrow{\text{grad}}N) = \Delta N$.

a) En vous aidant d'analogies avec d'autres domaines de la Physique, pouvez-vous interpréter les deux termes situés à droite de l'égalité ?

b) Quelle interprétation proposez-vous pour la constante τ ?

c) Expliquer, en particulier, pourquoi $\nu - 1$ intervient dans le terme de droite, et pas ν.

I.B - Masse critique

On cherche à déterminer la masse du bloc d'uranium (ou masse critique) pour laquelle la réaction en chaîne peut s'emballer et devenir explosive.

I.B.1) *Calcul de la masse critique dans le cas d'une boule d'uranium 235 pur, de rayon R*

On suppose que le problème est à géométrie sphérique de telle sorte que l'on puisse écrire :

$$N = N(r, t) = N_1(r)e^{\nu' t/\tau} \text{ et } \vec{J}(r,t) = -D\frac{\partial N}{\partial r}\vec{e}_r .$$

Dans cette situation, on a :

$$\Delta N_1 = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dN_1}{dr}\right) .$$

a) On pose

$$g(r) = rN_1(r) \text{ et } \alpha^2 = \left|\frac{\nu' - \nu + 1}{D\tau}\right| ;$$

montrer que la fonction $g(r)$ est solution d'une équation différentielle très classique. On recherche une fonction $r \to N_1(r)$ telle que $N_1(r = R) = 0$, que N_1 ne s'annule pas pour $r \in]0, R[$ et telle que N_1 tende vers une limite finie quand r tend vers zéro. Montrer que c'est possible si

$$\nu' = (\nu - 1) - \frac{\pi^2 D\tau}{R^2} .$$

b) Interpréter le fait que ν' augmente si R croît.

c) Quelle est la différence fondamentale entre les cas $\nu' > 0$ et $\nu' < 0$?

d) Exprimer le rayon minimal R_c tel qu'il puisse y avoir réaction en chaîne, en fonction de D, τ et ν.

e) On donne pour U_{92}^{235} de masse volumique $\rho = 19 \cdot 10^3 \text{kg m}^{-3}$: $\pi^2 D\tau = 2,2 \cdot 10^{-2} \text{m}^2$ et $\nu = 2,5$. Calculer la valeur du rayon critique R_c, ainsi que la masse critique M_c (masse de la boule d'uranium de rayon R_c).

I.B.2) *Mise en œuvre d'une bombe nucléaire*

Pour des raisons évidentes, on ne peut pas stocker sans précautions une masse d'uranium supérieure à la masse critique. Quelle disposition raisonnable pouvez-vous suggérer pour le conditionnement d'une arme nucléaire, embarquée dans un missile ? Comment pourrait-on déclencher l'explosion ?