

## Master OAM – Proposition de projet

A l'Institut de Physique de Nice  
CNRS & Université Côte d'Azur

---

### Comment simuler la diffusion atomique dans un nanopore ?

---

On parle de diffusion de Knudsen dans un gaz lorsque le libre parcours moyen d'un atome devient de l'ordre de la dimension typique du système (1). C'est le cas, par exemple, pour un gaz de faible densité confiné dans un milieu nanométrique. Dans cette situation, la diffusion va être gouvernée essentiellement par la loi de rebond entre un atome et la paroi du milieu le confinant. Il se trouve que cette loi n'est ni « spéculaire », ni « aléatoire uniforme » ; il s'agit de la loi de Lambert (ou « Cosine law »).

Le but de ce projet est tout d'abord de bien comprendre la physique sous-jacente à cette notion de diffusion de Knudsen en se basant sur l'article référencé ci-dessous (2). Il faudra bien comprendre la théorie prédisant, en particulier, la distribution du module des vitesses atomiques. Les résultats théoriques seront comparés à des simulations faites en utilisant un code de dynamique moléculaire similaire à celui utilisé dans le cadre de vos TP de Méthodes Mathématiques et numériques. Ce code permettra de simuler de manière réaliste la diffusion d'un ou de plusieurs atomes dans un nanopore.

Enfin, si l'étudiant en a la possibilité, il pourra investiguer la transition entre un régime de diffusion de Knudsen et celui d'un gaz classique.

**Contact** – Franck Celestini : [franck.celestini@univ-cotedazur.fr](mailto:franck.celestini@univ-cotedazur.fr)

[1] [https://en.wikipedia.org/wiki/Knudsen\\_diffusion](https://en.wikipedia.org/wiki/Knudsen_diffusion)

[2] *Cosine law at the atomic scale: Toward realistic simulations of Knudsen diffusion.* F. Celestini and F. Mortessagne. *Phys. Rev. E.* **77**, 021202 (2008).