

補足3-1 気体分子運動論による理想気体の粘性係数の導出

気体分子はその温度に応じて**熱的なゆらぎ**（ランダムな振動）により激しく衝突している。これを分子の位置の交換と大まかに考えることにする。図の分子アと分子イが異なる運動量をもっていて、 l の距離でその**位置を交換すると、その差の運動量がその方向に移動**したことになる。ここでは単にx方向の運動量にのみ着目することにする（x方向の速度を u とする）。

これを踏まえて、y方向の運動量移動を考える。下の図のようにy方向のある位置 y' において面積 A のある面を通過する運動量を、位置 y' の分子アと $y'+l$ の分子イの交換と位置 y' の分子イと $y'-l$ の分子ウの交換で考える。

ランダムな振動で \bar{v} その平均速度が

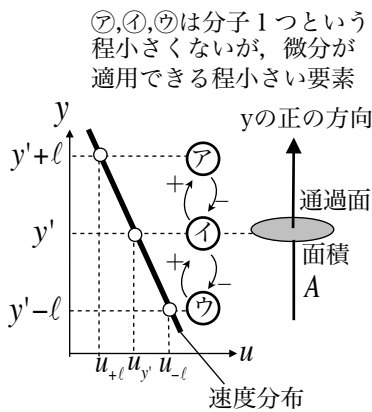
分子の速度分布がMaxwell-Boltzmann分布とすると

$$\bar{v} = \left(\frac{8k_B T}{\pi m} \right)^{1/2}$$

気体分子

$$l = \frac{1}{\sqrt{2} \pi n d^2}$$

分子同士は激しく衝突して衝突までの距離の平均を平均自由行程 とする



要素⑦, ④, ⑤はその位置での運動量を持ったまま位置を交換する。図の通過面を通過する運動量を考えるとして ⑦と④の交換では⑦がyの負の方向、④が正の方向なので、通過する運動量は（④の運動量-⑦の運動量）④と⑤の交換も同様にして（⑤の運動量-④の運動量）と考える。

さらに、運動量が移動する場合は、対象とする面を対象とする物体の表面としてイメージすると、**運動量の変化がその面に作用するせん断力に相当**と考えることができる。その際のせん断力の方向は**面の方向が正ならば正、負ならば負**の方向となる。この例では、面の方向が正なので、せん断力はxの正の方向すなわち、図に示す方向となる。

さて、流体要素が着目する面（対象面）を通して Δt 時間に通過する運動量を数式で表現すると

通過する体積 $\bar{v} \Delta t A$

通過する分子数 $n \bar{v} \Delta t A$

通過する運動量 $n \bar{v} \Delta t A m u$

1つの方向に着目すると $n \bar{v} \Delta t A m u \times \frac{1}{6}$

さて、ここでのせん断力は材料力学で勉強する応力（単位面積あたりの力）となっており、高校で勉強した力積が運動量変化に等しいことから、対象面を通過して面に入った運動量は粘性せん断力とすることができる。

$$\tau_{yx} A \Delta t = \frac{n \bar{v} \Delta t A}{6} \times \left\{ (m u_{y'} - m u_{+l}) + (m u_{-l} - m u_{y'}) \right\}$$

τ_{yx} : yの面に作用するx方向のせん断応力

u_{+l} と u_{-l} をTaylor展開によって近似する

$$u_{+l} = u_{y'} + l \left(\frac{du}{dy} \right)_{y'}$$

$$u_{-l} = u_{y'} - l \left(\frac{du}{dy} \right)_{y'}$$

τ_{yx} を書き下す。

$$\tau_{yx} = \frac{m n \bar{v}}{6} \times \left\{ (u_{y'} - u_{+l}) + (u_{-l} - u_{y'}) \right\} = \frac{m n \bar{v}}{6} \left[-2l \left(\frac{du}{dy} \right)_{y'} \right]$$

ニュートンの式 $\tau_{yx} = -\mu \left(\frac{du}{dy} \right)$

上の2つの式を比較して $\mu = \frac{m n \bar{v} l}{3}$ Maxwell-Boltzmann分布の \bar{v} と l を代入する

$$\mu = \frac{2}{3\pi d^2} \left(\frac{m k_B T}{\pi} \right)^{1/2}$$

m は分子1つの質量であるが、気体1モルということで考えれば

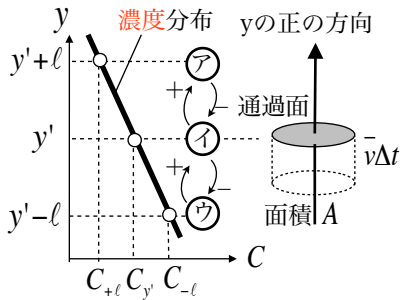
$$\mu \propto \sqrt{MT}$$

理想気体の分子運動論にMaxwell-Boltzmann分布を適用して気体の粘性係数を導出した。それは、

温度の1/2乗、分子量の1/2乗に比例する。

補足3-2 気体分子運動論による理想気体の拡散係数の導出

㉗, ㉘, ㉙は分子1つという程小さくないが、微分が適用できる程小さい要素



要素 ㉗, ㉘, ㉙ は熱的なゆらぎにより相互の位置を交換, それに伴い, 図の通過面を通過する物質量を考える。㉗と㉘の交換では㉗がyの負の方向, ㉘が正の方向なので, 通過する物質量は (㉘の物質量-㉗の物質量) ㉘と㉙の交換も同様にして (㉙の物質量-㉘の物質量) と考える。他の移動係数を考える時も同じだが, それぞれの交換では図の面を通過しているかどうか微妙だが, 通過していると考えよう。

さて, ではその物質量をどのように考えるのか?

要素の交換はゆらぎによるもので, その速度を \bar{v} と考える (平均速度)。 Δt 時間に面を通過する体積は $\bar{v}A\Delta t$ となる。濃度 C は単位体積あたりの物質量で定義されているので, 通過する物質量は $C\bar{v}A\Delta t$ となる。熱的なゆらぎは等方的でランダムな運動なので, 前後左右上下という方向の中で, 交換が実現する方向は1つなので, 1/6を乗じる。

C_{+l}, C_{-l} は Taylor展開より

$$C_{+l} = C_{y'} + l \left(\frac{dC}{dy} \right)_{y'}$$

$$C_{-l} = C_{y'} - l \left(\frac{dC}{dy} \right)_{y'}$$

以上のことから, 着目面を通過する物質量は $\frac{\bar{v}A\Delta t}{6} \{ (C_{y'} - C_{+l}) + (C_{-l} - C_{y'}) \}$ と導出できる。

一方, 移動速度式で定義していた物質流速 N を用いると $NA\Delta t$ と表現できる。

両者は等しいので, $NA\Delta t = \frac{\bar{v}A\Delta t}{6} \{ (C_{y'} - C_{+l}) + (C_{-l} - C_{y'}) \}$

Taylor展開より右辺の { } 内は $(C_{y'} - C_{+l}) + (C_{-l} - C_{y'}) = C_{-l} - C_{+l} = C_{y'} - l \left(\frac{dC}{dy} \right)_{y'} - C_{y'} - l \left(\frac{dC}{dy} \right)_{y'} = -2l \left(\frac{dC}{dy} \right)_{y'}$

N はFickの第一法則でも表現できるので $N = -D \left(\frac{dC}{dy} \right)_{y'} = \frac{\bar{v}}{6} \left\{ -2l \left(\frac{dC}{dy} \right)_{y'} \right\} = -\frac{1}{3} \bar{v} l \left(\frac{dC}{dy} \right)_{y'}$ ここで, 添字のAとかBとか, 偏微分とか常偏分とかは自分の好きなように考えてよいことにしよう

係数を比較すると $D = \frac{1}{3} \bar{v} l$ \bar{v} はゆらぎの平均速度, l は衝突するまでの距離, 平均自由行程である。

分子の速度分布にMaxwell-Boltzmann分布を適用すると $\bar{v} = \left(\frac{8k_B T}{\pi m} \right)^{1/2}$ $l = \frac{1}{\sqrt{2} \pi n d^2}$

気体の拡散係数は $D = \frac{1}{3} \left(\frac{8k_B T}{\pi m} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{2} \pi n d^2}$ となる。
 k_B : ボルツマン定数 (J/K) T : 温度 (K)
 n : 分子密度 (1/m³) m : 分子質量 (kg)
 d : 分子直径 (m) D : 拡散係数 (m²/s)

粘性係数と熱伝導度では分子密度 n が約分されているので, 温度と分子量の依存性として表現されたが, ここでは n が残っているので, 理想気体の状態方程式より, さらに展開する。

理想気体の状態方程式 $PV = mRT$ m : モル数 $R = k_B N_A$ N_A : アボガドロ定数

m モルの理想気体の分子密度はその定義より $n = \frac{mN_A}{V}$ と表される。さらに状態方程式より $n = \frac{P}{k_B T}$

上の拡散係数の式に代入して整理する。 $D = \frac{1}{3} \left(\frac{8k_B T}{\pi m} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{2} \pi d^2} \frac{k_B T}{P} = \frac{2}{3d^2} \left(\frac{k_B T}{\pi} \right)^{3/2} \frac{1}{P\sqrt{m}}$

m は分子1つの質量であるが, 気体1モルということで考えれば

$$D \propto \frac{T\sqrt{T}}{P\sqrt{M}}$$

理想気体の拡散係数は温度Tの3/2乗, 分子量Mの-1/2乗, 圧力の-1乗に比例する