03

Барометрическое распределение плотности газа, подчиняющегося уравнению состояния Лоренца

© А.Е. Дубинов[1,2]

[1] Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики,
607188 Саров, Нижегородская обл., Россия
[2] Саровский физико-технический институт — филиал Национального исследовательского ядерного университета „Московский инженерно-физический институт“,
607186 Саров, Нижегородская обл., Россия
e-mail: dubinov-ae@yandex.ru

Поступило в Редакцию 3 декабря 2014 г.
В окончательной редакции 11 февраля 2025 г.
Принято к публикации 11 февраля 2025 г.

Получена точная явная барометрическая формула для неидеального газа, подчиняющегося уравнению состояния Лоренца. Формула описывает распределение плотности такого газа в однородном гравитационном поле. Приведен пример применения формулы при выводе отношения типа Эйнштейна–Смолуховского для газа с уравнением состояния Лоренца в гравитационном поле.

Ключевые слова: неидеальный газ, гравитационное поле, барометрическая формула, уравнение состояния Лоренца.

DOI: 10.61011/JTF.2025.06.60459.435-24

Введение

Барометрическая формула для некоторого газа представляет собой зависимость концентрации газа $n(x)$ (или его плотности $\rho(x) = mn(x)$) в гравитационном поле $U(x)$ от высоты x при заданных в каком-либо сечении концентрации $n(x = 0) = n_0$ и температуре T. В однородном и стационарном гравитационных полях барометрическая формула имеет вид [1,2]:

$$n(x) = n_0 \exp\left(-\frac{mgx}{kT}\right) = n_0 \exp\left(-\frac{x}{\Lambda}\right), \qquad (1)$$

где m — масса частиц газа, g — ускорение свободного падения (ускорение в гравитационном поле), k — постоянная Больцмана, $\Lambda = kT/mg$ — характеристическая длина, на которой концентрация спадает в e раз. Формула (1) справедлива только для газа с уравнением состояния $P = nkT$ при фиксированной температуре (изотермический случай), где P — давление газа. Она широко используется для описания различных процессов динамики газов, жидкостей и плазмы [3–6], а также в химии [7,8], в планетных [9,10] и астрофизических науках [11].

Известны барометрические формулы и распределения концентрации и плотности в потенциальном поле и для некоторых других газов. Например, в [6,12–14] для описания нелинейных процессов в плазме используется аналогичная формула для адиабатического и политропного уравнений состояния идеального газа, а в [15,16] рассмотрены распределения модельного газа твердых сфер в гравитационном поле. В [17] представлено релятивистское обобщение барометрической формулы для ряда уравнений состояния, которое применено для политропного уравнения состояния газа, уравнения состояния вырожденного электронного газа в присутствии атомных ядер, уравнения состояния вырожденного нейтронного газа и уравнения состояния фотонного газа.

Известны барометрические формулы для квантовых газов. Так, в [18,19] выведены барометрические распределения бозонного газа, а в [20] — точная барометрическая формула для фермионного газа при частичном квантовом вырождении. Барометрическая формула для фермионов была использована, например, в теориях ионно-звуковых [21,22] и ленгмюровских волн [23,24] в плазме с квантово-вырожденными электронами. Была также выведена барометрическая формула для ультрарелятивистски вырожденного газа (в котором энергия Ферми много больше массы покоя частиц), подчиняющегося уравнению состояния Чандрасекара [25].

Важное практическое значение имеют барометрические формулы для реальных (неидеальных) газов. Аналитические исследования барометрических распределений для газов, подчиняющихся полиномиальным уравнениям состояния Ван-дер-Ваальса и Воля (Wohl), были проведены в [26,27], а в недавней работе [28] была выведена барометрическая формула для трансцендентного уравнения состояния Дитеричи.

Для дальнейшего развития этого направления в теории равновесия и динамики газов требуется пополнение перечня точных барометрических формул для других уравнений состояния реальных (неидеальных) газов.

В 1881 г. Х.А. Лоренц предложил полиномиальное уравнение состояния [29] (см. также [30,31]):

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)V = RT\left(1 + \frac{b}{V}\right), \tag{2}$$

где P — давление газа, V — молярный объем, R — универсальная газовая постоянная, a, b — параметры, имеющие тот же смысл, что и в уравнении Ван-дер-Ваальса: эти постоянные учитывают притяжение и отталкивание частиц газа. Несмотря на то что уравнение состояния Лоренца известно достаточно давно и оно математически проще уравнения Ван-дер-Ваальса, барометрическая формула для газа, подчиняющемуся (2), до сих пор была неизвестна. Целью настоящей работы являлся математический вывод точной и явной барометрической формулы для неидеального газа из уравнения состояния Лоренца (2). Отметим, что явные представления барометрических формул для реальных газов Ван-дер-Ваальса в [26,27] и Дитеричи в [28] получить не удалось. Использовать же неявные формулы в форме обратных функций из [26–28] в теоретических расчетах весьма неудобно.

1. Вывод барометрической формулы

Сначала перепишем уравнение (2) в переменных „давление–концентрация“

$$P = nkT(1 + \bar{\bar{b}}n) - \bar{\bar{a}}n^2. \tag{3}$$

Здесь $\bar{\bar{a}}$, $[\mathrm{J}\cdot m^3] = a/N_A^2$ и $\bar{\bar{b}}$, $[\mathrm{m}^3] = b/N_A$ — приведенные параметры уравнения состояния Лоренца, N_A — постоянная Авогадро. Легко видеть, что в пределе

$$\lim_{\bar{\bar{a}},\bar{\bar{b}}\to 0} nkT(1 + \bar{\bar{b}}n) - \bar{\bar{a}}n^2 = nkT, \tag{4}$$

т.е. уравнение Лоренца переходит в этом пределе в уравнение состояния идеального газа.

Существует несколько способов вывода барометрической формулы. Мы будем следовать наиболее простому способу — газостатическому, использованному, например, в [25,28,32]. Для этого рассмотрим уравнение газостатического равновесия

$$\frac{dU}{dx} + \frac{1}{n}\frac{dP}{dx} = 0. \tag{5}$$

Подставим преобразованное уравнение состояния (3) в уравнение (5) и получим следующее обыкновенное дифференциальное уравнение:

$$\frac{dU}{dx} + \left(\frac{kT}{n} + 2\bar{\bar{b}}kT - 2\bar{\bar{a}}\right)\frac{dn}{dx} = 0. \tag{6}$$

Уравнение (6) легко интегрируется, его общее решение с произвольной постоянной C есть

$$U + kT\ln n + 2(\bar{\bar{b}}kT - \bar{\bar{a}})n = C. \tag{7}$$

Постоянную C находим из условия $n(U = 0) = n_0$. Тогда, подставляя в (7) выражение для потенциальной энергии $U = mgx$ и выражение для C, получим

$$mgx + kT\ln\frac{n}{n_0} + 2(\bar{\bar{b}}kT - \bar{\bar{a}})(n - n_0) = 0. \tag{8}$$

Фактически уравнение (8) представляет собой барометрическую форму в неявном виде. В ней второе слагаемое слева соответствует идеальному газу, а третье слагаемое — поправкам Лоренца в уравнении состояния. Уравнение (8) удается разрешить относительно n и получить барометрическую формулу в более удобном явном виде:

$$n = n_0 \exp\left\{-W_0\left[G\exp\left(G - \frac{x}{\Lambda}\right)\right] + \left(G - \frac{x}{\Lambda}\right)\right\}, \tag{9}$$

где введен безразмерный параметр

$$G = \frac{2n_0(\bar{\bar{b}}kT - \bar{\bar{a}})}{kT}, \tag{10}$$

который можно назвать параметром неидеальности газа, подчиняющегося уравнению состояния Лоренца, а функция $W_0[\ldots]$ — основная (положительная) ветвь функции Ламберта, являющейся обратной к функции $x\cdot\exp(x)$ [6,33,34]. Легко убедиться, что в пределе $G \to 0$ полученная барометрическая формула (9) переходит в (1).

2. Численный пример

Была рассчитана зависимость (9) для нескольких значений параметра G. Результаты расчетов представлены на рисунке.

Рисунок показывает, что барометрическая зависимость для неидеального газа, подчиняющегося уравнению состояния Лоренца, так же как и для идеального газа, является убывающей функцией, причем с ростом параметра неидеальности G градиент функции снижается.

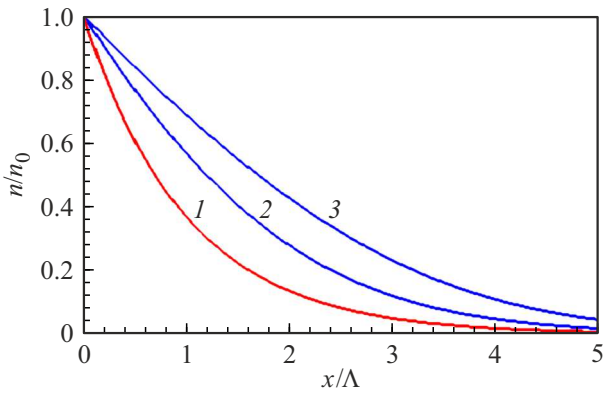

График барометрической зависимости (9) при различных значения параметра неидеальности G: *1* — при $G = 0$ (идеальный газ); *2* — при $G = 1$; *3* — при $G = 2$.

3. Отношение коэффициента диффузии к подвижности

Выведенная барометрическая формула (9) может быть использована, например, для тестирования кодов молекулярной динамики, в которых тем или иным способом моделируются реальные газы.

Приведем еще один пример использования полученной формулы (9) для аналитических расчетов. Известна, например, знаменитая формула Эйнштейна–Смолуховского, выражающая отношение коэффициента диффузии D к подвижности μ частиц идеального газа в потенциальном (электрическом) поле [35–38]:

$$\frac{D}{\mu} = kT. \tag{11}$$

Примечательно, что это отношение не зависит от концентрации газа.

Можно вывести формулу отношения D/μ, аналогичную (11), для газа, подчиняющегося уравнению состояния Лоренца. Для этого необходимо вычислить

$$\frac{D}{\mu} = -\frac{n(U)}{dn(U)/dU}. \tag{12}$$

Заменяя в (9) аргумент x/Λ на новый аргумент U/kT и вычисляя затем (12), получим

$$\frac{D}{\mu} = kT\left\{1 + W_0\left[G\exp\left(G - \frac{U}{kT}\right)\right]\right\}. \tag{13}$$

Подставим в (13) выведенное ранее выражение для $U = mgx$ (8), и, воспользовавшись определением функции Ламберта, после несложных преобразований запишем в итоге отношение

$$\frac{D}{\mu} = kT\left\{1 + W_0\left[G\frac{n}{n_0}\exp\left(\frac{n}{n_0}G\right)\right]\right\} = kT\left(1 + G\,\frac{n}{n_)}\right), \tag{14}$$

в котором первое слагаемое — kT — совпадает с (11), а второе слагаемое следует из поправок Лоренца в уравнение состояния. Если второе слагаемое является положительным, то отношение D/μ в (13) будет больше, чем для идеального газа. Отметим, что в отличие от случая идельного газа отношение D/μ зависит от концентрации газа.

4. Заключение

Выведена точная явная барометрическая формула для неидеального газа, подчиняющегося уравнению состояния Лоренца. Для ее математического вывода использовалось уравнение газостатического равновесия.

Полученная формула описывает распределение плотности такого газа в однородном гравитационном поле. Приведен численный пример, показывающий влияние параметра неидеальности на градиент убывания концентрации. Формула может быть полезна, например, при тестировании кодов молекулярной динамики. Приведен пример применения формулы при выводе отношения типа Эйнштейна–Смолуховского для газа с уравнением состояния Лоренца в потенциальном поле.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Курс теоретической физики. Т. 5. Статистическая физика* (Наука, М., 1976)

[2] P. Atkins, J. de Paula. *Atkins' Physical Chemistry* (Univ. Press, Oxford, 2006)

[3] A.A. Pokhunkov. Planet. Space Sci., **11**, 441 (1963). DOI: 10.1016/0032-0633(63)90272-1

[4] G. Lente, K. Ösz. Chem. Texts, **6**, 13 (2020). DOI: 10.1007/s40828-020-0111-6

[5] O. Klein. Rev. Mod. Phys., **21**, 531 (1949). DOI: 10.1103/RevModPhys.21.531

[6] A.E. Dubinov. Phys. Plasmas, **29**, 020901 (2022). DOI: 10.1063/5.0078573

[7] Г.А. Абакумов, В.Б. Федосеев. ЖФХ, **74**, 1579 (2000).

[8] O.L. Bottecchia. Quim. Nova, **32**, 1965 (2009). [In Portuguese]. DOI: 10.1590/S0100-40422009000700047

[9] M.N. Berberan-Santos, E.N. Bodunov, L. Pogliani. J. Math. Chem., **47**, 990 (2010). DOI: 10.1007/s10910-009-9620-7

[10] Z. Liu, B. Lin, J.F. Campbell, J. Yu, J. Geng, S. Jiang. Atmos. Meas. Tech., **17**, 2977 (2024). DOI: 10.5194/amt-17-2977-2024

[11] G.S. Saakyan, D.M. Sedrakyan. Astrophys., **8**, 170 (1972). DOI: 10.1007/BF01002166

[12] C. Sack, H. Schamel. Plasma Phys. Contr. Fus., **27**, 717 (1985). DOI: 10.1088/0741-3335/27/7/002

[13] A.E. Dubinov. J. Appl. Mech. Techn. Phys., **48**, 621 (2007). DOI: 10.1007/s10808-007-0078-8

[14] A.E. Dubinov, O.V. Suslova. J. Exper. Theor. Phys., **131**, 844 (2020). DOI: 10.1134/S1063776120100040

[15] H. Chen, H. Ma. J. Chem. Phys., **125**, 024510 (2006). DOI: 10.1063/1.2213249

[16] I.N. Cherepanov, P.V. Krauzin. J. Appl. Mech. Techn. Phys., **60**, 1005 (2019). DOI: 10.1134/S002189441906004X

[17] H. Dehnen, O. Obregon. Astron. Astrophys., **12**, 161 (1971). https://adsabs.harvard.edu/full/1971A%26A....12..161D

[18] J.V. Pulé. J. Math. Phys., **24**, 138 (1983). DOI: 10.1063/1.525584

[19] M. Van den Berg, J.T. Lewis. Commun. Math. Phys., **81**, 475 (1981). DOI: 10.1007/BF01208269

[20] А.А. Дубинова. ЖТФ, **79** (2), 48 (2009). [A. Dubinova. Tech. Phys., **54** (2), 210 (2009). DOI: 10.1134/S106378420902008X]

[21] A.E. Dubinov, A.A. Dubinova, M.A. Sazonkin. J. Comm. Technol. Electr., **55**, 907 (2010). DOI: 10.1134/S1064226910080097

[22] A.E. Dubinov, M.A. Sazonkin. J. Exper. Theor. Phys., **111**, 865 (2010). DOI: 10.1134/S1063776110110178

[23] A.E. Dubinov, I.N. Kitayev. Phys. Plasmas, **21**, 102105 (2014). DOI: 10.1063/1.4897327UH

[24] I.N. Kitayev, A.E. Dubinov. Rev. Mod. Plasma Phys., **8**, 31 (2024). DOI: 10.1007/s41614-024-00170-7

[25] A.E. Dubinov. Astrophys., **63**, 580 (2020). DOI: 10.1007/s10511-020-09660-1
[26] R. Ruedy. Canadian J. Res., **9**, 637 (1933). DOI: 10.1139/cjr33-115
[27] M.N. Berberan-Santos, E.N. Bodunov, L. Pogliani. Amer. J. Phys., **70**, 438 (2002). DOI: 10.1119/1.1424264
[28] А.Е. Дубинов. ВАНТ, **1**, 35 (2024).
[29] H.A. Lorentz. Ann. Phys., **12**, 127 (1881). [In German]. DOI: 10.1002/andp.18812480110
[30] М.П. Вукалович, И.И. Новиков. *Уравнение состояния реальных газов* (Госэнергоиздат, М.-Л., 1948)
[31] S.M. Walas. *Phase Equilibria in Chemical Engineering* (Butterworth-Heinemann, Boston-London-Sydney-Wellington-Durban-Toronto, 2013)
[32] A.E. Dubinov. Adv. Space Res., **71**, 1108 (2023). DOI: 10.1016/j.asr.2022.08.062
[33] I.D. Dubinova. Plasma Phys. Rep., **30**, 872 (2004). DOI: 10.1134/1.1809403
[34] А.Е. Дубинов, И.Д. Дубинова, С.К. Сайков. *W-функция Ламберта и ее применение в математических задачах физики* (РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров, 2006)
[35] A. Einstein. Ann. Phys., **322**, 549 (1905) [In German]. DOI: 10.1002/andp.19053220806
[36] M. von Smoluchowski. Ann. Phys., **326**, 756 (1906) [In German]. DOI: 10.1002/andp.19063261405
[37] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Курс теоретической физики. Т. 5. Гидродинамика* (Наука, М., 1986)
[38] Y. Roichman, N. Tessler. Appl. Phys. Lett., **80**, 1948 (2002). DOI: 10.1063/1.1461419