

КЛЮЧЕВЫЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НУКЛЕАЦИИ НА ЗАРЯЖЕННЫХ И НЕЙТРАЛЬНЫХ ЧАСТИЦАХ В РАМКАХ ГРАДИЕНТНОГО МЕТОДА ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

А.К. Щекин, Т.С. Лебедева, Д.В. Татьянаенко

В рамках градиентного метода функционала плотности с моделью Карнахана–Старлинга и Ван-дер-Ваальса для описания вклада твердых сфер вычислены профили плотности конденсата в малых критических каплях при гомогенной нуклеации, а также в устойчивых и критических каплях при гетерогенной нуклеации на твердом заряженном и нейтральном ядре конденсации молекулярного размера. Вычисления проведены для воды и аргона при разных значениях химического потенциала конденсата, что позволило определить высоты активационного барьера гомогенной и гетерогенной нуклеации как функции пересыщения пара при заданных значениях температуры системы. Взаимодействие молекул конденсата с твердым ядром описывалось короткодействующим потенциалом притяжения молекулярных сил. В случае заряженного ядра учитывался дальнодействующий кулоновский потенциал электрических сил. Диэлектрические проницаемости вычислялись как известные функции локальной плотности флюида и температуры. Для воды и для аргона построены зависимости химического потенциала молекул конденсата в капле как функции размера капли с учетом капиллярных, электростатических и молекулярных сил в капле с ядром конденсации.