

Аннотация на курсовую работу

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ
УСТОЙЧИВЫХ И НЕУСТОЙЧИВЫХ ПАРОВЫХ ПРОСЛОЕК
ВОКРУГ ЛИОФОБНЫХ НАНОЧАСТИЦ**

Студент: Гостева Любовь Андреевна

Руководитель: д. ф.-м. н., проф.

Щекин Александр Кимович

В последние годы вопрос о существовании устойчивых нанопузырьков на лиофобных поверхностях привлек большое внимание. Эксперименты показали, что поверхностные нанопузырьки (пузырьки газа, расположенные на границе жидкость-твердое тело) существуют намного дольше (несколько часов и дней), чем можно было ожидать из теории диффузного растворения, которая предсказывает исчезновение нанопузырьков за микросекунды.

Цель работы - доказать существование устойчивых паровых пузырьков как устойчивых паровых прослоек между лиофобной поверхностью твердого тела (плоская подложка или сферическая наночастица - ядро) и жидкой фазой.

В данной работе в рамках метода функционала плотности с квадратом градиента плотности в деталях рассмотрена термодинамика формирования

- гомогенных пузырьков в растянутой аргоноподобной жидкости;
- паровых прослоек на плоской лиофобной подложке в стабильной жидкости;
- концентрических паровых оболочек вокруг сферической лиофобной частицы нанометровых размеров в растянутой жидкости.

При этом были использованы

- модель Карнахана-Старлинга и приближение среднего поля для взаимодействия молекул флюида между собой;
- потенциал Леннарда-Джонса для взаимодействия молекул флюида с молекулами твердой частицы или подложки.

Леофобность была учтена за счет соотношения энергетических параметров взаимодействия флюид-флюид и флюид-твердое тело (первый был взят значительно больше второго).

Было показано, что стабильные паровые прослойки на плоской и сферической лиофобной поверхности существуют.

Были найдены профили плотности паровых прослоек. Устойчивые паровые прослойки отличаются сильной неоднородностью и малой толщиной. Эквимолекулярные радиусы

устойчивых и неустойчивых концентрических нанопузырьков на сферической лиофобной частице возрастают при увеличении радиуса частицы.

Найдено поверхностное натяжение пузырьков в зависимости от радиуса эквимолекулярной разделяющей поверхности и проведено его сравнение с поверхностным натяжением пузырьков и капелек при гомогенной нуклеации по длине Толмена и эффективной константе жесткости. Наличие электрического заряда частицы сильнее влияет на поверхностное натяжение пузырька по сравнению со случаем гетерогенной нуклеации капелек.

Зависимость химического потенциала молекул флюида в концентрическом пузырьке на сферической лиофобной частице от радиуса пузырька имеет минимум, ниже которого гетерогенная нуклеация пузырьков становится безбарьерной. При увеличении энергетического параметра взаимодействия флюид-частица или электрического заряда на частице минимум химического потенциала сдвигается вниз и, таким образом, гетерогенной нуклеации пузырька затрудняется.

Зависимость расклинивающего давления в устойчивых паровых прослойках на плоской лиофобной подложке и на сферической лиофобной частице от толщины прослойки является убывающей, что свидетельствует об устойчивости системы.

Данная работа основана на статье “Thermodynamic properties of stable and unstable vapor shells around lyophobic nanoparticles”, написанной совместно с А.К. Щекиным и Т.С. Лебедевой и находящейся сейчас на рассмотрении в журнале *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, зарегистрирована как PHYSA-201246 18 апреля 2020 г.