

НУКЛЕАЦІЙНІ ЯВИЩА У ПЛИНІ АТОМІВ В ЕЛЕКТРИЧНОМУ ПОЛІ

О. В. Держко^{1,2}, В. М. Мигаль²

¹Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького, 1, Львів, 290011, Україна

²Львівський державний університет імені Івана Франка, кафедра теоретичної фізики,
вул. Драгоманова, 12, Львів, 290005, Україна

(Отримано 3 лютого 1998 р.)

На основі запропонованого раніше функціонала густини великого термодинамічного потенціалу для плинну дворівневих атомів у зовнішньому електричному полі (Журн. фіз. досл. 1, 402 (1997)) досліджено утворення нової фази в метастабільних парі й рідині. Вивчено вплив поля на нуклеаційний бар'єр для цих фазових перетворень.

Ключові слова: метод функціонала густини, нуклеаційний бар'єр, кавітаційний бар'єр.

PACS number(s): 64.70.Fx, 82.65.Dp, 62.60.Nh, 64.60.Qb

І. ВСТУПНІ ЗАУВАЖЕННЯ

Останніми роками спостерігається посилення інтересу до вивчення властивостей неоднорідних плиннів. Особливо зручним для таких досліджень є метод функціонала густини, який, завдяки наявності відповідної обчислювальної техніки, дає змогу простежити вплив на неоднорідні макроскопічні властивості (коефіцієнт поверхневого натягу, кут змочування, нуклеаційний бар'єр тощо) взаємодій між частинками, з яких складається плин. Застосування апарату методу функціонала густини до нуклеаційних явищ у класичному плинні запропоновано в низці робіт Д. Окстобі зі співробітниками [1–3]. У нашій попередній роботі [4] ми використали цю схему

для дослідження деяких неоднорідних властивостей плинну атомів у зовнішньому електричному полі. При цьому було обґрунтовано вибір вихідного функціонала великого термодинамічного потенціалу, побудовано фазову діаграму газ–рідина, знайдено температурну залежність коефіцієнта поверхневого натягу та залежність нуклеаційного бар'єра для утворення рідини в пересиченій парі від ступеня пересичення. Теперішня робота присвячена дослідженню виникнення як рідини в пересиченій парі так і пари в розтягненій рідині за наявності зовнішнього електричного поля.

Для завершеності викладу нагадаємо окремі результати роботи [4], які використовуватимемо надалі. Виходитимемо з такого функціонала густини великого термодинамічного потенціалу:

$$\beta\Omega[\rho(\mathbf{R})] = \int d\mathbf{R}_1 \rho(\mathbf{R}_1) \left\{ \ln [\Lambda^3 \rho(\mathbf{R}_1)] - \frac{1 - 6v\rho(\mathbf{R}_1) + 4v^2\rho^2(\mathbf{R}_1)}{[1 - v\rho(\mathbf{R}_1)]^2} \right\} - \frac{6\beta\sigma^3 a}{\pi} \int_{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2| \geq 2\sigma} d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \frac{\rho(\mathbf{R}_1)\rho(\mathbf{R}_2)}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|^6} - \beta\mu \int d\mathbf{R}_1 \rho(\mathbf{R}_1), \quad (1.1)$$

що містить внесок Карнагана–Старлінга від короткосяжного відштовхування між атомами й середньопольовий внесок від далекосяжної взаємодії, яка зазнає змін за наявності зовнішнього електричного поля. У (1.1) запроваджено такі позначення: Λ — довжина хвилі де Бройля атома, $v = \frac{4}{3}\pi\sigma^3$, σ — радіус атома, $\beta = \frac{1}{kT}$, $a = \frac{1}{48}v(E_1 - E_0)\aleph^2(1 + 2\aleph^2\mathcal{E}^2)$, $E_1 - E_0$ — енергія збудження атома, $\aleph \equiv \frac{|\mathbf{p}|^2}{\sigma^3(E_1 - E_0)}$ — безрозмірний параметр, який характеризує атом, $|\mathbf{p}|$ — величина дипольного моменту переходу атома, $\mathcal{E} = \frac{|\mathbf{E}|\sigma^3}{|\mathbf{p}|}$ — безрозмірна величина напруженості зовнішнього електричного поля. Рівняння для рівноважної густини $\rho(\mathbf{r})$ має вигляд

$$\frac{1}{\beta} \left\{ \ln [\Lambda^3 \rho(\mathbf{r})] + \frac{8v\rho(\mathbf{r}) - 9v^2\rho^2(\mathbf{r}) + 3v^3\rho^3(\mathbf{r})}{[1 - v\rho(\mathbf{r})]^3} \right\} - \frac{12\sigma^3 a}{\pi} \int_{|\mathbf{R} - \mathbf{r}| \geq 2\sigma} d\mathbf{R} \frac{\rho(\mathbf{R})}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|^6} - \mu = 0. \quad (1.2)$$

При цьому, підставивши розв'язок (1.2) у (1.1), отримуємо значення великого термодинамічного потенціалу неоднорідної системи, що вивчається, $\Omega(T, \mu, V)$.

Розглядаючи однорідні властивості (1.1), (1.2), коли $\rho(\mathbf{r}) = \rho$, знаходимо, що рівняння для рівноважної густини набуває вигляду

$$\ln(\Lambda^3 \rho) + \frac{8v\rho - 9v^2\rho^2 + 3v^3\rho^3}{(1 - v\rho)^3} - 2\beta a\rho - \beta\mu = 0. \quad (1.3)$$

Рівняння (1.3) разом зі співвідношенням (1.1) в однорідному випадку приводять до такого рівняння стану плинну:

$$\beta p = \rho \frac{1 + v\rho + v^2\rho^2 - v^3\rho^3}{(1 - v\rho)^3} - \beta a\rho^2. \quad (1.4)$$

При температурі, нижчій за критичну, плин є у вигляді двох фаз, що співіснують. Критичні параметри є такими: $\eta_c \approx 0.13044$, $\tau_c(\mathcal{E}) \approx 0.00196518\aleph^2(1 + 2\aleph^2\mathcal{E}^2)$, $\pi_c(\mathcal{E}) \approx 0.00009202\aleph^2(1 + 2\aleph^2\mathcal{E}^2)$; тут $\eta = v\rho$, $\tau = \frac{kT}{E_1 - E_0}$, $\pi = \frac{pv}{E_1 - E_0}$ — безрозмірні густина, температура й тиск, відповідно. Ізотерма, бінодаль (крива співіснування двох фаз) і спінодаль атомного плинну (1.1) з $\aleph = 1$ (усі наведені в роботі розрахунки виконано для такого значення \aleph) зображені на рис. 1.

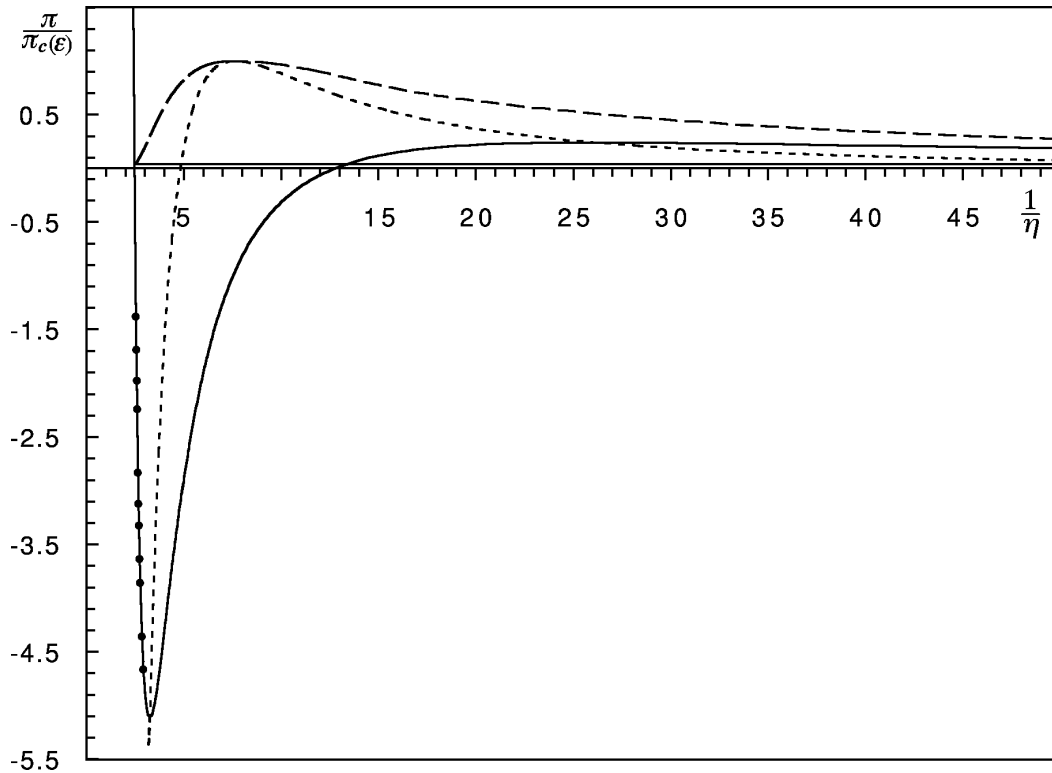


Рис. 1. Ізотерма при $\tau = 0.6\tau_c(\mathcal{E})$ (суцільна лінія), бінодаль (штрихова лінія) і спінодаль (пунктирна лінія) атомного плинну (1.1) з $\aleph = 1$. У використаному масштабі осі ординат горизонтальний фрагмент ізотерми лежить лише трохи вище від осі абсцис. Крапками на ізотермі відзначено кілька станів метастабільної розтягнутої рідини.

Розглядаючи неоднорідний плин при $T < T_c$ у вигляді двох фаз у рівновазі з плоскою міжфазною поверхнею, на основі рівняння (1.2) можна обчислити профіль густини зі змінюючою висоти і знайти значення великого термодинамічного потенціалу двофазного плинну, який визначає коефіцієнт поверхневого натягу $\gamma(T)$. При цьому для $\tau = 0.6\tau_c(\mathcal{E})$ маємо $\Gamma(\tau) = \frac{\gamma(T)\sigma^2}{E_1 - E_0} = 0.287062\tau = 0.000338(1 + 2\mathcal{E}^2)$. Оскільки існує коефіцієнт поверхневого натягу, то добре відомо, що поява нової фази, скажімо, при зміні стану плинну вздовж ізотерми, відбувається з деяким “запізненням” [5–7]. Розглянемо, наприклад, утворення рідини в парі. Нова фаза (рідина) з’являється в пересиченій парі з тиском $p > p(T)$, де $p(T)$ — рівноважний тиск при температурі T , у результаті флюктуацій. Якщо флюктуаційним чином утворюється крапля рідини з радіусом, більшим за радіус Томсона,

$$r^* = \frac{2\gamma(T)}{\Delta p}, \quad \Delta p \equiv p - p(T) = \rho_l(T)\Delta\mu, \quad (1.5)$$

де $\rho_l(T)$ — густина рідкої фази плинину при температурі T , $\Delta\mu \equiv \mu - \mu(T)$, μ — хемічний потенціал пересиченої пари, $\mu(T)$ — рівноважне значення хемічного потенціалу при температурі T , то крапля буде рости і відбудеться перехід до двофазного стану. Якщо радіус краплі рідини, що утворилася в результаті флюктуації, менший за r^* , то крапля буде випаровуватися і зникне. Імовірність флюктуації визначається роботою, яку слід виконати, щоб перейти від початкового до кінцевого стану; для краплі критичного розміру r^* ця робота (нуклеаційний бар'єр для утворення краплі рідини у пересиченій парі) у межах капілярного наближення становить

$$A^{cl}(T, p) = \frac{4}{3}\pi r^{*2}\gamma(T) = \frac{16\pi}{3} \frac{\gamma^3(T)}{kT(\Delta p)^2}. \quad (1.6)$$

Для цієї температури з ростом p величина r^* зменшується, $A^{cl}(T, p)$ теж зменшується, а ймовірність флюктуації, у результаті якої утворюється крапля рідини з радіусом r^* , зростає. Число крапель рідини, що утворюються в одиниці об'єму за одиницю часу, визначається функцією $\exp\left[-\frac{A^{cl}(T, p)}{kT}\right]$. Ця величина стрімко збільшується для даної температури при деякому значенні p , й експериментатор бачить випадання туману. При обчисленні кавітаційного бар'єра знову ж таки використовують формулу (1.6) [8]; при цьому $\Delta p < 0$. Кілька станів метастабільної розтягнутої рідини відзначено крапками на фрагменті ізотерми $\tau = 0.6\tau_c(\mathcal{E})$, що відповідає нестійким станам, на рис. 1.

Мета нашої роботи — дослідити нуклеаційні явища в атомному плинні в електричному полі (1.1) методом функціонала густини без використання капілярного наближення. У розділі II ми подамо результати обчислення нуклеаційного бар'єра для утворення краплі рідини в пересиченій парі, а в розділі III покажемо, як виконати таке обчислення для утворення бульбашки пари в розтягненій рідині. Обговорення отриманих результатів складає розділ IV.

II. ЗАРОДКОУТВОРЕННЯ РІДИНИ В ПЕРЕСИЧЕНІЙ ПАРІ

Розглянемо метастабільну газову фазу при $T < T_c$ з тиском p , який більший від рівноважного тиску при цій температурі $p(T)$. Обчислюючи з рівняння стану (1.4) густину ρ , яка відповідає цьому тиску, знайдемо зі співвідношення (1.3) хемічний потенціал системи μ . При цьому $\Delta\mu \equiv \mu - \mu(T) > 0$. Нехай тепер у системі виникає сферична краплина рідини, яка, узагалі кажучи, не перебуває в рівновазі з навколишньою метастабільною парою. Задача полягає у знаходженні нуклеаційного бар'єра для фазового переходу газу в рідину $A(T, \rho)$ на основі аналізу профілю густини й великого термодинамічного потенціалу такого неоднорідного плинину.

Виходитимемо з рівнянь (1.2) і (1.1). Уважатимемо, що система міститься у сферичній посудині радіусом \mathcal{R} , а краплина виникла в її центрі, де поміщено початок системи координат. Спрямувавши вісь z уздовж вектора \mathbf{r} , рівняння для профілю густини (1.2) після нескладних перетворень переписуємо у вигляді

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \left\{ \ln [\Lambda^3 \rho(r)] + \frac{8v\rho(r) - 9v^2\rho^2(r) + 3v^3\rho^3(r)}{[1 - v\rho(r)]^3} \right\} &= \frac{6\sigma^3 a}{r} \left\{ \int_{2\sigma-r}^{r+2\sigma} dRR\rho(R) \left[\frac{1}{16\sigma^4} - \frac{1}{(r+R)^4} \right] \right. \\ &\left. + \int_{r+2\sigma}^{\mathcal{R}} dRR\rho(R) \left[\frac{1}{(r-R)^4} - \frac{1}{(r+R)^4} \right] \right\} + \mu, \quad (2.1) \end{aligned}$$

якщо $0 \leq r < 2\sigma$, і

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \left\{ \ln [\Lambda^3 \rho(r)] + \frac{8v\rho(r) - 9v^2\rho^2(r) + 3v^3\rho^3(r)}{[1 - v\rho(r)]^3} \right\} &= \frac{6\sigma^3 a}{r} \left\{ \int_0^{r-2\sigma} dRR\rho(R) \left[\frac{1}{(r-R)^4} - \frac{1}{(r+R)^4} \right] \right. \\ &\left. + \int_{r-2\sigma}^{r+2\sigma} dRR\rho(R) \left[\frac{1}{16\sigma^4} - \frac{1}{(r+R)^4} \right] + \int_{r+2\sigma}^{\mathcal{R}} dRR\rho(R) \left[\frac{1}{(r-R)^4} - \frac{1}{(r+R)^4} \right] \right\} + \mu, \quad (2.2) \end{aligned}$$

якщо $2\sigma \leq r \leq \mathcal{R}$.

Великий термодинамічний потенціал такої метастабільної системи даватиме формула (1.1), якщо в ній узяти профіль густини, знайдений з (2.1), (2.2). Якщо в доданку в (1.1), що містить подвійний інтеграл, спочатку інтегрувати за \mathbf{R}_2 , а потім за \mathbf{R}_1 , при першому інтегруванні використати сферичну систему координат з віссю z , направленою вздовж \mathbf{R}_1 , урахувати, що результат інтегрування за \mathbf{R}_2 залежить лише від R_1 , то після нескладних перетворень прийдемо до такого виразу для значення великого термодинамічного потенціалу:

$$\begin{aligned} \Omega(T, \mu, V) = & \frac{4\pi}{\beta} \int_0^{\mathcal{R}} dR_1 R_1^2 \rho(R_1) \left\{ \ln [\Lambda^3 \rho(R_1)] - \frac{1 - 6v\rho(R_1) + 4v^2\rho^2(R_1)}{[1 - v\rho(R_1)]^2} - \beta\mu \right\} \\ & - 12\sigma^3 a\pi \left(\int_0^{2\sigma} dR_1 R_1 \rho(R_1) \left\{ \int_{2\sigma - R_1}^{R_1 + 2\sigma} dR_2 R_2 \rho(R_2) \left[\frac{1}{16\sigma^4} - \frac{1}{(R_1 + R_2)^4} \right] \right. \right. \\ & + \left. \int_{R_1 + 2\sigma}^{\mathcal{R}} dR_2 R_2 \rho(R_2) \left[\frac{1}{(R_1 - R_2)^4} - \frac{1}{(R_1 + R_2)^4} \right] \right\} \\ & + \int_{2\sigma}^{\mathcal{R}} dR_1 R_1 \rho(R_1) \left\{ \int_0^{R_1 - 2\sigma} dR_2 R_2 \rho(R_2) \left[\frac{1}{(R_1 - R_2)^4} - \frac{1}{(R_1 + R_2)^4} \right] \right. \\ & \left. \left. + \int_{R_1 - 2\sigma}^{R_1 + 2\sigma} dR_2 R_2 \rho(R_2) \left[\frac{1}{16\sigma^4} - \frac{1}{(R_1 + R_2)^4} \right] + \int_{R_1 + 2\sigma}^{\mathcal{R}} dR_2 R_2 \rho(R_2) \left[\frac{1}{(R_1 - R_2)^4} - \frac{1}{(R_1 + R_2)^4} \right] \right\} \right). \end{aligned} \quad (2.3)$$

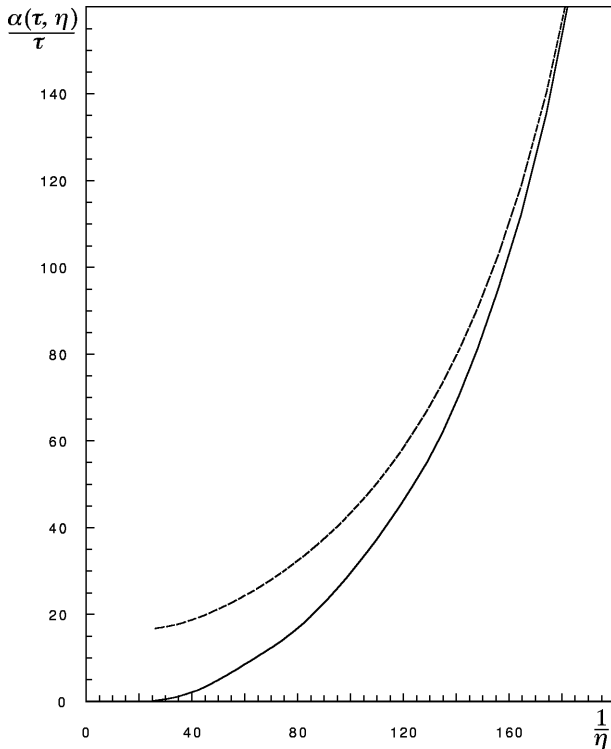


Рис. 2. Нуклеаційний бар'єр для фазового переходу газу в рідину $\alpha(\tau, \eta)$ залежно від густини пересиченої пари η при $\tau = 0.6\tau_c(\mathcal{E})$, знайдений згідно з (2.4) (суцільна лінія) і (1.6) (штрихова лінія).

Згідно з термодинамічним розглядом у межах капілярного наближення можна очікувати, що рівняння (2.1), (2.2) матиме розв'язок, який відповідатиме краплі рідини з радіусом Томсона в пересиченій парі. Справді, розв'язуючи це рівняння ітераціями, можна виявити, що існує профіль густини, який лишається незмінним для великого числа ітерацій (150–180), а потім починає змінюватися: або так, як при висиханні краплі, або як при дальшому рості краплі рідини. Значення великого термодинамічного потенціалу метастабільного плинину, що складається з пересиченої пари і краплі рідини, $\Omega(T, \mu, V)$ (2.3) для незмінного з ростом числа ітерацій профілю густини дає у методі функціонала густини нуклеаційний бар'єр для фазового переходу газу в рідину

$$A(T, \rho) = \Omega(T, \mu, V) - \left(-p \frac{4}{3} \pi \mathcal{R}^3 \right). \quad (2.4)$$

Формула (2.4), на противагу (1.5), не ґрунтується на капілярному наближенні. Вона придатна і тоді, коли радіус крапель рідини, що вже починають рости, є малим, так що поняття такої макроскопічної величини, як коефіцієнт поверхневого натягу, втрачає сенс.

На рис. 2 зображено залежність $\frac{A(T, \rho)}{kT}$ від $\frac{1}{\rho}$ для $\tau = 0.6\tau_c(\mathcal{E})$. Обчислення у методі функціонала гу-

стини не мають відомої вади цього ж розрахунку в межах капілярного наближення: у другому підході нуклеаційний бар'єр не зникає на спінодалі.

ІІІ. ЗАРОДКОУТВОРЕННЯ ГАЗУ В РОЗТЯГНЕНІЙ РІДИНІ (КАВІТАЦІЯ)

Розглянемо тепер рідку фазу при $T < T_c$ із тиском p , який менший від рівноважного тиску при цій температурі $p(T)$ (див. рис. 1). Знайшовши з рівняння стану (1.4) густину ρ при цьому тиску, обчислимо згідно зі співвідношенням (1.3) хемічний потенціал плинину μ . При цьому $\Delta\mu < 0$. Нехай далі у системі ви-

никає сферична краплина пари, яка, узагалі кажучи, не перебуває у рівновазі з розтягнутою рідиною. Як і в попередньому розділі, наше завдання полягає в аналізі профілю густини й великого термодинамічного потенціалу такого неоднорідного плинину та знаходженні кавітаційного бар'єра.

Рівняння (2.1), (2.2) описують профіль густини сферичної бульбашки пари в рідині. Великий термодинамічний потенціал метастабільної системи “розтягнена рідина плюс бульбашка пари” обчислюється за формулою (2.3), якщо в неї підставити знайдений з (2.1), (2.2) профіль густини. Нуклеаційний бар'єр для фазового переходу рідини в газ знову ж таки визначається формулою (2.4).

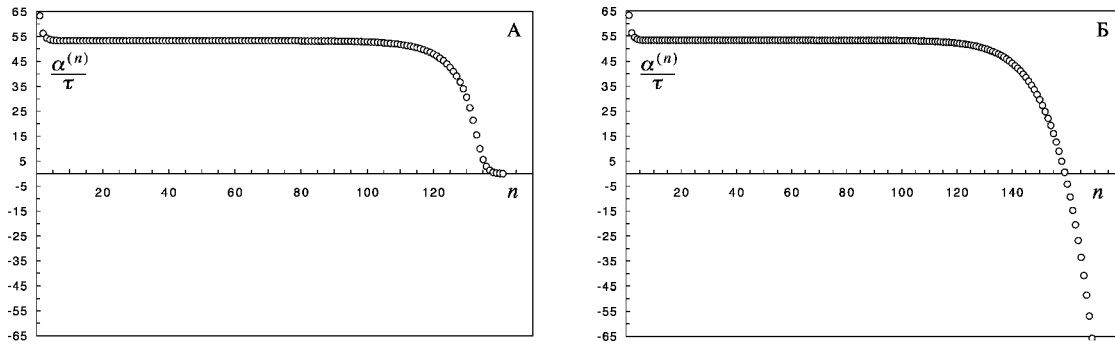


Рис. 3. Значення енергії утворення бульбашки пари у розтягненій рідині (2.4) $\frac{A^{(n)}(T, \rho)}{kT} = \frac{\Omega^{(n)}(T, \mu, V) + p \frac{4}{3} \pi \mathcal{R}^3}{kT} = \frac{\alpha^{(n)}(\tau, \eta)}{\tau}$ як функція номера ітерації n . Тут $\tau = 0.6\tau_c(\mathcal{E})$, а $\frac{\Delta\mu}{E_1 - E_0} = -0.010376 - 0.0012$, $\Lambda^3 = v$ при $\mathcal{E} = 0.5$. На рисунку А $\frac{r^{(0)}}{2\sigma} = 4.08$, а на рисунку Б $\frac{r^{(0)}}{2\sigma} = 4.081$.

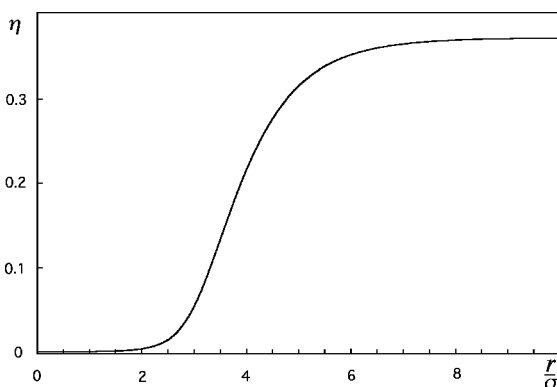


Рис. 4. η як функція $\frac{r}{\sigma}$ для значень термодинамічних параметрів, указаних у підписі до рис. 3; наведено результат ітерацій з області, для якої великий термодинамічний потенціал практично не змінюється $\frac{\alpha(\tau, \eta)}{\tau} \approx 53.3$ (див. рис. 3).

Обчислення профілю густини $\rho(r)$ й енергії утворення газової фази в розтягненій рідині $A(T, \rho)$ виглядають так. При заданій температурі $T < T_c$ і тиску p

чи густині ρ визначаємо μ і шукаємо розв'язок рівняння (2.1), (2.2) [9]. Для цього візьмемо пробний профіль, наприклад,

$$\rho^{(0)}(r) = \Theta(r) \left[\rho_v(T) \Theta(r^{(0)} - r) + \rho \Theta(r - r^{(0)}) \right],$$

де $\rho_v(T)$ — густина газової фази плинину при температурі T , а $r^{(0)}$ — число, близьке, скажімо, до радіуса Томсона $r^{(0)} \approx r^*$, і почнемо розв'язувати рівняння (2.1), (2.2) ітераціями, обчислюючи для кожної ітерації значення великого термодинамічного потенціалу (2.3). Звичайно $\frac{\mathcal{R}}{2\sigma} = 50$, а кількість точок при інтегруванні становить 500–1000 в інтервалі від 0 до $2r^{(0)}$ і 100–200 в інтервалі від $2r^{(0)}$ до \mathcal{R} . Аналізуючи профіль $\rho^{(n)}(r)$, можна переконатися: якщо $r^{(0)} \gg r^*$, то зі збільшенням кількості ітерацій n бульбашка пари починає рости, тоді ж як у випадку $r^{(0)} \ll r^*$ зі зростанням ітерацій бульбашка пари зменшується і зникає; в обох випадках значення великого термодинамічного потенціалу зі збільшенням кількості іте-

рацій зменшується. Підібравши належним чином $r^{(0)}$, доможемося незмінності значення великого термодинамічного потенціалу зі збільшенням кількості ітерацій n для великої області зміни n (див. рис. 3). При цьому невелика зміна в $r^{(0)}$ при великих n приводить до зникнення бульбашки пари (рис. 3А) або до її росту (рис. 3Б). Профіль густини для деякої ітерації, що відповідає точці n з області, де великий термодинамічний потенціал $\Omega^{(n)}(T, \mu, V)$ є сталим (див. рис. 3), показаний на рис. 4. Значення $\Omega^{(n)}(T, \mu, V)$ “на полиці” візьмемо для обчислення енергії утворення бульбашки пари в розтягненій рідині $A(T, \rho)$ (2.4).

IV. ОБГОВОРЕННЯ ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ

Наведені в цій роботі результати завершують дослідження неоднорідних властивостей плинку атомів в електричному полі, розпочаті в [4]. Ці результати можуть бути корисними з погляду відповідних експериментальних досліджень нуклеації та кавітації за наявності електричного поля. Звичайно нуклеаційні вимірювання роблять з використанням камери Вільсона, термодифузійної камери Каца чи камери зі швидким розширенням. Аналіз можливих впливів наявності електричного поля на спостережувані величини в тому чи іншому нуклеаційному чи кавітаційному експерименті є самостійною задачею і потребує окремого розгляду. Розвинута теорія могла б стосуватися плинків інертних атомів, наприклад, аргону. Авторам, на жаль, нічого не відомо про експериментальні дослідження впливу електричного поля на нуклеаційні явища в таких системах.

Цікавим результатом виконаних досліджень видається встановлена універсальність теорії плинку в електричному полі (1.1): якщо температуру й тиск вимірювати в одиницях критичної температури та критичного тиску для даного поля, то результати для різних значень полів є однаковими (див. рис. 1–5). Зрозуміло, що вибраний вихідний функціонал великого термодинамічного потенціалу (1.1) приведе до такої універсальності, адже поява електричного поля зводиться лише до перенормування константи a :

$$\frac{1}{48}v(E_1 - E_0)\aleph^2 \rightarrow \frac{1}{48}v(E_1 - E_0)\aleph^2(1 + 2\aleph^2\mathcal{E}^2).$$

Така зміна веде до збільшення критичних температури й тиску

$$\tau_c(0) \rightarrow \tau_c(0)(1 + 2\aleph^2\mathcal{E}^2),$$

$$\pi_c(0) \rightarrow \pi_c(0)(1 + 2\aleph^2\mathcal{E}^2),$$

і електричне поле \mathcal{E} можна “прибрати”, якщо вимірювати температуру й тиск в одиницях $\tau_c(\mathcal{E})$ і $\pi_c(\mathcal{E})$. Таким чином, у межах наближення (1.1) урахування електричного поля зводиться до перерахунку до відповідних одиниць універсальних результатів, приведених в одиницях $\tau_c(\mathcal{E})$ і $\pi_c(\mathcal{E})$. Цікавим є питання про експериментальну перевірку цього твердження.

Частина цієї роботи була зроблена в Марбурзькому університеті (Німеччина) восени 1995 року. Один з авторів (О.В.Д.) дякує DAAD за стипендію і Г. Ухтману за гостинність.

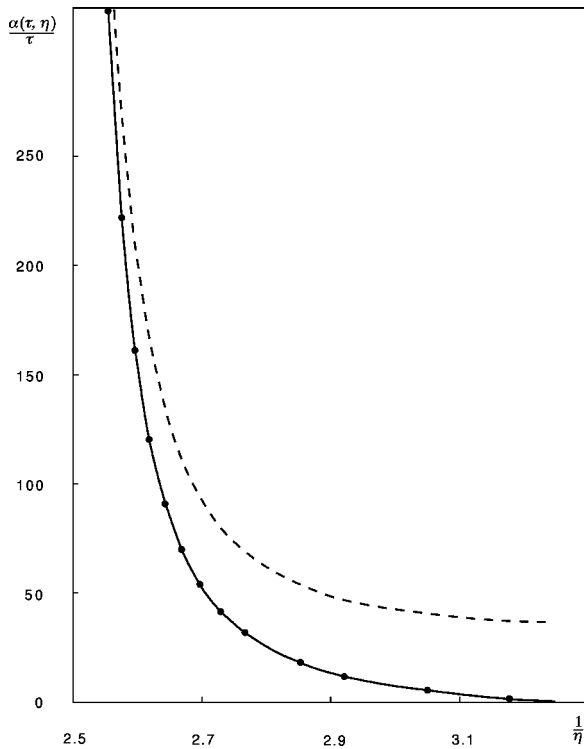


Рис. 5. Нуклеаційний бар'єр для фазового переходу рідини в газ $\alpha(\tau, \eta)$ залежно від густини розтягненої рідини η при $\tau = 0.6\tau_c(\mathcal{E})$, знайдений згідно з (2.4) (суцільна лінія) і (1.6) (штрихова лінія).

На рис. 5 зображено залежність $\frac{A(T, \rho)}{kT}$ від $\frac{1}{\rho}$ для $\tau = 0.6\tau_c(\mathcal{E})$. Як і у випадку нуклеаційного бар'єра для фазового переходу газу в рідину, результат для кавітаційного бар'єра, знайдений методом функціонала густини, зникає при наближенні до спінодалі, як і має бути. Отримані результати показують, як залежить енергія утворення бульбашки пари від електричного поля, що становить інтерес для відповідних експериментальних досліджень.

- [1] D. W. Oxtoby, R. Evans, J. Chem. Phys. **89**, 7521 (1988).
 [2] X. C. Zeng, D. W. Oxtoby, J. Chem. Phys. **94**, 4472 (1991).
 [3] D. W. Oxtoby, J. Phys.: Cond. Matt. **4**, 7627 (1992).
 [4] О. В. Держко, В. М. Мигаль, Журн. фіз. досл. **1**, 402 (1997).
 [5] М. Фольмер, *Кинетика образования новой фазы* (Наука, Москва, 1986).
 [6] К. Хуанг, *Статистическая механика* (Мир, Москва, 1966).
 [7] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика, часть 1* (Наука, Москва, 1976).
 [8] Я. Б. Зельдович, Журн. эксп. теор. физ. **12**, 525 (1942).
 [9] Практично задається значення $\Delta\mu < 0$ у рівнянні (2.1), (2.2). Для вибраного $\mu = \mu(T) + \Delta\mu$ з (1.3), (1.4) можна визначити відповідну густину і тиск розтягнутої рідини.

NUCLEATION PHENOMENA IN ATOMIC FLUID IN THE ELECTRICAL FIELD

O. V. Derzhko^{1,2}, V. M. Myhal²

¹*Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine,
1 Svientsitskii Str., Lviv, UA-290011, Ukraine*

²*The Ivan Franko State University of Lviv, Chair of Theoretical Physics,
12 Drahomanov Str., Lviv, UA-290005, Ukraine*

On the basis of the density functional of grand thermodynamical potential for a fluid of two-level atoms in external electrical field suggested earlier (J. Phys. Stud. **1**, 402 (1997)) the appearance of a new phase in metastable vapour and liquid has been examined. The influence of the field on the nucleation barrier for these phase transformations has been studied.