

ВЛАСТИВОСТІ НЕОДНОРІДНОГО ПЛИНУ АТОМІВ В ЕЛЕКТРИЧНОМУ ПОЛІ. ГРАДІЄНТНЕ НАБЛИЖЕННЯ

О. В. Держко^{1,2}, В. М. Мигаль²

¹Інститут фізики конденсованих систем НАН України, вул. Свенціцького, 1, Львів-11, 79011

²Львівський національний університет імені Івана Франка

кафедра теоретичної фізики, вул. Драгоманова, 12, Львів-5, 79005

(Отримано 25 липня 2000 р.; в остаточному вигляді — 28 листопада 2000 р.)

Розглянуто задачу про властивості неоднорідного плинду дворівневих атомів у зовнішньому електричному полі на основі запропонованого раніше функціонала густини великого термодинамічного потенціалу (Журн. фіз. досл. 1, 402 (1997)). Обчислення виконано в ґрадієнтному наближенні, яке справедливе при температурах, незначно нижчих за критичну. Отримано температурну залежність коефіцієнта поверхневого натягу, залежність нуклеаційного (кавітаційного) бар'єра від густини пересиченої пари (розтягнутої рідини). Результати порівнюються з результатами обчислень на основі нелокального функціонала густини. Обговорено вплив електричного поля на властивості неоднорідного атомного плинду.

Ключові слова: метод функціонала густини, ґрадієнтне наближення, поверхневий натяг, нуклеаційний бар'єр, кавітаційний бар'єр, електричне поле

PACS numbers: 64.70.Fx, 82.65.Dp, 62.60.Nh, 64.60.Qb

Метод функціонала густини є досить поширеним формалізмом дослідження властивостей неоднорідних класичних чи квантових плиндув [1–4]. Привабливим виглядає його застосування до вивчення нуклеаційних явищ при фазових переходах газ–рідина чи рідина–газ, бо з'являється можливість у межах достатньо прозорої схеми пов'язати експериментально спостережувані величини з міжчастинковими взаємодіями [5,4].

У наших попередніх працях [6,7] ми дослідили деякі властивості неоднорідного плинду дворівневих атомів у зовнішньому електричному полі методом функціонала густини. Для цього розглянули дворівневі атоми, між якими існує далекосяжна взаємодія ван дер Ваальса (її для вибраної моделі атома легко розрахувати) та короткосяжна взаємодія у вигляді твердосферного відштовхування. Наявність зовнішнього електричного поля в такій моделі змінює ефективну міжатомну взаємодію на великих відстанях, що у свою чергу зумовлює зміни у статистико–механічних властивостях плинду. У працях [6,7] було проаналізовано зміни в ефективних міжатомних взаємодіях, що зумовлені полем, обґрунтовано вибір вихідного функціонала великого термодинамічного потенціалу, побудовано фазову діаграму газ–рідина, отримано температурну залежність коефіцієнта поверхневого натягу, вивчено залежність нуклеаційних бар'єрів для фазових переходів газ–рідина та рідина–газ від густини пересиченої пари та розтягнутої рідини. У проведених дослідженнях використано нелокаль-

ний функціонал густини, що враховує короткосяжне атомне відштовхування в наближенні Карнагана–Старлінґа, а внесок від далекосяжного притягання, яке зазнає зміни через наявність поля, — у середньопольовому наближенні. Нелокальний функціонал густини приводить до інтегральних рівнянь для рівноважного профілю густини. У теперішній праці ми переглядаємо результати дослідження властивостей неоднорідного атомного плинду в електричному полі, розглядаючи нелокальні внески у функціонал густини великого термодинамічного потенціалу в ґрадієнтному наближенні. Слід очікувати, що ґрадієнтне наближення є придатним для малих ґрадієнтів густини неоднорідного плинду, тобто для неоднорідного плинду з температурою, лише незначно меншою за критичну. З математичної точки зору рівноважний профіль густини тепер визначаємо на основі диференціальних рівнянь, для яких слід розв'язувати відповідну крайову задачу чи задачу Коші. Ми порівнюємо результати, знайдені у ґрадієнтному наближенні, з отриманими раніше результатами на основі нелокального функціонала густини, виявляючи сферу застосовності ґрадієнтного наближення. Ми обговоримо вплив електричного поля на властивості неоднорідного атомного плинду, що одержані у ґрадієнтному наближенні.

Нагадаймо, що функціонал густини великого термодинамічного потенціалу плинду атомів у зовнішньому електричному полі, обґрунтований у [6,7], має вигляд

$$\Omega[\rho(\mathbf{R})] = \int d\mathbf{R}_1 f_{CS}(\rho(\mathbf{R}_1)) - \frac{6\sigma^3 a}{\pi} \int_{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2| \geq 2\sigma} d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \frac{\rho(\mathbf{R}_1)\rho(\mathbf{R}_2)}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|^6} - \mu \int d\mathbf{R}_1 \rho(\mathbf{R}_1), \quad (1)$$

$$f_{CS}(\rho(\mathbf{R})) = kT\rho(\mathbf{R}) \left(\ln(\Lambda^3 \rho(\mathbf{R})) - \frac{1 - 6v\rho(\mathbf{R}) + 4v^2\rho^2(\mathbf{R})}{(1 - v\rho(\mathbf{R}))^2} \right).$$

Перший доданок у функціоналі густини (1) є локальним внеском Карнагана–Старлінга від короткосяжних взаємодій; другий доданок — нелокальний середньопольовий внесок від далекосяжних взаємодій. У (1) використано такі позначення: Λ — довжина теплової хвилі де Бройля атома, $v = \frac{4}{3}\pi\sigma^3$, σ — радіус атома, $a = \frac{1}{48}v(E_1 - E_0)\aleph^2(1 + 2\aleph^2\mathcal{E}^2) = v(E_1 - E_0)\alpha$, $E_1 - E_0$ — енергія збудження атома, $\aleph = \frac{|\mathbf{p}|^2}{\sigma^3(E_1 - E_0)}$

— безрозмірний параметр, що характеризує атом (у чисельних розрахунках, результати яких наведено нижче, $\aleph = 1$), $|\mathbf{p}|$ — величина дипольного моменту переходу атома, $\mathcal{E} = \frac{|\mathbf{E}|\sigma^3}{|\mathbf{p}|}$ — безрозмірна величина напруженості зовнішнього електричного поля.

Розгляньмо нелокальний внесок у (1) у градієнтному наближенні, припустивши, що густина в точці \mathbf{R}_2 мало відрізняється від густини в точці \mathbf{R}_1 ,

$$\rho(\mathbf{R}_2) = \rho(\mathbf{R}_1) + \sum_{i=x,y,z} (\nabla_i \rho(\mathbf{R}_1)) (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=x,y,z} (\nabla_i \nabla_j \rho(\mathbf{R}_1)) (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)_i (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)_j + \dots; \quad (2)$$

тут

$$\nabla_x \rho(\mathbf{R}_1) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_{1x}} \rho(\mathbf{R}_1)$$

і т.д. Підставляючи (2) в (1) та інтегруючи за \mathbf{R}_2 (для обчислення інтегралів вибираємо систему координат із початком у \mathbf{R}_1 ; результат інтегрування не залежить від \mathbf{R}_1), знаходимо

$$\begin{aligned} \Omega[\rho(\mathbf{R})] &= \int d\mathbf{R}_1 f_{CS}(\rho(\mathbf{R}_1)) - a \int d\mathbf{R}_1 \rho(\mathbf{R}_1) \left(\rho(\mathbf{R}_1) + 2\sigma^2 \sum_{i=x,y,z} \nabla_i^2 \rho(\mathbf{R}_1) + \dots \right) - \mu \int d\mathbf{R}_1 \rho(\mathbf{R}_1) \\ &= \int d\mathbf{R}_1 \left(f_0(\rho(\mathbf{R}_1)) + f_2^{(a)}(\rho(\mathbf{R}_1)) \sum_{i=x,y,z} \nabla_i^2 \rho(\mathbf{R}_1) + \dots \right), \end{aligned} \quad (3)$$

$$f_0(\rho(\mathbf{R})) = f_{CS}(\rho(\mathbf{R})) - a\rho^2(\mathbf{R}), \quad f_2^{(a)}(\rho(\mathbf{R})) = -2a\sigma^2\rho(\mathbf{R}).$$

Оскільки

$$f_2^{(a)}(\rho(\mathbf{R})) \sum_{i=x,y,z} \nabla_i^2 \rho(\mathbf{R}) = \sum_{i=x,y,z} \nabla_i \left(f_2^{(a)}(\rho(\mathbf{R})) \nabla_i \rho(\mathbf{R}) \right) - \frac{df_2^{(a)}(\rho)}{d\rho} \sum_{i=x,y,z} (\nabla_i \rho(\mathbf{R})) (\nabla_i \rho(\mathbf{R})),$$

$$\int d\mathbf{R} \sum_{i=x,y,z} \nabla_i \left(f_2^{(a)}(\rho(\mathbf{R})) \nabla_i \rho(\mathbf{R}) \right) = 0,$$

то остаточно функціонал великого термодинамічного потенціалу в градієнтному наближенні набуває вигляду [8]

$$\Omega[\rho(\mathbf{R})] = \int d\mathbf{R}_1 \left(f_0(\rho(\mathbf{R}_1)) + f_2(\rho(\mathbf{R}_1)) \sum_{i=x,y,z} (\nabla_i \rho(\mathbf{R}_1))^2 + \dots \right) - \mu \int d\mathbf{R}_1 \rho(\mathbf{R}_1), \quad (4)$$

$$f_2(\rho(\mathbf{R})) = 2a\sigma^2.$$

Пам'ятаймо, що функціонал великого термодинамічного потенціалу плин у зовнішньому електричному полі у градієнтному наближенні (4) містить залежність від величини напруженості зовнішнього електричного поля через коефіцієнт a , означений вище.

У методі функціонала густини рівноважну густину шукають з умови

$$\frac{\delta\Omega[\rho(\mathbf{R})]}{\delta\rho(\mathbf{R})} = 0.$$

Тому для (4) приходимо до рівняння

$$\frac{df_0(\rho(\mathbf{R}))}{d\rho(\mathbf{R})} - 4a\sigma^2 \sum_{i=x,y,z} \nabla_i^2 \rho(\mathbf{R}) - \mu = 0. \quad (5)$$

Ураховуючи явний вигляд (3) функції $f_0(\rho(\mathbf{R}))$, рівняння для рівноважної густини (5) переписемо в остаточному вигляді

$$kT \ln(\Lambda^3 \rho(\mathbf{R})) + kT \frac{8v\rho(\mathbf{R}) - 9v^2\rho^2(\mathbf{R}) + 3v^3\rho^3(\mathbf{R})}{(1 - v\rho(\mathbf{R}))^3} - 2a\rho(\mathbf{R}) - 4a\sigma^2 \sum_{i=x,y,z} \nabla_i^2 \rho(\mathbf{R}) - \mu = 0. \quad (6)$$

Нагадаймо [6,7], що при температурі, нижчій за критичну, $\tau_c = \frac{kT_c}{E_1 - E_0} \approx 0.00196518N^2(1 + 2N^2\mathcal{E}^2)$, плин, функціонал великого термодинамічного потенціалу для якого є (1) чи (4), є у вигляді двох співіснуючих фаз — рідини та пари. При цьому, наприклад, якщо $\tau = 0.9\tau_c \approx 0.00176866$, то густина пари $\eta_v = v\rho_v \approx 0.00454212$, густина рідини $\eta_l \approx 0.24808424$, рівноважне значення тиску $\pi(\tau) = \frac{p(T)v}{E_1 - E_0} \approx 0.00005375$, а рівноважне значення хемічного потенціалу $\nu(\tau) = \frac{\mu(T) - kT \ln \frac{\Lambda^3}{v}}{E_1 - E_0} \approx -0.00665919$. Якщо ж $\tau = 0.6\tau_c \approx 0.00117911$, то $\eta_v \approx 0.00308146$, $\eta_l \approx 0.40620414$, $\pi(\tau) \approx 0.00000348$, $\nu(\tau) \approx -0.00691718$.

Розглядаючи плоску міжфазну поверхню, профіль рівноважної густини $\eta(z)$ знаходимо з рівняння

$$\sigma^2 \frac{d^2\eta(z)}{dz^2} = \mathcal{F}(\eta(z)), \quad (7)$$

$$\mathcal{F}(\eta) = \frac{\tau}{4\alpha} \left(\ln \eta + \frac{8\eta - 9\eta^2 + 3\eta^3}{(1 - \eta)^3} \right) - \frac{1}{2}\eta - \frac{1}{4\alpha}\nu(\tau),$$

уважаючи, що $\eta(z = -\infty) = \eta_l$, $\eta(z = \infty) = \eta_v$.

Рівняння (7) має просту механічну інтерпретацію: це рівняння руху Ньютона частинки одиничної маси з одним ступенем вільності під дією сили \mathcal{F} , що не залежить від часу $\frac{z}{\sigma}$, а лише від координати частинки η . Якісно правильну залежність $\mathcal{F}(\eta)$ (7) дає така функція:

$$\mathcal{F}(\eta) = 2 \left(\frac{\chi}{\Delta\eta} \right)^2 (\eta - \eta_v) (\eta - \bar{\eta}) (\eta - \eta_l), \quad (8)$$

де $\bar{\eta} = \frac{1}{2}(\eta_v + \eta_l)$, $\Delta\eta = \frac{1}{2}(\eta_v - \eta_l) < 0$, а $\chi > 0$ — деякий параметр (див., наприклад, рис. 1). Тоді, уводячи нову змінну $\tilde{\eta} = \frac{\chi}{\Delta\eta} (\eta - \bar{\eta})$, використовуючи для отриманого рівняння руху закон збереження енергії з потенціальною енергією $U(\tilde{\eta}) = -\frac{1}{2}(\tilde{\eta}^2 - \chi^2)^2 + U_0$, ураховуючи, що $\tilde{\eta} = \pm\chi$ та $\frac{d\tilde{\eta}}{dz} = 0$ при $z \rightarrow \pm\infty$, отримуємо аналітичний розв'язок рівняння для профілю густини (7) у припущенні (8) [9]

$$\eta(z) = \bar{\eta} + \Delta\eta \tanh \left(\chi \frac{z - z_0}{\sigma} \right) \quad (9)$$

(z_0 — стала інтегрування).

На рис. 1 показано залежність $\mathcal{F}(\eta)$ (7) при $\tau = 0.9\tau_c$, а також $\mathcal{F}(\eta)$ (8) з $\chi = 0.35$. На рис. 2 подано розв'язок крайової задачі (7) при цій же температурі [10], а також профіль густини $\eta(z)$ (9). Для порівняння на рис. 2 наведено профіль густини, знайдений на основі нелокального функціонала густини (1) (див. [6]). На рис. 3, 4 наведені такі ж результати при нижчій температурі $\tau = 0.6\tau_c$. Градієнтне наближення приводить до плавнішого профілю густини, аніж нелокальний функціонал густини. Наближений профіль густини (9) є "симетричним" щодо $z_0 = 0$, на відміну від такого профілю, знайденого у градієнтному наближенні чи на основі нелокального функціонала густини.

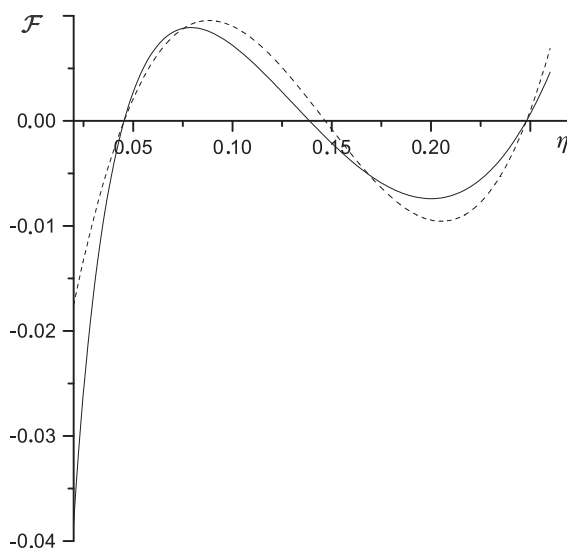


Рис. 1. Функція $\mathcal{F}(\eta)$ при температурі $0.9\tau_c$. Суцільна лінія відповідає точному виразу (7), а штрихова лінія — наближеному виразу (8) з $\chi = 0.35$.

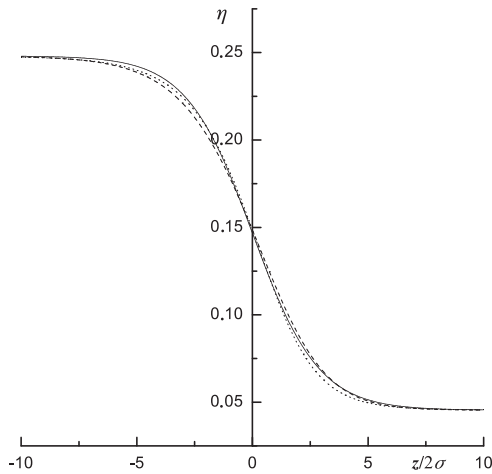


Рис. 2. Профіль густини для плоскої міжфазної поверхні при температурі $0.9\tau_c$. Суцільна лінія — результат нелокального розгляду (1), штрихова лінія — градієнтне наближення (7), а пунктирна лінія відповідає виразові (9) з $\chi = 0.35$.

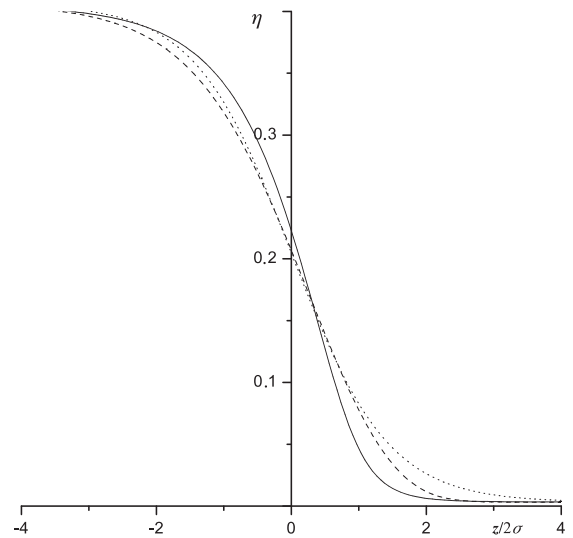


Рис. 4. Профіль густини для плоскої міжфазної поверхні при температурі $0.6\tau_c$. Суцільна лінія — результат нелокального розгляду (1), штрихова лінія — градієнтне наближення (7), а пунктирна лінія відповідає виразові (9) з $\chi = 0.7$.

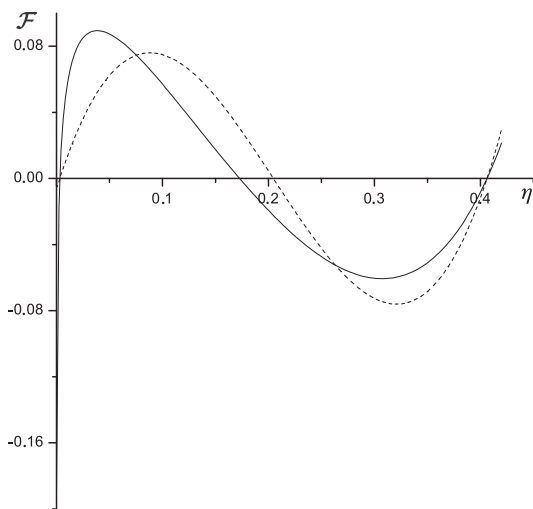


Рис. 3. Функція $\mathcal{F}(\eta)$ при температурі $0.6\tau_c$. Суцільна лінія відповідає точному виразові (7), а штрихова лінія — наближеному виразові (8) з $\chi = 0.7$.

Знайдений профіль рівноважної густини дозволяє обчислити (згідно з (1)) великий термодинамічний потенціал неоднорідного плин $\Omega(T, \mu(T), V)$, а отже, і коефіцієнт поверхневого натягу $\gamma(T)$ (див. [6]). На рис. 5 наведено температурну залежність коефіцієнта поверхневого натягу. Це експериментально вимірювана величина. З рис. 5 видно, що градієнтне наближення дає завищене значення коефіцієнта поверхневого натягу (близько 10% при температурі $0.6\tau_c$); з наближенням температури до критичної різниця у значеннях коефіцієнта поверхневого натягу, знайдених у межах градієнтного наближення і на основі нелокального функціонала густини, зникає.

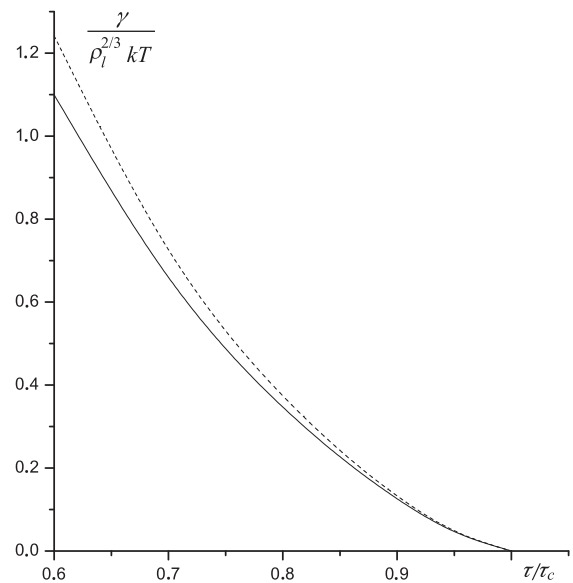


Рис. 5. Температурна залежність коефіцієнта поверхневого натягу $\gamma(\tau)$. Суцільна лінія отримана за допомогою нелокального функціонала густини (1), а штрихова лінія — у градієнтному наближенні (7).

Розгляньмо далі пересичену пару при температурі, наприклад, $\tau = 0.9\tau_c$, тиск якої $\pi = s\pi(\tau) \approx 0.00005871$, $s \approx 1.09222061$. При цьому густина пересиченої пари, що розглядається, $\epsilon \eta \approx 0.05453225$, а

хемічний потенціал — $\nu = \nu(\tau) + \Delta\nu$, $\Delta\nu = 0.0001$. Шукаймо сферично-симетричний розв'язок рівняння (6), що описує утворення краплі рідини в початку координат. Рівняння для профілю безрозмірної густини для сферичної міжфазної поверхні $\eta(r)$ має вигляд

$$\sigma^2 \left(\frac{2}{r} \frac{d\eta(r)}{dr} + \frac{d^2\eta(r)}{dr^2} \right) = \mathcal{F}(\eta(r)) - \frac{1}{4\alpha} \Delta\nu. \quad (10)$$

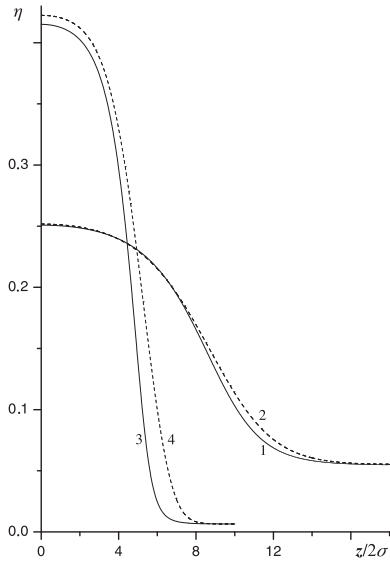


Рис. 6. Профілі густини сферичної міжфазної поверхні. Криві 1, 2 розраховані при $\tau = 0.9\tau_c$, $s \approx 1.09222061$. Для розв'язування інтегрального рівняння використано початковий сходинкоподібний профіль з $\frac{r^{(0)}}{2\sigma} = 8.7$ [6]. При цьому значення нуклеаційного бар'єра у градієнтному наближенні є $\frac{\alpha(\tau, s)}{\tau} \approx 23.8$, а результат на основі нелокального функціонала густини — $\frac{\alpha(\tau, s)}{\tau} \approx 23.5$. Криві 3, 4 розраховані при $\tau = 0.6\tau_c$, $s \approx 1.99999176$, $\frac{r^{(0)}}{2\sigma} = 5.44$; у градієнтному наближенні $\frac{\alpha(\tau, s)}{\tau} \approx 97.5$, якщо ж виходити з нелокального функціонала густини, то $\frac{\alpha(\tau, s)}{\tau} \approx 92.3$. Суцільні лінії 1, 3 отримані за допомогою нелокального функціонала густини (1), штрихові лінії 2, 4 — результат у градієнтному наближенні (10).

Оскільки ми знаємо значення густини пересиченої пари $\eta(r = \infty) = \eta$ і те, що $\frac{d\eta(r=\infty)}{dr} = 0$, здавалося б, що функцію $\eta(r)$, $r \geq 0$ слід шукати, розв'язуючи відповідну задачу Коші для рівняння (10). Однак виявляється [11], що практично зручніше розв'язувати крайову задачу, покладаючи $\frac{d\eta(r=0)}{dr} = \frac{d\eta(r=\infty)}{dr} = 0$ [10]. (Знайдений розв'язок такої крайової задачі, зрозуміло, є і розв'язком згаданої задачі Коші.) На рис. 6 показано знайдений профіль густини при $\tau = 0.9\tau_c$, а також при $\tau = 0.6\tau_c$ разом з результатами, знайденими на основі нелокального функціонала густини (див. [6]). Знову градієнтне наближення передбачає

плавніший профіль густини, ніж нелокальний функціонал густини, а також більшу густину рідини у краплі рідини та “радіус” краплі. На рис. 7, 8 наведено залежність нуклеаційного бар'єра $A(T, s)$ для фазового переходу газу в рідину (див. [6]; $A(T, s)$ обчислено згідно з (1)) від пересичення. Ця величина вимірюється в нуклеаційних експериментах. Градієнтне наближення приводить до дещо завищеного значення нуклеаційного бар'єра, особливо поблизу бінодалі.

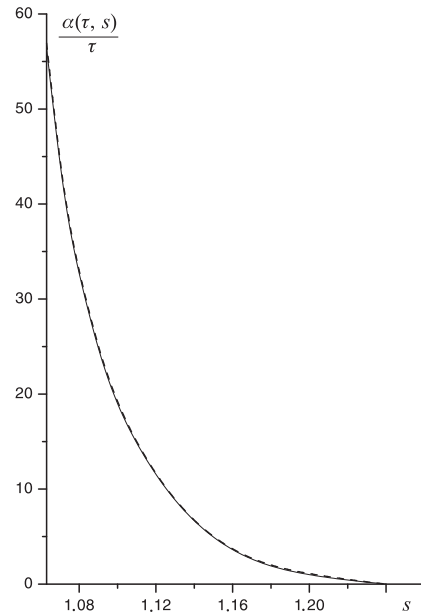


Рис. 7. Нуклеаційний бар'єр $\frac{A(T, s)}{kT} = \frac{\alpha(\tau, s)}{\tau}$ при температурі $0.9\tau_c$. Суцільна лінія — результат, отриманий за допомогою нелокального функціонала густини (1), штрихова лінія — результат у градієнтному наближенні (10). Обидві лінії практично збігаються при цій температурі.

Розгляньмо розтягнену рідину при температурі, наприклад, $\tau = 0.6\tau_c$, тиск якої $\pi \approx -0.00028378$. При цьому густина розтягнутої рідини є $\eta \approx 0.374456660$, а хемічний потенціал $\nu = \nu(\tau) - \Delta\nu$, $\Delta\nu = -0.000733333$. Потрібний сферично-симетричний розв'язок $\eta(r)$ рівняння (6), що описує утворення бульбашки пари в початку координат, знаходимо знову з рівняння (10), розв'язуючи вже згадану крайову задачу.

На рис. 9 наведено знайдений профіль густини при $\tau = 0.6\tau_c$, а на рис. 10 — залежність кавітаційного бар'єра $A(T, \eta)$ (див. [7]; $A(T, \eta)$ обчислено згідно з (1)) від густини розтягнутої рідини при цій температурі. Як і для фазового переходу газу в рідину, бар'єр для фазового переходу рідини в газ у градієнтному наближенні є дещо більшим, ніж знайдений на основі нелокального функціонала густини, і різниця між цими значеннями зникає при наближенні до спінодалі.

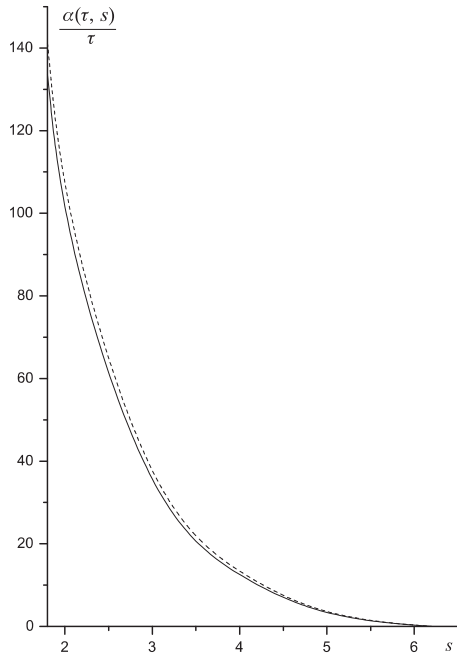


Рис. 8. Нуклеаційний бар'єр $\frac{\alpha(\tau, s)}{\tau}$ при температурі $0.6\tau_c$. Суцільна лінія — результат, отриманий за допомогою нелокального функціонала густини (1), штрихова лінія — результат у ґрадієнтному наближенні (10).

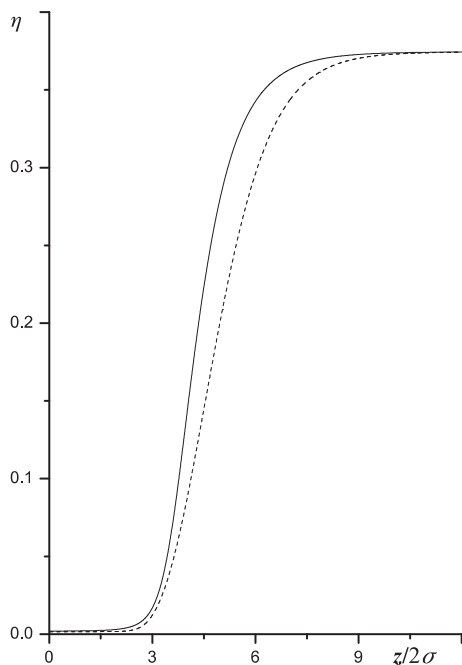


Рис. 9. Профіль густини сферичної міжфазної поверхні при температурі $0.6\tau_c$. Суцільна лінія — результат, отриманий за допомогою нелокального функціонала густини (1) ($\frac{r^{(0)}}{2\sigma}=4.5065$), штрихова лінія — результат у ґрадієнтному наближенні (10). Значення кавітаційного бар'єра у ґрадієнтному наближенні $\frac{\alpha(\tau, \eta)}{\tau} \approx 74.1$, а з використанням нелокального функціонала густини $\frac{\alpha(\tau, \eta)}{\tau} \approx 69.3$.

Обговоримо вплив електричного поля на обчислені величини. Як видно з (1), однорідне електричне поле тільки змінило константу ван дер Ваальсової взаємодії a . У результаті поле змінює тільки критичну температуру і критичний тиск; обидві величини зростають зі збільшенням напруженості електричного поля. Результати, подані з використанням безрозмірних величин $\frac{T}{T_c}$ і $\frac{p}{p_c}$, уже не залежать від поля, яке таким чином визначає лише величини одиниць вимірювання температури й тиску.

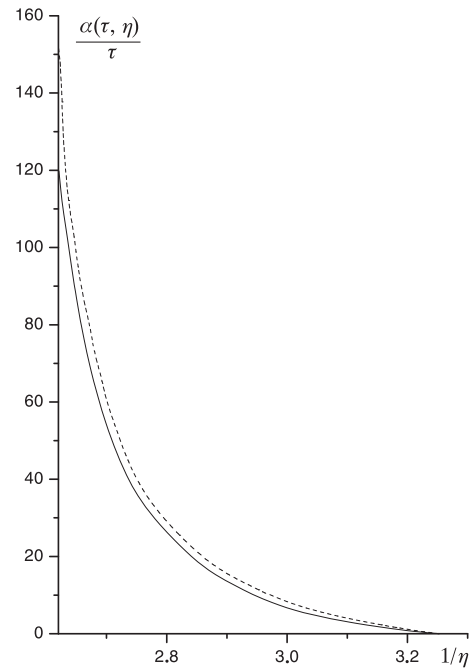


Рис. 10. Кавітаційний бар'єр $\frac{A(T, \eta)}{kT} = \frac{\alpha(\tau, \eta)}{\tau}$ при температурі $0.6\tau_c$. Суцільна лінія — результат, отриманий за допомогою нелокального функціонала густини (1), штрихова лінія — результат у ґрадієнтному наближенні (10).

Підкреслимо нарешті, що порівняння результатів, знайдених у межах ґрадієнтного наближення і на основі нелокального функціонала густини, важливе для розуміння меж застосовності ґрадієнтного наближення. Результати для поверхневого натягу, нуклеаційного й кавітаційного бар'єрів, знайдені в цій роботі, а також у працях [6,7], можуть бути корисними для аналізу відповідних нуклеаційних експериментів, наприклад, для інертних газів у зовнішньому електричному полі.

Автори дякують В. М. Ткачукові, Ю. В. Калужному за обговорення окремих, розглянутих у праці питань. Частина цієї роботи виконана у Johannes Kepler Universität Linz. В. М. Мигаль дякує Österreich-Kooperation für Wissenschaft, Bildung und Kunst за надану стипендію і Г. Іро за гостинність у Лінці.

- [1] R. Evans, *Adv. Phys.* **28**, 143 (1979).
- [2] Дж. Роулинсон, Б. Уидом, *Молекулярная теория капиллярности* (Мир, Москва, 1986).
- [3] *Fundamentals of Inhomogeneous Fluids*, edited by D. Henderson (Marcel Dekker, New York, 1992).
- [4] О. В. Держко, В. М. Мигаль, *Вибрані питання теорії неоднорідних класичних рідин: Текст лекцій* (ЛДУ імені Івана Франка, Львів, 1999).
- [5] D. W. Oxtoby, *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 7627 (1992).
- [6] О. В. Держко, В. М. Мигаль, *Журн. фіз. досл.* **1**, 402 (1997).
- [7] О. В. Держко, В. М. Мигаль, *Журн. фіз. досл.* **2**, 339 (1998).
- [8] Зазначимо, що врахування опущених у (2) наступних доданків у випадку попарного потенціалу далекосяжної взаємодії, що спадає із збільшенням віддалі степеневе, приводить до розбіжних внесків у (3) [2,3]. Тому теорія для таких систем, яка враховує неоднорідність у їх густині точніше, має виходити з нелокального функціонала густини.
- [9] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Механика* (Наука, Москва, 1988).
- [10] D. B. Meade, B. S. Haran, R. E. White, *The shooting technique for the solution of two-point boundary value problems*, *MapleTech* **3**, 85 (1996) (<http://www.maplesoft.com/cybermath/share/shoot.html>).
- [11] J. C. Barrett, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, L19 (1997).

**THE PROPERTIES OF A NONUNIFORM ATOMIC FLUID IN THE ELECTRIC FIELD.
THE GRADIENT APPROXIMATION**

O. V. Derzhko^{†,‡}, V. M. Myhal[‡]

[†]*Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., Lviv, UA-79011, Ukraine*

[‡]*The Ivan Franko National University of Lviv, Chair of Theoretical Physics,
12 Drahomanov Str., UA-79005, Ukraine*

On the basis of the already suggested density functional of the grand thermodynamical potential (*J. Phys. Stud.* **1**, 402 (1997)) a problem concerning the properties of a nonuniform fluid of the two-level atoms in the external electrical field is considered. The calculations are performed within the frames of the gradient approximation which is valid for the temperatures only slightly lower than the critical temperature. The temperature dependence of the surface tension, the dependence of the nucleation (cavitation) barrier on the density of the saturated vapour (the liquid under tensile stress) are obtained. These results are compared with the ones obtained with the help of the nonlocal density functional. The influence of the electric field on the properties of a nonuniform atomic fluid is discussed.