

УДК 539.6;544.77;532.6

ЗАВИСИМОСТЬ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ КАПЛИ, ОБРАЗОВАННОЙ НА МОЛЕКУЛЯРНОМ ЯДРЕ КОНДЕНСАЦИИ ИЛИ ИОНЕ, ОТ РАДИУСА КАПЛИ

© 2020 г. Т. С. Лебедева^а, Д. Су^б, А. К. Щёкин^{а,*}

^а Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

^б Университет Токио, Бункю-ки, Токио, Япония

*e-mail: akshch@list.ru

Поступила в редакцию 05.09.2019 г.

После доработки 18.09.2019 г.

Принята к публикации 18.09.2019 г.

Исследована зависимость термодинамического поверхностного натяжения малой капли, образованной на ядре конденсации молекулярного размера, от размера капли, размера ядра, параметров молекулярного поля и заряда ядра в случае иона. Расчеты были сделаны для молекул пересыщенного пара аргона при разных значениях химического потенциала молекул в рамках градиентного метода функционала плотности и модели Карнахана–Старлинга для вклада твердых сфер. Взаимодействие молекул аргона с незаряженным ядром конденсации описывалось потенциалом Леннарда–Джонса. В случае иона дополнительно учитывался дальнедействующий кулоновский потенциал электрических сил. Диэлектрические проницаемости были заданы как функции локальной плотности числа молекул аргона. В качестве переменной, описывающей размер капли, был выбран радиус эквимолекулярной поверхности капли. Полученные зависимости поверхностного натяжения капель были сравнены с зависимостью поверхностного натяжения от размера капли без ядра конденсации. Показано, что при выделении первого сольватного слоя вокруг ядра конденсации, зависимость поверхностного натяжения от радиуса эквимолекулярной поверхности малой капли с ядром конденсации демонстрирует похожее поведение с практически такой же отрицательной толменовской поправкой, что и при отсутствии ядра, но с другой поправкой с константой эффективной жесткости поверхностного слоя.

Ключевые слова: гетерогенная нуклеация, капля, ядро конденсации, поверхностное натяжение, статистическая термодинамика и механика, метод функционала плотности

DOI: 10.31857/S0572329920010183

1. Введение. Вопросу о влиянии размера малой капли на ее поверхностное натяжение посвящено много работ. В [1–4] в рамках метода функционала плотности было впервые показано, что учет только толменовской поправки (пропорциональной кривизне капли) недостаточен для описания этой зависимости, и нужно учитывать следующий вклад в поверхностное натяжение, который пропорционален квадрату кривизны и связан с константой эффективной жесткости поверхностного слоя [4, 5]. Термодинамический анализ в рамках метода разделяющих поверхностей Гиббса для поверхностного натяжения малой капли полярной и неполярной жидкости, образованной на заряженном ядре конденсации, был проведен в работах [6–10]. Этот ана-

лиз, как и термодинамический анализ в случае наноразмерных ядер конденсации в [11], был сделан в предположении разделения поверхностных слоев ядро—жидкость и жидкость—пар в капле, при этом поправки по параметру кривизны учитывались только в первом порядке. Как будет видно из дальнейшего нашего рассмотрения, разделение поверхностных слоев ядро—жидкость и жидкость—пар объемной жидкой прослойкой не всегда возможно, а в тех случаях, когда оно возможно, требует мотивированного выбора границы между поверхностными слоями ядро—жидкость и жидкость—пар. Исследование нуклеации на ионах в рамках метода функционала плотности было проведено в [12, 13]. Однако, нам неизвестны работы, в которых бы обсуждалась зависимость поверхностного натяжения малых капель на ядрах молекулярного размера в присутствии или отсутствии электрического поля.

Недавно нами в рамках градиентного метода функционала плотности была исследована роль расклинивающего давления в тонких сферических жидких пленках вокруг наноразмерных ядер конденсации [14, 15]. При достаточно больших размерах ядер можно уже пренебречь зависимостью поверхностного натяжения капли от кривизны и связать все размерные эффекты с расклинивающим давлением. Однако для ядер конденсации молекулярного размера понятие расклинивающего давления теряет смысл, и зависимость поверхностного натяжения капли от ее радиуса может быть существенной. Чтобы ее найти, мы воспользовались в данной работе градиентным методом функционала плотности для молекул пересыщенного пара аргона при разных значениях химического потенциала молекул аргона. Взаимодействие молекул аргона между собой описывалось в рамках модели Карнахана—Старлинга для вклада твердых сфер и приближения среднего поля для молекулярного притяжения [16, 17]. Взаимодействие молекул аргона с незаряженным ядром конденсации задавалось потенциалом Леннарда—Джонса. В случае иона дополнительно учитывался дальнедействующий кулоновский потенциал электрических сил в духе работы Китамуры и Онуки [18]. При этом диэлектрические проницаемости пара и жидкости были заданы как известные функции локальной плотности аргона и температуры. В качестве переменной, описывающей размер капли, был выбран радиус эквимолекулярной поверхности капли. Расчеты термодинамически определенного поверхностного натяжения капли были проведены при нескольких размерах ядер конденсации, как меньших, так и больших размера молекулы конденсирующегося вещества. Полученные зависимости поверхностного натяжения капель были сравнены с зависимостью поверхностного натяжения от размера капли без ядра конденсации.

2. Постановка задачи. Рассмотрим открытую систему с пересыщенным однокомпонентным паром при некоторой фиксированной температуре T и химическом потенциале молекул пара μ . Поместим в систему сферическое ядро конденсации (или ион) радиуса R_d . Считаем поверхность ядра равномерно покрытой образующимся конденсатом, вещество ядра нерастворимым в конденсате, электрический заряд (если он присутствует) равномерно распределенным по поверхности ядра.

Большой термодинамический потенциал системы с каплей, образовавшейся вокруг ядра (конечное состояние системы), может быть представлен суммой вкладов [6, 10, 11]

$$\begin{aligned} \Omega_2 = \Omega_i(R_d) + 4\pi R_{em}^2 \sigma^{\alpha\beta} - 4\pi \int_{R_d}^{R_{em}} p_T^\alpha(r) r^2 dr + \\ + \int_{R_d}^{R_{em}} \frac{D^2 r^2}{\varepsilon^\alpha} dr - 4\pi \int_{R_{em}}^L p_T^\beta(r) r^2 dr + \int_{R_{em}}^L \frac{D^2 r^2}{\varepsilon^\beta} dr \end{aligned} \quad (2.1)$$

Здесь $\Omega_i(R_d)$ — вклад в большой термодинамический потенциал, связанный с присутствием ядра конденсации, окруженного сольватной оболочкой радиуса R_d ; R_{em} — радиус эквимолекулярной разделяющей поверхности между каплей и паром. Верхний

греческий индекс у величины указывает к какой фазе она относится: α – жидкость, β – пар. Двойным греческим верхним индексом будем помечать величины, относящиеся к соответствующим межфазным границам, $\sigma^{\alpha\beta}$ – термодинамически определенное поверхностное натяжение для эквимолекулярной разделяющей поверхности на границе жидкость–пар. Величина $p_T(r)$ – тангенциальная компонента локального тензора давления в присутствии центрального электрического поля, создаваемого зарядом иона, D – индукция этого поля, ε – диэлектрическая проницаемость соответствующей фазы, L – внешний радиус системы, который выбирается достаточно далеко от ядра там, где влияние ядра на плотность вещества в системе практически отсутствует, и плотность окружающего флюида достигает плотности пара в объемной фазе.

В присутствии центрального электрического поля [6, 10, 11]

$$p_T^{\alpha,\beta}(r) = p^{\alpha,\beta} + \frac{D^2}{8\pi\varepsilon^{\alpha,\beta}} \quad (2.2)$$

где p^α, p^β – давления в жидкости и паре в отсутствие поля при заданных T и μ . Проинтегрировав с учетом (2.2) и выражения для индукции кулоновского поля слагаемые в выражении (2.1), выразим термодинамическое поверхностное натяжение $\sigma^{\alpha\beta}$ капли как

$$\sigma^{\alpha\beta} = \frac{1}{4\pi R_{em}^2} \left\{ \Omega_2 - \Omega_i(R_d) + \frac{4\pi}{3}(R_{em}^3 - R_d^3)p^\alpha + \frac{4\pi}{3}(L^3 - R_{em}^3)p^\beta - \right. \\ \left. - \frac{(Ze)^2}{2\varepsilon^\alpha} \left(\frac{1}{R_d} - \frac{1}{R_{em}} \right) - \frac{(Ze)^2}{2\varepsilon^\beta} \left(\frac{1}{R_{em}} - \frac{1}{L} \right) \right\} \quad (2.3)$$

где Z – заряд иона в единицах элементарного заряда e .

Найти Ω_2 можно в рамках градиентного метода функционала плотности [14–17]. В соответствии с [14–17], представим Ω_2 как следующий функционал радиального профиля плотности $\rho(r)$ вещества:

$$\Omega_2 = \\ = 4\pi \int_{R_i}^L \left[k_B T \rho \left[\ln(\lambda_{th}^3 \rho) - 1 + \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1 - \eta)^2} \right] - a\rho^2 + \frac{C}{2}(\nabla\rho)^2 - \mu\rho + \rho w(r) + \frac{(Ze)^2}{8\pi\varepsilon(\rho)r^4} \right] r^2 dr \quad (2.4)$$

Здесь r – расстояние от центра ядра конденсации, k_B – постоянная Больцмана, $\eta = \pi d^3 \rho / 6$ – безразмерная плотность числа молекул конденсирующегося вещества, d – диаметр твердой сферы (далее $\sigma \equiv (\pi/6)^{1/3} d$ используется для перехода к безразмерной длине), $\lambda_{th} = \hbar \sqrt{2\pi / (mk_B T)}$ – тепловая длина де Бройля, \hbar – постоянная Планка, m – масса молекулы конденсирующегося вещества, a – параметр среднего поля, определяемый потенциалом межмолекулярного взаимодействия молекул конденсирующегося вещества, $C = 14\sigma^5 k_B T$ – параметр, определяемый потенциалом межмолекулярного взаимодействия в конденсате, но не зависящий от параметров ядра конденсации, $w(r)$ – потенциал молекулярного поля ядра конденсации, $\varepsilon(\rho) = (1 + 8\pi\alpha_m \rho / 3) / (1 - 4\pi\alpha_m \rho / 3)$ – диэлектрическая проницаемость как функция локальной плотности конденсата.

В выражении (2.4) возьмем потенциал $w(r)$ как потенциал Леннард–Джонса $w(r) = E_{vw} \{ (\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6 \}$. При расчетах энергетический параметр E_{vw} для ядра конденса-

ции был выбран $E_{vw} = 12a/\sigma^3$, т.е. потенциал притяжения молекулы конденсата к ядру приблизительно в 12 раз больше, чем к другой молекуле конденсата. Выбор E_{vw} был обусловлен, во-первых, требованием получить при расчете капли, полностью покрывающие поверхность ядра конденсации для обеспечения центральной симметрии. Во-вторых, необходимо иметь выраженную сольватную оболочку вокруг ядра, чтобы при расчете поверхностного натяжения слоя жидкость–газ исключить эффекты, связанные со структурой этой оболочки.

Равновесный профиль плотности $\rho(r)$ может быть найден из условия стационарности $\delta\Omega_2/\delta\rho(\mathbf{r}) = 0$ для функционала (2.4). С учетом сферической симметрии системы (с центром в центре ядра конденсации), условие стационарности принимает вид нелинейного обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка на профиль плотности числа молекул:

$$\begin{aligned} \frac{C}{k_B T} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\rho}{dr} \right) = \ln(\lambda_{th}^3 \rho) + \eta \left[\frac{8 - 9\eta + 3\eta^2}{(1 - \eta)^3} \right] - \\ - \frac{2a}{k_B T} \rho - \frac{\mu}{k_B T} + \frac{w(r)}{k_B T} - \frac{(Ze)^2}{8\pi k_B T r^4 \epsilon^2} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} \right)_T \end{aligned} \quad (2.5)$$

3. Численные результаты. На рис. 1 схематично представлена рассматриваемая система размера L в конечном состоянии, то есть с образовавшейся на ядре конденсации радиально неоднородной по плотности жидкой каплей. Начало координат помещено в центр ядра. Расчеты были проведены для ядер конденсации разных размеров, которые были меньше или больше размера молекулы конденсирующегося вещества. На рис. 1 проиллюстрирован случай, когда радиус ядра $R_j = 0.4\sigma$, что меньше радиуса молекулы конденсата $\Delta\sigma = 0.6\sigma$. Пунктирной кривой изображена характерная зависимость безразмерного потенциала $w(r)/k_B T$ сил молекулярного взаимодействия молекул конденсата с ядром. Сплошная кривая на рис. 1 – это характерный профиль безразмерной локальной плотности пленки $\eta(r)$. Радиус R_d задает границу сольватной оболочки вокруг ядра (обозначена крупными точками). Радиус R_{em} определяет положение точками эквимолекулярной поверхности капли, жидкая фаза обозначена мелкими точкам, газовая фаза – косыми линиями.

Решая численно уравнение (2.5) при температуре $T = 90$ К для аргоноподобных молекул, мы нашли профили плотности капель как функции безразмерного радиуса r/σ при нескольких значениях безразмерного сдвига химического потенциала $\Delta\tilde{\mu} = (\mu - \mu_\infty)/k_B T$ (μ_∞ – значение химического потенциала при равновесии с плоской границей раздела жидкость–пар). При значении химического потенциала $\mu > \mu_\infty$ (но ниже некоторого порогового значения) уравнение (2.5) имеет два решения, соответствующие стабильной (устойчивому равновесию с паром) и критической (неустойчивому равновесию с паром) каплям. В статье были использованы следующие значения параметров [14–17]: $\pi d^3/6 = 16.22 \times 10^{-30}$ м³, $\sigma = (\pi d^3/6)^{1/3} = 2.53 \times 10^{-10}$ м³, $a = 3.58 \cdot 10^{-49}$ Дж · м³, $\mu_\infty = -1.539 \times 10^{-20}$ Дж, $\eta_\infty^\alpha = \pi d^3 \rho^\alpha(\mu_\infty)/6 = 0.408$, $\eta_\infty^\beta = \pi d^3 \rho^\beta(\mu_\infty)/6 = 0.00296$, $\sigma_\infty^{\alpha\beta} = 0.0119$ Н/м, $\alpha_m = 6.9 \times 10^{-30}$ м³.

Результаты расчетов профилей при $\Delta\tilde{\mu} = 0.27$ в безразмерных величинах η и r/σ приведены на рис. 2 и 3. Сплошная кривая показывает профиль плотности капли в отсутствие ядра конденсации. Горизонтальная линия соответствует значению плотности жидкости в объемной фазе при заданном химическом потенциале (кривая 1). Приведены профили плотности для стабильных (кривые 2) и критических капель

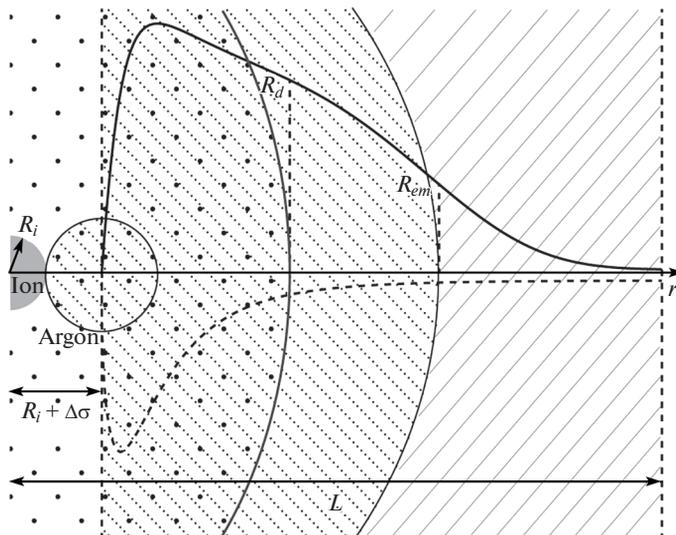


Рис. 1

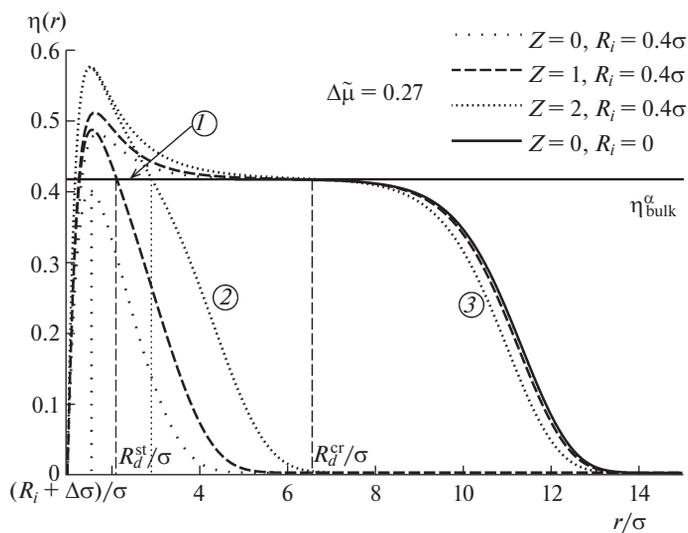


Рис. 2

(кривые 3). На рис. 2 представлен расчет для ядра размера $R_i = 0.4\sigma$ при $Z = 0$ (нейтральное ядро конденсации, профиль изображен точками с длинным пробелом), $Z = 1$ (однократно заряженный ион, профиль показан штрихами), $Z = 2$ (двукратно заряженный ион, профиль показан точками). На рис. 3 показаны профили плотности для капель, образовавшихся на ионах с зарядом $Z = 2$ при различных размерах ионов: $R_i = 0.4\sigma$ (профиль показан точками), $R_i = 0.6\sigma$ (профиль показан штрихами с точками), $R_i = 0.8\sigma$ (профиль показан длинными штрихами).

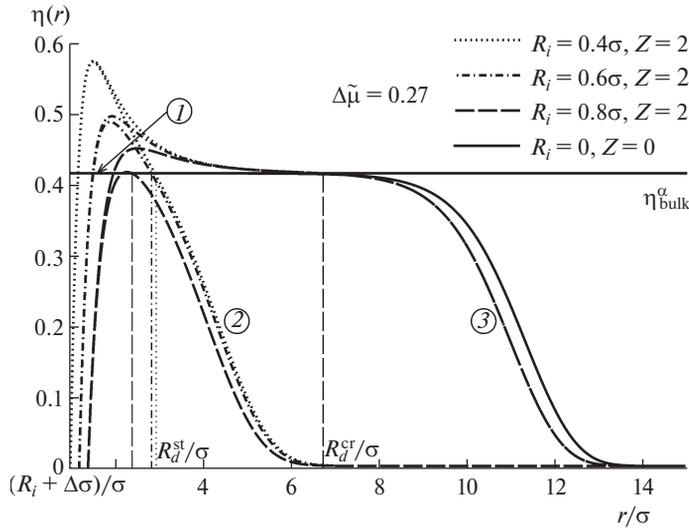


Рис. 3

Точку пересечения профиля $\eta(r)$ с линией плотности жидкой фазы η^α принимаем за радиус сольватной оболочки R_d вокруг ядра. Если капля достаточно рыхлая (на рис. 2 это случай стабильной капли на нейтральном ядре), и профиль плотности не достигает объемной фазы, тогда R_d совпадает с координатой максимума профиля плотности. Радиус R_{em} эквимолекулярной поверхности при заданном химическом потенциале вычислялся по формуле [16]

$$R_{em}^3 = -\frac{1}{\rho^\alpha - \rho^\beta} \int_{R_i}^L r^3 \frac{d\rho(r)}{dr} dr \quad (3.1)$$

Подставив полученные численные зависимости $\rho(r)$ в выражение (2.4), можно рассчитать разность больших термодинамических потенциалов $\Omega_2 - \Omega_i(R_d)$. Так как в формуле (2.3) стоит разность $\Omega_2 - \Omega_i(R_d)$, то для ее вычисления нужно интегрировать выражение (2.4) от точки R_d до границы системы.

На рис. 4 и рис. 5 приведены результаты расчета поверхностного натяжения по формуле (2.3) для различных значений химического потенциала $\Delta\tilde{\mu}$, которым соответствуют значения безразмерного эквимолекулярного радиуса R_{em}/σ для стабильной и критической каплей. По оси ординат отложены величины $\sigma^{\alpha\beta}$ в единицах 10^3 Н/м, по оси абсцисс безразмерный радиус эквимолекулярной поверхности R_{em}/σ . Результаты расчета показаны символами, кривые соответствуют квадратичной по кривизне капли аппроксимации [4]

$$\sigma^{\alpha\beta}(R_{em}) = \sigma^{\alpha\beta} (1 - 2\delta_\infty/R_{em} + \kappa/R_{em}^2) \quad (3.2)$$

где δ_∞ – толменовская длина и κ – константа эффективной жесткости поверхностного слоя [5]. Сплошная кривая с косыми крестиками показывает зависимость поверхностного натяжения от безразмерного внешнего радиуса капли R_{em}/σ для случая капли без ядра ($\delta_\infty = -0.19\sigma$, $\kappa = -1.58\sigma^2$). Горизонтальная сплошная линия соответству-

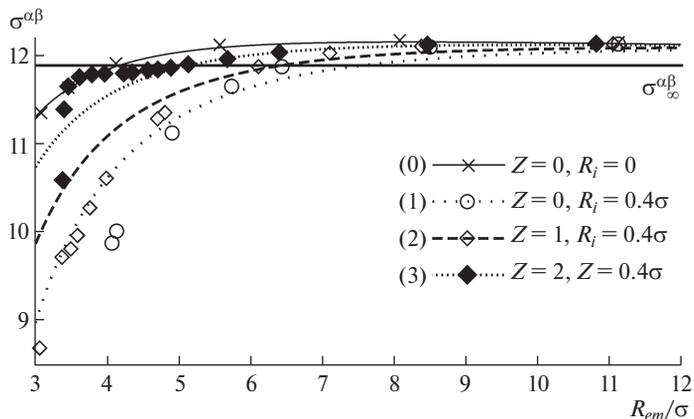


Рис. 4

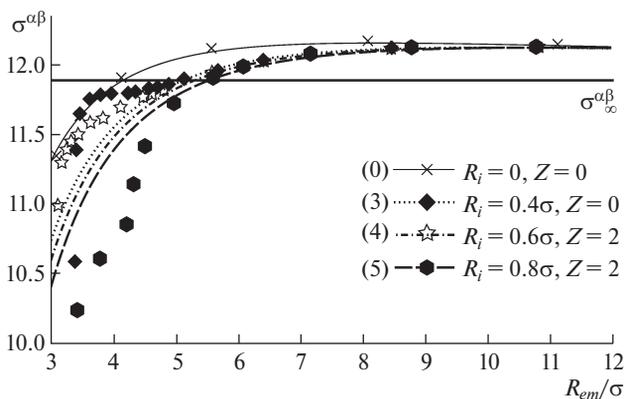


Рис. 5

ет значению поверхностного натяжения при плоской границе раздела $\sigma_{\infty}^{\alpha\beta}$. К этому значению все кривые на рис. 4 и 5 стремятся в пределе больших радиусов R_{em}/σ , проходя перед этим через максимум. На рис. 4 представлен расчет для иона радиуса $R_i = 0.4\sigma$ и различных зарядов: $Z = 0$ (кружки, кривая с редким пунктиром отвечает формуле (3.2) с $\delta_{\infty} = -0.25\sigma$ и $\kappa = -3.70\sigma^2$), $Z = 1$ (ромбы, кривая со штрихами отвечает формуле (3.2) с $\delta_{\infty} = -0.23\sigma$ и $\kappa = -2.90\sigma^2$), $Z = 2$ (закрашенные ромбы, кривая с частым пунктиром отвечает формуле (3.2) с $\delta_{\infty} = -0.21\sigma$ и $\kappa = -2.12\sigma^2$). На рис. 5 приведены результаты для капель, образовавшихся на ионах с зарядом $Z = 2$ при $R_i = 0.4\sigma$ (закрашенные ромбы на пунктирной кривой по формуле (3.2) с $\delta_{\infty} = -0.21\sigma$ и $\kappa = -2.12\sigma^2$), $R_i = 0.6\sigma$ (звезды на штрих-пунктирной кривой по формуле (3.2) с $\delta_{\infty} = -0.21\sigma$ и $\kappa = -2.26\sigma^2$), $R_i = 0.8\sigma$ (шестиугольники на штриховой кривой по фор-

муле (3.2) с $\delta_\infty = -0.22\sigma$ и $\kappa = -2.46\sigma^2$). Отметим, что при малых R_{em}/σ на рис. 4 и 5 видно появление немонотонного поведения вычисленных значений поверхностного натяжения. При таких радиусах капля разделяется на поверхностный слой капли и сольватной оболочки становится плохо определенным. Поэтому эту область размеров капля мы не будем обсуждать.

4. Выводы. При исключении эффектов, связанных непосредственно с сольватной оболочкой, зависимость поверхностного натяжения от размера капли для каплей без ядра и каплей на нейтральном и заряженном ядре молекулярного размера демонстрирует похожее поведение. Во всех случаях с уменьшением размера капли поверхностное натяжение сначала растет, проходит через максимум и затем уменьшается. Это поведение вполне описывается формулой (3.2). При этом толменовская длина оказывается приблизительно одинаковой во всех случаях (наибольшее отклонение для нейтрального ядра с $R_j = 0.4\sigma$ на рис. 4 связано, по-видимому, с тем, что в этом случае сольватная оболочка слабо выражена). Однако, вклад в поверхностное натяжение, который пропорционален квадрату кривизны и связан с константой эффективной жесткости поверхностного слоя, различается уже существенно. Этот вклад наименьший в случае капли без ядра конденсации, с ростом размера заряженного ядра он возрастает.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 18-53-50015 ЯФ_а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Baidakov V.G., Boltachev G.Sh.* Curvature dependence of the surface tension of liquid and vapor nuclei // *Phys. Rev. E.* 1999. V. 59. № 1. P. 469.
2. *Baidakov V.G., Boltachev G.Sh.* Extended version of the Van der Waals capillarity theory// *J. Chem. Phys.* 2004. V. 121. № 17. P. 8594.
3. *Быков Т.В., Щёкин А.К.* Термодинамические характеристики малой капли в рамках метода функционала плотности // *Коллоид. журн.* 1999. Т. 61. № 2. С. 164 (*Colloid J.* 1999. V. 61. P. 144.)
4. *Быков Т.В., Щёкин А.К.* Поверхностное натяжение, длина Толмена и эффективная константа жесткости поверхностного слоя капли с большим радиусом кривизны // *Неорганические материалы.* 1999. Т. 35. № 6. С. 759 (*Inorganic Materials.* 1999. V. 35. № 6. P. 641).
5. *Blokhuis E.M., van Giessen A.E.* Density functional theory of a curved liquid-vapour interface: evaluation of the rigidity constants // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2013. V. 25. № 22. P. 225003.
6. *Куни Ф.М., Щёкин А.К., Русанов А.И.* К теории зародышеобразования на заряженных ядрах. 3. Разложение по параметру кривизны капли в сильном поле заряженного ядра // *Коллоид. журн.* 1983. Т. 45. № 4. С. 682 (*Colloid J. USSR.* 1983. V. 45. P. 598).
7. *Куни Ф.М., Щёкин А.К., Русанов А.И.* К теории зародышеобразования на заряженных ядрах. 4. Вычисление работы образования в сильном поле заряженного ядра // *Коллоид. журн.* 1983. Т. 45. № 5. С. 901 (*Colloid J. USSR.* 1983. V. 45. P. 801).
8. *Куни Ф.М., Щёкин А.К., Русанов А.И.* К теории зародышеобразования на заряженных ядрах. 5. Химический потенциал пара на пороге безбарьерной нуклеации и его асимметрия к знаку заряда ядра // *Коллоид. журн.* 1983. Т. 45. № 6. С. 1083 (*Colloid J. USSR.* 1983. V. 45. P. 951).
9. *Щёкин А.К., Русанов А.И., Куни Ф.М.* К теории зародышеобразования на заряженных ядрах. 6. Безбарьерное зародышеобразование в парах органических жидкостей // *Коллоид. журн.* 1984. Т. 46. № 3. С. 535 (*Colloid J. USSR.* 1984. V. 46. P. 598).
10. *Щёкин А.К., Сасим Т.В.* Нелинейность электрических свойств жидкости в термодинамике капли, образованной на заряженном ядре // *Коллоид. журн.* 1988. Т. 50. № 4. С. 782 (*Colloid J. USSR.* 1988. V. 50. P. 671).
11. *Shchekin A.K., Podguzova T.S.* The modified Thomson equation in the theory of heterogeneous nucleation on charged solid particles // *Atmos. Res.* 2011. V. 101. № 3. P. 493.
12. *Kusaka I., Wang Z.-G., Seinfeld J.H.* Ion-Induced Nucleation: A Density Functional Approach // *J. Chem. Phys.* 1995. V. 102. № 2. P. 913.

13. *Kusaka I., Wang Z.-G., Seinfeld J.H.* Ion-Induced Nucleation: II. Polarizable Multipolar Molecules // *J. Chem. Phys.* 1995. V. 103. № 20. P. 8993.
14. *Shchekin A.K., Lebedeva T.S., Suh D.* The overlapping surface layers and the disjoining pressure in a small droplet // *Colloids and Surfaces A.* 2019. V. 574. P. 78.
15. *Shchekin A.K., Lebedeva T.S.* Density functional description of size-dependent effects at nucleation on neutral and charged nanoparticles // *J. Chem. Phys.* 2017. V. 146. n. 094702.
16. *Щёкин А.К., Лебедева Т.С., Татьяненко Д.В.* Ключевые термодинамические характеристики нуклеации на заряженных и нейтральных ядрах молекулярного размера в рамках градиентного метода функционала плотности // *Коллоид. журн.* 2016. Т. 78. № 4. С. 520 (*Colloid Journal.* 2016. V. 78. P. 553).
17. *Shchekin A.K., Lebedeva T.S., Tatyanyenko D.V.* Dependence of the condensate chemical potential on droplet size in thermodynamics of heterogeneous nucleation within the gradient DFT // *Fluid Phase Equilibria.* 2016. V. 424. P. 162.
18. *Kitamura H., Onuki A.* Ion-induced nucleation in polar one-component fluids // *J. Chem. Phys.* 2005. V. 123. № 12. 124513.