ВЛАСТИВОСТІ НЕОДНОРІДНОГО ПЛИНУ АТОМІВ В ЕЛЕКТРИЧНОМУ ПОЛІ. ҐРАДІЄНТНЕ НАБЛИЖЕННЯ

О. В. Держко[1,2], В. М. Мигаль[2]
[1] *Інститут фізики конденсованих систем НАН України, вул. Свєнціцького, 1, Львів–11, 79011*
[2] *Львівський 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 плину дворівневих атомів у зовнішньому електричному полі на основі запропонованого раніше функціонала густини великого термодинамічного потенціялу (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 (розтягненої рідини). Результати порівнюються з результатами обчислень на основі нелокального функціонала густини. Обговорено вплив електричного поля на властивості неоднорідного атомного плину.

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, 62.60Nh, 64.60.Qb

Метод функціонала густини є досить поширеним формалізмом дослідження властивостей неоднорідних класичних чи квантових плинів [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 плину 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 плину. У працях [6,7] було проаналізовано зміни в ефективних міжатомних взаємодіях, що зумовлені полем, обґрунтовано вибір вихідного функціонала великого термодинамічного потенціялу, побудовано фазову діяграму 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 розтягненої рідини. У проведених дослідженнях використано нелокальний 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 інтеґральних рівнянь для рівноважного профілю густини. У теперішній праці ми переглядаємо результати дослідження властивостей неоднорідного атомного плину в електричному полі, розглядаючи нелокальні внески у функціонал густини великого термодинамічного потенціялу в ґрадієнтному наближенні. Слід очікувати, що ґрадієнтне наближення є придатним для малих ґрадієнтів густини неоднорідного плину, тобто для неоднорідного плину з температурою, лише незначно меншою за критичну. З математичної точки зору рівноважний профіль густини тепер визначаємо на основі диференціяльних рівнянь, для яких слід розв'язувати відповідну крайову задачу чи задачу Коші. Ми порівняємо результати, знайдені у ґрадієнтному наближенні, з отриманими раніше результатами на основі нелокального функціонала густини, виявляючи сферу застосовности ґрадієнтного наближення. Ми обговоримо вплив електричного поля на властивості неоднорідного атомного плину, що одержані у ґрадієнтному наближенні.

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

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

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

Перший доданок у функціоналі густини (1) є локальним внеском Карнагана–Старлінґа 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, $a = \frac{1}{48}v(E_1 - E_0)\aleph^2(1 + 2\aleph^2\mathcal{E}^2) = v(E_1 - E_0)\alpha$, $E_1 - E_0$ — енерґія 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 ґрадієнтному наближенні, припустивши, що густина в точці $\mathbf{R}_2$ мало відрізняється від густини в точці $\mathbf{R}_1$,

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

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 інтеґруючи за $\mathbf{R}_2$ (для обчислення інтеґралів вибираємо систему координат із початком у $\mathbf{R}_1$; результат інтеґрування не залежить від $\mathbf{R}_1$), знаходимо

$$\Omega[\rho(\mathbf{R})] = \int \mathrm{d}\mathbf{R}_1 f_{CS}(\rho(\mathbf{R}_1)) - a\int \mathrm{d}\mathbf{R}_1\rho(\mathbf{R}_1)\left(\rho(\mathbf{R}_1) + 2\sigma^2\sum_{i=x,y,z}\nabla_i^2\rho(\mathbf{R}_1) + \ldots\right) - \mu\int \mathrm{d}\mathbf{R}_1\rho(\mathbf{R}_1)$$

$$= \int \mathrm{d}\mathbf{R}_1\left(f_0(\rho(\mathbf{R}_1)) + f_2^{(a)}(\rho(\mathbf{R}_1))\sum_{i=x,y,z}\nabla_i^2\rho(\mathbf{R}_1) + \ldots\right), \tag{3}$$

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

Оскільки

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

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

то остаточно функціонал великого термодинамічного потенціялу в ґрадієнтному наближенні набуває вигляду [8]

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

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

Пам'ятаймо, що функціонал великого термодинамічного потенціялу плину атомів у зовнішньому електричному полі у ґрадієнтному наближенні (4) містить залежність від величини напружености 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

$$\frac{\mathrm{d}f_0(\rho(\mathbf{R}))}{\mathrm{d}\rho(\mathbf{R})}-4a\sigma^2\sum_{i=x,y,z}\nabla_i^2\rho(\mathbf{R})-\mu=0. \qquad (5)$$

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

$$kT\ln\left(\Lambda^3\rho(\mathbf{R})\right)+kT\frac{8v\rho(\mathbf{R})-9v^2\rho^2(\mathbf{R})+3v^3\rho^3(\mathbf{R})}{\left(1-v\rho(\mathbf{R})\right)^3}$$

$$-2a\rho(\mathbf{R})-4a\sigma^2\sum_{i=x,y,z}\nabla_i^2\rho(\mathbf{R})-\mu=0. \qquad (6)$$

Нагадаймо [6,7], що при температурі, нижчій за критичну, $\tau_c=\frac{kT_c}{E_1-E_0}\approx 0.00196518\aleph^2(1+2\aleph^2\mathcal{E}^2)$, плин, функціонал великого термодинамічного потенціялу 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 потенціялу $\nu(\tau)=\frac{\mu(T)-kT\ln\frac{\Lambda^3}{v}}{E_1-E_0}\approx -0.00665919$. 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

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

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

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 вільности 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:

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

де $\overline{\eta}=\frac{1}{2}(\eta_v+\eta_l)$, $\Delta\eta=\frac{1}{2}(\eta_v-\eta_l)<0$, а $\chi>0$ — деякий параметр (див., наприклад, рис. 1). Тоді, уводячи нову змінну $\tilde{\eta}=\frac{\chi}{\Delta\eta}(\eta-\overline{\eta})$, використовуючи для отриманого рівняння руху закон збереження енерґії з потенціяльною енерґією $\mathcal{U}(\tilde{\eta})=-\frac{1}{2}\left(\tilde{\eta}^2-\chi^2\right)^2+\mathcal{U}_0$, ураховуючи, що $\tilde{\eta}=\pm\chi$ та $\frac{\mathrm{d}\tilde{\eta}}{\mathrm{d}z}=0$ при $z\to\pm\infty$, отримаємо аналітичний розв'язок рівняння для профілю густини (7) у припущенні (8) [9]

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

(z_0 — стала інтеґрування).

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 $\tau=0.6\tau_c$. Ґрадієнтне 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 ґрадієнтному наближенні чи на основі нелокального функціонала густини.

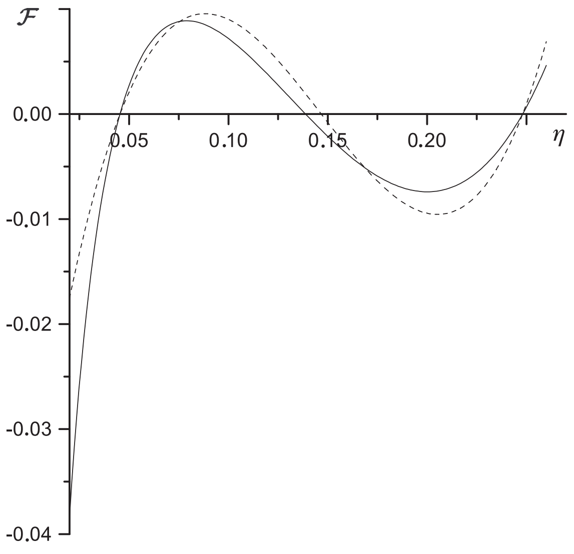

Рис. 1. Функція $\mathcal{F}(\eta)$ при температурі $0.9\tau_c$. Суцільна лінія відповідає точному виразові (7), а штрихова лінія — наближеному виразові (8) з $\chi=0.35$.

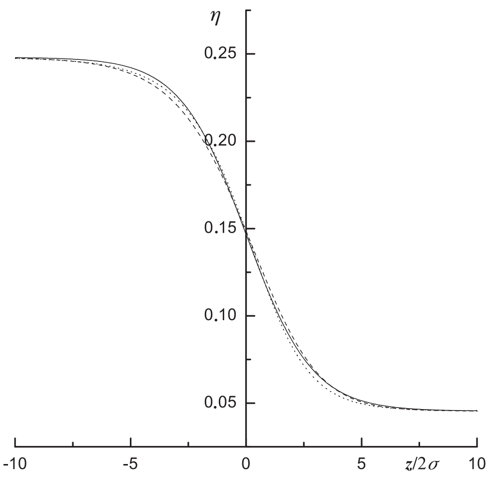

Рис. 2. Профіль густини для плоскої міжфазної поверхні при температурі $0.9\tau_c$. Суцільна лінія — результат нелокального розгляду (1), штрихова лінія — ґрадієнтне наближення (7), а пунктирна лінія відповідає виразові (9) з $\chi = 0.35$.

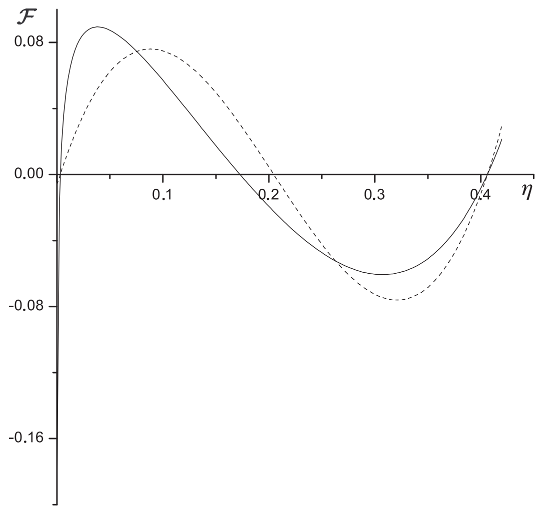

Рис. 3. Функція $\mathcal{F}(\eta)$ при температурі $0.6\tau_c$. Суцільна лінія відповідає точному виразові (7), а штрихова лінія — наближеному виразові (8) з $\chi = 0.7$.

Знайдений профіль рівноважної густини дозволяє обчислити (згідно з (1)) великий термодинамічний потенціял неоднорідного плину $\Omega(T, \mu(T), V)$, 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 ґрадієнтне наближення дає завищене значення коефіцієнта поверхневого натягу (близько 10% при температурі $0.6\tau_c$); з наближенням температури до критичної різниця у значеннях кофіцієнта поверхневого натягу, знайдених у межах ґрадієнтного наближення і на основі нелокального функціонала густини, зникає.

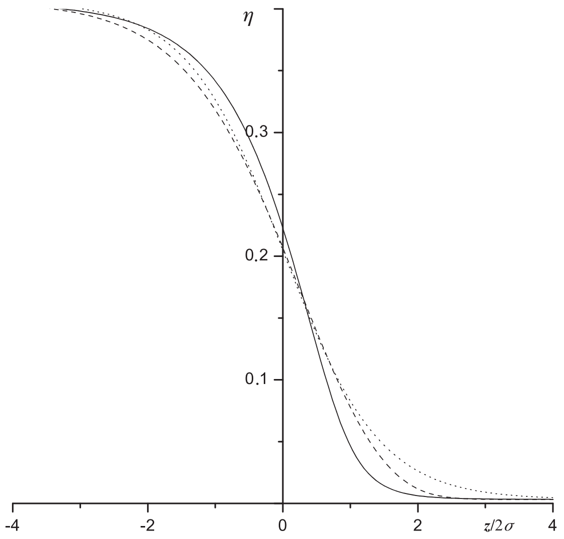

Рис. 4. Профіль густини для плоскої міжфазної поверхні при температурі $0.6\tau_c$. Суцільна лінія — результат нелокального розгляду (1), штрихова лінія — ґрадієнтне наближення (7), а пунктирна лінія відповідає виразові (9) з $\chi = 0.7$.

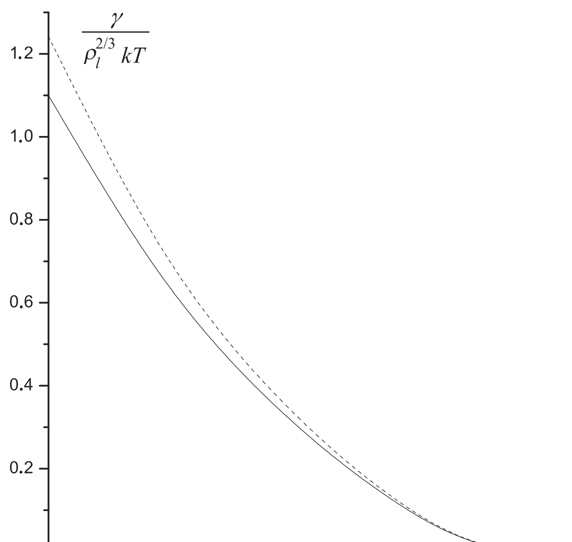

Рис. 5. Температурна залежність коефіцієнта поверхневого натягу $\gamma(\tau)$. Суцільна лінія отримана за допомогою нелокального функціонала густини (1), а штрихова лінія — у ґрадієнтному наближенні (7).

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, є $\eta \approx 0.05453225$, а хемічний потенціял — $\nu = \nu(\tau) + \Delta\nu$, $\Delta\nu = 0.0001$. 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

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

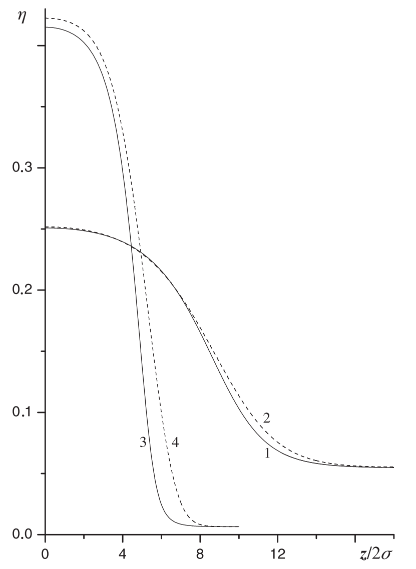

Рис. 6. Профілі густини сферичної міжфазної поверхні. Криві 1, 2 розраховані при $\tau = 0.9\tau_c$, $s \approx 1.09222061$. Для розв'язування інтеґрального рівняння використано початковий сходинкоподібний профіль з $\frac{r^{(0)}}{2\sigma} = 8.7$ [6]. При цьому значення нуклеаційного бар'єра у ґрадієнтному 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 ґрадієнтному 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 ґрадієнтному наближенні (10).

Оскільки ми знаємо значення густини пересиченої пари $\eta(r = \infty) = \eta$ і те, що $\frac{\mathrm{d}\eta(r=\infty)}{\mathrm{d}r} = 0$, 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 $\frac{\mathrm{d}\eta(r=0)}{\mathrm{d}r} = \frac{\mathrm{d}\eta(r=\infty)}{\mathrm{d}r} = 0$ [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 ґрадієнтне наближення передбачає плавніший профіль густини, аніж 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. Ґрадієнтне наближення приводить до дещо завищеного значення нуклеаційного бар'єра, особливо поблизу бінодалі.

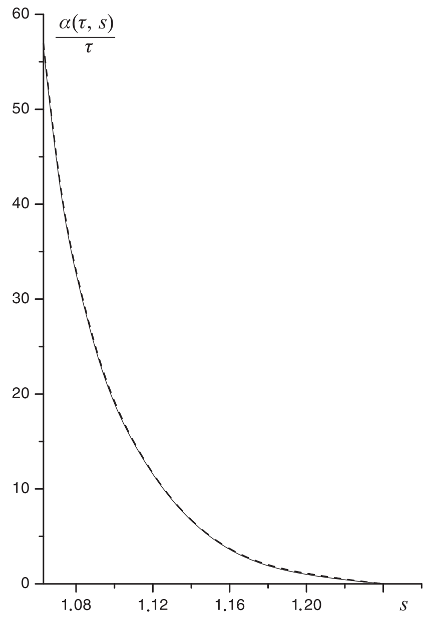

Рис. 7. Нуклеаційний бар'єр $\frac{A(T,s)}{kT} = \frac{\alpha(\tau,s)}{\tau}$ при температурі $0.9\tau_c$. Суцільна лінія — результат, отриманий за допомогою нелокального функціонала густини (1), штрихова лінія — результат у ґрадієнтному наближенні (10). Обидві лінії практично збігаються при цій температурі.

Розгляньмо розтягнену рідину при температурі, наприклад, $\tau = 0.6\tau_c$, тиск якої $\pi \approx -0.00028378$. При цьому густина розтягненої рідини є $\eta \approx 0.37445660$, а хемічний потенціял $\nu = \nu(\tau) - \Delta\nu$, $\Delta\nu = -0.00073333$. 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 розтягненої рідини при цій температурі. Як і для фазового переходу газу в рідину, бар'єр для фазового переходу рідини в газ у ґрадієнтному наближенні є дещо більшим, аніж знайдений на основі нелокального функціонала густини, і різниця між цими значеннями зникає при наближенні до спінодалі.

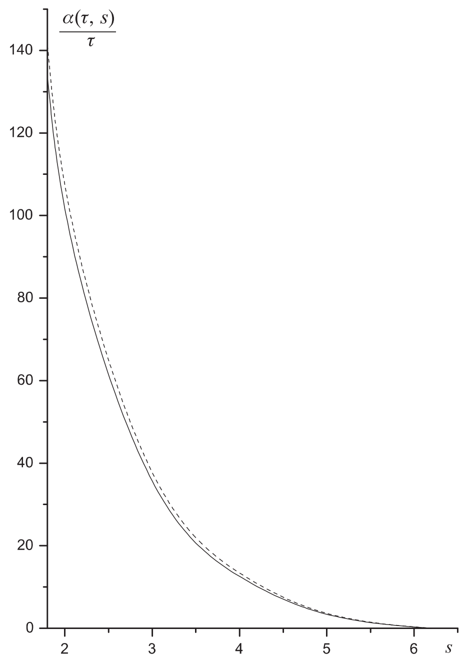

Рис. 8. Нуклеаційний бар'єр $\frac{\alpha(\tau,s)}{\tau}$ при температурі $0.6\tau_c$. Суцільна лінія — результат, отриманий за допомогою нелокального функціонала густини (1), штрихова лінія — результат у ґрадієнтному наближенні (10).

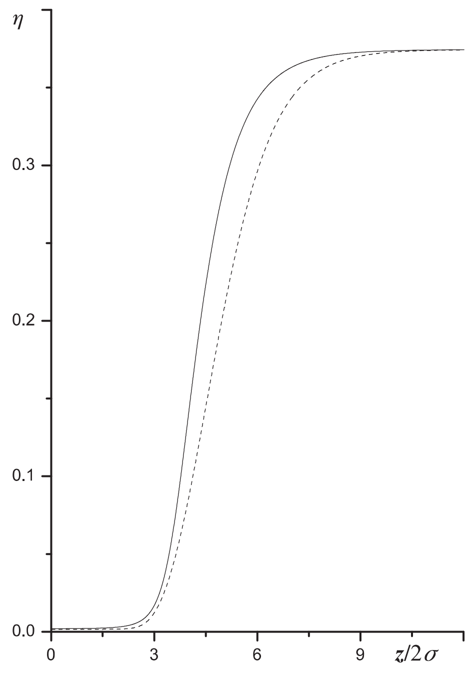

Рис. 9. Профіль густини сферичної міжфазної поверхні при температурі $0.6\tau_c$. Суцільна лінія — результат, отриманий за допомогою нелокального функціонала густини (1) ($\frac{r^{(0)}}{2\sigma}$=4.5065), штрихова лінія — результат у ґрадієнтному наближенні (10). Значення кавітаційного бар'єра у ґрадієнтному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

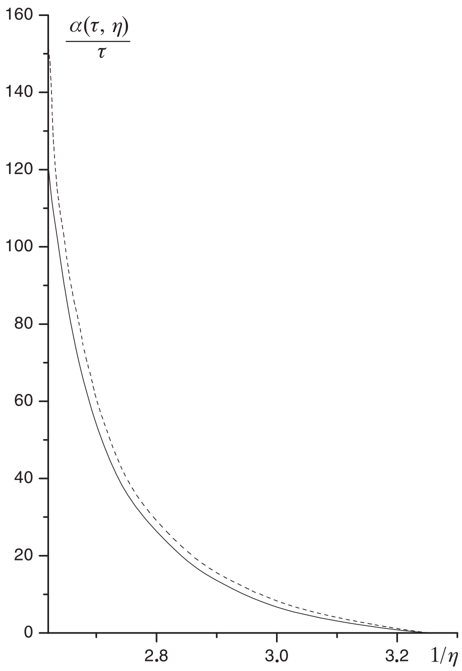

Рис. 10. Кавітаційний бар'єр $\frac{A(T,\eta)}{kT} = \frac{\alpha(\tau,\eta)}{\tau}$ при температурі $0.6\tau_c$. Суцільна лінія — результат, отриманий за допомогою нелокального функціонала густини (1), штрихова лінія — результат у ґрадієнтному наближенні (10).

Підкреслимо нарешті, що порівняння результатів, знайдених у межах ґрадієнтного наближення і на основі нелокального функціонала густини, важливе для розуміння меж застосовности 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. Калюжному 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 плинів: 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 потенціялу далекосяжної взаємодії, що спадає із збільшенням віддалі степенево, 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.