

Перегрев кластеров при неизотермической нуклеации

Перевощиков Е.Е.^{1,2,@} и Жуховицкий Д.И.¹

¹ Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, Ижорская ул., 13, корп. 2, Москва, 125412, Россия

² Московский физико-технический институт, Институтский пер. 9, Долгопрудный, Московская область, 141701, Россия

@ perevoshchikyy@jiht.ru

Исследована стационарная нуклеация пар-жидкость в системе Леннарда-Джонса в изотермических и неизотермических условиях с использованием молекулярной динамики. В неизотермических расчетах термостатированы только мономеры, тогда как более крупные кластеры эволюционируют свободно.

Получено распределение температуры по размерам кластеров [1] в широком диапазоне пересыщений. При низких пересыщениях S малые кластеры оказываются холоднее мономеров. По мере роста кластеров их температура увеличивается, достигая прежних значений при околोकритических размерах. При более высоких пересыщениях зависимость температуры от размера становится монотонно возрастающей. Определяя распределение кластеров по размерам, неизотермичность влияет на неидеальность пара. Так, при пересыщении $S \approx 2.96$ перегрев увеличивает концентрации докритических кластеров, снижая фактор сжимаемости в ≈ 1.6 раза по сравнению с изотермической кинетикой; при $S \approx 3.75$ уменьшаются концентрации кластеров во всем диапазоне размеров, что повышает фактор сжимаемости на $\approx 15\%$.

Измеренные скорости нуклеации для неизотермического случая согласуются с двухпараметрической моделью, дополненной поправкой на неизотермическую диффузию [2], предсказывающей снижение скорости примерно на порядок по сравнению с изотермической кинетикой. Отличительным моментом является наблюдение ретроградной зависимости скорости нуклеации от пересыщения.

[1] Perevoshchikov E E and Zhukhovitskii D I 2025 *Colloid J.* **87**(4) 537

[2] Zhukhovitskii D I 2024 *J. Chem. Phys.* **160**(19) 194505