

М. Анисимов, Л. Анисимова¹, П. Тёрнер², Ф. Хопке³

Достижения в исследовании нуклеации для описания динамики атмосферного аэрозоля. II. Поверхность скорости нуклеации водяного пара

Институт химической кинетики и горения СО РАН,

¹ *Институт катализа СО РАН, г. Новосибирск, Россия*

² *Факультет математики и вычислительных наук,*

³ *Факультет химического машиностроения, Кларксонский Университет, г. Потсдам, США*

Поступила в редакцию 20.01.2005 г.

Разработан общий компьютерный алгоритм для построения поверхности скорости нуклеации. Алгоритм применен для случая нуклеации водяного пара. Полученные результаты могут использоваться для расчетов нуклеации водяного пара в атмосфере. Очевидным преимуществом компьютерного полуэмпирического построения поверхностей скорости нуклеации является возможность строить такие поверхности во всем диапазоне изменения параметров нуклеации, что не может быть достигнуто в эксперименте. Примеры труднодостижимых условий включают очень низкие температуры, среды с высоким давлением и/или очень высокой температурой (также, как звезды) и т.д. Предполагается, что данный алгоритм будет разрабатываться далее для полуэмпирического построения поверхностей скорости нуклеации в одно- и двухкомпонентных системах.

Введение

За последние полвека была разработана классическая теория нуклеации и достигнут заметный прогресс в молекулярной теории нуклеации. Основные усилия направлялись на моделирование малых молекулярных систем с применением межмолекулярного потенциала. В целом, текущее состояние теории нуклеации можно охарактеризовать как далекое от завершения. При том что нуклеацию можно успешно описать с помощью достаточно простых моделей для простых реальных систем [1], экспериментальные данные часто не согласуются с теоретическими или, в лучшем случае, согласие наблюдается только для узких диапазонов температуры нуклеации. Доступные данные по нуклеации образуют всего лишь небольшие островки на широком поле условий нуклеации — от критической температуры до абсолютного нуля. Ограниченное количество экспериментальных данных стимулирует разработку полуэмпирических методов построения поверхностей скорости нуклеации для интерполяции и экстраполяции имеющихся экспериментальных данных в те области, информация по которым полностью отсутствует.

Нами разработан алгоритм для полуэмпирического построения поверхностей скорости нуклеации. В качестве примера унарной системы обсуждается топология поверхности скорости нуклеации водяного пара. Нуклеация двух параллельных фаз (стабильной и нестабильной) в критических зародышах рассматривается в контексте многоповерхностных скоростей нуклеации.

Для простоты в рассматриваемые состояния включен всего лишь один фазовый переход (таяние). Для построения скорости нуклеации во всем температурном интервале, т.е. от критической точки до абсолютного нуля, используется несколько весьма вероятных предположений.

Основные принципы

Согласно подходу, разработанному М.П. Анисимовым [2], поверхность скорости нуклеации для любой системы можно построить на основе ее фазовой диаграммы. Этот подход подразумевает использование диаграммы фазового равновесия в качестве линий нулевых скоростей нуклеации. Из этих равновесных линий и возникают поверхности скорости нуклеации. Для нормировки наклонов линеаризованных скоростей нуклеации требуется наличие ограниченного числа экспериментальных данных. Поверхность скорости нуклеации описывается в терминологии стационарных скоростей нуклеации. Для построения поверхностей скоростей нуклеации используются несколько предположений из [3]. Все эти предположения обычно применяются для описания фазовых переходов первого рода. Основной характеристикой нуклеации (или фазовых переходов первого рода) является возможность разделить изначально однородную исходную фазу на две или более фаз. Это условие противоречит

характеристикам фазового перехода второго рода. Критическая точка или критическая линия (для бинарной системы) представляет условия фазового перехода второго рода, при котором невозможно сосуществование двух или более фаз.

В предположении, что скорость нуклеации может быть представлена непрерывной, монотонной функцией, можно утверждать, что *скорость нуклеации уменьшается по мере приближения к фазовому переходу второго рода и становится нулевой для фазового перехода второго рода*. Системы не могут достичь условий фазового перехода второго рода из-за роста флуктуаций вблизи фазового перехода в исходной фазе. Поэтому можно говорить только о пределе фазового перехода. Алгоритм для полуэмпирического построения поверхности скорости нуклеации [4] можно описать следующим образом:

а) Получаем расширение имеющихся данных для стабильного и нестабильного фазового равновесия до критической температуры и абсолютного нуля для интересующей системы.

б) Определяем условия, соответствующие самым высоким скоростям нуклеации (в данном исследовании скорости максимальны при спиновальных условиях), и экстраполируем их до абсолютного нуля.

в) Предполагаем, что выбранная функция для описания скорости нуклеации (например, экспонента) сохраняется для всех условий нуклеации.

г) Линеаризуем экспериментальные скорости нуклеации для всех каналов с использованием предположения «в».

д) Оцениваем скорости нуклеации при спиновальных условиях и при любой невысокой ($\log J = -10$ для данного исследования) скорости нуклеации с использованием линейной аппроксимации для экспериментальных данных.

е) Проводим приближение спиновальных скоростей нуклеации с использованием известных величин скоростей нуклеации при спиновальных условиях, включая нулевые значения при критической и нулевой температурах.

ж) Повторяем то же процесс, что в пункте «е», для определенной невысокой скорости нуклеации ($\log J = -10$ в данном случае).

з) Используем линеаризованные функции для расчета поверхности скорости нуклеации на основе приближений «е» и «ж».

Равновесные и спиновальные линии водяного пара

При использовании алгоритма все экспериментальные данные для равновесных состояний водяного пара в форме зависимости давления P от температуры T были взяты из Метеорологических таблиц [5] и экстраполированы до нулевой температуры с помощью уравнений $\log P_{lqd} = 11,6644 - 2422,2995/T$ и $\log P_{slid} = 12,5709 - 2670,5623/T$ для жидкой и твердых фаз соответственно (рис. 1 и 2).

В этих уравнениях температура T может изменяться от 0 до 220 К. Равновесные линии включают их расширения, иллюстрирующие стабильные и нестабильные равновесия. На рис. 1 представлены линии «пар–жидкость», «пар–твердое тело» и спиновальные линии пара во всех диапазонах давления и температуры.

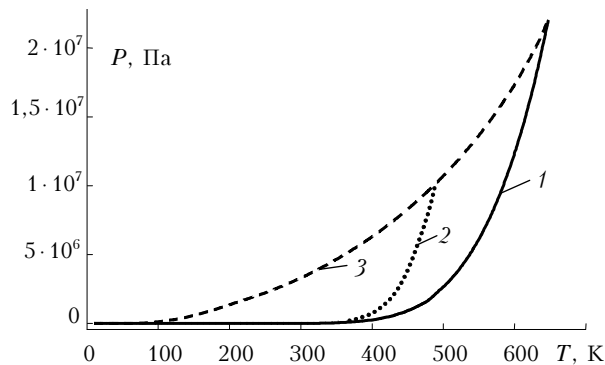


Рис. 1. P-T-диаграмма для воды: 1 – линия равновесия «жидкость–пар»; 2 – линия равновесия «твердое тело–пар»; 3 – линия спинодали

Равновесие «пар–лед» расширено до спиновальных условий (рис. 2). Последняя (спиновальная) точка этого нестабильного равновесия соответствует температуре 487,2 К и давлению, равному 10 МПа.

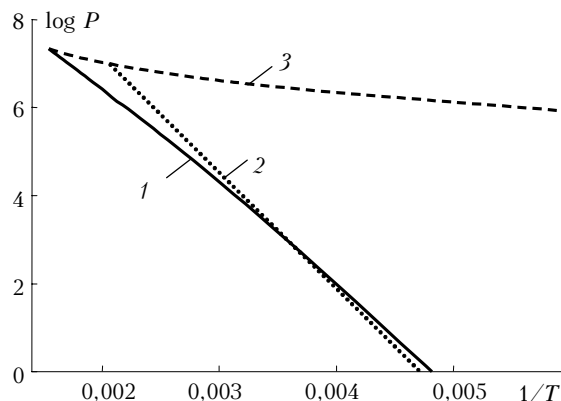


Рис. 2. Условия экстраполяции для спиновального распада и условий фазового равновесия (включая нестабильное): 1 – линия равновесия «жидкость–пар»; 2 – линия равновесия «твердое тело–пар»; 3 – линия спинодали

Для расчета спиновальных условий (температуры и давления) нужно использовать уравнение состояния. Чтобы получить топологию поверхности скорости нуклеации в пределе абсолютного нуля температуры, необходимо продолжить спиновальную линию до абсолютного нуля, представляющую собой предел существования пара. Спиновальные условия для водяного пара рассчитывались с использованием уравнения состояния Ван-дер-Ваальса:

$$P = RT/(V - b) - aV^{-2},$$

где V — объем; R — газовая постоянная; постоянные a и b определены как $a = 27(RT_c)^2/64P_c$ и $b = RT_c/8P_c$. Критическая температура $T_c = 647,3$ К и критическое давление $P_c = 22,04832$ МПа для водяного пара взяты из [6]. Спинодальные условия были экстраполированы от 220 К до температуры абсолютного нуля с использованием уравнения $\log P_{sp} = 7,2159 - 217,5720/T$.

Спинодальное пересыщение пара

Особый интерес представляет оценка пересыщения пара для спинодальных условий во всем диапазоне температур существования спинодали. Недавно было высказано предположение, что спинодальная линия для метастабильных состояний пара стремится к нулевому давлению в пределе нулевой температуры [3]. Следовательно, пересыщение пара имеет неопределенное значение в нулевом пределе температуры. На рис. 1 показаны спинодальные линии для водяного пара.

Представляется, что спинодальное пересыщение пара должно иметь значение, равное единице, как в пределе абсолютного нуля, так и в критической точке. Однако значение пересыщения пара неожиданно стремительно увеличивается с понижением температуры, причем логарифм пересыщения достигает значения нескольких сотен при нескольких кельвинах. На рис. 3 спинодальное пересыщение пара показано только до 35 порядков величины.

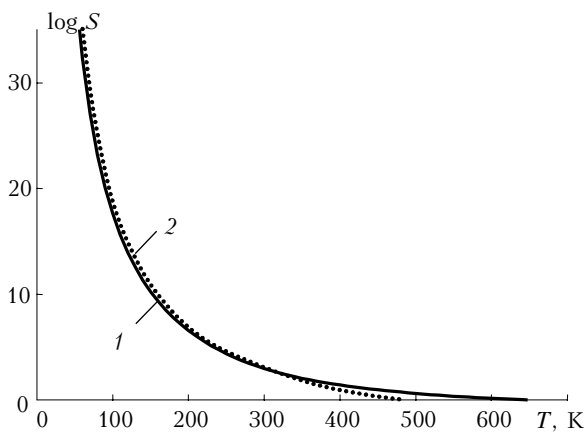


Рис. 3. Пересыщения водяного пара при спинодальных условиях: 1 — «пар-жидкость»; 2 — «пар-твердое тело»

Пересыщение водяного пара при спинодальных условиях быстро растет от единицы в критической точке в направлении нулевой температуры. Полуэмпирическая оценка пересыщения пара при спинодальных условиях для других паров покажет, остается ли этот результат справедливым в общем случае.

Как уже отмечалось, спинодальное давление пара предполагается одинаковым как для жидкости, так и для кристаллических образований. Поэтому спинодальные отношения пересыщения пара для разных фаз разные из-за различия в равновесных давлениях пара над жидкой и твердой фазами (рис. 3). По-видимому, пересыщение водяного па-

ра становится бесконечным в пределе абсолютного нуля или, более вероятно, пересыщение необходимо рассчитывать в приближениях квантовой механики. Рост пересыщения пара, показанный на рис. 3, уже ярко выражен при температуре 350 К, где оценка давлений пара спинодальных линий более точна, чем при низких температурах.

Линеаризация данных по нуклеации в каждом канале

Из [7] следует, что нуклеация пара в окрестности его тройной точки является двухканальной. В [8] были экспериментально определены средние частоты появления переохлажденной воды, смешанной лед-капельной фазы и ледяных частиц в облаках. Было найдено, что вода может существовать в состоянии капель или льда в атмосферных облаках одновременно при температуре в диапазоне 230–270 К [8]. Можно надеяться, что частицы сохраняют исходное фазовое состояние своих критических зародышей. В [9] отмечалось, что если воздух насыщен по отношению ко льду, то он ненасыщен по отношению к воде. В результате переохлажденные капли воды не могут сосуществовать в равновесии с кристаллами льда. Продолжая мысль, высказанную в [9], можно сказать, что лед уменьшает количество недостаточно насыщенного пара над каплями из-за откачки пара путем конденсации (замерзания). Он уменьшает размер и общее число капельных частиц. Очевидно, смесь капель и ледяных частиц в атмосфере будет динамичной, поскольку в ней одновременно протекают замерзание капель и нуклеация пара с образованием капель и ледяных частиц.

Экспериментальные данные [10] соответствуют температурам нуклеации ниже тройной точки, и они должны воспроизводить результирующую скорость нуклеации для водяных капель и ледяных частиц. Мы взяли экспериментальные данные из [10], где эти скорости не разделены по природе конденсированной фазы.

Количественные данные для скоростей нуклеации в каждой фазе (жидкой и ледяной) отсутствуют. В результате в данной работе фазовые состояния разделялись на основе приемлемой топологии, которая известна в окрестности тройной точки [2], для двух каналов нуклеации. Точки пересечения данных по скоростям нуклеации для ледяных частиц и жидких капель рассчитываются с использованием литературных данных [10] для общей скорости нуклеации, т.е. совместных величин для льда и капель. Согласно нашим оценкам линия пересечения поверхностей обеих фаз расположена в пределах трех порядков величины скорости нуклеации. Следует подчеркнуть, что скорость нуклеации должна быть представлена двумя каналами нуклеации и двухполюстной поверхностью нуклеации.

Скорости нуклеации для льда или жидких капель можно описать, используя линеаризованное приближение, такое как $\log J = a + b \log^{-2} S$, где J — скорость нуклеации пара; коэффициенты a и b —

постоянные для данной температуры нуклеации T . Предполагается, что эти приближения экспериментальных скоростей нуклеации остаются справедливыми для всех условий нуклеации, от нуля до максимального значения. Скорости нуклеации для льда J_s и капель J_d (рис. 4) можно описать, используя линейные приближения, представленные в табл. 1, где S — отношение пересыщения пара для данной фазы. Предполагается, что эти приближения скоростей нуклеации для каждого канала, данные в табл. 1, остаются справедливыми для всех условий нуклеации, от нуля до максимального значения.

Таблица 1

Приближения квазиэкспериментальных скоростей нуклеации ледяных частиц (J_s) и капель (J_d), полученные из экспериментальных данных [10] для различных температур нуклеации

T , К	$\log J_s$	$\log J_d$
220	$20,0357-21,6108\log^{-2}S$	$19,0615-14,1080\log^{-2}S$
230	$21,1240-19,1413\log^{-2}S$	$20,8838-13,5074\log^{-2}S$
240	$21,1723-15,6712\log^{-2}S$	$22,6646-12,9738\log^{-2}S$
250	$20,9976-12,8425\log^{-2}S$	$22,5084-11,2466\log^{-2}S$
260	$20,3089-9,9781\log^{-2}S$	$22,0372-9,6404\log^{-2}S$

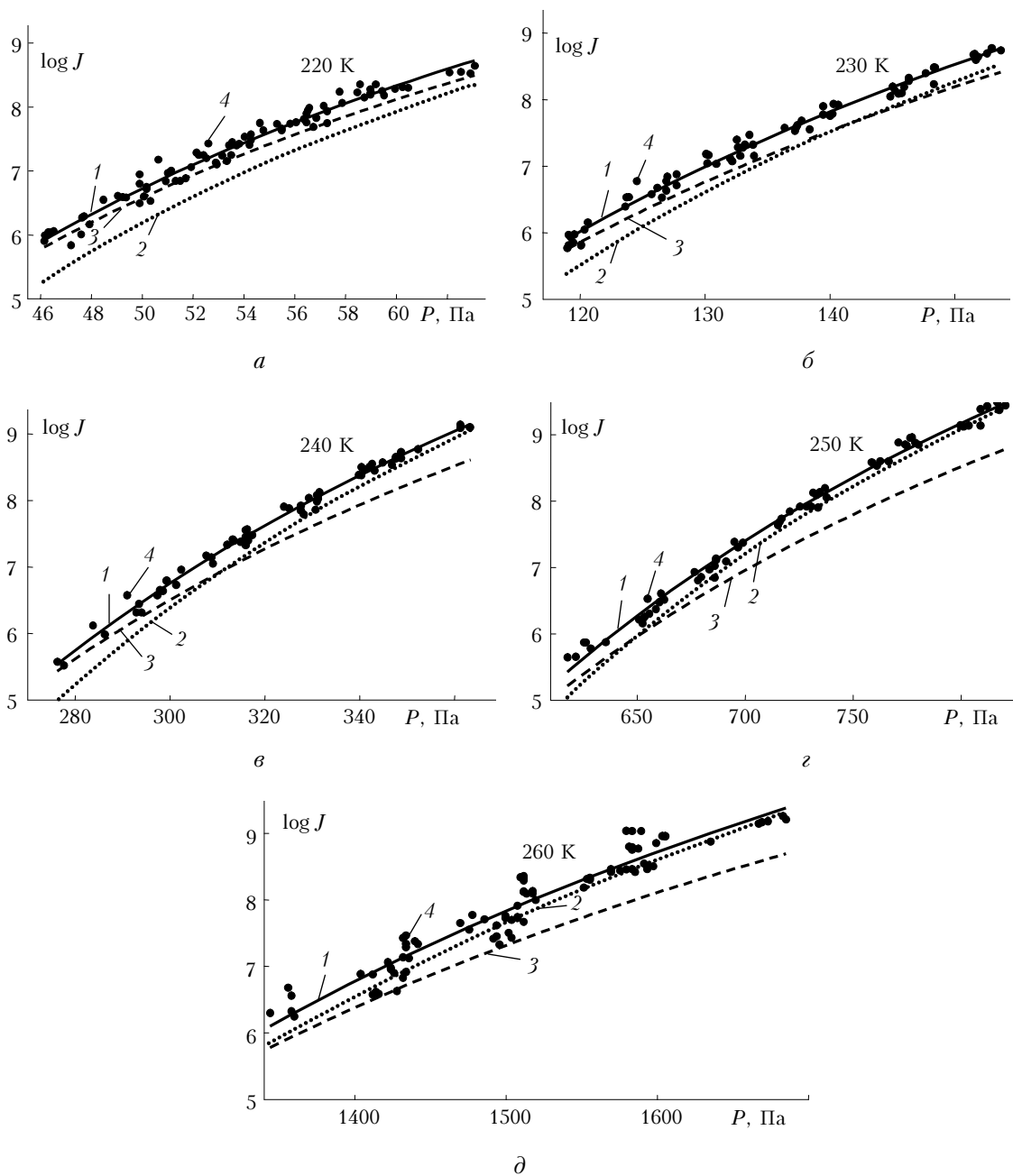


Рис. 4. Экспериментальные данные [10] (4) и их регрессия (1) для суммарной скорости нуклеации ледяных частиц (3) и капель воды (2). Температуры нуклеации показаны для каждой кривой

Точку зрения, изложенную выше, может схематично проиллюстрировать рис. 5, на котором линеаризованная изотерма скорости нуклеации восстает из точки фазового равновесия.

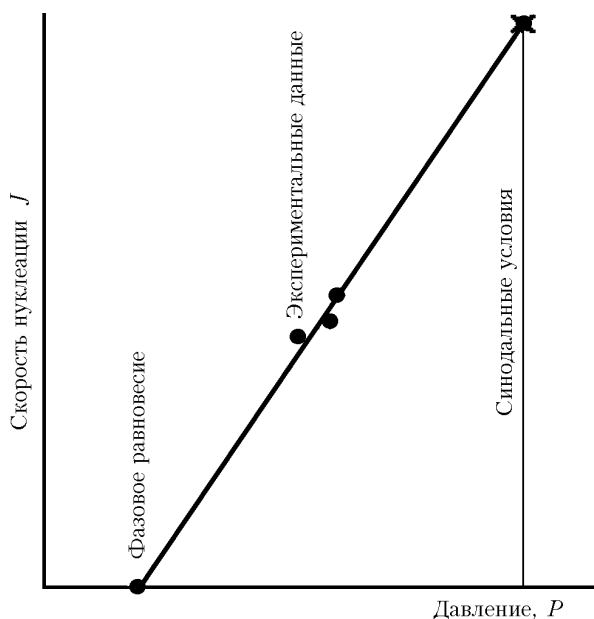


Рис. 5. Схема алгоритма для компьютерного полуэмпирического построения поверхностей скоростей нуклеации

Наклон линеаризации определяется экспериментальными точками. Верхняя точка линеаризации соответствует синодальным условиям.

Скорость нуклеации при синодальных условиях и профиль пересыщения пара при $J = 10^{-10} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$

Экстремальные значения скорости нуклеации можно экстраполировать до условий синодального распада, что даст оценки скоростей нуклеации при синодальных условиях. Нулевые скорости нуклеации при критической температуре и при абсолютном нуле, а также точки, полученные экстраполяцией, дают всю имеющуюся на сегодняшний день информацию по оценке скоростей нуклеации при синодальных условиях. Возможные синодальные скорости нуклеации иллюстрируется рис. 6 на примере нуклеации водяного пара. Регрессия второго порядка в пространстве $\log J - T$ используется для аппроксимации точек для льда (темные точки) и капель (серые точки) с нулевыми значениями скоростей нуклеации в критической точке и в пределе абсолютного нуля температуры. Можно видеть, что регрессии включают равновесные условия как нулевые значения скорости нуклеации. Скорость нуклеации, равная $10^{-10} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$, в нашем рассмотрении используется в качестве опорной. Экстраполяция линеаризованных экспериментальных данных использовалась для оценки значений пересыщения при скорости нуклеации $J = 10^{-10} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$.

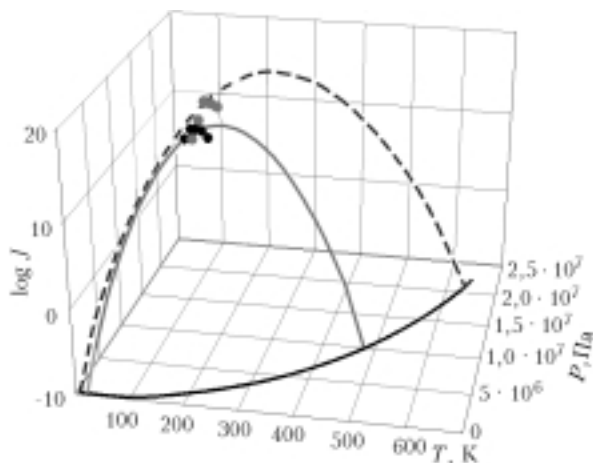


Рис. 6. Синодальные скорости нуклеации: нуклеация ледяных частиц показана светлой линией, а нуклеация капель — штриховой линией

Синодальные пересыщения и пересыщения (или давления пара), оцененные на опорном уровне скорости нуклеации с использованием регрессий для скоростей нуклеации каждой фазы (рис. 6 и табл. 1), можно применить для построения давления пара (см. жирную линию на рис. 6) для опорного уровня скорости нуклеации. Рис. 6 иллюстрирует относительные конфигурации синодальных скоростей нуклеации для ледяных частиц и водяных капель и давление пара на уровне $J = 10^{-10} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$.

Поверхность скорости нуклеации

Самый нижний уровень поверхности скорости нуклеации при $J = 10^{-10} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ лежит слишком низко для какого-либо практического использования, поскольку скорость нуклеации $J = 10^{-10} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ дает только один акт нуклеации на 1 см^3 за более чем 300 лет. С помощью линейного приближения того же рода (с использованием масштабных или любых других функциональных связей) для данной температуры нуклеации (в нашем примере взято $\log J = a + b \log^{-2} S$) возможно построить поверхности скорости нуклеации для скоростей образования любой фазы (кристаллической или жидкой в нашем случае). Незначительные продолжения до критической температуры и температуры абсолютного нуля для получения полной поверхности скорости нуклеации могут быть построены с использованием любой приемлемой экстраполяции констант, которые использовались для линеаризации. Рис. 7 иллюстрирует поверхность скорости нуклеации в пространстве $\log J - T - P$. Альтернативное $J - T - P$ -представление показано на рис. 8. Уравнения, представляющие изотермы поверхностей скорости нуклеации, собраны в табл. 2. В данном полуэмпирическом построении ключевые роли играют имеющиеся экспериментальные данные по нуклеации и уравнения состояний.

Следует отметить, что в данной работе нуклеация рассматривается в однокомпонентном приближении для системы «водяной пар — газ-носитель».

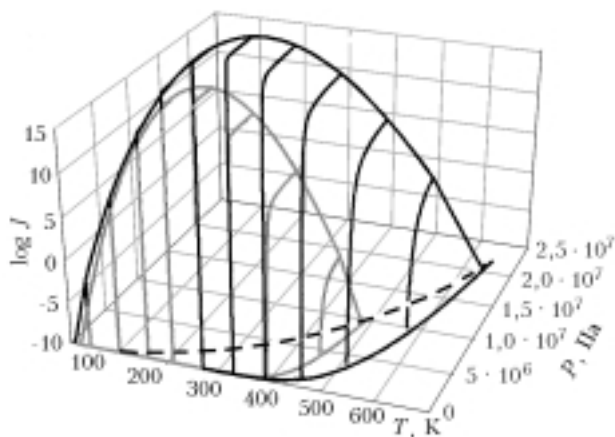


Рис. 7. Поверхности скорости нуклеации для капель воды и ледяных частиц в пространстве $\log J$ – P – T (жирные линии – нуклеация водяных капель; светлые – нуклеация ледяных частиц; штриховая – спинодаль пара)

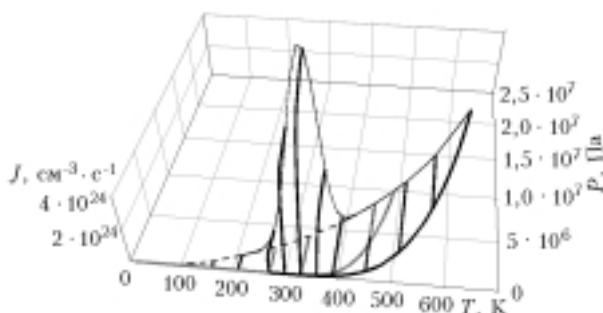


Рис. 8. Альтернативный, J – P – T , вид поверхностей скорости нуклеации для водяных капель и ледяных образований (светлая линии – нуклеация ледяных частиц; жирная – нуклеация водяных капель; тонкая – спинодальная нуклеация для нуклеации капель; штриховая – спинодаль пара)

Однако фактически такая нуклеация является бинарной, поскольку газ-носитель принимает в ней участие в качестве второго компонента [11].

Заключение

Впервые разработан компьютерный алгоритм для полуэмпирического построения поверхности скорости нуклеации в однокомпонентной системе с тройной точкой. Алгоритм реализован для случая поверхности скорости нуклеации водяного пара. Поверхность скорости нуклеации строится для всех условий, возможных с физической точки зрения. Очевидным преимуществом полуэмпирического построения поверхностей скорости нуклеации является возможность построить эту поверхность во всем диапазоне изменения параметров нуклеации, что не может быть достигнуто экспериментально. Предполагается, что данный алгоритм будет разрабатываться далее для полуэмпирического построения поверхностей скорости нуклеации в одно- и двухкомпонентных системах.

Построение поверхностей скорости нуклеации для воды помогло выявить дополнительные потребности в исследованиях нуклеации, а именно:

- измерение скоростей нуклеации должно проводиться для каждого канала нуклеации;
- необходимы дополнительные теоретические исследования для обеспечения более обоснованной экстраполяции или лучшего масштабирования скоростей нуклеации на спинодальные условия;
- теоретическая проверка требуется для классов функций, которые могут использоваться для аппроксимации скоростей нуклеации на опорном уровне спинодальных и низких скоростей;
- экспериментальный диапазон измерения скоростей нуклеации очень мал по сравнению со всем диапазоном процесса нуклеации.

Таблица 2

Уравнения, представляющие изотермы поверхностей скорости нуклеации

Для нуклеации водных капель или стекловидных частиц	Для твердой фазы нуклеации (лед)
$\log J_d [20 \text{ K}] = -5,8046 - 12,3370 \log^{-2} S$	$\log J_s [20 \text{ K}] = -9,9994 - (6,619e-3) \log^{-2} S$
$\log J_d [40 \text{ K}] = -1,8765 - 6,1199 \log^{-2} S$	$\log J_s [40 \text{ K}] = -5,0543 - 12,2849 \log^{-2} S$
$\log J_d [100 \text{ K}] = 8,3047 - 2,3702 \log^{-2} S$	$\log J_s [100 \text{ K}] = 7,1300 - 6,0197 \log^{-2} S$
$\log J_d [160 \text{ K}] = 16,0822 - 1,4137 \log^{-2} S$	$\log J_s [160 \text{ K}] = 15,3388 - 3,0508 \log^{-2} S$
$\log J_d [210 \text{ K}] = 20,7293 - 1,0224 \log^{-2} S$	$\log J_s [210 \text{ K}] = 19,1441 - 1,8134 \log^{-2} S$
$\log J_d [220 \text{ K}] = 21,4589 - 0,9643 \log^{-2} S$	$\log J_s [220 \text{ K}] = 19,5742 - 1,6368 \log^{-2} S$
$\log J_d [230 \text{ K}] = 22,1222 - 0,9107 \log^{-2} S$	$\log J_s [230 \text{ K}] = 19,8940 - 1,4773 \log^{-2} S$
$\log J_d [240 \text{ K}] = 22,7189 - 0,8613 \log^{-2} S$	$\log J_s [240 \text{ K}] = 20,1037 - 1,3330 \log^{-2} S$
$\log J_d [250 \text{ K}] = 23,2492 - 0,8154 \log^{-2} S$	$\log J_s [250 \text{ K}] = 20,2031 - 1,2021 \log^{-2} S$
$\log J_d [260 \text{ K}] = 23,7130 - 0,7726 \log^{-2} S$	$\log J_s [260 \text{ K}] = 20,1923 - 1,0833 \log^{-2} S$
$\log J_d [270 \text{ K}] = 24,1104 - 0,7327 \log^{-2} S$	$\log J_s [270 \text{ K}] = 20,0714 - 0,9752 \log^{-2} S$
$\log J_d [300 \text{ K}] = 24,9046 - 0,6269 \log^{-2} S$	$\log J_s [300 \text{ K}] = 19,0483 - 0,7051 \log^{-2} S$
$\log J_d [330 \text{ K}] = 25,1029 - 0,5376 \log^{-2} S$	$\log J_s [330 \text{ K}] = 17,0365 - 0,4996 \log^{-2} S$
$\log J_d [360 \text{ K}] = 24,7074 - 0,4606 \log^{-2} S$	$\log J_s [360 \text{ K}] = 14,0399 - 0,3426 \log^{-2} S$
$\log J_d [390 \text{ K}] = 23,7206 - 0,3930 \log^{-2} S$	$\log J_s [390 \text{ K}] = 10,0676 - 0,2228 \log^{-2} S$
$\log J_d [450 \text{ K}] = 19,9884 - 0,2785 \log^{-2} S$	$\log J_s [450 \text{ K}] = -0,6056 - 0,0647 \log^{-2} S$
$\log J_d [510 \text{ K}] = 14,0209 - 0,1840 \log^{-2} S$	
$\log J_d [570 \text{ K}] = 6,2725 - 0,1055 \log^{-2} S$	
$\log J_d [630 \text{ K}] = -12,5176 + 0,0141 \log^{-2} S$	

Измерения следует оптимизировать, чтобы обеспечить критические опорные точки для построения поверхностей скорости нуклеации. Данные, собранные в табл. 2, можно использовать для практического расчета нуклеации ледяных частиц и жидких капель, которая может протекать при атмосферных условиях. Когда скорость нуклеации будет реально измерена для каждого канала нуклеации, может потребоваться коррекция текущих данных.

Работа поддержана грантом РФФИ № 05-03-32208.

1. *Reiss H.* In *Nucleation and Atmospheric Aerosols 2000* / Ed. by B. Hale and M. Kulmala. AIP, Melville, NY, 2000. P. 181.
2. *Anisimov M.P.* // *J. Aerosol Sci.* 1990. 21(Suppl.1.). P. 23–26.
3. *Anisimov M.P., Hopke P.K., Rasmussen D.H., Shandakov S.D., Pinaev V.A.* // *J. Chem. Phys.* 1998. V. 109. N 4. P. 1435–1444.
4. *Anisimov M., Anisimova L., Turner P., and Hopke P.* A computer algorithm for nucleation rate surface

construction // *Nucleation and Atmospheric Aerosols 2004: 16th International Conference* / Eds. M. Kasahara & M. Kulmala. Japan: Kyoto University Press, 2004. P. 205–209.

5. *Smithsonian Meteorological Tables* // *Smithsonian Miscellaneous Collections*. D.C. USA. Washington: Smithsonian Institution Press, 1968. V. 114. P. 453
6. *Handbook of Chemistry and Physics* / Ed. D.R. Lide. 85th edition. New York; London; Tokyo: CRC Press, Boca Raton. 2004–2005.
7. *Anisimova L., Hopke P.K., and Terry J.* // *J. Chem. Phys.* 2001. V. 114. N 20. P. 9852–9856.
8. *Boronikov A.M., Gaivoronskii L.I., Zak E.G., Kostarev V.V., Mazin I.P., Minervin M.E., Khrgian A.K., and Shmeters S.M.* *Cloud Physics*. Israel Program for Scientific Translations. Jerusalem, Israel, 1963.
9. *Seinfeld J.H., Pandis S.N.* // *Atmosph. Chem. and Phys.* New York: J. Wiley&Sons. Inc., 1998. P. 1326.
10. *Viisanen Y., Strey R., Reiss H.* // *J. Chem. Phys.* 2000. V. 112. N 18. P. 8205–8207.
11. *Anisimov M.P., Koropchak J.A., Nasibulin A.G., Timoshina L.V.* // *J. Chem. Phys.* 1998. V. 109. N 22. P. 10004–10010.

M. Anisimov, L. Anisimova, P. Turner, P. Hopke. **Nucleation research progress for description of atmospheric aerosol dynamics. II. Nucleation rate surface for water vapor.**

General computer algorithm for nucleation rate surface design is developed. The algorithm is applied to the case of water vapor nucleation. Results can be used for calculation of the atmospheric water vapor nucleation. An obvious advantage of the computer semi-empirical design of nucleation rate surfaces is the ability to construct this surface over the full interval of nucleation parameters that is impossible in experiments. Examples of conditions that are difficult to achieve include very low temperatures, high-pressures and/or very high-temperature medium (such as stars) etc. It is assumed that the algorithm can be further developed for the semi-empirical design of nucleation rate surfaces for one- and two-component systems.