

ОПТИКА КЛАСТЕРОВ, АЭРОЗОЛЕЙ И ГИДРОЗОЛЕЙ

УДК 539.1.043, 539.12.04

Моделирование конденсации водяного пара. Четырехточечный потенциал

Г.Ф. Крымский, С.И. Петухов, Г.С. Павлов*

*Институт космофизических исследований и аэронауки им. Ю.Г. Шафера СО РАН
677980, г. Якутск, пр. Ленина, 31*

Поступила в редакцию 9.10.2015 г.

Проведено моделирование конденсации пара на поверхности воды с использованием четырехточечного потенциала для молекул. Параметры феноменологической модели растворенного в воде пара воспроизводятся как результат микромоделирования поведения кластера, состоящего из 55 молекул. Коэффициент залипания молекул на водной поверхности вычисляется на основе механической аналогии с упругим ударом. Получено согласие параметров микромоделирования с параметрами феноменологической модели.

Ключевые слова: водяной пар, четырехточечный потенциал, кластер, микромоделирование; water vapor, four-point potential, cluster, micromodeling.

Введение

Динамика облакообразования управляется процессами роста и испарения облачных капель. Этими же процессами формируется атмосферное электричество. Соответствующие механизмы кроются в конечном счете в свойствах молекул воды. Уже в работах 100-летней давности Вильсоном было установлено, что молекулы водяного пара взаимодействуют с ионами. При этом было обнаружено, что взаимодействие с ионами положительного и отрицательно-го знаков различно (изложение соответствующих результатов можно найти в [1, 2]).

Большая роль ионизации воздуха в процессах конденсации водяного пара была установлена в многочисленных работах, посвященных влиянию космических лучей на облакообразование [3–6]. В настоящее время исследуется также влияние космических лучей на грозовую активность [7, 8]. Механизм этого влияния качественно понятен в свете зарядовой асимметрии, установленной Вильсоном. Как указывается в [8], отрицательно заряженные капли более активно конденсируют пар и быстро растут, вследствие чего происходит гравитационное разделение положительных и отрицательных зарядов. Появление сильных электрических полей в сочетании с наличием электронов в составе вторичных космических лучей вызывает пробой Гуревича [9] и создает грозовую активность. Природа зарядовой асимметрии процесса конденсации изучалась Русановым [10] с феноменологической (химической) точки зрения.

Развитие средств и методов физического эксперимента и применение методик компьютерного моделирования открывают новые возможности для исследования процессов облакообразования и роли космических лучей в этой сфере.

В рамках интеграционного проекта СО РАН проводятся эксперименты по исследованию конденсации водяного пара в присутствии пучков ионизирующих частиц [11–13]. С этой целью здесь мы попытаемся описать конденсацию пара на каплях и их испарение, опираясь на микромоделирование взаимодействий с участием молекул воды. При этом будет уделяться внимание зарядовой асимметрии этих процессов.

В настоящей статье исследуется применение четырехточечного потенциала для описания процессов конденсации и испарения, находятся соответствующие значения параметров.

Компьютерное микромоделирование конденсации молекул водяного пара выполнялось многими авторами при различных предположениях о форме потенциала взаимодействия между молекулами воды [14–16]. Наиболее последовательно этот подход использован в работах Шевкунова [17–19]. В [17] проведено сравнение различных форм потенциала и отдано предпочтение так называемому пятицентровому потенциалу Rahman–Stillinger [16]. Центральная сферически симметричная часть является хорошо известным потенциалом Леннарда–Джонса (потенциал «6–12»), к которому добавлены 4 заряда – 2 положительных и 2 отрицательных, расположенных в вершинах описанного тетраэдра. Чтобы создать зарядовую асимметрию, расположение отрицательных зарядов слегка изменено.

* Гермоген Филиппович Крымский; Станислав Иванович Петухов; Гавриил Сергеевич Павлов (ganyu1981@mail.ru).

С помощью такого потенциала в работах [17–20] проведено обширное моделирование процесса осаждения молекул водяного пара на различных поверхностях и образования водяного кластера. Эволюция таких объектов изучалась методом Монте-Карло. Наиболее важным свойством исследованных кластеров оказались ионные пары, входящие в их состав и образующие долгоживущую кластерную плазму [20]. Соответственно большое число нейтральных кластеров воды в атмосфере в действительности являются квазинейтральными.

Исходные положения для микромоделирования

Широко используемый для моделирования так называемый пятицентровый потенциал Rahman–Stillinger будет модифицирован следующим образом. Центральной сферически-симметричной части потенциала, представляющей потенциал Леннарда-Джонса, будет приписываться большая константа связи. В результате сферические молекулы станут недеформируемы и будут иметь фиксированные радиусы. Из предположения, что в воде они плотно упакованы, этот радиус находится как $R_0 = 1,74 \cdot 10^{-8}$ см. Вместо четырех зарядов, фиксированных внутри молекулы, будут постулироваться три заряда: два положительных заряда $+e$, образующих с центром молекулы треугольник со сторонами $a_0 = 0,95 \cdot 10^{-8}$ см, угол между которыми составляет 105° , и отрицательный заряд $-2e$, расположенный в центре этого треугольника. Следует заметить, что наш потенциал (мы его будем называть четырехцентровым) в отличие от упомянутого ранее обеспечивает дипольный момент молекулы, равный почти точно табличному моменту.

Представление электрического потенциала как в пятицентровой, так и в четырехцентровой моделях неявно предполагает наличие в молекуле неэлектростатических сил. В отсутствие таких сил по известной теореме Ирншоу было бы невозможно иметь стабильные молекулы.

Молекулярные кластеры, которые мы будем изучать, образуются соприкасающимися между собой молекулами, способными поворачиваться вокруг своего центра под действием межмолекулярных электростатических сил.

Чтобы проверить пригодность нашего потенциала для моделирования, на первом этапе будут подсчитаны энергия связи молекулы в воде и коэффициент залипания молекулы пара, падающей на водную поверхность. Эти два параметра находятся также из кривой насыщения как подгоночные величины. Как будет показано ниже (см. также [21, 22]), те и другие значения совпадают практически в третьем знаке, что вполне нас устраивает.

Наш подход к микромоделированию будет несколько отличным от [21, 22]. Мы не будем исследовать формирование кластеров осаждающимся паром, а рассмотрим поведение готовых кластеров. Молекулы в кластерах будем считать плотно упакованными и находящимися на фиксированных рас-

стояниях от ближайших соседей. Формально это соответствует потенциалу типа Леннарда-Джонса с очень большой константой связи. Электрическая структура молекулы также принимается отличной от пятицентровой структуры.

Вначале производится параметризация известной температурной зависимости давления насыщения. В основу положена феноменологическая модель «растворенного» пара. Далее предпринимается попытка воспроизвести указанную зависимость и ее подгоночные параметры как результат микромоделирования взаимодействий с участием молекул в кластере.

Кривая насыщения. Модель с подгоночными параметрами

Здесь представлена простая феноменологическая модель явлений испарения воды и конденсации водяного пара, которая построена на основе представления воды как смеси жидкости и растворенного в ней пара. Кривая насыщения при этом представляет собой функцию с двумя свободными параметрами.

Концентрация пара, растворенного в воде, определяется распределением Максвелла:

$$n(v) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\rho_{\text{H}_2\text{O}}}{m} \left(\frac{m}{kT}\right)^{3/2} \begin{cases} 0, & v < \sqrt{2\Delta E/m}, \\ v^2 \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT}\right), & v > \sqrt{2\Delta E/m}. \end{cases}$$

Здесь m , v – масса и скорость молекулы воды; ΔE – энергия связи молекул; $\rho_{\text{H}_2\text{O}}$ – плотность воды; T – температура; k – постоянная Больцмана.

Плотность потока частиц, выходящих из воды,

$$q_- = \int_0^\infty n(v) \left(\frac{v}{4}\right) dv = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\rho_{\text{H}_2\text{O}}}{m} \frac{1}{\sqrt{kTm}} (\Delta E + kT) \exp\left(\frac{-\Delta E}{kT}\right).$$

Концентрация пара в воздухе

$$n_p(v) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{P}{kT} \left(\frac{m}{kT}\right)^{3/2} v^2 \exp\left(\frac{-mv^2}{kT}\right),$$

где P – парциальное давление пара. Плотность потока пара, конденсирующегося на поверхности воды,

$$q_+ = \alpha_c \int_0^\infty n_p(v) \left(\frac{v}{4}\right) dv = \frac{\alpha_c}{\sqrt{2\pi}} \frac{P}{\sqrt{kTm}}.$$

Здесь α_c – феноменологический коэффициент залипания, показывающий, какая доля частиц, падающих на поверхность, конденсируется на ней. Пар является насыщенным, если $q_- = q_+$. Давление насыщенного пара

$$P = \frac{1}{\alpha_c} \frac{\rho_{\text{H}_2\text{O}}}{m} (\Delta E + kT) \exp\left(\frac{-\Delta E}{kT}\right).$$

Чтобы обеспечить давление насыщения, равное 101 кПа при 100 °С и 0,6 кПа при 0 °С, необходимо положить $\Delta E = 7,13 \cdot 10^{-13}$ эрг и $\alpha_c = 0,0250$.

Водяной кластер

Авторы выполнили моделирование кластера, состоящего из 55 молекул воды. В основу положена электростатическая модель молекулы воды, в соответствии с которой молекула представляет собой шар радиусом $R_0 = 1,74 \cdot 10^{-8}$ см, в центре которого расположен атом кислорода, а на расстоянии $a_0 = 0,95 \cdot 10^{-8}$ см от него размещены 2 атома водорода, лишенные своих электронов (протоны). Угол раствора треугольника Н–О–Н составляет $2\psi = 105^\circ$. Избыточный отрицательный заряд в количестве двух электронов находится в центре треугольника. Дипольный момент такой молекулы ($1,84 \cdot 10^{-18}$ ед. CGSE) близок к табличному. Молекулы плотно упакованы, и радиус R_0 соответствует плотной упаковке. Во всех вычислениях пренебрегалось деформациями молекул.

Кластер состоит из центральной молекулы, ее окружение – из 12 молекул и 42 молекул, соприкасающихся с окружением. В начальном состоянии молекулы были ориентированы случайным образом. Специальная программа градиентного спуска в 165-мерном пространстве приводила кластер к минимуму электростатической энергии. Работа программы заключалась в повороте каждой молекулы вокруг всех трех осей. Поворотом вокруг первой оси достигался минимум и происходил переход ко второй оси, а затем к третьей. Потом операция производилась со второй молекулой и т.д. Весь цикл с 55 молекулами повторялся до тех пор, пока энергия не переставала уменьшаться. В результате становились известными суммарная энергия кластера и энергия связи центральной молекулы. Каждая реализация случайного кластера давала отличающиеся значения энергии – достигался локальный минимум. Было произведено 200 реализаций, результаты которых подвергнуты усреднению. Энергия связи центральной молекулы позволяла определить давление насыщения при двух температурах и усреднялось именно давление насыщения. В результате найдено эффективное значение энергии связи, равное $\Delta E_{ef} = 6,56 \cdot 10^{-13}$ эрг.

Если из энергии кластера вычесть энергию внутреннего кластера, состоящего из 13 молекул, и поделить результат на 42, то получим энергию связи молекулы, находящейся на поверхности кластера. Энергия внутреннего кластера оценивалась как энергия центральной молекулы, увеличенная в 13 раз. Дефицит энергии связи для поверхностных молекул проявляет себя как эффект поверхностного натяжения. Этот дефицит усреднялся по всем реализациям с весом, в качестве которого бралось давление насыщения, вычисленное для каждой реализации. Величина дефицита получилась равной $dE = 0,66 \cdot 10^{-13}$ эрг. Площадь, приходящаяся на одну молекулу поверхностного слоя, равна $\Delta S = 2\sqrt{3}R_0^2$. Отсюда получаем оценку коэффициента поверхностного натяжения

$$\sigma = \frac{dE}{\Delta S} = 62 \text{ дн/см},$$

что находится в неплохом соответствии с табличным значением, равным 73 дн/см.

Коэффициент залипания

Конденсация пара происходит вследствие залипания молекул на поверхности воды. Если в момент касания поверхности энергия связи молекулы положительна (имеется притяжение к поверхности), то молекула может залипнуть. Это происходит вследствие того, что молекула испытывает неупругий удар и теряет часть своей энергии. Если η – коэффициент неупругости, а начальная энергия молекулы равна E_0 , то условием залипания будет

$$(1 - \eta)(E_0 + \delta E) < \delta E,$$

где δE – энергия связи.

При ударе налетающей молекулы о поверхность воды возникают коллективные колебания молекул, делающие удар неупругим. Энергия, переходящая к коллективным колебаниям, в начальной стадии удара практически полностью переходит к единственной молекуле-мишени и легко может быть подсчитана.

Попытаемся получить коэффициент неупругости с помощью простой механической модели. Представим, что налетающая молекула упруго сталкивается с молекулой-мишенью, находящейся на поверхности воды и опирающейся на три молекулы следующего слоя. Для упрощения ударный параметр будем считать нулевым, как это показано на рис. 1, а. Удар будем представлять как деформацию упругих связей («пружин») с жесткостью g_0 .

Пусть молекула-мишень смещается в направлении опорных молекул на расстояние Δh . Тогда длина каждой опоры сокращается на $\Delta l = \Delta h \sin \phi$, где угол ϕ равен углу между ребром равносторонней пирамиды и ее основанием. Упругая энергия, запасаемая всеми тремя опорами, равна

$$\Delta W = 3g_0 \frac{\Delta l^2}{2} = 2g_0 \frac{\Delta h^2}{2},$$

так как $\sin \phi = \sqrt{2/3}$. Следовательно, три опоры с жесткостью g_0 могут быть заменены одной эквивалентной опорой с жесткостью $2g_0$, как это продемонстрировано на рис. 1, б. При этом принимается во внимание, что смещением молекул второго слоя можно пренебречь. Поэтому на рис. 1, б показано, что опора $2g_0$ соединена с жестким основанием. Рассматривая динамику этой системы, мы можем найти коэффициент неупругости удара η . Удар становится неупругим, потому что при отскоке налетающей молекулы часть ее первоначальной энергии остается в виде деформации опоры с жесткостью $2g_0$ и в форме кинетической энергии молекулы-мишени.

Рассмотрим колебания двух последовательно соединенных пружин разной жесткости и двух материальных точек с одинаковыми массами. Первое тело поместим в конце пружины, второе расположим между пружинами, а свободный конец пружины

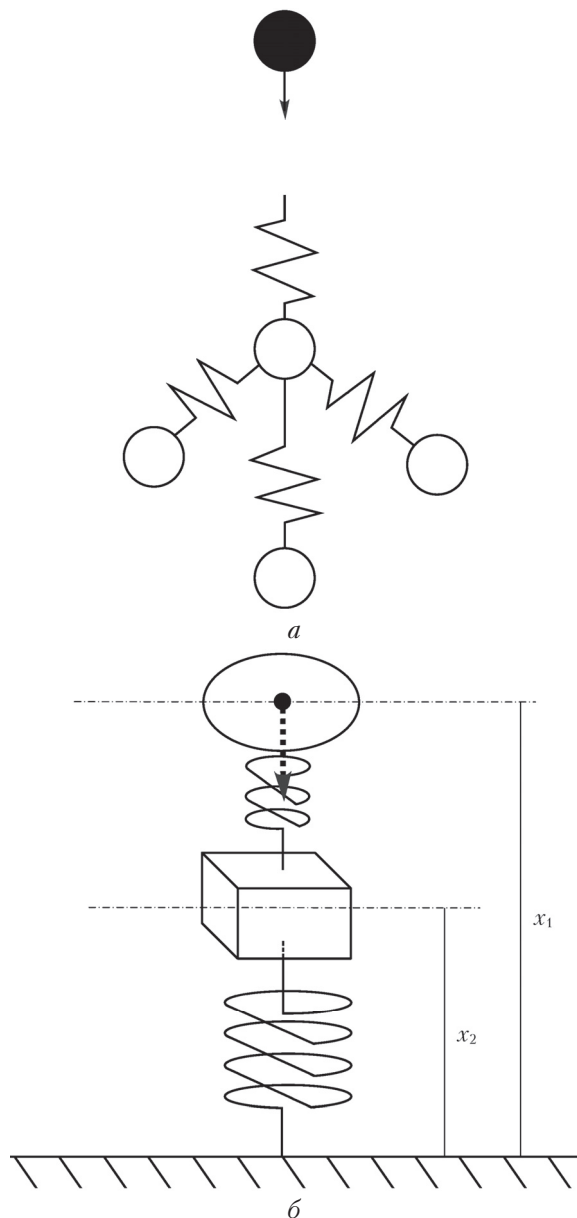


Рис. 1. Модель упругого столкновения молекул (а) и схема замены трех опор одной эквивалентной (б)

прикрепим к неподвижной стенке. Эта конструкция соответствует рис. 1, б. Сообщим первому телу скорость v_0 . Система описывается уравнениями динамики, в которых ускорение первого тела определяется упругой силой, пропорциональной разности смещений двух материальных тел δx_1 и δx_2 .

Ускорение второго тела определяется упругой силой двух пружин:

$$\begin{cases} m \frac{d^2 x_1}{dt^2} = -g_0(\delta x_1 - \delta x_2), \\ m \frac{d^2 x_2}{dt^2} = -g_0(\delta x_1 - \delta x_2) - 2g_0 \delta x_2. \end{cases}$$

Поделим уравнения на g_0 и введем переменную $\tau = t\sqrt{g_0/m}$. Тогда

$$\begin{cases} \frac{d^2 x_1}{d\tau^2} = -(\delta x_1 - \delta x_2), \\ \frac{d^2 x_2}{d\tau^2} = \delta x_1 - 3\delta x_2. \end{cases}$$

Начальные условия задачи:

$$\begin{aligned} \delta x_1 &= 0, \quad \frac{dx_1}{d\tau} = v \sqrt{\frac{m}{g_0}}, \\ \delta x_2 &= 0, \quad \frac{dx_2}{d\tau} = 0. \end{aligned}$$

Решение системы ищем в виде

$$\begin{aligned} \delta x_1(\tau) &= b_1 \sin \omega_1 \tau + b_2 \sin \omega_2 \tau, \\ \delta x_2(\tau) &= c_1 \sin \omega_1 \tau + c_2 \sin \omega_2 \tau. \end{aligned}$$

После нахождения коэффициентов строится график величины $\delta x_1(\tau) - \delta x_2(\tau)$, показывающий деформацию пружины g_0 (рис. 2). Пружина приходит в полностью разгруженное состояние в момент $\tau = 4,566$. В этот момент молекула отрывается от мишени и сохраняет 88,15% первоначальной скорости. Это означает, что коэффициент неупругости $\eta = 0,223$. Такой коэффициент мы будем приписывать любым ударам молекулы о поверхность.

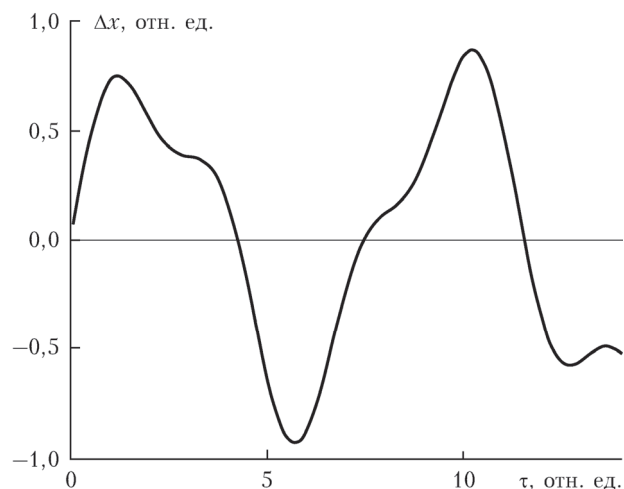


Рис. 2. График зависимости величины $\delta x_1(\tau) - \delta x_2(\tau) = \Delta x$ от времени τ

Потенциал взаимодействия падающей молекулы с поверхностью воды непосредственно перед ударом моделировался методом случайных бросков. Направление движения, ориентация молекулы, а также положение точки пересечения траектории с поверхностью задавались генератором случайных чисел. В момент, когда молекула коснулась одной из молекул поверхности, находилась ее энергия связи с тремя ближайшими молекулами. Взаимодействием с другими молекулами пренебрегалось. Взаимная ориентация этих трех молекул бралась такой же, как у трех молекул случайного кластера из 55 молекул, приведенного к минимуму потенциальной энергии.

Если наблюдалось отталкивание, энергия связи δE считалась отрицательной.

Результаты определения энергии связи для 1200 бросков представлены на рис. 3 в виде интегральной кривой распределения. Здесь по оси абсцисс представлена энергия связи в единицах $10^4 e^2/2R_0$, а по оси ординат – количество бросков, энергия связи которых меньше этой величины. Кривая хорошо аппроксимируется функцией

$$F(\delta E) = 1200 \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} \int_{-\infty}^{\delta E} \exp\left(\frac{-x^2}{2\sigma_0^2}\right) dx,$$

где $\sigma_0 = 214$. Следовательно, распределение бросков по энергии описывается гауссоидой с полушириной $\sigma = 0,0214e^2/2R_0$ и нулевой средней. Таким образом, энергия связи падающей молекулы с плоской поверхностью воды описывается распределением

$$\rho_p(\delta E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(\frac{-\delta E^2}{2\sigma^2}\right).$$

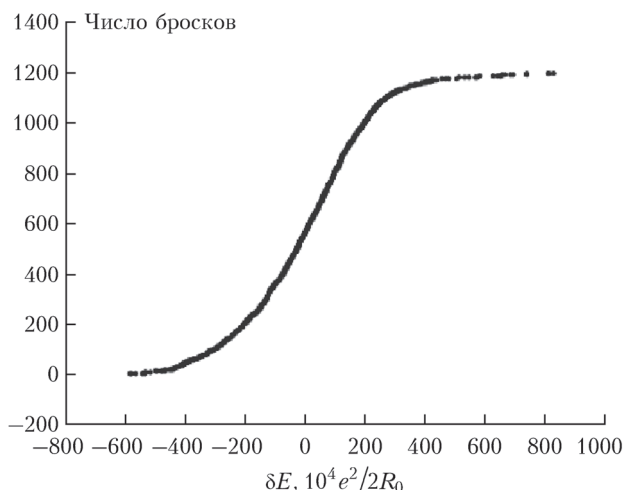


Рис. 3. Интегральная кривая распределения по 1200 реализациям. По оси абсцисс представлена энергия связи, а по оси ординат количество реализаций

Поток молекул, падающих на поверхность, пропорционален $v^3 \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT}\right) dv$ или $\exp\left(\frac{-E}{kT}\right) EdE$, из которых залипают молекулы, имеющие энергию $E < \frac{\delta E \eta}{1 - \eta}$. Это неравенство является упомянутым выше условием залипания. Отсюда для энергии связи $\delta E > 0$ и температуры T получаем коэффициент залипания

$$\alpha(\delta E, T) = 1 - \left(1 + \frac{\eta}{1 - \eta} \frac{\delta E}{kT}\right) \exp\left(\frac{-\eta \delta E}{(1 - \eta)kT}\right).$$

После усреднения по нормальному распределению $\rho_p(\delta E)$ находим для $T = 273$ и 373 К соответственно $\alpha_{00} = 0,110$ – коэффициент залипания при температуре 0°C , $\alpha_{100} = 0,074$ – коэффициент зали-

пания при температуре 100°C . В этом диапазоне температур коэффициент залипания может быть аппроксимирован как

$$\alpha(T) = \alpha_0 \exp\left(\frac{E_*}{kT}\right),$$

где $\alpha_0 = 0,0252$, $E_* = 0,56 \cdot 10^{-13}$ эрг.

Если подставить этот коэффициент залипания в формулу для давления насыщения, то изменится значение параметра связи ΔE в показателе экспоненты. Оно станет равным

$$\Delta E = \Delta E_{ef} + E_* = 7,12 \cdot 10^{-13} \text{ эрг.}$$

Заключение

Таким образом, параметры кривой насыщения, полученные при моделировании кластера, почти точно совпадают с подгоночными параметрами, приведенными выше. Итак, четырехточечный потенциал хорошо описывает процессы конденсации и испарения, протекающие на поверхности воды.

Авторы благодарят Э.А. Бондарева, обратившего наше внимание на зависимость коэффициента залипания от температуры. Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ № 12-02-00174-а, программы Президиума РАН № 10 «Фундаментальные свойства материи и астрофизика», Междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН № 79 «Влияние космических лучей на конденсацию атмосферного водяного пара и процессы облакообразования» и Гранта Президента Российской Федерации по государственной поддержке ведущих научных школ НШ-3269.2014.2.

1. Мейсон Б.Дж. Физика облаков. Л.: Гидрометеоздат, 1961. 542 с.
2. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. Л.: Наука, 1975. 592 с.
3. Ney E.P. Cosmic radiation and the weather // Nature (Gr. Brit.). 1959. V. 183. P. 451–452.
4. Пудовкин М.И., Люблич А.А. Проявление циклов солнечной и магнитной активности в вариациях температуры воздуха в Ленинграде // Геомагнетизм и аэрон. 1989. Т. 29, № 3. С. 359–363.
5. Пудовкин М.И., Бабушкина С.В. Влияние электромагнитного и корпускулярного излучений солнечной вспышки на интенсивность зональной циркуляции атмосферы // Геомагнетизм и аэрон. 1991. Т. 31, № 3. С. 493–499.
6. Svensmark H. Cosmoclimatology: A new theory emerges // Astron. Geophys. 2007. V. 48, N 1. P. 1,18–1,24.
7. Ермаков В.И. Роль грозных облаков в механизме связи погоды с солнечной активностью // Геомагнетизм и аэрон. 2000. Т. 40, № 1. С. 130–132.
8. Ermakov V.I., Bazilevskaya G.A., Pokrovsky P.E., Stozhkov Y.I. Ion balance equation in the atmosphere // J. Geophys. Res. D. 1997. V. 102, N 19. P. 23,413–23,419.
9. Гуревич А.В., Зыбин К.П. Пробой на убегающих электронах и электрические разряды во время грозы // Успехи физ. наук. 2001. Т. 171. С. 1177.
10. Русанов А.И. К термодинамике нуклеации на заряженных центрах // Докл. АН СССР. 1978. Т. 238, № 4. С. 831–834.

11. Крымский Г.Ф., Колосов В.В., Тырышкин И.С. Конденсация пара в присутствии ионизирующих воздействий // Оптика атмосфер. и океана. 2010. Т. 23, № 9. С. 826–829.
12. Крымский Г.Ф., Колосов В.В., Ростов А.П., Тырышкин И.С. Установка для исследования нуклеации водяных паров в искусственной атмосфере // Оптика атмосфер. и океана. 2010. Т. 23, № 9. С. 820–825.
13. Пономарев Ю.Н., Климкин А.В., Козлов А.С., Колосов В.В., Крымский Г.Ф., Куряк А.Н., Малышкин С.Б., Петров А.К. Исследования конденсации пересыщенного водяного пара при ионизации атмосферы и сопутствующего характеристического ИК-излучения // Солнечно-земная физ. 2012. Вып. 21. С. 58–61.
14. Barker J.A., Watts R.O. Structure of water; A Monte Carlo calculation // Chem. Phys. Lett. 1956. V. 3, N 4. P. 144–145.
15. Briant C.L., Burton J.J. Effective potential for water-ion interactions in prenucleation embryos // J. Chem. Phys. 1974. V. 61. P. 2849–2855.
16. Rahman A., Stillinger F.H. Improved simulation of liquid water by molecular dynamics // J. Chem. Phys. 1974. V. 60. P. 1545.
17. Шевкунов С.В. Нуклеация водяного кластера на нонах. Численный эксперимент // Ж. эксперим. и теор. физ. 1994. Т. 105, вып. 5. С. 1258.
18. Шевкунов С.В. Коллективные взаимодействия в механизме сцепления зародышей конденсированной фазы с кристаллической поверхностью. 1. Пространственная организация // Коллоид. ж. 2008. Т. 70, № 5. С. 694–708.
19. Шевкунов С.В. Компьютерное моделирование микроконденсации на кристаллических частицах // Докл. РАН. 2010. Т. 433, № 6. С. 761–766.
20. Шевкунов С.В. Рассеяние радиоволн сантиметрового диапазона в ионизированном радиоактивным излучением газе. Формирование кластерной плазмы // Ж. эксперим. и теор. физ. 2001. Т. 108, № 3. С. 485–508.
21. Крымский Г.Ф., Павлов Г.С. Электрическая модель конденсации водяного кластера // Докл. РАН. 2008. Т. 420, № 6. С. 750–751.
22. Павлов Г.С., Крымский Г.Ф., Петухов С.И. Модель роста водяных капель // Изв. РАН. Сер. физ. 2015. Т. 79, № 5. С. 754–755.

G.F. Krymsky, S.I. Petukhov, G.S. Pavlov. Simulation of water vapor condensation. Four-point potential.

The simulation of vapor condensation on the water surface using the four-point potential for molecules is described. The parameters of the phenomenological model of vapor dissolved in water are reproduced as a result of microsimulation of the behavior of a cluster consisting of 55 molecules. Coefficient of sticking molecules on the water surface is calculated based on mechanical analogy with an elastic blow. The consent of microsimulation parameters with the parameters of the phenomenological model is obtained.