

OBSAH

1. Statisticko-termodynamický popis tekutin	9
1.1. Definice a vztahy pro termodynamické funkce tekutin v kanonickém souboru	9
1.2. Distribuční funkce ve velkém kanonickém souboru	14
2. Integrální rovnice pro distribuční funkce	25
2.1. Hierarchie integro-diferenciálních rovnic	25
2.1.1. Bornova-Greenova-Yvonova rovnice	26
2.1.2. Kirkwoodova rovnice	27
2.2. Rozvoje distribučních funkcí a diagramová technika	29
2.2.1. Viriálový rozvoj	29
2.2.2. Metoda topologické redukce	31
2.3. Percusova-Yevickova rovnice a HNC rovnice	39
2.4. Metoda funkciónálu	45
2.5. Řešení Percusovy-Yevickovy rovnice pro systém tuhých koulí	47
3. Poruchové metody k určení termodynamických funkcí reálných jednosložkových soustav	51
3.1. Poruchový rozvoj pro volnou energii	54
3.2. Metody s referentním systémem tuhých koulí	57
3.2.1. Metoda Zwanzigova	58
3.2.2. Varianta Smithova a Alderova	59
3.2.3. Varianta Frischova, Katzova, Praestgaardova a Lebowitzova	60
3.2.4. Variační metoda Kozaka a Rice	61
3.2.5. Variační metoda Mansooriova a Canfieldova	63
3.3. Metody používající referentní soustavy částic s "měkkými" odpuzivými silami	65
3.3.1. Rowlinsonův rozvoj k charakterisaci referentní soustavy	66
3.3.2. Varianta Hendersonova a Davisonova	68
3.3.3. Aplikace Rowlinsonovy charakterisace referentní soustavy v poruchovém rozvoji prvního řádu	69
3.3.4. Poruchový rozvoj Barkerův a Hendersonův	71
3.3.5. Resumače poruchového rozvoje	77
3.3.6. Metoda Chandlerova, Weeksova a Andersonova	80
3.3.7. Varianta Verletova	83
3.4. Stavové rovnice pro reálný plyn	85
4. Poruchové teorie roztoků	88
4.1. Vlastnosti směsí tuhých koulí	90

4.2. Variační metoda pro směsi	98
4.3. Rozšíření Barkerovy a Hendersonovy teorie pro směsi	101
4.4. Ostatní poruchové metody	104
4.5. Závěr	107
Dodatek 1. Funkcionál a funkcionální derivace	109
Dodatek 2. Základy diagramové techniky	111
Dodatek 3. Bipolární souřadnice	116
Dodatek 4. Integrovaná transformace	117
Dodatek 5. Řešení Percusovy-Yevickovy rovnice pro systém tuhých koulí	118
Dodatek 6. Inverse Laplaceových transformací radiálních distribučních funkcí směsi tuhých koulí v Percusově-Yevickově aproximaci	122
Seznam symbolů	124
Literatura	127
Rejstřík	131