

OBSAH

Seznam symbolů a zkratk	7
Předmluva	11
1 Úvod	13
2 Statistická termodynamika a termodynamika	16
2.1 Mezimolekulární síly	16
2.1.1 Modelové párové potenciály	17
2.1.2 Párové potenciály reálných látek	19
2.1.3 Neadditivní síly - tříčasticové potenciály	21
2.2 Exaktní vztahy pro termodynamické funkce a molekulární korelační funkce	25
2.3 Počítačové experimenty	31
2.3.1 Princip simulací Monte Carlo - Metropolisův algoritmus	32
2.3.2 Simulace v izotermním-izobarickém souboru a ve velkém kanonickém souboru	34
2.3.3 Výpočty chemického potenciálu a Helmholtzovy energie	36
2.3.4 Metoda váženého průměru	37
3 Teorie tekutin	40
3.1 Postupy vycházející z limit ideálního plynu a ideálního krystalu	41
3.1.1 Viriální rozvoj	41
3.1.2 Hustotní rozvoje korelačních funkcí	47
3.1.3 Mřížkové teorie	52
3.2 Teorie založené na integrálních rovnicích pro korelační funkce	57
3.2.1 Superpoziční aproximace	57
3.2.2 Metody založené na Ornsteinově-Zernikeho rovnici	59
3.2.3 Metody druhého řádu	61
3.2.4 Samokonzistentní aproximace	62
3.2.5 Fenomenologické aproximace přímé korelační funkce	64
3.3 Poruchové metody	67
3.3.1 Poruchové rozvoje Helmholtzovy energie a radiální distribuční funkce	68
3.3.2 Aproximace "blip function" a vysokoteplotní aproximace	70
3.3.3 Aproximace ORPA a EXP	72
3.3.4 Stellovy rozvoje	75
3.3.5 Kombinované metody	75
4 Modelové a skutečné potenciály inertních plynů	81
4.1 Tuhé koule	81
4.1.1 Data	83
4.1.2 Numerické metody řešení integrálních rovnic	87
4.1.3 Testování teorií	90
4.2 Lennard-Jonesova tekutina	99
4.2.1 Data	99
4.2.2 Testování teorií	100
4.3 Inertní plyny	104
4.3.1 Moderní párové potenciály	105
4.3.2 Metody ověřování párových potenciálů	109
4.3.3 Ověření tříčasticových potenciálů	112
4.3.4 Výpočet termodynamických veličin v plynu a v kapalině	113
5 Roztoky elektrolytů	119

5.1.1 Data	123
5.1.2 Aplikace teorií jednoduchých tekutin na primitivní model	124
5.2 Reálné roztoky elektrolytů	129
6 Ostatní aplikace	136
6.1 Taveniny solí	136
6.2 Jednokomponentní plazma	137
6.3 Kapalné kovy	140
6.4 Vlastnosti kapalného helia 4	142
6.5 Molekulové tekutiny	143
7 Závěr	145
Literatura	148