

## Ассоциативная модель флюида и нерешенная проблема теории жидкости

Ю. К. Товбин  
ИОНХ им. Н.С. Курнакова, РАН  
e-mail: tovbinuk@mail.ru

Сформулирована ассоциативная модель паро - жидкостной системы, в которой одновременно учитываются исключенный соседями объем, доступный для движения любой молекулы флюида, и ее колебательные движения в связанном состоянии со своими соседями. На необходимость учета связанных состояний молекул флюида давно обращали внимание: эксперимент (1928) и модели с 1939 года, но этот фактор был исключен, как в начальной версии цепочки уравнений ББГКИ, так и последующих версиях теории интегральных уравнений.

Ассоциативная модель является дискретно - континуальной версией модели решеточного газа. Уравнения ассоциативной модели паро - жидкостной системы построены в терминах корреляционных функций, как и в цепочке уравнений ББГКИ, в кластерном подходе для модели решеточного газа. Кластерный подход является альтернативным методом построения уравнений для корреляционных функций относительно метода построения цепочки уравнений ББГКИ.

Использование корреляционных функций исключает из прямого рассмотрения статистическую сумму системы  $Q$ , и это обстоятельство приводит к проблеме неоднозначности путей расчета термодинамических функций паро - жидкостной системы. На неоднозначность путей расчета свободной энергии  $F = -kT \ln(Q)$  и энтропии  $S$  ( $TS = U - F$ ) через корреляционные функции флюида было указано в известной книге И.З. Фишера (1961), но позже это вопрос нигде не анализировался.

Обсуждаются:

- 1) необходимость учета связанных состояний молекул флюида,
- 2) связь новой теории с теорией неидеальных газов Урселла (1927) – Майера (1937) и с цепочкой ББГКИ,
- 3) суть проблемы расчета термодинамических функций паро - жидкостной системы,
- 4) способ решения указанной проблемы.