

О КРУГЛЫХ ДАТАХ, ОСТРЫХ ВОПРОСАХ И РЕШЕНИИ ПРОБЛЕМ МАЛОПАРАМЕТРИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ МЕТОДОМ ЛОГИЧЕСКОЙ АБДУКЦИИ

Петрик Г.Г.

*ИПГ ДНЦ РАН, Мазачкала, Россия
galina_petrik@mail.ru*

Знаменитому родоначальнику одного из двух направлений при конструировании уравнений состояния (УС) – малопараметрических и многоконстантных – УС Ван-дер-Ваальса через пять лет «стукнет» 150. Среди сотен его модификаций выделяется УС Редлиха-Квонга (в 2019 г. ему будет 70 лет). Возродив интерес к работе Ван-дер-Ваальса, оно породило массу важных модификаций (Соаве, Пенга-Робинсона, Шмидта-Венцеля; Юздина, Макаулиффа), которые вскоре отметят круглые даты: 45 – 40 лет. Но несмотря на огромное количество давно известных УС и достигнутые успехи, задача построения и выбора оптимального малопараметрического УС не решена.

К известным малопараметрическим УС имеется много вопросов. Одни из первых – о числе параметров в «двухпараметрических» УС, о смысле параметра b различных УС, о смысле третьего параметра, о молекулярной модели, с которой принято связывать эти УС. Из непроясненного смысла параметров следует основной недостаток УС вдв-типа – их слабая связь с микроуровнем. Основывая на расчетах вывод о преимуществах нового уравнения (модели термодинамического уровня), авторы обычно не касаются причин, почему это улучшение происходит, и не связывают его с изменениями модели молекулярного уровня.

Состояние проблемы в этой области отвечает методу логической абдукции. Имеются вопросы, которые не могут быть разрешены в рамках действующей модели. Если эти проблемы удастся разрешить в рамках новой модели, это будет означать ее адекватность. Новая молекулярно-термодинамическая модель построена нами на основе самой простой микромодели – взаимодействующих точечных центров. Получены семейства малопараметрических физически обоснованных реалистических термических уравнений состояния (ФОРТУС). В рамках этой модели удастся получить ответы на многие вопросы, имеющиеся к УС вдв-типа, что и означает адекватность нового УС. Заметим, что УС взаимодействующих центров исполнится 10 лет в следующем году (см. наши работы на сайте www.csmos.ru).