
吸附等温线饱和行为的新理论模型 MDPI Liquids

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/39842.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

吸附等温线饱和行为的新理论模型 MDPI Liquids。论文标题：An Alternative Approach to the Saturation Behavior of Adsorption Isotherms

论文链接：<https://www.mdpi.com/2673-8015/6/1/9>

期刊名：Liquids

期刊链接：<https://www.mdpi.com/journal/liquids>

Lelidis, I.; Barbero, G. An Alternative Approach to the Saturation Behavior of Adsorption Isotherms. Liquids 2026, 6, 9. <https://doi.org/10.3390/liquids6010009>

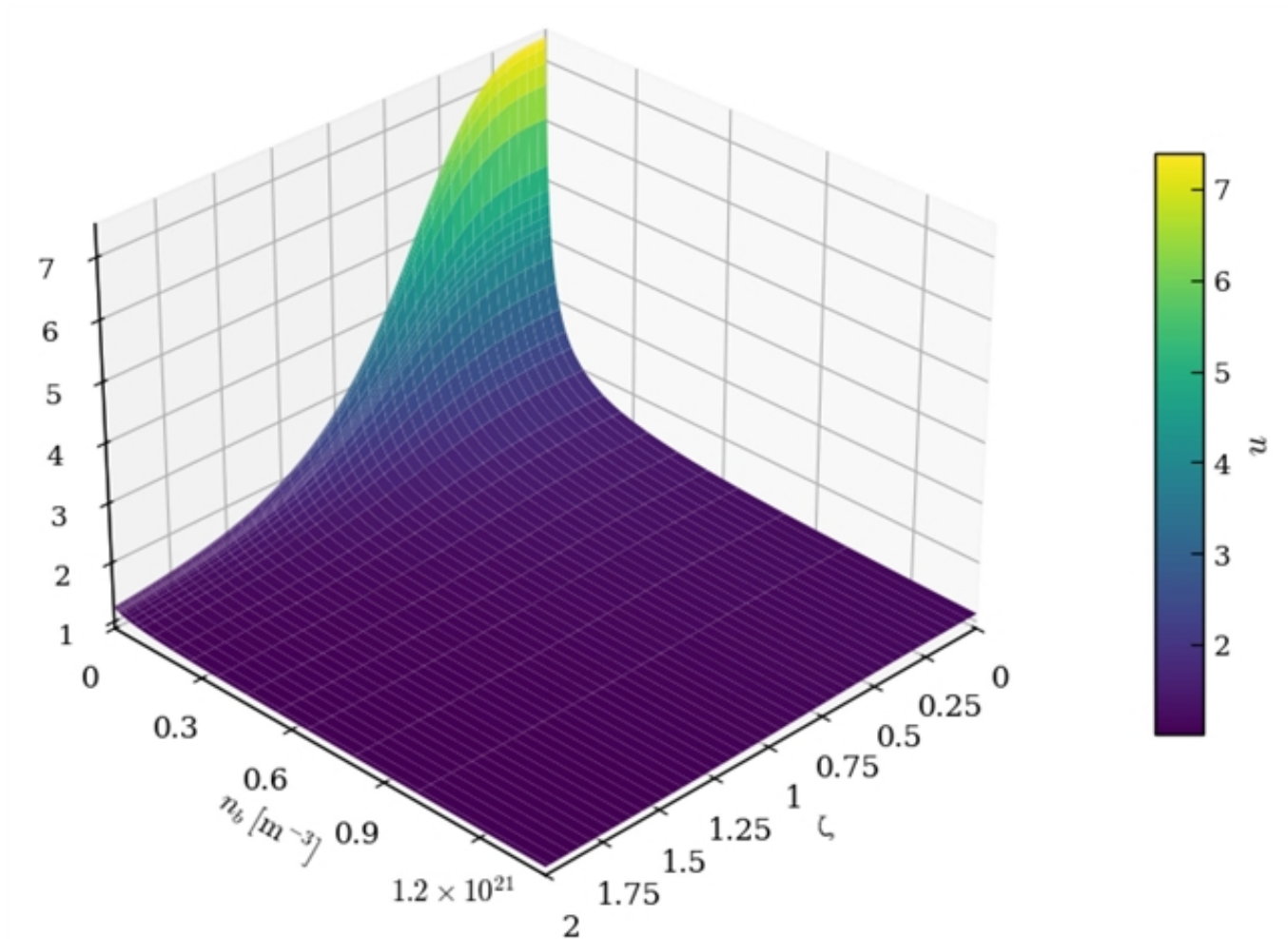
吸附饱和现象传统上由朗缪尔模型解释，即表面吸附位点数量有限导致吸附量趋于平台。但该理论依赖离散位点假设，难以描述无定形材料、软界面与连续介质体系。本文提出全新连续介质模型，不预设有限吸附位点，仅通过吸附质-基底吸引势与粒子间排斥势，成功再现吸附饱和行为，为界面吸附提供更普适的物理图像。

本研究从经典吸附动力学出发，指出朗缪尔模型的核心局限是强制引入最大吸附密度 θ_0 ，而真实连续界面不存在固定位点。为此，作者团队构建半无限大体系统计力学模型：吸附质受范德华型吸引势 $V_0(z)$ 被吸附至界面，同时受与局域浓度偏差成正比的平均场排斥势 $\theta(n)$ ，两者共同决定浓度分布 $n(z)$ 。

模型采用玻尔兹曼统计，得到自洽非线性方程，数值求解不同体相浓度 n_b 下的吸附质浓度剖面。结果显示，界面附近吸附质浓度急剧升高，随距离快速衰减；低浓度区吸附量 θ 与 n_b 近似线性增长，高浓度区 θ 趋于饱和值 θ_{sat} ，与朗缪尔等温线趋势一致。

关键发现证实：饱和源于吸附质间排斥作用，而非位点限制。排斥强度 θ 越大，饱和吸附量 θ_{sat} 越低，且满足 $\theta_{sat} \propto 1/\theta$ 标度关系。引入二次排斥项后，饱和水平改变但饱和现象依然存在，证明机制鲁棒性。

该模型无需假设均匀表面与单分子层吸附，适用于玻璃、聚合物、液体界面等无明确吸附位点的体系，统一解释连续介质中的吸附饱和。与朗缪尔模型 (Langmuir model) 相比，新理论物理基础更扎实、适用范围更广，可直接关联分子相互作用参数与宏观吸附行为，为催化、分离、界面工程等领域提供更精准的理论工具。



图例：吸附质浓度 μ 随距吸附剂表面的约化距离 ζ 以及吸附质本体浓度 n_b 的约化变化量。

期刊简介

主编：Prof. Dr. Enrico Bodo, University of Rome La Sapienza, Italy

Liquids (ISSN 2673-8015) 创刊于2021年，是一本国际性、同行评审的开放获取期刊。期刊研究领域涵盖物理学中的液态理论、合成与分析化学、生物学的多个领域，以及工程学和气象学中的流体动力学等。目前，Liquids 已被ESCI (Web of Science)、Scopus (CiteScore 2.9)、CAPlus/SciFinder 等多个主要数据库收录。

2024 CiteScore 2.9 Time to First Decision 35.3 Days Acceptance to Publication 4.3 Days

来源：Liquids

更多科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://iikx.com)转发