## Лопаткин, Александр Анфимович. Обобщенная термодинамическая теория и молекулярные модели физической адсорбции на твердых адсорбентах : диссертация ... доктора химических наук : 02.00.04. - Москва, 1984. - 354 с. : ил.

## Оглавление диссертациидоктор химических наук Лопаткин, Александр Анфимович

ВВЕДЕНИЕ.

ГЛАВА I. ТЕРМОДИНАМИКА АДСОРБЦИИ.

1.1. Краткий обзор работ по термодинамике адсорбции

1.2. О термодинамике гетерогенных систем

1.3. Общее определение избыточных величин.

1.4. Некоторые частные примеры для границы флюидфлюид

1.4.1. Теория капиллярности Гиббса

1.4.2. Метод слоя конечной толщины

1.4.3. Обобщенное правило фаз.

1.5. Термодинамика адсорбции на поверхности твердых тел (вводные замечания).

1.6. Построение термодинамики, связанной с объемным методом измерения адсорбции.

1.7. Теплоты адсорбции.

1.8. Адсорбция из растворов.

1.9. Адсорбция при очень малых заполнениях поверхности (область Генри).

1.10. Феноменологическое описание адсорбционных данных.

1.11. Некоторые дополнительные замечания по поводу термодинамики адсорбции.

ВЫВОДЫ К ГЛАВЕ I.

ГЛАВА 2. МОЛЕКУЛЯРНО-СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ АДСОРБВДИ

2.1. Постановка задачи.

2.2. Сводка общих молекулярно-статистических выражений.

2.3. Применение канонического ансамбля для описания молекулярных моделей адсорбции на твердом адсорбенте.

2.4. Большой канонический ансамбль и выражения для избыточных термодинамических функций через статистические моменты распределения

2.5. О потенциальной энергии адсорбции.

2.6. Решеточные модели адсорбции. Введение.

2.7. Одномерные решеточные модели. Матричный метод

2.7.1. Моделирование неоднородной поверхности

2.7.2. Учет возможной переориентации адсорбированных молекул.

2.7.3. Одновременное действие нескольких факторов

2.8. Решеточные модели адсорбции из смесей.

2.9. Решеточная модель поверхности кристалла со ступенями роста.

2.10. Молекулярные модели адсорбции цеолитами

ВЫВОДЫ К ГЛАВЕ 2.

ГЛАВА 3. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК

АДСОРБЦИИ.

3.1. Введение.

3.2. Расчеты в области Генри.

3.2.1. Адсорбция инертных газов цеолитом ИаХ

3.2.2. Адсорбция метана и других углеводородов цеолитом 1\1<хХ.

3.2.3. Адсорбция ряда веществ сшшкалитом.

3.3. Использование решеточных моделей адсорбции . . 275 3.3.1. Адсорбция неопентана цеолитом МаХ.

3.3.2. Инертные газы на ступенчато-неоднородной поверхности кристаллов Na.CE

3.4. Численные расчеты для более сложных решеточных моделей.

3.4.1. Модели, учитывающие неоднородность поверхности.

3.4.2. Модели, учитывающие переориентацию адсорбированных молекул.

ВЫВОДЫ К ГЛАВЕ 3.