

修正的格子空间的密度泛函理论在狭缝中的应用

刘梅堂; 牟伯中; 刘洪来; 胡英

华东理工大学化学系, 上海 200237

摘要:

对描述单原子分子溶液在狭缝中的吸附现象的格子空间的密度泛函理论 (LDFT, lattice density functional theory)进行了修正, 在系统Helmholtz函数的推导中引入了平均场近似校正和Gibbs-Helmholtz方程. 对比Monte Carlo (MC)模拟结果, 发现LDFT理论对吸附分子在狭缝中的吸附浓度分布的预测与模拟数据有较大的偏差, 而修正模型的结果与模拟数据吻合较好. 随着体相浓度的变化, 分子在狭缝中具有多级吸附行为, 具体表现为在特定体相浓度区, 对相同的体相浓度, 狭缝中同时存在不同的分子浓度分布, 而在Gibbs等温线上可以明显看出多级吸附的性质. 对比修正前后的结果发现, 两者均可以预测多级吸附行为, 但仍存在着较大的差异.

关键词: LDFT 狭缝吸附 多级吸附 相变

收稿日期 2004-01-19 修回日期 2004-03-03 网络版发布日期 2004-06-15

通讯作者: 牟伯中 Email: bzmu@ecust.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 刘梅堂; 牟伯中. 狭缝滞留吸附性质的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(03): 355-358

扩展功能

本文信息

[PDF\(1363KB\)](#)

服务与反馈

[把本文推荐给朋友](#)

[加入我的书架](#)

[加入引用管理器](#)

[引用本文](#)

[Email Alert](#)

[文章反馈](#)

[浏览反馈信息](#)

本文关键词相关文章

▶ [LDFT](#)

▶ [狭缝吸附](#)

▶ [多级吸附](#)

▶ [相变](#)

本文作者相关文章

▶ [刘梅堂](#)

▶ [牟伯中](#)

▶ [刘洪来](#)

▶ [胡英](#)