

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ  
И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

УДК 544.723

ПОЛИЛОГАРИФМИЧЕСКАЯ ИЗОТЕРМА АДСОРБЦИИ  
ПРИ ЛИНЕЙНОЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ  
ПОВЕРХНОСТИ

© 2020 г. М. В. Вигдорович<sup>1,3,4,\*</sup>, Л. Е. Цыганкова<sup>2</sup>, Н. В. Шель<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Angara GmbH, Дюссельдорф, 40599, Германия

<sup>2</sup> Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина, Тамбов, 392000, Россия

<sup>3</sup> Тамбовский государственный технический университет, Тамбов, 392000, Россия

<sup>4</sup> Всероссийский научно-исследовательский институт использования техники и нефтепродуктов в сельском хозяйстве, Тамбов, 392022, Россия

\*e-mail: dr.vigdorowitsch@angara-gmbh.de

Поступила в редакцию 01.10.2020 г.

После доработки 07.11.2020 г.

Принята к публикации 24.11.2020 г.

Получено точное решение для изотермы мономолекулярной адсорбции при линейной энергетической неоднородности поверхности. Показано, что интерпретация многочисленных экспериментальных результатов, ранее ассоциируемых с равномерной энергетической неоднородностью поверхности (адсорбционная модель Тёмкина) на основании наличия у изотермы протяженных линейных участков в полулогарифмических координатах, может потребовать основательного пересмотра. Изучены свойства новой изотермы, рассмотрены асимптотические и физически предельные случаи. Показано, что в случае полилогарифмической адсорбционной модели неоднородность поверхности представлена двумя параметрами, энергетической дисперсией (идентичен параметру неоднородности адсорбционной модели Тёмкина) и энергетическим градиентом. В зависимости от знака последнего, различаются адсорбционно-агрессивные и адсорбционно-умеренные поверхности. Для первых чем больше теплота адсорбции участка поверхности, тем большее количество таких участков поверхности имеется, тогда как для вторых большая теплота адсорбции присуща меньшему количеству участков поверхности. Физически, больший энергетический градиент “толкает” систему в том же направлении, что и большая энергетическая дисперсия, однако делает это менее динамично. Аналогично адсорбционной модели Тёмкина, выделен случай “средних заполнений” (термин Тёмкина), для него выведена упрощенная форма полилогарифмической изотермы.

**Ключевые слова:** адсорбция, изотерма, Тёмкин

**DOI:** 10.1134/S2304487X20050156

ВВЕДЕНИЕ

Вопрос, связанный с типом изотерм на энергетически неоднородных поверхностях, исторически восходит к работам И. Ленгмюра [1]. При заданной неоднородности  $a$  ( $\epsilon$ ), интегрирование с ядром  $L$  производится по теплоте адсорбции  $\epsilon$  по всей поверхности  $S$ , на каждом из бесконечно малых участков которой реализуется изотерма Ленгмюра:

$$\theta = \int_S L(\epsilon) d\epsilon, \quad (1)$$

где  $\theta$  – степень покрытия поверхности.

Интегрирование по степени покрытия в уравнении (1) с ленгмюровским ядром

$$L(\epsilon) = \frac{a_0 \exp(\epsilon/kT) p}{1 + a_0 \exp(\epsilon/kT) p}, \quad (2)$$

где  $p$  – давление в газовой фазе, ионная активность в жидкой фазе или концентрация при условии, что раствор имеет постоянную ионную силу, по теплоте адсорбции от  $(\epsilon_0 - c \frac{kT}{2})$  до  $(\epsilon_0 + c \frac{kT}{2})$  вдоль параметрически задаваемой линии (параметр  $t \in [0; 1]$ )

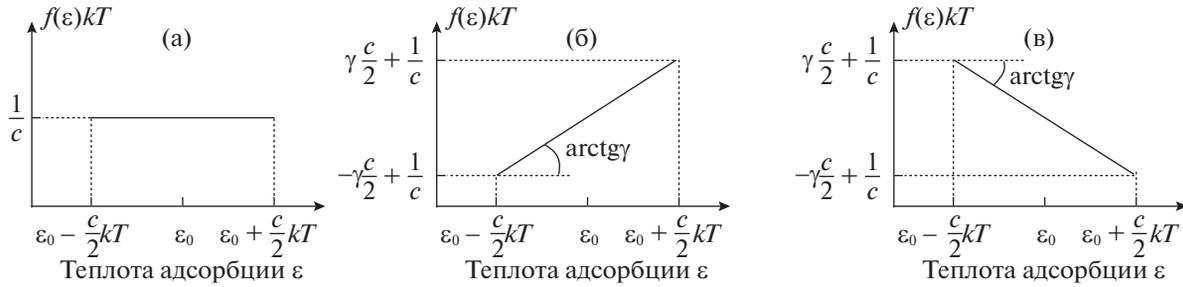
$$\epsilon = \epsilon_0 + kT \frac{c}{2} - kTct, \quad (3)$$

приводит к хорошо известной изотерме Тёмкина [2]:

$$\theta = \frac{1}{c} \ln \frac{1 + a_+ p}{1 + a_- p}, \quad (4)$$

где коэффициенты  $a_+ = a_0 \exp(\frac{c}{2}) \exp(\frac{\epsilon_0}{kT})$  и

$a_- = a_0 \exp(-\frac{c}{2}) \exp(\frac{\epsilon_0}{kT})$  соответствуют слабо и



**Рис. 1.** Функции распределения для: (а) энергетически равномерно неоднородной поверхности (адсорбционная модель Тёмкина), (б) линейно неоднородной поверхности – адсорбционно агрессивной, (в) линейно неоднородной поверхности – умеренной.

сильно адсорбирующим участкам поверхности,  $c = \ln\left(\frac{a_+}{a_-}\right)$  – параметр энергетической неоднородности поверхности (константа),  $a_0p$  – безразмерное давление (активность или концентрация сообразно вышесказанному). В случае  $a_+ \gg a_-$  существует диапазон так называемых “средних покрытий”, определенный таким образом непосредственно Тёмкиным, где имеют место следующие неравенства:

$$a_+p \gg 1, \tag{5a}$$

т.е. сильно адсорбирующие участки поверхности, главным образом, заняты, и

$$a_-p \ll 1, \tag{5b}$$

что соответствует, главным образом, незанятости слабо адсорбирующих участков поверхности. Упрощенная форма уравнения (4)

$$\theta = \frac{1}{c} \ln a_+p \tag{6}$$

происходит именно из такого условия Тёмкина и весьма ценится в экспериментальных работах вследствие удобной в обработке линейной зависимости в полулогарифмических координатах [3].

Хорошо известно, что результат, аналогичный уравнению (4), можно также получить интегрированием

$$\theta = \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} L(x)f(x)dx \tag{7}$$

с дифференциальной функцией распределения адсорбирующих участков поверхности по теплоте адсорбции вида [4]

$$f(x) = \frac{1}{kT} \begin{cases} \frac{1}{c}, & -\frac{c}{2} \leq x \leq \frac{c}{2}; \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases} \tag{8}$$

Следует обратить внимание, что при формулировке исходных условий иногда имеет место следующее недоразумение. Об изотерме Тёмкина ча-

сто говорят как о линейном распределении, хотя такая характеристика связана с упорядочением адсорбирующих участков поверхности по теплоте адсорбции *при интегрировании по степени покрытия*. Функция распределения же участков поверхности является *константой*, т.е. вероятность того, что случайно выбранный адсорбирующий участок поверхности характеризуется теплотой адсорбции  $\varepsilon$ , не зависит от  $\varepsilon$  (рис. 1а). В свою очередь,  $\varepsilon$  линейно возрастает или убывает при переходе от одной группы адсорбирующих участков поверхности к другой. Энергетически такой тип поверхности характеризуется как равномерно неоднородный.

В отличие от равномерно неоднородных поверхностей, тип линейно неоднородной поверхности не упоминается в монографиях по адсорбции [5, 6], а какой-либо его детальный анализ, возможно, выполненный ранее, авторам неизвестен. По всей видимости, дефицит внимания к линейной неоднородности связан с тем, что точное аналитическое выражение для интеграла в уравнении (7) связано со специальной функцией, так называемой *полилогарифмической функцией 2-го рода*, или *дилогарифмом*, которая упоминается в традиционных справочниках по специальным функциям отнюдь не детально (см., например, [7]). Лишь в относительно недавнее время она вызвала интерес, а ее свойства были подробно изучены [8–10]. Вкратце охарактеризуем ее в целом. Некоторые из возможных представлений дилогарифма связаны с интегралом

$$Li_2(z) = -\int_0^z \frac{\ln(1-t)}{t} dt,$$

а при  $|z| < 1$  также рядом

$$Li_2(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^2}.$$

В соответствии с определением, полилогарифмическая функция 2-го рода – аналитическая в  $\mathbb{C}$  всюду, кроме  $z = 1$ , где она имеет логарифмиче-

скую точку ветвления. Для действительных значений  $z = x$  имеет место разрез вдоль действительной оси от 1 до  $+\infty$ . Данная особенность не существенна в контексте настоящего сообщения, поскольку далее пойдет речь о существенно отрицательных действительных аргументах  $x = -a_{\pm}p$  полилогарифмической функции 2-го рода, которая при этом непрерывна, отрицательна и квазилогарифмически убывает при возрастании  $|x|$ .

**ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ И ИЗОТЕРМА АДСОРБЦИИ ПРИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИ ЛИНЕЙНО НЕОДНОРОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ**

Линейной энергетической неоднородности поверхности соответствует следующая функция распределения адсорбирующих участков поверхности по теплоте адсорбции (рис. 1б, 1в):

$$f(x) = \frac{1}{kT} \begin{cases} \gamma \frac{x - \epsilon_0}{kt} + \frac{1}{c}, & -\frac{c}{2} \leq x \leq \frac{c}{2}, \\ 0, & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (9)$$

где  $\gamma$  – фактор линейной неоднородности, причем неравенство  $|\gamma| < 2/c^2$  неизбежно следует из условия неотрицательности функции распределения, которая не может пересекать ось абсцисс на рис. 1б, в.

В отличие от функции распределения (8), количество адсорбирующих участков поверхности с теплотой адсорбции  $\epsilon$  прямо пропорционально  $\epsilon$ . Для адсорбционно агрессивных поверхностей с  $\gamma > 0$  носителями большей теплоты адсорбции  $\epsilon$  является большее количество адсорбирующих участков поверхности, для адсорбционно умеренных поверхностей с  $\gamma < 0$  – наоборот, меньшее. При  $\gamma = 0$  возникает случай адсорбционной модели Тёмкина на энергетически равномерно неоднородной поверхности с уравнением (8).

Энергетическая неоднородность поверхности с функцией распределения (9) характеризуется двумя параметрами,  $c$  и  $\gamma$ . Первый “унаследован” из адсорбционной модели Тёмкина и отвечает за ширину диапазона возможных значений теплоты адсорбции (“энергетическая дисперсия” адсорбирующих участков поверхности). Второй отсутствует в адсорбционной модели Тёмкина и отвечает за то, сколь сильно адсорбционные участки поверхности различаются по количеству в зависимости от теплоты адсорбции  $\epsilon$  (“энергетический градиент”). Оба параметра суть характеристики энергетической неоднородности поверхности.

Интегрирование функции распределения (9) с лэнгмюровским ядром (2) может быть осуществлено аналитически. Рассмотрим соответствующее

выражение для степени покрытия поверхности

$$\theta = \frac{1}{kT} \int_{-kT\frac{c}{2}}^{kT\frac{c}{2}} L(\epsilon) \left( \frac{\epsilon - \epsilon_0}{kt} + \frac{1}{c} \right) d\epsilon = I_1 + I_2, \quad (10)$$

где  $I_1$  принимает “квази-тёмкинскую” форму

$$I_1 = \frac{1}{kT} \int_{-kT\frac{c}{2}}^{kT\frac{c}{2}} L(\epsilon) \left( -\frac{\epsilon_0}{kt} + \frac{1}{c} \right) d\epsilon = \frac{1 - c\epsilon_0/kT}{c} \ln \frac{1 + a_+p}{1 + a_-p}. \quad (11)$$

$I_2$  имеет следующий вид:

$$I_2 = \frac{\gamma}{(kT)^2} \int_{-kT\frac{c}{2}}^{kT\frac{c}{2}} L(\epsilon) \epsilon d\epsilon = \gamma \left\{ \text{Li}_2(-a_+p) - \text{Li}_2(-a_-p) + \frac{\epsilon_0}{kT} \times \right. \\ \left. \times \ln \frac{1 + a_+p}{1 + a_-p} + \frac{c}{2} \ln[(1 + a_+p)(1 + a_-p)] \right\}, \quad (12)$$

где  $\text{Li}_2$  – полилогарифмическая функция 2-го рода, или дилогарифм.

Подставляя уравнения (11) и (12) в (10), получаем окончательную форму полилогарифмической изотермы:

$$\theta = \gamma [\text{Li}_2(-a_+p) - \text{Li}_2(-a_-p)] + \frac{1}{c} \ln \frac{1 + a_+p}{1 + a_-p} + \gamma \frac{c}{2} \ln[(1 + a_+p)(1 + a_-p)]. \quad (13)$$

Как следует из уравнения (13), предельным случаем полилогарифмической изотермы при  $\gamma = 0$  является изотерма Тёмкина (4).

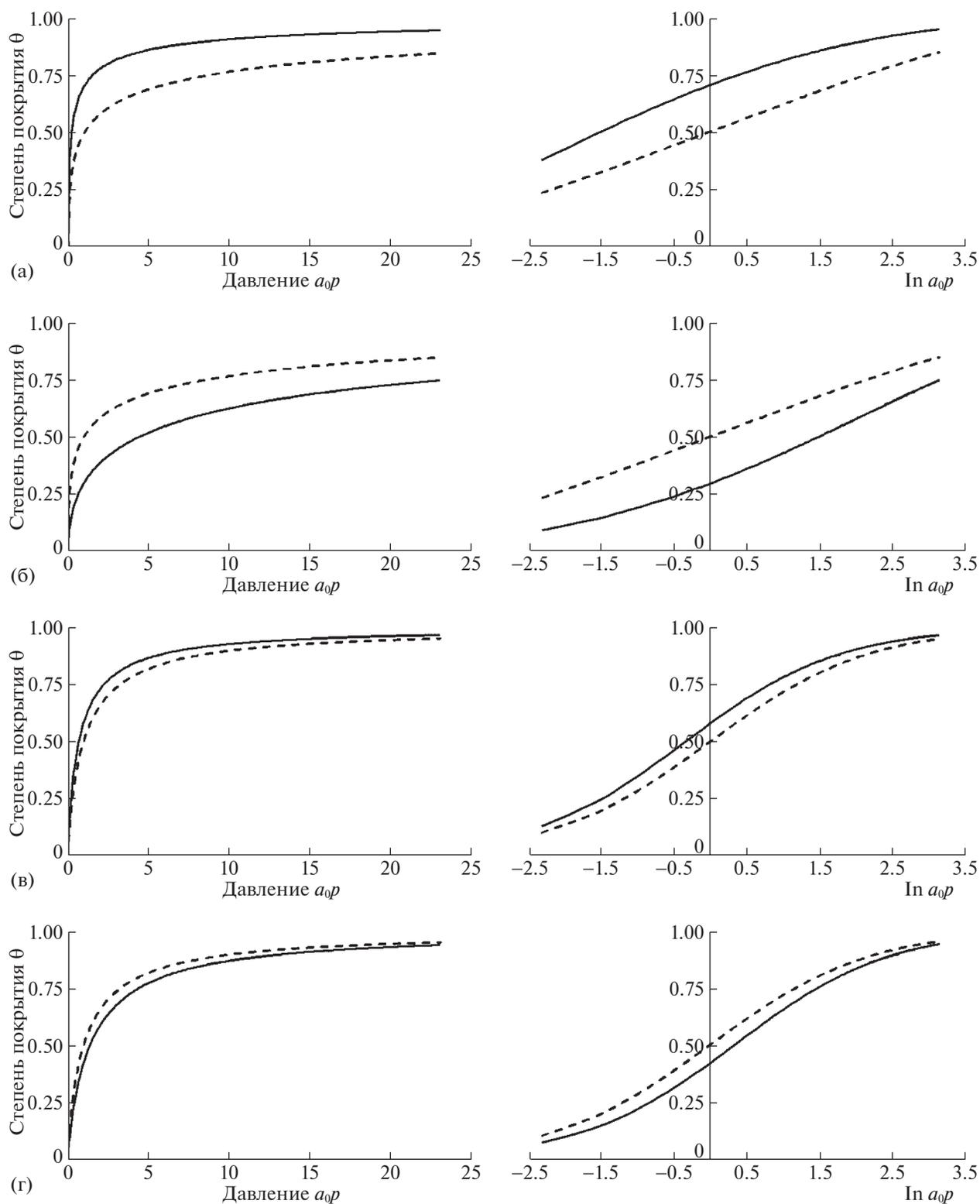
**ОБСУЖДЕНИЕ**

Некоторые типичные графики полилогарифмической изотермы адсорбции (13) приведены на рис. 2.

Рассмотрим асимптотическое поведение полилогарифмической изотермы в сравнении с изотермой Тёмкина.

При  $p \rightarrow 0$  асимптотика  $\theta \rightarrow 0$  следует из разложения в ряд функции  $\text{Li}_2(-x)$  вдоль отрицательной части оси абсцисс

$$\text{Li}_2(-x) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-x)^i}{i^2} \quad (14)$$



**Рис. 2.** Факторы энергетической неоднородности: а. Энергетическая дисперсия  $c = 8$ , энергетический градиент  $\gamma = 0.03125$  (адсорбционно агрессивная поверхность); б.  $c = 8$ ,  $\gamma = -0.03125$  (адсорбционно умеренная поверхность); в.  $c = 2$ ,  $\gamma = 0.5$  (адсорбционно агрессивная поверхность); г.  $c = 2$ ,  $\gamma = -0.5$  (адсорбционно умеренная поверхность). Сплошные кривые: полная изотерма; штриховые кривые: “тёмкинская” компонента в ее составе.

и принимает вид

$$\theta(p \rightarrow 0) = \left[ \left( \frac{1}{c} - \gamma \right) (a_+ - a_-) + \gamma \frac{c}{2} (a_+ + a_-) \right] p - \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{c} + \frac{\gamma}{2} (c - 1) \right] (a_+^2 - a_-^2) p^2 + O(p^3). \quad (15)$$

При  $p \rightarrow \infty$  асимптотику можно получить из свойств дилוגарифма для комплексной переменной  $z$ :

$$\text{Li}_2\left(-\frac{1}{z}\right) = -\frac{\pi^2}{6} - \frac{1}{2} \ln^2 z + \text{Li}_2(-z), \quad (16)$$

которая справедлива для действительных  $x < 0$ , посредством последовательной замены  $z$  на  $1/x$ :

$$\theta(p \rightarrow \infty) = 1 - \frac{\left( \frac{1}{c} - \gamma \right) (a_+ - a_-) + \gamma \frac{c}{2} [a_+ + a_-]}{a_+ a_-} \times \left( \frac{1}{p} + O\left(\frac{1}{p^2}\right) \right). \quad (17)$$

При  $\gamma = 0$  уравнения (15) и (17) позволяют получить асимптотическое поведение, соответствующее адсорбционной модели Тёмкина.

Как следует из рис. 2а, полилогарифмической изотерме в целом присущ существенно более динамичный рост на адсорбционно агрессивных поверхностях, по сравнению с ее “тёмкинской” компонентой, начиная с области низких давлений. В пределе высоких давлений полилогарифмическая изотерма выходит на асимптотику  $\theta = 1$  быстрее. Совершенно противоположная картина имеет место на адсорбционно умеренной поверхности (рис. 2б). Рисунки 2в и 2г отражают ситуацию малой энергетической дисперсии, не представляющую интереса в рамках адсорбционной модели Тёмкина. Чем уже диапазон возможных значений теплоты адсорбции, тем ближе “тёмкинская” компонента к полилогарифмической изотерме. Благодаря этому, имеется возможность изучить “чистый” эффект энергетического градиента. Он “толкает” систему в том же направлении, что и энергетическая дисперсия, но менее интенсивно.

Рассмотрим область “средних покрытий” (ср. с уравнением (6)). Учитывая разложения (14) и (16) и неравенства (5), легко получить для 1-го слагаемого в уравнении (13)

$$\gamma [\text{Li}_2(-a_+ p) - \text{Li}_2(-a_- p)] \approx \gamma \left[ -\frac{\pi^2}{6} - \frac{1}{2} \ln^2(a_+ p) \right],$$

для третьего слагаемого

$$\gamma \frac{c}{2} \ln[(1 + a_+ p)(1 + a_- p)] \approx \frac{\gamma c}{2} \ln(a_+ p),$$

а второе слагаемое принимает ту же форму, что в уравнении (6). В итоге получаем:

$$\theta = \frac{1}{c} \ln(a_+ p) + \gamma \left[ -\frac{\pi^2}{6} - \frac{1}{2} \ln^2(a_+ p) + \frac{c}{2} \ln(a_+ p) \right]. \quad (18)$$

Это – упрощенная форма полилогарифмической изотермы для области “средних покрытий”, являющаяся аналогом уравнения (6) в адсорбционной модели Тёмкина. Первое слагаемое

$\theta_T = \frac{1}{c} \ln(a_+ p)$  в уравнении (18) представляет вклад линеаризованной “квази-тёмкинской” компоненты (см. уравнение (6)) в этой области. Вторая компонента представляет собой отклонение полилогарифмической изотермы от “квази-тёмкинского” вклада. Заметим, что в полулогарифмических координатах зависимость будет носить квадратичный характер ( $\cup$ -образный для адсорбционно агрессивных и  $\cap$ -образный для адсорбционно умеренных поверхностей).

Ранее было отмечено (см. уравнение (9)), что имеется естественное ограничение, накладываемое на величину энергетического градиента  $\gamma$ . Присваивая ему предельно возможное значение

$\gamma_{\text{lim}} = -2/c^2$  (адсорбционно умеренная поверхность) в уравнении (18), для области “средних покрытий” получаем следующее выражение:

$$\theta = \frac{1}{c^2} \left[ \frac{\pi^2}{3} + \ln^2(a_+ p) \right]. \quad (19)$$

Противоположное предельно возможное значение энергетического градиента  $\gamma = 2/c^2$  в случае адсорбционно агрессивных поверхностей приводит к следующему уравнению для “средних покрытий”:

$$\theta(x) = -\left[ \frac{1}{c} \ln(a_+ x) - 1 \right]^2 + 1 - \frac{\pi^2}{3c^2}. \quad (20)$$

Уравнения (19) и (20) представляют собой упрощенную полилогарифмическую изотерму в области “средних покрытий” при наиболее выраженном эффекте энергетического градиента адсорбирующих участков поверхности.

Практическая применимость полилогарифмической изотермы для интерпретации экспериментальных данных рассмотрена в работах авторов [11, 12].

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Реализацию полилогарифмической изотермы следует ожидать на поверхностях с линейным распределением адсорбирующих участков по теплоте адсорбции. Проанализировано функциональное поведение изотермы, ее предельные случаи при предельном значении энергетического градиента для адсорбционно агрессивных и умеренных поверхностей, в также асимптотическое поведение в области высоких и низких давлений (или активностей, а в случае растворов с постоянной ионной силой – и концентраций). Проведено сравнение полилогарифмической изотермы с логарифмической изотермой Тёмкина.

Протяженные прямолинейные участки “квази-тёмкинской” компоненты в высокой степени воспроизводятся и полилогарифмической изотермой в целом. Таким образом, наличие протяженных прямолинейных участков на зависимостях степени покрытия поверхности от давления (ионной активности или концентрации в соответствующих случаях) необязательно указывает на равномерную энергетическую неоднородность поверхности, что де-факто считалось очевидным прежде.

Представленные результаты важны и в контексте решения обратной задачи, то есть реконструкции функции распределения на основе экспериментально определенной изотермы  $\theta(p)$  путем решения интегрального уравнения типа (7). При этом  $\theta(p)$  получает аппроксимацию на основе экспериментальных данных в качестве отправной точки. В такой ситуации, будучи нацеленными на энергетическую неоднородность поверхности, удовлетворяющую более слабому закону, нежели экспоненциальный, весьма вероятно и естественно искать (и найти, с учетом приближенных исходных данных!) решение скорее в виде линейной функции, нежели в виде сложной полилогарифмической функциональной формы, особенно если экспериментальные данные настраиваются на прямолинейную аппроксимацию в полулогарифмических координатах. Все это делает энергетически равномерную и линейную неоднородности поверхности трудноразличимыми. Тем не менее, практически все ранее полученные результаты, ассоциируемые с равномерной энергетической неоднородностью поверхности в результате анализа прямолинейных участков экспериментально определенной изотермы адсорбции, могут требовать пересмотра и иной интерпретации.

Данная работа была частично (Л.Ц., Н.Ш.) поддержана Российским научным фондом, проект № 18-16-00006.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Langmuir I.J.* The Adsorption of Gases on Plane Surfaces of Glass, Mica and Platinum. *Am. Chem. Soc.* 1918. V. 40. P. 1361–1403.
2. *Тёмкин М.И.* Адсорбционное равновесие и кинетика процессов на неоднородных поверхностях со взаимодействием между адсорбированными молекулами // *Журнал физической химии.* 1941. Т. 15. С. 296–307.
3. *Šlygin A., Frumkin A.* Über die Platinelektrode. *Acta Physicochimica URSS.* 1935. V. 3. P. 791–818.
4. *Borówko M.* Adsorption on Heterogeneous Surfaces. In *Adsorption. Theory, Modeling, and Analysis*, p. 105–174 / Ed. by *J. Tóth.* Marcel Dekker, Inc. New York, Basel, 2002.
5. *Adsorption. Theory, Modeling, and Analysis* / Ed. by *J. Tóth.* Marcel Dekker, Inc. New York, Basel, 2002.
6. *Rudzinski W., Everett D.H.* Adsorption of Gases on Heterogeneous Surfaces. Academic Press: London, 1992. 578 p.
7. *Справочник по специальным функциям* / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. М.: Наука, 1979. 832 с.
8. *Maximon L.C.* The dilogarithm function for complex argument // *Proc. R. Soc. Lond. A.* 2003. V. 459. P. 2807–2819 (open access [rspa.royalsocietypublishing.org](https://doi.org/10.1098/rspa.2003.1156)). <https://doi.org/10.1098/rspa.2003.1156>
9. *Hassani M.* Approximation of the dilogarithm function // *J. Inequal. Pure and Appl. Math.* 2007. V. 8. P. 1–3.
10. *Cvijović D.* New integral representations of the polylogarithm function // *Proc. R. Soc. A.* 2007. V. 463. P. 897–905. <https://doi.org/10.1098/rspa.2006.1794>
11. *Vigdorowitsch M.V., Tsygankova L.E., Prokhorenkov V.D.* // *J. Math. Chem.* 2020. <https://doi.org/10.1007/s10910-020-01133-2>
12. *Цыганкова Л.Е., Альшика Н., Вигдорович М.В., Запалкина И.В.* Анализ адсорбции ингибитора коррозии углеродистой стали в модельных пластовых водах посредством полилогарифмической изотермы. *Коррозия: материалы, защита.* № 1. 2021. В печати.

---

Vestnik Nacional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta “МИФИ”, 2020, vol. 9, no. 5, pp. 389–395

---

## Polylogarithmic Adsorption Isotherm at Surface Linear Energetic Heterogeneity

M. V. Vigdorowitsch<sup>a,c,d,#</sup>, L. E. Tsygankova<sup>b</sup>, and N. V. Shel'c

<sup>a</sup> *Angara GmbH, Düsseldorf, 40599 Germany*

<sup>b</sup> *Derzhavin Tambov State University, Tambov, 392000 Russia*

<sup>c</sup> *Tambov State Technical University, Tambov, 392000 Russia*

<sup>d</sup> *All-Russian Scientific Research Institute for the Use of Machinery and Oil Products in Agriculture, Tambov, 392022 Russia*

<sup>#</sup> *e-mail: dr.vigdorowitsch@angara-gmbh.de*

Received October 1, 2020; revised November 7, 2020; accepted November 24, 2020

**Abstract**—An exact solution for the monomolecular adsorption isotherm on the surface with linear energetic heterogeneity has been obtained. It is shown that the interpretation of numerous experimental data that were

earlier associated with a surface energy heterogeneity (the Temkin adsorption model) may require an extensive revision because of the existence of lengthy linear segments of an isotherm in semilogarithmic coordinates. The new properties of the isotherm are studied and the asymptotic and physical limiting cases have been considered. It has been shown that the surface energetic heterogeneity in the case of the polylogarithmic adsorption model is represented by two parameters: the energy dispersion, which is identical to the Temkin model heterogeneity parameter, and energy gradient. Depending on the sign of the latter, predatory surfaces are distinguished. For predatory surfaces, the greater the adsorption heat of the surface area, the larger the number of such surface domains. For temperate surfaces, the greater adsorption heat is inherent in fewer surface domains. Physically, the greater adsorption gradient “pushes” the system in the same direction as the greater energy dispersion but less pronouncedly. Similar to the Temkin adsorption model, a simplified form of the polylogarithmic isotherm is obtained for the case of “medium coverage” (the term by Temkin).

*Keywords:* adsorption, isotherm, Temkin

DOI: 10.1134/S2304487X20050156

### REFERENCES

- Langmuir I.J., The Adsorption of Gases on Plane Surfaces of Glass, Mica and Platinum, *Am. Chem. Soc.*, 1918, vol. 40, pp. 1361–1403.
- Temkin M.I., Adsorption Equilibrium und Kinetics of Processes on Heterogeneous Surfaces with Interaction between Adsorbed Molecules, *Zhurnal Fizicheskoy Khimii*, 1941, vol. 15, pp. 296–307.
- Šlygin A., Frumkin A., Über die Platinelektrode, *Acta Physicochimica URSS*, 1935, vol. 3, pp. 791–818.
- Borówko M., Adsorption on Heterogeneous Surfaces, in *Adsorption. Theory, Modeling, and Analysis*, J. Tóth, Ed., New York, Basel: Marcel Dekker, Inc., 2002, pp. 105–174.
- Adsorption. Theory, Modeling, and Analysis*, Ed. J. Tóth. New York, Basel: Marcel Dekker, Inc., 2002.
- Rudzinski W., Everett, D.H., *Adsorption of Gases on Heterogeneous Surfaces*, London: Academic Press, 1992. 578 p.
- Handbook of Mathematical Functions* Ed. Abramowitz M., Stegun T.A., Washington, DC: National Bureau of Standards, 1964.
- Maximon L.C., The dilogarithm function for complex argument, *Proc. R. Soc. Lond. A*, 2003, vol. 459, pp. 2807–2819 (open access [rspa.royalsocietypublishing.org](https://rspa.royalsocietypublishing.org)), DOI 10.1098/rspa.2003.1156.
- Hassani M., Approximation of the dilogarithm function, *J. Inequal. Pure and Appl. Math.*, 2007, vol. 8, pp. 1–3.
- Cvijović D., New integral representations of the polylogarithm function, *Proc. R. Soc. A*, 2007, vol. 463, pp. 897–905 DOI:10.1098/rspa.2006.1794.
- Vigdorowitsch M.V., Tsygankova L.E., Prokhorenkov V.D., *J. Math. Chem.*, 2020. DOI: 10.1007/s10910-020-01133-2
- Tsygankova L.E., Alshikha N., Vigdorowitsch M., Zarapina I.V., Analysis of adsorption of a carbon steel corrosion inhibitor in model stratum waters by means of a polylogarithmic isotherm, *Int. J. Corros. Scale Inhib.*, 2021, vol. 10, no. 1 (in print).