

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Ігор Миронович Мриглод  
Ірина Степанівна Бзовська

ВПЛИВ АДСОРБОВАНИХ ДОМШОК НА КАТАЛІТИЧНЕ ОКИСЛЕННЯ  
СО: МОДЕЛЬ ГРАТКОВОГО ГАЗУ

Роботу отримано 3 жовтня 2006 р.

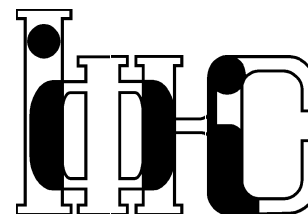
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантово-статистичної теорії процесів каталізу

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ  
ФІЗИКИ  
КОНДЕНСОВАНИХ  
СИСТЕМ

ICMP-06-17U

Мриглод І.М., Бзовська І.С.

ВПЛИВ АДСОРБОВАНИХ ДОМШОК НА КАТАЛІТИЧНЕ  
ОКИСЛЕННЯ СО: МОДЕЛЬ ГРАТКОВОГО ГАЗУ

ЛЬВІВ

УДК: 530.1; 535.37

PACS: 68.10JY, 82.65JV

### Вплив адсорбованих домішок на каталітичне окислення CO: модель ґраткового газу

Мриглод І.М., Бзовська І.С.

**Анотація.** В рамках ґраткової моделі досліджується каталітична реакція синтезу вуглекислого газу (оксиду вуглецю IV) з кисню та чадного газу (оксиду вуглецю II) із врахуванням присутності неактивних домішок і взаємодій на поверхні. Отримано систему рівнянь, що описує динаміку реакцій на поверхні каталізатора, та знайдено її розв'язки у наближенні середнього поля. Отримані результати проаналізовано в порівнянні з результатами, відомими в літературі.

### Effect of adsorbed impurities on catalytic CO oxidation: a lattice-gas model

Mryglod I.M., Bzovska I.S.

**Abstract.** On the basis of a lattice model catalytic reaction of carbon acid gas synthesis (carbon dioxide) from oxygen and carbon monoxide is investigated by incorporating the effect of inactive impurities and correlations between coadsorbates. The system of equations that describes the reaction dynamics on the surface is obtained. These equations are solved in the mean-field approximation and the results are analyzed in comparison with those known in the literature.

## 1. Вступ

Предметом даної роботи є дослідження каталітичної реакції синтезу вуглекислого газу (оксиду вуглецю IV) з кисню та чадного газу (оксиду вуглецю II) із врахуванням взаємодій на поверхні. Оксид вуглецю – отруйний газ і його нейтралізація шляхом каталітичного окислення має велике практичне значення. Цей процес важливий при вирішенні проблеми очистки атмосфери від вихлопних газів автомашин і інших забруднень, а також очистки технологічних газів (наприклад, водню) від оксиду вуглецю. З іншого боку, реакція окислення монооксиду вуглецю



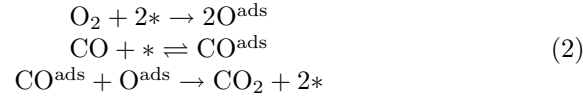
часто використовується у якості модельної для вирішення різних теоретичних питань.

Вивчення кінетики хімічних осциляцій у гетерогенному каталізі, зокрема в процесах оксидації CO [1–5], активно проводиться в останні роки. При моделюванні реакції окислення CO виходять із припущення про домінуючу роль механізму Лангмюра-Гіншелвуда, який передбачає можливість перебігу реакції за умови, коли обидві реагуючі речовини спочатку хемосорбувалися на поверхні. Проте, існує кілька моделей перебігу цієї реакції. Різні моделі враховують різні фактори, які можуть впливати на процес окислення CO. Зокрема, це такі процеси як дифузія [6–9], теплообмін [7, 10], врахування типу поверхні [11, 12], взаємодія між сусідами [13–15], роль приповерхневих шарів [16–21], вплив механізму Елея-Ріделя [22], реконструкція поверхні [23] тощо.

В основу теоретичних досліджень кінетики хімічних осциляційних реакцій оксидації CO покладають модель ZGB [24]. У даній роботі ми розглянемо можливість її узагальнення на випадок врахування присутності неактивних домішок і взаємодій на поверхні. Будемо виходити з наступних припущень. Вважатимемо, що реакція проходить лише на поверхні каталізатора, тобто взаємодії можливі лише між частинками, що адсорбовані на поверхні каталізатора. При цьому зазначимо таке: адсорбція кисню відбувається через процес його швидкого розпаду біля поверхні каталізатора на два атоми, кожен з яких самостійно сідає на окреме вільне активне місце; молекули вуглекислого газу сідають на поверхню і перебувають на ній, не розпадаючись на атоми. Перетворення частинок можливе лише в адсорбованому шарі.

## 2. Формулювання моделі

Запишемо рівняння реакцій, які можуть проходити при окисленні оксиду вуглецю на поверхні каталізатора:



де \* означає вільне активне місце на каталітичній поверхні. В ролі каталізатора вибрано просту кристалічну поверхню Pt(111) з домішками лужного металу – калію К, який є ефективним промовтером у багатьох промислово-важливих реакціях, зокрема це синтез амонію, гідрогенізація СО тощо. Нехай поверхня каталізатора моделюється як квадратна ґратка з  $N$  активних вузлів, кожен з яких може бути зайнятий або молекулою СО, або атомом кисню О. Введемо позначення для чисел заповнення  $i$ -того вузла:  $n_i^1$  для адсорбованої молекули СО і  $n_i^2$  для адсорбованого кисню, де  $n_i^l = [0, 1]$ . При цьому повинна виконуватись умова:  $n_i^1 + n_i^2 \leq 1$ . Специфікою реакції є те, що швидкості дифузії СО і О дуже відрізняються – молекули СО дуже рухливі на поверхні у порівнянні з адсорбованим киснем, який практично нерухомий. Тому слід розрізняти два різні випадки: високої і низької швидкості реакції.

У випадку, коли швидкості адсорбції і десорбції СО є вищими, ніж швидкість реакції окислення СО на поверхні, повільна зміна покриття поверхні киснем описується кінетичним рівнянням. Для цього процесу ми також враховуємо взаємодію між найближчими сусідами адсорбату.

$$\begin{aligned} H = & -(\mu_1 + h_1) \sum_i n_i^1 - (\mu_2 + h_2) \sum_i n_i^2 + w_1 \sum_{\langle i,j \rangle} n_i^1 n_j^1 \\ & + w_2 \sum_{\langle i,j \rangle} n_i^2 n_j^2 + \varepsilon_{12} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i^1 n_j^2, \end{aligned} \quad (3)$$

де  $\mu_1$  і  $\mu_2$  – хімічні потенціали адсорбованих СО і О відповідно,  $w_1$ ,  $w_2$ ,  $\varepsilon_{12}$  – енергії взаємодії між найближчими сусідами СО-СО, О-О і СО-О відповідно. Щоб врахувати вплив лужного металу на властивості поверхні, введено поля  $h_1$  і  $h_2$ . Зміна локальної енергії СО  $\delta\varepsilon_1 = \widetilde{h}_1 \langle n_{alkali} \rangle = -h_1$  з'являється через далекосяжні електростатичні взаємодії СО з лужним металом Li ( $\langle n_{alkali} \rangle$  означає покриття поверхні літєм). Аналогічно, зміна локальної енергії кисню  $\delta\varepsilon_2 = \widetilde{h}_2 \langle n_{alkali} \rangle = -h_2$ .

Така модель була запропонована Н. Павленко, П. Костробієм та іншими авторами у роботі [15]. Вони показали, що в кластерному наближенні кінетичні фазові діаграми ( $p_{\text{CO}}, 1/T$ ) містять бістабільну область. Як відомо, у стані бістабільності можливі різкі стрибки з однієї стійкої гілки на іншу. При наявності в системі змінної, що повільно змінюється в часі, виникають релаксаційні осциляції. В цій роботі ми розглянемо дану модель у наближенні середнього поля і покажемо, що область бістабільності існує і в цьому, простішому наближенні.

Розглянемо гамільтоніан системи в наближенні середнього поля. У даному наближенні реальні взаємодії частинок описуються дією на кожен частинку середнього поля, що не залежить від положення частинки та її найближчого оточення. Щоб перейти до наближення середнього поля, замінимо в гамільтоніані кожне з чисел  $n_i$  на

$$n_i^1 = \langle n^1 \rangle + \Delta n_i^1 \quad (4)$$

$$n_i^2 = \langle n^2 \rangle + \Delta n_i^2 \quad (5)$$

де  $\langle n^l \rangle = \langle n_i^l \rangle$  – середнє значення числа  $n_i^l$ . Це середнє внаслідок рівноправності всіх вузлів кристалічної решітки від номера вузла не залежить. Наближення середнього поля полягає в тому, що нехтують доданками, квадратичними щодо відхилень  $(\Delta n_i^l)^2$ . Така заміна дає:

$$w_1 \sum_{i,j} n_i^1 n_j^1 \simeq -w_1 N \langle n^1 \rangle^2 + 2w_1 \langle n^1 \rangle \sum_i n_i^1 \quad (6)$$

$$w_2 \sum_{i,j} n_i^2 n_j^2 \simeq -w_2 N \langle n^2 \rangle^2 + 2w_2 \langle n^2 \rangle \sum_i n_i^2 \quad (7)$$

$$\varepsilon_{12} \sum_{i,j} n_i^1 n_j^2 \simeq -\varepsilon_{12} \langle n^1 \rangle \langle n^2 \rangle N + \varepsilon_{12} \langle n^2 \rangle \sum_i n_i^1 + \varepsilon_{12} \langle n^1 \rangle \sum_i n_i^2 \quad (8)$$

В результаті гамільтоніан системи у наближенні середнього поля набере вигляду

$$H = -\widetilde{\mu}_1 \sum_i n_i^1 - \widetilde{\mu}_2 \sum_i n_i^2 + AN, \quad (9)$$

де введено наступні позначення:

$$A = -w_1 \langle n^1 \rangle^2 - w_2 \langle n^2 \rangle^2 - \varepsilon_{12} \langle n^1 \rangle \langle n^2 \rangle \quad (10)$$

$$\tilde{\mu}_1 = \mu_1 + h_1 - 2w_1 \langle n^1 \rangle - \varepsilon_{12} \langle n^2 \rangle \quad (11)$$

$$\tilde{\mu}_2 = \mu_2 + h_2 - 2w_2 \langle n^2 \rangle - \varepsilon_{12} \langle n^1 \rangle \quad (12)$$

Отже, залежність від чисел заповнення  $n_i$  у цьому гамільтоніані така ж сама, як і в гамільтоніані системи незваємодіючих частинок, що перебувають у зовнішньому силовому полі. Таким чином, гамільтоніан нашої системи є сумою одночастинкових гамільтоніанів, внаслідок чого велика статистична сума розпадеться на добуток одночастинкових великих статистичних сум:

$$\Xi_M = \prod_{i=1}^N \xi_i, \quad (13)$$

де

$$\xi_i = \sum_{n_i=0}^l \exp\left(-\frac{A - \tilde{\mu}_1 n_i^1 - \tilde{\mu}_2 n_i^2}{kT}\right) = e^{-\frac{A}{kT}} (1 + e^{\frac{\tilde{\mu}_1}{kT}} + e^{\frac{\tilde{\mu}_2}{kT}}). \quad (14)$$

Одночастинкова велика статистична сума не залежить від номера вузла, оскільки всі вузли однакові. Отже, велика статистична сума всієї системи дорівнює

$$\Xi = \xi_1^N = e^{-\frac{AN}{kT}} (1 + e^{\frac{\tilde{\mu}_1}{kT}} + e^{\frac{\tilde{\mu}_2}{kT}})^N, \quad (15)$$

звідки для великого термодинамічного потенціалу знаходимо

$$\Omega = -kT \ln \Xi = -Nw_1 \theta_1^2 - Nw_2 \theta_2^2 - \varepsilon_{12} \theta_1 \theta_2 N - kTN \ln \left[ 1 + \exp\left(\frac{\tilde{\mu}_1}{kT}\right) + \exp\left(\frac{\tilde{\mu}_2}{kT}\right) \right]. \quad (16)$$

Виходячи з цієї формули, можемо розрахувати всі термодинамічні функції системи в наближенні середнього поля.

Скориставшись термодинамічною формулою

$$\theta_i = -\frac{1}{N} \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \mu_i} \right)_T, \quad (17)$$

дістанемо наступну систему рівнянь для величин покриття  $\theta_i$ :

$$\theta_1 = \frac{\exp\left(\frac{\mu_1 + h_1 - 2w_1 \theta_1 - \varepsilon_{12} \theta_2}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{\mu_1 + h_1 - 2w_1 \theta_1 - \varepsilon_{12} \theta_2}{kT}\right) + \exp\left(\frac{\mu_2 + h_2 - 2w_1 \theta_2 - \varepsilon_{12} \theta_1}{kT}\right)}, \quad (18)$$

$$\theta_2 = \frac{\exp\left(\frac{\mu_2 + h_2 - 2w_2 \theta_2 - \varepsilon_{12} \theta_1}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{\mu_1 + h_1 - 2w_1 \theta_1 - \varepsilon_{12} \theta_2}{kT}\right) + \exp\left(\frac{\mu_2 + h_2 - 2w_1 \theta_2 - \varepsilon_{12} \theta_1}{kT}\right)}. \quad (19)$$

Рівняння для  $\theta_i$  є самоузгоджені, оскільки середня величина покриття є параметром розподілу, за допомогою якого обчислюють середнє.

У роботі [15] розглядаються два випадки, що відповідають умовам високої і низької швидкості реакцій. Розглянемо їх окремо. У випадку низької швидкості реакції в умовах високої швидкості дифузії СО його розподіл є рівноважним. З іншого боку, оскільки адсорбований кисень не перебуває у рівновазі, то часова еволюція кисневого покриття буде визначатися кінетичним рівнянням

$$\frac{d\theta_O}{dt} = 2p_{O_2} k_O s_O (1 - \theta_{CO} - \theta_O)^2 - k\theta_{CO}\theta_O, \quad (20)$$

Перший доданок описує хемосорбцію кисню на вузли поверхневої ґратки, а другий доданок відноситься до реакції окислення СО,  $p_{O_2}$  – питомий тиск кисню,  $k_O$  – частота зіткнень молекул кисню з поверхнею, а  $s_O$  – так званий коефіцієнт прилипання. Коефіцієнт  $k$  характеризує швидкість реакції і  $k = k_{CO_2} \exp(-\beta E_0)$ , де  $E_0$  – енергія активації реакції. Адсорбція кисню є дисоціативною, тому швидкість десорбції є дуже низькою, і нею можна знехтувати. Щоб проаналізувати стійкі стани такої модельної системи, необхідно розв'язати рівняння  $d\theta_O/dt = 0$  разом з рівняннями (18) – (19) і знайти середні покриття СО і кисню.

У випадку, коли швидкість реакції є вищою, ніж швидкість адсорбції і десорбції СО, величину покриття СО аналізуємо з кінетичного рівняння, що включає процеси адсорбції та десорбції СО і реакцію окислення. Часова еволюція СО покриття:

$$\frac{d\theta_{CO}}{dt} = p_{CO} k_{CO} s_{CO} (1 - \theta_{CO} - \theta_O) - d\theta_{CO} - k\theta_{CO}\theta_O, \quad (21)$$

де  $d = d_0 \exp(-\beta E_d)$  – швидкість десорбції СО. Припускаємо, що локальний рівноважний розподіл СО зумовлений високою швидкістю дифузії СО. Щоб проаналізувати стійкі стани, треба розв'язати систему рівнянь  $d\theta_O/dt = 0$  і  $d\theta_{CO}/dt = 0$  разом з рівняннями (18) – (19) відносно величин покриття СО і кисню. Крім того, щоб проаналізувати залежності покриття обох реагуючих адсорбатів від  $p_{CO}$ , можна припустити, що газ СО біля поверхні є ідеальним і використати наступне співвідношення між питомим тиском і хімічним потенціалом:  $p_{CO} = (kT)^{5/2} (m_{CO}/2\pi\hbar^2)^{3/2} \exp[(\mu_1 - \Delta\varepsilon_1)/kT]$ , де  $m_{CO}$  – маса молекули СО. Додатковий параметр  $\Delta\varepsilon_1$  зумовлений

різницею хімічних потенціалів і одночастинкової енергії в газоподібному і адсорбованому стані. Величина  $\Delta\varepsilon_1$  може бути знайдена з експериментальних даних.

### 3. Результати

Розглянемо спершу випадок низької швидкості реакції і дослідимо для нього середні покриття CO і O в залежності від  $\mu_{CO}$ . На Рис. 1 зображено випадок присутності домішок на поверхні ( $h_1/|w_1| = -0.3$ ,  $h_2 = 0$ ) разом з відповідними залежностями для поверхні Pt без лужного металу. Нами вибрані такі параметри моделі:  $E_0 = 8.2$

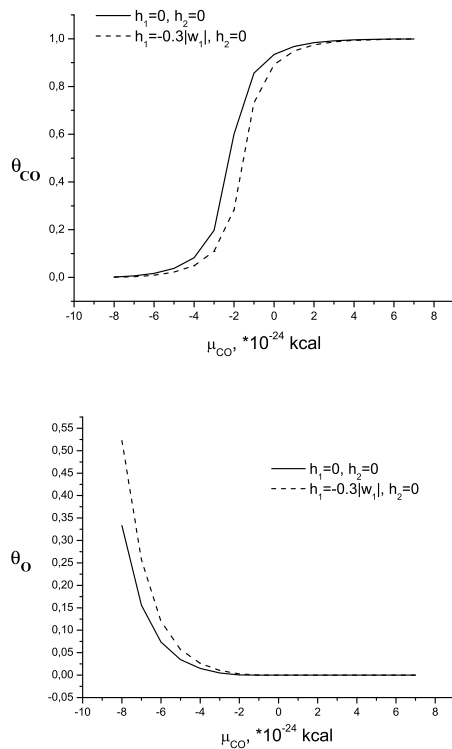


Рис. 1. Середні покриття CO і кисню при  $T=466$  К як функції  $\mu_{CO}$ .

ккал/моль,  $\varepsilon_{12} = 1.72$  ккал/моль,  $w_1 = -1.32$  ккал/моль з припу-

щенням про відштовхувальний характер взаємодій для CO-O і притягальний характер CO-CO. Для інших параметрів моделі вибиралися такі значення:  $k_{CO_2} = 3 \cdot 10^6 c^{-1}$ ,  $k_O = 7.8 \cdot 10^5 c^{-1} \text{Торр}^{-1}$ ,  $s_O = 0.06$ , що відповідають Pt(111) поверхні.

Врахування домішок лужного металу, як видно з Рис. 1, відповідає збільшенню локальної енергії CO  $\delta\varepsilon_1 = -h_1$ , що веде до делокалізації адсорбованого CO і, як результат, до зменшення CO покриття. Незважаючи на відсутність локалізованого поля ( $h_2 = 0$ ), зменшення покриття CO супроводжується значним збільшенням покриття O у порівнянні з випадком  $h_1 = h_2 = 0$ . Таким чином, з одного боку, далекосяжні поля, викликані лужним металом, ведуть до делокалізації CO з відповідним пониженням CO покриття. З іншого боку, цей процес супроводжується адсорбцією кисню і відповідним збільшенням кисневого покриття.

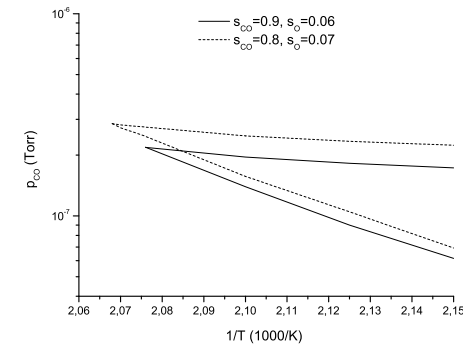


Рис. 2. Фазові діаграми  $(p_{CO}, 1/T)$  для різних величин  $s_{CO}$  і  $s_O$ .

У випадку високої швидкості реакції використовувалися наступні значення для модельних параметрів, що знаходилися з умови узгодження теоретичних результатів, отриманих в рамках кластерного наближення [15], з експериментом:  $\varepsilon_{12} = 1.9$  ккал/моль,  $w_1 = -1.27$  ккал/моль,  $E_0 = 7.9$  ккал/моль,  $E_d = 36$  ккал/моль,  $k_{CO} = 7 \cdot 10^6 c^{-1} \text{Торр}^{-1}$ ,  $d_0 = 2 \cdot 10^{16} c^{-1}$ ,  $s_{CO} = 0.9$ . Знайдені параметри показують на існування CO-CO притягання. По аналогії з попереднім (низька швидкість реакції) випадком, враховано ефект лужного металу через вплив електростатичних полів  $h_1$  і  $h_2$ . Крім того, відповідно до відомих експериментальних результатів можна врахувати зміну коефіцієнтів прилипання для CO і кисню, спричи-

нену наявністю лужного металу. Відповідна фазова діаграма зображена на Рис. 2 для двох випадків:  $s_{CO} = 0.9$ ,  $s_O = 0.06$  і  $s_{CO} = 0.8$ ,  $s_O = 0.07$ .

З Рис. 2 видно, що при високій швидкості реакції характер розв'язків змінюється – виникає бістабільна область. Як бачимо, біфуркацію розв'язку можна спостерігати і в наближенні середнього поля. Зауважимо, що для випадку  $s_{CO} = 0.8$ ,  $s_O = 0.07$  спостерігаємо зміщення бістабільної області до області вищих тисків  $p_{CO}$ .

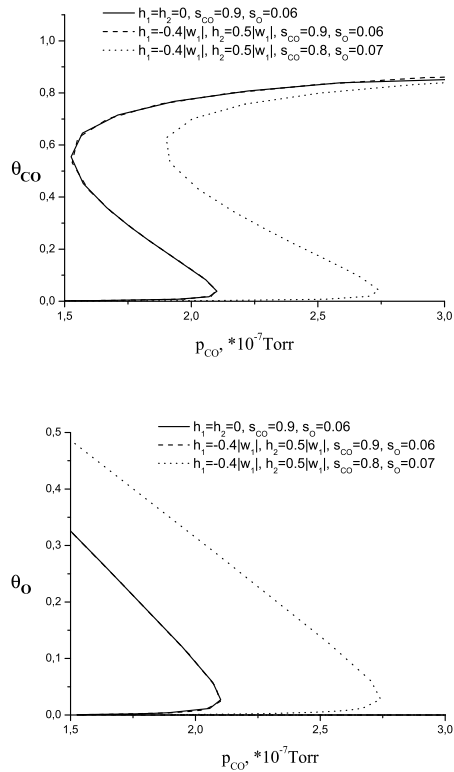


Рис. 3. Середні покриття CO і кисню при  $T=466$  К як функції  $p_{CO}$  для різних величин  $h_1$ ,  $h_2$ ,  $s_{CO}$  і  $s_O$ .

Важливою характерною особливістю отриманих результатів є те, що просте врахування електростатичних полів  $h_1$  і  $h_2$  практично не змінює області бістабільності, тоді як її значне зміщення з'являється

переважно через зміну коефіцієнтів прилипання. Це добре видно на Рис. 3, де зображено залежності покриття CO і O від тиску  $p_{CO}$  для різних наборів коефіцієнтів прилипання.

Цікаво також знайти у цьому ж наближенні нижню межу коефіцієнтів прилипання  $s_{CO}$  і  $s_O$ , при яких існує область бістабільності. Як видно з Рис. 4,  $s_{CO} = 0.09$ ,  $s_O = 0.008$  є критичними величинами, коли ще існує біфуркація розв'язку. При менших значеннях  $s_{CO}$  і  $s_O$  область бістабільності зникає.

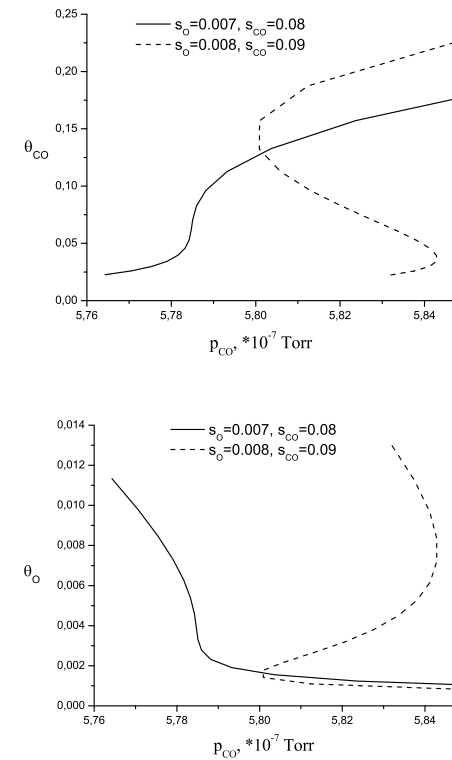


Рис. 4. Середні покриття CO і кисню при  $T=466$  К як функції  $p_{CO}$  для різних величин  $s_{CO}$  і  $s_O$ .

Отже, зміна  $s_{CO}$  і  $s_O$ , зумовлена наявністю лужного металу, відіграє важливу роль у випадку високої швидкості реакції. Аналогічно до першого випадку – повільної реакції, зміщення діаграми при вра-

хуванні домішок лужного металу знову супроводжується зменшенням покриття CO і збільшенням покриття кисню, що узгоджується з експериментальними результатами.

Як бачимо, незважаючи на те, що модель спрощена, не враховує ряду ефектів, а вплив лужних домішок враховано лише через далекосяжні електростатичні поля  $h_l$  та зміну коефіцієнтів прилипання  $s_l$ , вона досить добре описує характерні риси реакції окислення монооксиду вуглецю на поверхні. Варто зазначити, що бістабільна область, яка спостерігається у кластерному наближенні, існує і в наближенні середнього поля у випадку, коли швидкість реакції є значно вищою, ніж швидкість адсорбції-десорбції CO. Для низької швидкості реакції біфуркація розв'язку у цьому наближенні не спостерігається. У випадку високої швидкості реакції зміщення на діаграмі з'являється насамперед через зміну коефіцієнтів прилипання, спричинену впливом лужного металу. До зміни значень електростатичних полів  $h_l$  результати розрахунків точки біфуркації практично нечутливі. Незважаючи на сильне відштовхування CO-O, делокалізація CO супроводжується збільшенням кисневого покриття.

## Література

1. Zhdanov V.P., Surf.Sci. 500, 966 (2002).
2. Levine H. and Zou X., Phys.Rev.E 48, No.1, 50 (1993).
3. Chavez F. and Vicente L., Perera A. and Moreau M., J.Chem.Phys.109, No.19, 8617 (1998).
4. Lund C.D., Surko C.M., Maple M.B., and Yamamoto S.Y., J.Chem.Phys.108, No.13, 5565 (1998).
5. Suchorski Yu., Beben J., Imbihl R., James E.W., Lin Da-Jiang and Evans J.W., Phys.Rev.B 63, No.16, 165417 (2001).
6. Grandi B.C.S. and Figueiredo W., Phys.Rev.E 65, 036135 (2002).
7. Nekhamkina O., Digilov R., Sheintuch M., J.Chem.Phys. 119, 2322 (2003).
8. Ehsasi M., Matloch M., Frank O., Block J.H., Christmann K., Rys F.S., Hirschwald W., J. Chem. Phys. 91, 4949 (1989).
9. Evans J.W., J. Chem. Phys. 98, 2463 (1993).
10. Cisternas Y., Holmes Ph., Kevrekidis I.G., Li X., J.Chem.Phys.118, 3312 (2003).
11. Peskov N.V., Slinko M.M., Jaeger N.I., J.Chem.Phys. 116, 2098 (2002).
12. Meakin P., Scalapino D.J., J.Chem.Phys. 87, 731 (1987).

13. Bagnoli F., Sente B., Dumont M., Dagonnier R., J.Chem.Phys. 94, 777 (1991).
14. Satulavsky J., Albano E.V., J.Chem.Phys. 97, 9490 (1992).
15. Pavlenko N., Kostrobij P.P., Suchorski Yu., Imbihl R., Surf.Sci.489, 29 (2001).
16. Khan K.M., Yaldram K., Khalifeh J., Khan M.A., J.Chem.Phys. 106, 8890 (1997).
17. Khan K.M., Ahmad N., Physica A 280, 391 (2000).
18. Khan K.M., Yaldram K., Surf.Sci. 445, 186 (2000).
19. Khan K.M., Surf.Sci. 470, 155 (2000).
20. Ahmad N., Khan K.M., Chem.Phys. 263, 339 (2001).
21. Chavez F., Vicente L., Perera A., J.Chem.Phys. 113, 10353 (2000).
22. Meakin P., J.Chem.Phys. 93, 2903 (1990).
23. Imbihl R., Ertl G., Chem.Rev. 95, 697 (1995).
24. Ziff R.M., Gulari E., Barshad Y., Phys.Rev.Lett. 56, 2553 (1986).

# CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

**AIMS AND SCOPE:** The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

---

**ABSTRACTED/INDEXED IN:**

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- “Referativnyi Zhurnal”
- “Dzherelo”

---

**EDITOR IN CHIEF:** Ihor Yukhnovskii

**EDITORIAL BOARD:** T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Freiburg*; R. Folk, *Linz*; D. Henderson, *Provo*; Yu. Holovatch, *Lviv*; M. Holovko, *Lviv*; O. Ivankiv, *Lviv*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; H. Krienke, *Regensburg*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod, *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; N. Plakida, *Dubna*; G. Röpke, *Rostock*; Yu. Rudavskii, *Lviv*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; M. Vavrukh, *Lviv*; A. Zagorodny, *Kyiv*.

**CONTACT INFORMATION:**

Institute for Condensed Matter Physics  
of the National Academy of Sciences of Ukraine  
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine  
Tel: +380(322)760908; Fax: +380(322)761158  
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua    <http://www.icmp.lviv.ua>