

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-01-37U

I.V.Стасюк, К.Д.Товстюк*, О.В.Величко

ГРАТКОВА МОДЕЛЬ АДСОРБЦІЇ ДИПОЛЬНИХ
ЧАСТИНОК В ПОРИСТОМУ СЕРЕДОВИЩІ

*Науково-технологічний центр Інституту проблем матеріалознавства
НАН України, Львів, вул. Патона, 1

ЛЬВІВ

Граткова модель адсорбції дипольних частинок в пористому середовищі

І.В.Стасюк, К.Д.Товстюк, О.В.Величко

Анотація. Розглядається адсорбція дипольних частинок на поверхні часток макроскопічного розміру або на внутрішній поверхні пористого матеріалу, утвореній сукупністю поверхонь різної геометричної форми (наприклад, адсорбція груп OH⁻ на поверхні перехідного металу (Ni, Fe) чи кремнезему SiO₂). Таке середовище моделюється системою сфер або часток з плоскими гранями. Для вивчення рівноважних умов осідання дипольних частинок використовується граткова модель. Враховано наявність зовнішнього електричного поля, прикладеного у заданому напрямі. У певній області значень хімічного потенціалу адсорбту та поля відбуваються різкі зміни ступеня покриття поверхні, сумарної поляризації і діелектричної сприйнятливості, які можуть мати характер фазових переходів першого роду.

Lattice model of adsorption of dipole particles in porous medium

I.V.Stasyuk, K.D.Tovstyuk, O.V.Velychko

Abstract. An adsorption of dipole particles onto the surface of macroscopic size bodies or onto the internal surface of the porous material formed by a set of surfaces with various geometrical forms is investigated in the present work (e.g. adsorption of OH⁻ groups onto the surface of the transition metal (Ni, Fe) or silica SiO₂). Such a medium is modelled by a system of spheres or bodies with facets. The lattice model is used for investigation of the equilibrium conditions of the dipole particles deposition. The presence of the external electric field applied in the given direction is taken into account. In the certain interval of values of the chemical potential of adsorbate and the field sharp changes of the state of surface fullness, total polarization and dielectric susceptibility which could be realized as the first order phase transitions.

Подається в *Physica Status Solidi (b)*

Submitted to *Physica Status Solidi (b)*

© Інститут фізики конденсованих систем 2001

Institute for Condensed Matter Physics 2001

1. Вступ

Розглядається задача про адсорбцію дипольних частинок (наприклад, іонних груп OH^-) на внутрішній та зовнішній поверхні пористого металічного матеріалу. Прикладом такого об'єкта може бути кераміка, утворена спіканням часток металу мікроскопічних розмірів. Поява нескомпенсованого сумарного електричного дипольного моменту окремої частки може суттєвим чином визначати її поведінку у зовнішньому електричному полі. У випадку Fe чи Ni такі частки досягають середнього діаметра від 0.6 до 1.1 μ . Як показують квантовохімічні розрахунки [1, 2], адсорбція груп OH^- на поверхні Fe чи Ni характеризується орієнтацією групи нормально до поверхні (в рівноважному положенні іон водню розташовується далі від поверхні, а іон кисню – близче). Виникаючий дипольний момент складає при цьому ~ 1.61 D для адсорбції на поверхні Ni та ~ 1.46 D у випадку поверхні Fe. Кераміка моделюється системою часток, які випадковим чином доторкаються. Поверхні часток утворюють внутрішні поверхні пор.

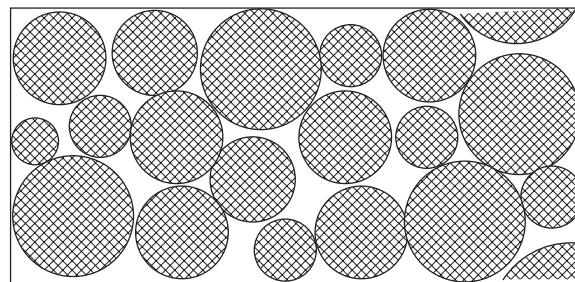


Рис. 1. Схематичне зображення структури пористого середовища (випадок сфер).

Зазначимо, що подібний підхід може бути використаний і при моделюванні адсорбції іонів OH^- в порах, що існують в композитних матеріалах, утворених на базі аморфного SiO_2 . Як показують квантово-хімічні розрахунки [1, 2], а також дані вимірювань в інфрачервоній області спектру [3], осідання груп OH^- на поверхні SiO_2 супроводжується появою нормальної до поверхні складової електричного дипольного моменту (середній момент на групу OH^- складає ~ 1.6 D).

У зв'язку з вищесказаним у даній роботі розв'язується задача про осідання дипольних іонних груп (іонів OH^-) на поверхні окремої

частки. Форма частки може бути довільною, хоча при розрахунках бралися найпростіші випадки (частки у вигляді сфери або паралелепіпеда). Досліджується розподіл адсорбованих частинок на поверхні при наявності зовнішнього електричного поля з врахуванням взаємодії між частинками. Проведено розрахунки середнього дипольного моменту частки, досліджено поверхневі внески до діелектричної сприйнятливості. Вплив оточуючого середовища (газової атмосфери чи водного розчину) враховано через відповідні зміни хімічного потенціалу адсорбата). Проаналізовано роль форми часток і їх розмірів при формуванні умов, за яких неоднорідне електричне поле може суттєвим чином визначати їх динаміку.

2. Модельний опис системи

Для дослідження рівноважних умов осідання дипольних частинок на поверхнях часток використовується граткова модель [4]. Вважається, що при адсорбції іонні групи локалізуються в певних позиціях, що утворюють регулярну структуру типу двовимірної кристалічної гратки (це підтверджено даними квантовохімічних розрахунків [1, 2], у яких досліджувалися адіабатичні потенціали для адсорбованих частинок – груп OH^-). Враховано, що дипольні моменти іонних груп орієнтуються перпендикулярно до поверхні. Приймається до уваги наявність зовнішнього електричного поля, прикладеного у певному напрямі (у більшості випадків це вісь OZ).

З врахуванням парних взаємодій між частинками адсорбату гамільтоніан задачі має вигляд

$$H = \sum_i H_i - \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} n_i n_j, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} H_i &= (E_i - \mu)n_i, \\ E_i &= -h \cos \theta_i, \\ h &= Ed. \end{aligned} \quad (2)$$

Тут i – індекс позиції на поверхні; n_i – числа заповнення дипольних частинок; d – дипольний момент частинки (іонної групи), адсорбованої на поверхні; μ – хімічний потенціал адсорбата в оточуючому середовищі; E_i – енергія дипольних частинок на поверхні у діючому полі з напруженістю E ; θ_i – кут між вектором диполя і вектором поля \vec{E} .

Взаємодія V_{ij} включає диполь-дипольну та непряму (через електронну підсистему базового матеріалу, на якому відбувається адсорбція) складові. Вважається, що $V_{ij} > 0$; це відповідає взаємодії притягання.

У наближенні середнього поля гамільтоніан (1) спрощується і набуває форми

$$H_{\text{MF}} = \frac{N}{2} V \bar{n}^2 + \sum_i (E_i - \mu - V \bar{n}) n_i. \quad (3)$$

Тут $\bar{n} = \frac{1}{N} \sum_i \bar{n}_i$ – загальне середнє число заповнення позицій для адсорбованих частинок (яке має зміст ступеня покриття поверхні); $0 \leq \bar{n} \leq 1$; \bar{n}_i – середнє число заповнення певної позиції

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\beta(E_i - V \bar{n} - \mu)} + 1}; \quad (4)$$

N – загальне число позицій на поверхні вибраної частки.

Параметр \bar{n} визначається у даному випадку з рівняння

$$\bar{n} = \frac{1}{N} \sum_i \frac{1}{e^{\beta(E_i - \mu - V \bar{n})} + 1}. \quad (5)$$

Зазначимо, що розв'язок цього рівняння дає рівноважне значення ступеня покриття поверхні, що відповідає мінімуму термодинамічного потенціалу

$$\Omega = -\Theta \ln Z = \frac{N}{2} V \bar{n}^2 - \Theta \sum_i \ln \left(1 + e^{-\beta(E_i - \mu - V \bar{n})} \right). \quad (6)$$

Виходячи з формули (6), легко записати вирази для поздовжньої складової (паралельної до поля \vec{E}) повного дипольного моменту частинки (з розрахунку на одну позицію):

$$M_z = -\frac{\partial \Omega}{\partial h} \frac{1}{N} = \frac{1}{N} \sum_i \frac{\cos \theta_i}{e^{\beta(-h \cos \theta_i - \mu - V \bar{n})} + 1} \quad (7)$$

та поздовжньої діелектричної сприйнятливості

$$\chi_{zz} = \frac{\partial M_z}{\partial h}, \quad (8)$$

тобто

$$\chi_{zz} = \chi_{zz}^0 + \beta^2 V \frac{A_{(1)}^2}{1 - \beta V A_{(0)}}, \quad (9)$$

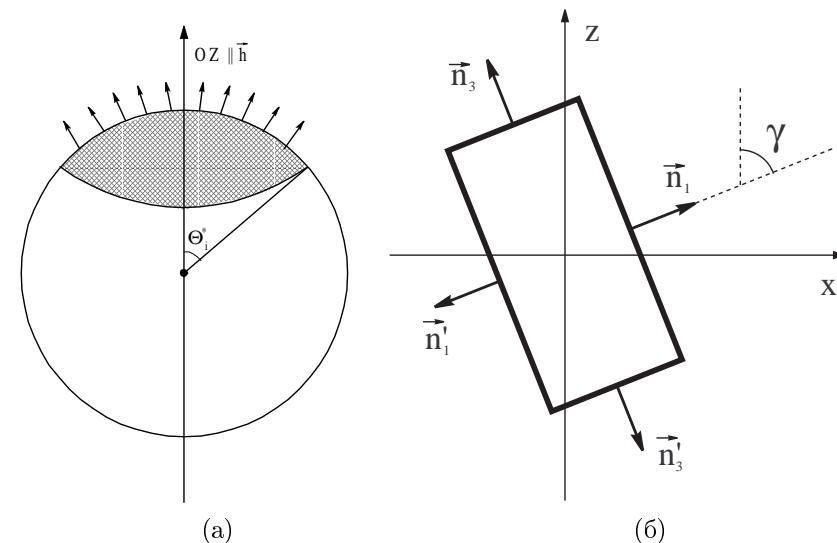


Рис. 2. Сфера (а) і паралелепіпед (б) з дипольними частинками на поверхні у електричному полі. Для спрощення розрахунків вибрано орієнтацію граней паралелепіпеда 2 і 2' перпендикулярно до осі y .

де

$$\begin{aligned} \chi_{zz}^0 &= \beta A_{(2)}, \\ \beta A_{(n)} &= \frac{1}{N} \sum_i \cos^n \theta_i \frac{e^{\beta(-h \cos \theta_i - \mu - V \bar{n})}}{[e^{\beta(-h \cos \theta_i - \mu - V \bar{n})} + 1]^2}. \end{aligned}$$

З виразу (4) для \bar{n}_i , який має характер розподілу Фермі, випливає можливість часткового заповнення поверхні диполями. При певних співвідношеннях між параметрами h , V і μ існує критичний кут θ^* , що при низьких температурах ($T \sim 0$) розмежовує заповнені адсорбованими частинками та пусті області поверхні

$$\theta^* = \arccos \frac{\alpha}{h}, \quad (10)$$

де $\alpha = -\mu - \frac{V}{2} + V \xi$; $\xi = \frac{1}{2} - \bar{n}$. При $\theta < \theta^*$ $\bar{n}_i \approx 1$; при $\theta > \theta^*$ $\bar{n}_i \approx 0$ (див. рис. 1а, де це проілюстровано для поверхні сфери).

Підсумовування по позиціях при розрахунках за формулами (5)–

(9) здійснюється за допомогою функції розподілу $\rho(x)$:

$$\frac{1}{N} \sum_i \Phi(d_i) = \int dx \rho(x) \Phi(x); \quad \rho(x) = \frac{1}{N} \sum_i \delta(x - \cos \theta_i). \quad (11)$$

Вигляд цієї функції залежить від форми поверхні, на якій відбувається адсорбція. У випадку сферичних часток

$$\rho(x) = \frac{1}{2}, \quad x \in [-1, 1]. \quad (12)$$

Для дископодібних часток (при орієнтації осі диска вздовж поля \vec{E})

$$\rho(x) \approx \frac{1}{2} [\delta(x-1) + \delta(x+1)]; \quad (13)$$

для голкоподібних часток (розташованих вздовж поля)

$$\rho(x) \approx \delta(x); \quad (14)$$

для напівсфер (коли напрям поля \vec{E} є віссю обертання напівсфери)

$$\rho(x) = \frac{1}{2} \delta(x+1) + \rho_1(x); \quad \rho_1(x) = \frac{1}{2}, \quad x \in [0, 1]; \quad (15)$$

врешті, для поверхні у вигляді паралелепіпеда

$$\rho(x) = \sum_k \frac{S_k}{S} \delta(x - \cos \gamma_k), \quad (16)$$

де γ_k - кут між напрямком поля і нормальню до k -ї грані; S_k - площа k -ї грані; $S = \sum_k S_k$ - загальна площа поверхні паралелепіпеда.

При використанні функції розподілу $\rho(x)$ маємо

$$\frac{\Omega}{N} = \frac{V}{2} \bar{n}^2 - \theta \int_{-1}^1 dx \ln \left(1 + e^{-\beta(\alpha-hx)} \right) \rho(x). \quad (17)$$

Рівняння (5), що визначає ступінь покриття $\bar{n} = 1/2 - \xi$, представляється у формі

$$\xi = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \rho(x) \operatorname{th} \frac{\beta}{2} (\alpha - hx) dx; \quad (18)$$

відповідно, поздовжні компоненти дипольного моменту і сприйнятливості будуть

$$\begin{aligned} M &= \int_{-1}^1 dx \frac{x \rho(x)}{e^{\beta(\alpha-hx)} + 1}, \\ \chi_{zz} &= \frac{1}{\theta} \int_{-1}^1 dx \frac{x^2 \rho(x) e^{\beta(\alpha-hx)}}{(e^{\beta(\alpha-hx)} + 1)^2}. \end{aligned} \quad (19)$$

Зазначимо, що при відсутності поля ($\vec{E} = 0; h = 0$) покриття поверхні є рівномірним (число заповнення позиції \bar{n}_i не залежить від її розташування). Сумарний середній дипольний момент і сприйнятливість даються при цьому інтегралами

$$\begin{aligned} M_z &= \frac{1}{e^{\beta\alpha} + 1} \int_{-1}^1 x \rho(x) dx, \\ \chi_{zz}^0 &= \frac{1}{\theta} \frac{e^{\beta\alpha}}{(e^{\beta\alpha} + 1)^2} \int_{-1}^1 x^2 \rho(x) dx, \\ A_{(n)} &= \frac{e^{\beta\alpha}}{(e^{\beta\alpha} + 1)^2} \int_{-1}^1 x^n \rho(x) dx, \end{aligned} \quad (20)$$

звідки видно, що $M = 0$, якщо $\rho(x)$ є парною функцією (що має місце у випадку фігур, які володіють центральною симетрією). Сприйнятливість досягає максимальних значень при $\alpha \sim 0$, тобто при $\mu \sim -\frac{V}{2} + V\xi = -V\bar{n}$.

Подібно до наведеного розраховуються поперечні компоненти сумарного дипольного моменту частки з певною формою поверхні. Зокрема

$$\begin{aligned} M_x &= \frac{1}{N} \sum_i \frac{\sin \theta_i \cos \varphi_i}{e^{\beta(-h \cos \theta_i - \mu - V\bar{n})} + 1}; \\ M_y &= \frac{1}{N} \sum_i \frac{\sin \theta_i \sin \varphi_i}{e^{\beta(-h \cos \theta_i - \mu - V\bar{n})} + 1}. \end{aligned} \quad (21)$$

Якщо ввести функцію розподілу

$$g(x, y) = \frac{1}{N} \sum_i \delta(x - \cos \theta_i) \delta(y - \cos \varphi_i), \quad (22)$$

причому

$$\rho(x) = \int dy g(x, y), \quad (23)$$

то

$$\begin{aligned} M_x &= \int dx \int dy \frac{\sqrt{1-x^2}yg(x, y)}{e^{\beta(\alpha-hx)}+1}; \\ M_y &= \int dx \int dy \frac{\sqrt{1-x^2}\sqrt{1-y^2}g(x, y)}{e^{\beta(\alpha-hx)}+1}. \end{aligned} \quad (24)$$

Як приклад, наведемо вигляд функції $g(x, y)$ для випадку сферичної поверхні

$$g(x, y) = \frac{1}{2\bar{n}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1-x^2-y^2}}. \quad (25)$$

3. Розрахунок діелектричних функцій системи

Наведеним вище виразам відповідають середній дипольний момент, що припадає на одиницю об'єму пористого середовища

$$\widetilde{M} = dN_{cp}M$$

та діелектрична сприйнятливість

$$\tilde{\chi} = \frac{d^2 N_{cp}}{\varepsilon_0 V} \chi,$$

де $N_{cp} = \frac{\pi a^2}{a_0^2} \cdot \frac{12}{\sqrt{2}a^3}$. Тут перший множник визначає (для сферичних часток) число позицій для адсорбата на поверхні сфери з діаметром a ; другий характеризує кількість сфер даного розміру в одиниці об'єму у випадку щільної (типу гексагональної) упаковки. Параметр a_0 визначає середню віддаль між найближчими позиціями адсорбованих частинок на поверхні сфер.

При числових розрахунках взято наступні значення параметрів: $d = 1.7 \text{ D} \dots 2.7 \text{ D} = (5.6 \dots 9) \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м}$; $a = 10^{-7} \dots 10^{-6} \text{ м}$; $a_0 = 3 \cdot 10^{-10} \text{ м}$; $V = 0.01 \dots 0.02 \text{ eB}$. При цьому

$$\begin{aligned} d \cdot N_{cp} &= (0.6 \cdot 10^5 \dots 0.9 \cdot 10^6) \text{ Кл} \cdot \text{м}, \\ \frac{d^2 N_{cp}}{\varepsilon_0 V} &= \begin{cases} 0.36 \dots 1.17 & a_0 = 10^{-6} \text{ м}, \\ 3.6 \dots 11.7 & a_0 = 10^{-7} \text{ м}. \end{cases} \end{aligned}$$

У подальшому використовувались безрозмірні відношення θ/V , h/V , $d \cdot E/V$ та $E_0 = -\mu/V$. Значенням $kT/V = 1$, $d \cdot E/V = 1$, $\mu/V = 1$

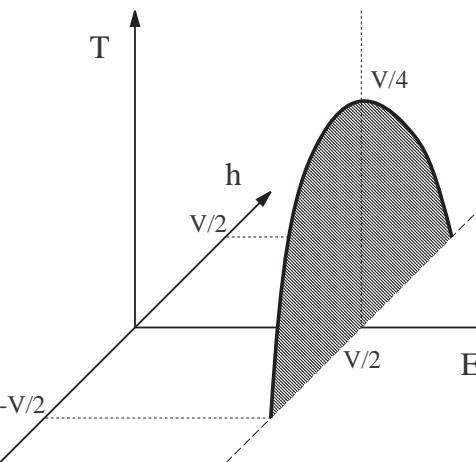


Рис. 3. Поверхня фазових переходів; лінія критичних точок позначена товстою лінією (випадок сфер).

відповідають $T = 116 \text{ K}$, $E = 10^4 \text{ В/см}$, $\mu = 0.01 \text{ eB}$ при $V = 0.01 \text{ eB}$; $\varepsilon_0 = 100$. Для паралелепіпеда вибрано такі відношення граней: $S_1/S = 1/14$, $S_2/S = 1/7$, $S_3/S = 2/7$.

Рівняння (18) розв'язувалось числовим способом при використанні функції розподілу у вигляді (12) (випадок сферичної поверхні) та (16) (поверхня у вигляді сукупності плоских граней). Термодинамічно стійкі розв'язки відбиралися з умови абсолютноного мінімуму термодинамічного потенціалу (17).

3.1. Випадок сфери

Результати, отримані у випадку сферичної поверхні, подані на рис. 3–7. При нульовому полі має місце фазовий перехід 1-го роду, при якому зміна параметра $E_0 = E_i - \mu$ викликає стрибок ступеня покриття \bar{n} (при $T = 0, \Delta\bar{n} = 1$), що відповідає ефекту кооперативної адсорбції. Фазовий перехід зникає при критичній температурі $\Theta_c = V/2$. При $h \neq 0$ даний перехід продовжує існувати до критичного поля $h_c = V/2$. Лінія критичних точок лежить в площині $E_0 = V/2$ і визначається рівнянням

$$\Theta_c = \frac{h}{2 \operatorname{Arth}(2h/V)}. \quad (26)$$

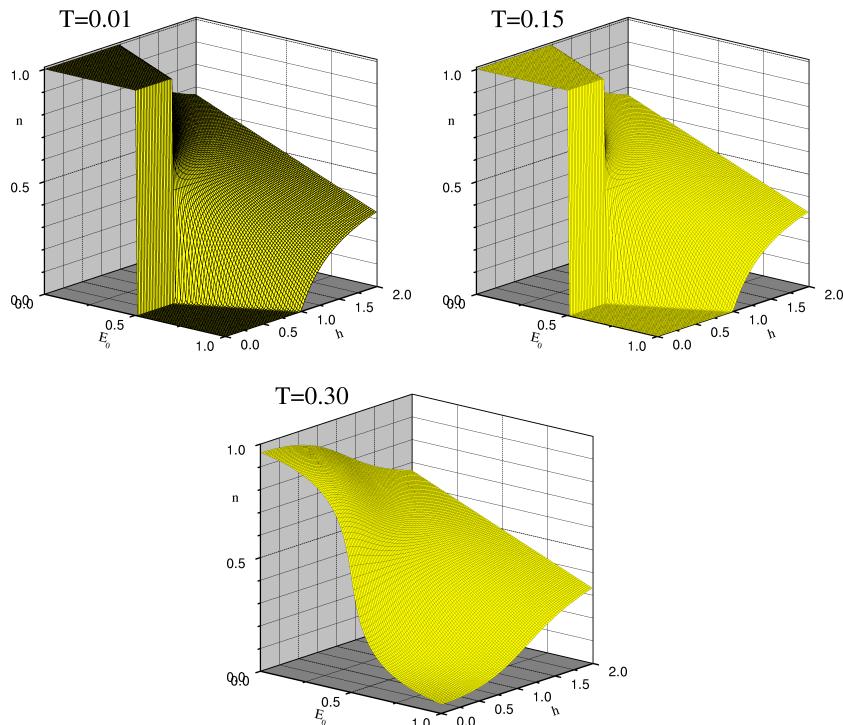


Рис. 4. Залежність середньої заселеності від величини поля та E_0 при різних температурах.

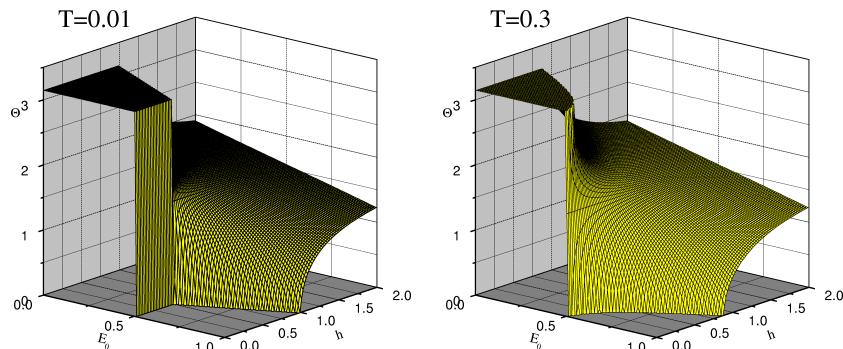


Рис. 5. Залежність величини кута θ , що розмежовує заповнену та порожню області на сфері, від величини поля та E_0 при різних температурах.

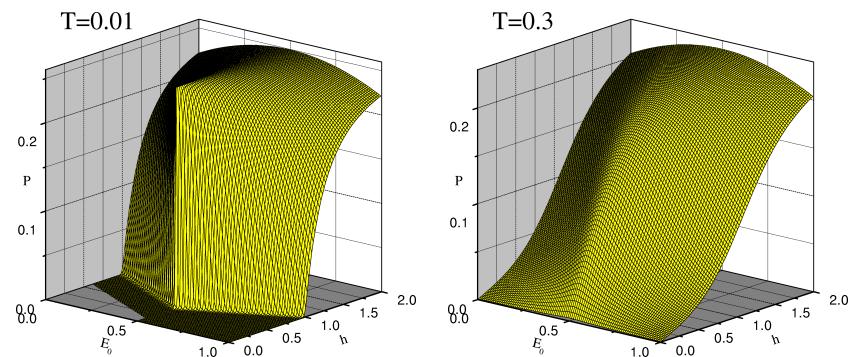


Рис. 6. Залежність сумарної поляризації M від величини поля та E_0 при різних температурах.

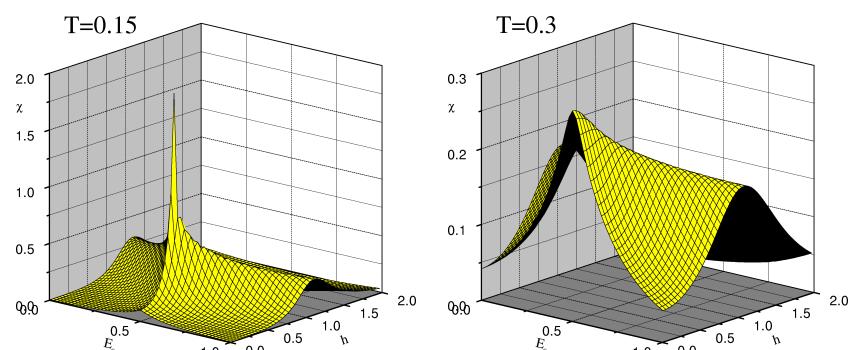


Рис. 7. Залежність сприйнятливості χ від величини поля та E_0 при різних температурах.

При $h > h_c$ стрибкоподібна зміна \bar{n} замінюється на плавну; при великих полях \bar{n} прямує до половинного заповнення. Подібні висновки стосуються і граничного кута θ^* (рис. 5). В області проміжних значень \bar{n} (чи кута θ^*) середній дипольний момент найбільший і швидко зменшується при прямуванні \bar{n} до нуля або одиниці. Поздовжня сприйнятливість χ_{zz} також зростає в цій області, маючи розбіжність на лінії критичних точок (26).

3.2. Випадок паралелепіпеда

З метою спрощення розрахунків грані паралелепіпеда 2 і 2' зафіксовано перпендикулярно до осі y (див. Рис. 2б). Це, однак, не впливає на загальність отриманих результатів. Розраховані для даного випадку термодинамічні функції ілюструють рис. 8–10.

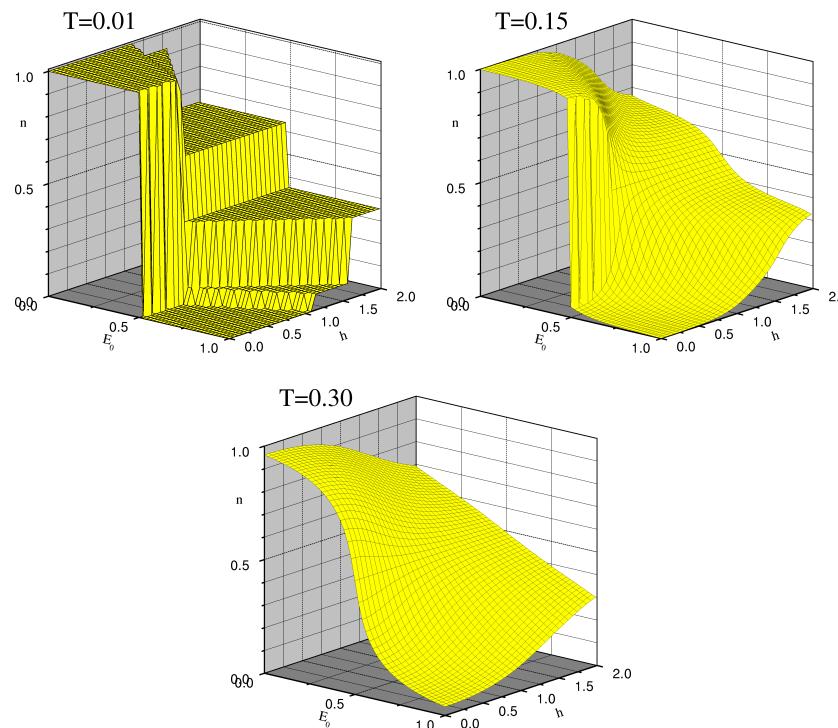


Рис. 8. Залежність середньої заселеності від величини поля та величини E_0 при різних температурах ($\gamma = \pi/6$).

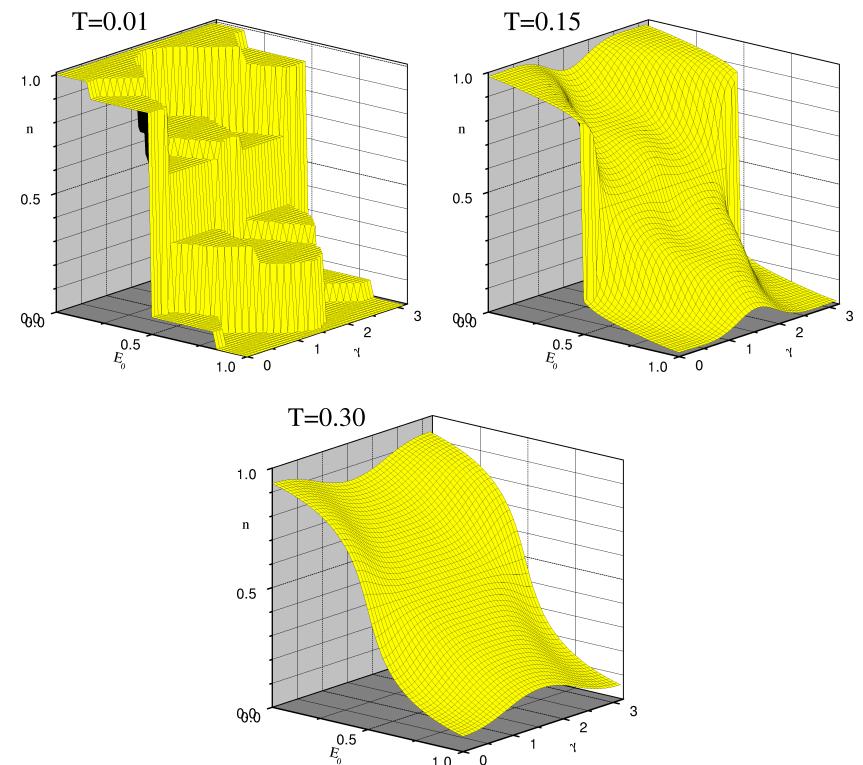


Рис. 9. Залежність середньої заселеності від орієнтації паралелепіпеда та величини E_0 при різних температурах ($h = 0.8$).

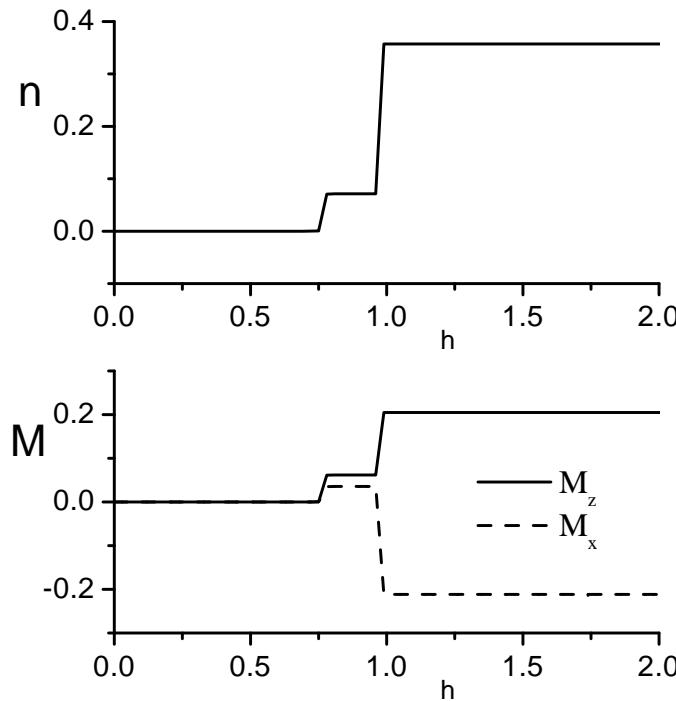


Рис. 10. Залежність заселеності та компонент сумарної поляризації від величини поля ($T = 0.01, \gamma = \pi/6, E_0 = 0.7$).

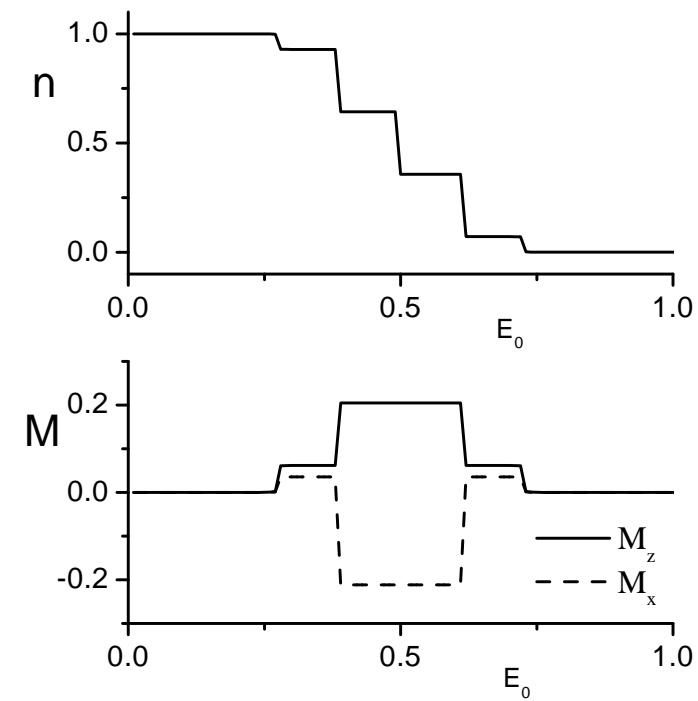


Рис. 11. Залежність заселеності та компонент сумарної поляризації від величини E_0 ($T = 0.01, \gamma = \pi/6, h = 0.8$).

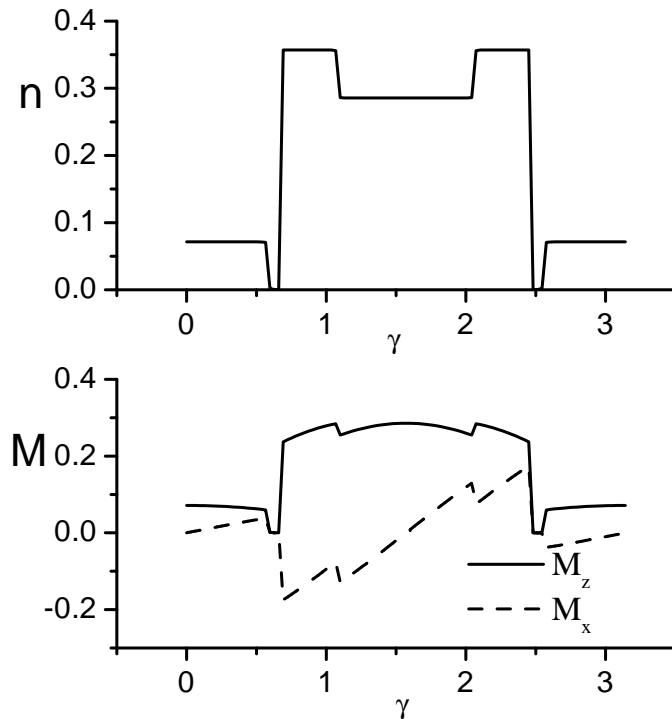


Рис. 12. Залежність заселеності та компонент сумарної поляризації від орієнтації паралелепіпеда ($T = 0.01$, $h = 0.8$, $E_0 = 0.7$).

В області нульового та малих значень поля h картина заселеності поверхні є подібною до випадку сфери. Має місце фазовий перехід 1-го роду при $E_0 = V/2$ зі стрибком \bar{n} (при $T < T_c$). Однак, в області $h > h_c$ плавна зміна параметра \bar{n} в залежності від E_0 перетворюється при низьких T в послідовність декількох фазових переходів. Області існування проміжних фаз розширяються при рості h . Таке розщеплення фазового переходу є характерним для поведінки ізингоподібних систем у випадковому полі [5] для полімодальних розподілів $\rho(x)$ (моделі з симетричним бімодальним та тримодальним розподілами досліджувались в ряді робіт, див. [6–10]). Зміна орієнтації паралелепіпеда також приводить до стрибків середньої заселеності \bar{n} (це відповідає заселенню адсорбатом чи вивільненню від адсорбата окремих граней) (рис. 9). Стрибкоподібний перерозподіл адсорбата супроводжується відповідними змінами сумарної поляризації M (рис. 10–12).

4. Висновки

Запропоновано просту і ефективну модель для опису рівноважного процесу адсорбції частинок з дипольним моментом на дрібнодисперсні частки у зовнішньому електричному полі. Ця ж модель застосована і до опису адсорбції на внутрішній поверхні пор у пористому середовищі (коли ця поверхня моделюється як сукупність фрагментів певної геометричної форми). Виходячи з припущення про певну форму часток, отримано вирази для ступеня покриття поверхні частинками адсорбату та діелектричних характеристик моделі (сумарна поляризація та статична діелектрична сприйнятливість) у залежності від зовнішніх параметрів (напруженість електричного поля, хімічний потенціал частинок і температура). На їх основі проведено розрахунки поверхневих внесків у статичну поляризацію та діелектричну сприйнятливість системи.

З отриманих результатів, представлених в графічному вигляді, видно, що у вузькій області значень хімічного потенціалу та поля $h = d \cdot E$ відбуваються різкі зміни ступеня покриття поверхні, середньої поляризації і сприйнятливості. Така поведінка має місце при частковому заповненні дипольними частинками поверхні сфер при адсорбції. Кут θ^* , що визначає це заповнення, може змінюватись практично стрибкоподібно від 0 до π , або більш плавно, але достатньо швидко при невеликих змінах хімічного потенціалу груп OH^- в оточуючому середовищі. Значення діючого поля E може визначатись як діелектричною сталою ϵ_0 , так і товщиною Δ приповерхне-

вого (приелектродного) шару, в якому відбувається основне падіння напруги. При малих значеннях Δ ефект підсилення поля може досягати 2–3 порядки.

Щодо особливостей діелектричних властивостей паралелепіпеда з дипольними частинками на поверхні, то характерним є ступінчастий характер залежностей. Це по'язане з тим, що всі вузли на певній грані паралелепіпеда перебувають в однакових умовах, отже їх заселення/звільнення відбувається стрибкоподібно. Неізотропність паралелепіпеда викликає появу поперечної складової поляризації. Оскільки зміна величини поля викликає складний перерозподіл дипольних частинок на гранях, то поперечні складові поляризації можуть приймати від'ємні значення.

Виявлене явище часткового осідання дипольних частинок (груп OH^-) на поверхню в пористій кераміці повинно впливати на її емісійні характеристики і може бути важливим при дослідженні оптимальних режимів експлуатації пристрій з пористими електродами.

З другого боку, адсорбція дипольних частинок на наночастках SiO_2 може суттєво змінювати їх діелектричні характеристики і впливати на динаміку таких часток у зовнішніх полях.

Робота виконана за часткового сприяння фонду НТЦУ (Проект № 818).

Література

- Стасюк І.В., Стеців Р.Я., Дулепа І.Р. Дослідження адсорбції водню, азоту та гідроксогрупи OH^- на поверхні перехідних металів. Препринт Інституту фізики конденсованих систем НАН України, ІФКС-01-04У, Львів, 2001, 19 с.; ЖФД, 2001, том 5, № 4 (в другі).
- Стасюк І.В., Стеців Р.Я., Дулепа І.Р., Сизоненко Ю.В. Адсорбція кисню, водню, азоту та гідроксогрупи OH^- на поверхні заліза, окислів заліза FeO , Fe_2O_3 та окислу кремнію SiO_2 . Препринт Інституту фізики конденсованих систем НАН України, ІФКС-01-33У, Львів, 2001, 24 с.
- Glinka Yu.D. // Phys. Rev. B, 2000, vol. 62, p. 4733.
- Pardee W.J., Mahan G.D. // J. Solid State Chem., 1975, vol. 15, p. 310.
- Imry Y. // J. Stat. Phys, 1984, vol. 34, p. 849.
- Aharony A. // Phys. Rev. B, 1978, vol. 18, p. 3318.
- Kaneyoshi T. // JMMM, 1995, vol. 151, p. 45.
- Bobak A., Maćko P. // JMMM, 1992, vol. 109, p. 172.

- Mattis D.C. // Phys. Rev. Lett., 1985, vol. 55, p. 3009.
- Kaufman M., Klunzinger P.E., Khurani A. // Phys. Rev. B, 1986, vol. 34, p. 4766.

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 Васильович Стасюк
Корній Денисович Товстюк
Олег Володимирович Величко

ГРАТКОВА МОДЕЛЬ АДСОРБЦІЇ ДИПОЛЬНИХ ЧАСТИНОК В
ПОРИСТОМУ СЕРЕДОВИЩІ

Роботу отримано 28 грудня 2001 р.

Затверджено до друку Вченуою радиою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України
© Усі права застережені