

ІНСТИТУТ  
ФІЗИКИ  
КОНДЕНСОВАНИХ  
СИСТЕМ

ICMP-23-02U

В.В. Ігнатюк

ДО ФЕНОМЕНОЛОГІЧНОЇ МОДЕЛІ  
УТВОРЕННЯ МІКРОТРИЩИН

ЛЬВІВ

УДК: 539.3; 539.5

PACS: 46.50.+a, 62.20.mt, 83.60.Uv

### До феноменологічної моделі утворення мікротріщин

В.В. Ігнатюк

**Анотація.** Розглянуто модифіковану модель Гріффітса для опису утворення мікротріщин (МТ) при врахуванні термоактивованої поверхневої дифузії частинок матеріалу тріщини по її краях. Детально проаналізовано випадки, коли всередину мікроефекту потрапляє чужорідна частинка (*guest*-частинка), яка може не лише розштовхувати краї МТ, а і формувати певні міжатомні зв'язки притягальної природи з материнськими (*host*)-частинками, що формують екстер'єр мікроефекту. Результати отримано як шляхом числових розрахунків, так і у вигляді певних аналітичних виразів. Останнє дозволяє з'ясувати причини тієї чи іншої поведінки характерних довжин, глибин потенціальних ям на профілях повної поверхневої енергії МТ, що залишаються поза увагою при використанні лише числових методів.

### On the phenomenological model of microcracks formation

V.V. Ignatyuk

**Abstract.** A modified Griffiths model was considered for the description of microcracks (MCR) formation with taking into account the thermally activated surface diffusion of particles along the crack edges. We analyzed in detail a case when the foreign *guest*-particle enters the microdefect. This particle can not only push the edges of MCR apart, but also form certain interatomic bonds of an attractive nature with the parent *host*-particles, that form the exterior of the microdefect. The results are obtained both by numerical calculations and in the form of certain analytical expressions. The latter makes it possible to find out the reasons for a peculiar behavior of the characteristic lengths and depths of the potential wells on the profiles of the total surface energy of MCR, which remain out of frame when using the numerical methods only.

Подается в Журнал фізичних досліджень  
Submitted to Journal of Physical Studies

© Інститут фізики конденсованих систем 2023  
Institute for Condensed Matter Physics 2023

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/>)

Василь Васильович Ігнатюк

До ФЕНОМЕНОЛОГІЧНОЇ МОДЕЛІ УТВОРЕННЯ МІКРОТРИЩИН

Роботу отримано 22 листопада 2023 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

## 1. Вступ

Дослідження дефектоутворення у твердих тілах, незважаючи на свою довгу та успішну історію [1–3], все ще залишається привабливим та перспективним як для теоретиків [4], так і експериментаторів [5], а протягом останніх десятиліть – і для експертів в області комп'ютерного моделювання [6]. Такі дослідження мають і прикладне значення, дозволяючи вивчати прикладні аспекти міцності матеріалів [7] в різних зовнішніх умовах, включаючи високі температури, поля деформацій та/або радіації [8, 9].

З експериментальних досліджень відомо [5], що тріщиноутворення як у пластичних, так і крихких твердих матеріалах протікає через зародження, ріст та подальше злиття порожнин субмікронних масштабів. Можна стверджувати з великою достовірністю, що ці нанопустоти виникають в областях пониженої концентрації матеріалу, наприклад, у непорядкованих ділянках всередині локальних треків [8] після прольоту радіонуклідів. У таких областях матеріал чинить опір можливій зміні локального об'єму, що веде до появи помітних механічних напружень. Таким чином, непорядковані або пошкоджені ділянки накопичують внутрішні напруження, які поширилися перед початковим мікроефектом і призводять до його швидкого розвитку, коли розмір мікротріщини (МТ) наближається до певного критичного значення. І хоча миттєвого руйнування матеріалу зазвичай не відбувається внаслідок ослаблення міжатомних зв'язків, вмикається механізм сповільненої деструкції, пов'язаний з термоактивацією внутрішніх напружень [10–12] та можливою гетерогенністю твердих тіл.

Швидкий розвиток комп'ютерних можливостей дозволяє моделювати поширення дефектів у режимі реального часу [6]. Однак комп'ютерне моделювання, незважаючи на всі свої численні переваги, включаючи можливість повної візуалізації процесів руйнування, може бути корисними для опису тріщиноутворення лише у певних структурованих твердих тілах, для яких відомі міжатомні потенціали та матеріальні характеристики речовини. В якості певної альтернативи можна застосувати статистико-механічний підхід. Деякі з таких методів є строгими [13, 14], інші базуються на певних напівфеноменологічних підходах [1, 10, 11].

З цієї точки зору найбільш перспективними уявляються т. зв. гібридні моделі [7], коли невелика внутрішня область (порядку кількох міжатомних відстаней) характеризується напівемпіричним потенціалом, а зовнішня область інтерпретується як пружне середовище у

дво- або тривимірному просторі. Це дозволяє поєднувати точні методи статистичної механіки та основні ідеї теорії пружності для обчислення таких спостережуваних характеристик, як часи нуклеації та росту, час руйнування, критичні значення полів напружень тощо. У даній главі ми розглядатимемо саме такі моделі, які ґрунтуються на комбінації точних статистико-механічних методів та деяких модельних підходів. Нашим завданням є дослідження утворення МТ у твердих тілах в полі зовнішніх та внутрішніх напружень, оцінка енергій їх зародження та росту, умов їх стійкості та розподілу за характерними довжинами.

Спочатку ми розглянемо модифіковану модель Гріффітса для опису утворення МТ при врахуванні термоактивованої поверхневої дифузії частинок матеріалу тріщини по її краях (або, як часом кажуть, берегах). Далі ми отримаємо значення для мінімальної  $L_{min}$  та максимальної  $L_{max}$  довжини МТ при заданні міжчастинкової сили взаємодії певної форми. У розділі 4 будуть розглянуті випадки, коли всередину мікрodefекту потрапляє чужорідна частинка (*guest*-частинка), яка може не тільки розштовхувати береги МТ, а і формувати певні міжатомні зв'язки притягальної природи з материнськими (*host*)-частинками, що формують екстер'єр мікрodefекту. Оскільки більшість результатів розділу 4 отримані внаслідок числових розрахунків, і детальні причини тієї чи іншої поведінки характерних довжин, глибин потенціальних ям на профілях повної поверхневої енергії МТ тощо залишаються поза розглядом, у наступному розділі буде проведено детальний аналіз отриманих результатів на основі точних чи наближених аналітичних співвідношень. Це може слугувати вказівником на шляху прогнозування тріциноутворення в твердих тілах та керування ним через задіяння певних мікроскопічних механізмів та зміну матеріальних характеристик. В останньому розділі будуть підбиті основні підсумки проведених досліджень.

## 2. Модифікована модель Гріффітса тріциноутворення в твердих тілах

У рамках більшості мезоскопічних підходів вважається, що основним механізмом утворення МТ є термоактивація внутрішніх напружень. Згідно теорії Гріффіта [1] для  $2D$  моделі дефекту, при прикладанні розтягуючих напружень МТ передається енергія

$$U(\sigma, L) = \gamma L - \frac{\sigma^2 L^2}{2E}, \quad (2.1)$$

де перший доданок відповідає енергії, яку необхідно затратити для створення мікрodefекту довжини  $L$ , а другий описує зміну енергії пружного середовища при утворенні МТ. Параметри рівн. (2.1) мають наступний зміст:  $E$  означає модуль Юнга, а  $\gamma$  – енергію, яку слід затратити для утворення МТ одиничної площі. Її значення з достатньою точністю можна апроксимувати як  $\gamma = Ea$ , де  $a$  – міжатомна відстань.

У роботі [10] розглядалась еліптична МТ з віссю  $Ox$ , спрямованою вздовж мікрodefекту,

$$y(x) = d\sqrt{1 - (x/L)^2}, \quad d = \sigma L/E, \quad (2.2)$$

з великою напіввіссю  $L$  та малою  $d$ . Зазвичай вважається, що деформація  $\varepsilon = \sigma/E \ll 1$ , отже максимальне розкриття МТ  $d$  є набагато меншим за її довжину.

Максимальне значення енергії МТ (2.1) визначає критичну довжину мікрodefекту

$$L_{max} = \gamma E/\sigma^2 = a/\varepsilon^2. \quad (2.3)$$

При досягненні МТ довжини  $L_{max}$  відбувається швидке руйнування твердого тіла.

Для означення іншої характерної довжини  $L_{min}$  зробимо логічне припущення, що мінімальне розкриття МТ не може бути меншим, ніж міжатомна відстань. Тоді з рівн. (2.2) негайно впливає наступна оцінка для мінімальної довжини МТ:

$$L_{min} = aE/\sigma \equiv a/\varepsilon \gg a. \quad (2.4)$$

Для подальшого розгляду нам необхідно означити ще одну характерну величину, пов'язану з утворенням та розвитком мікрodefектів. Вважатимемо, що в деякій точці з координатою  $x = L - S(L)$  розкриття МТ дорівнює міжатомній відстані. В науковій літературі вводиться поняття кінчикова область (*tip zone*) МТ [10, 11], і довжину цієї області  $S(L)$  для профілю (2.2) легко оцінити з умови  $y(L - s(L)) = a$ , що дає

$$s(L) \approx \frac{a^2}{\varepsilon^2 L}. \quad (2.5)$$

Очевидно, що поверхнева дифузія частинок всередину кінчкової зони неможлива. Ріст МТ відбуватиметься лише тоді, коли довжина мікрodefекту  $L(t)$  збільшується з часом не менше ніж на  $s(L)$ .

У протилежному випадку, якщо  $L(t + \Delta t) - L(t) < s(L)$ , дифузійні процеси, що призводять до перебудови периферії тріщини (і які уповільнюють заліковування дефекту), стають неможливими, і термічно активовані флуктуації можуть вести до спонтанного закриття МТ [10]. Час  $\Delta t$ , який необхідний для росту МТ на довжину  $s(L)$ , у найвищому порядку за деформаціями можна оцінити як  $\Delta t(L) \sim \exp[\gamma s(L)/k_B T]$ . Відповідно, швидкість направленої росту мікродефекту можна записати як  $v(L) = s(L)/\Delta t(L) \sim \exp[-\gamma s(L)/k_B T]$ . В області не надто високих температур, час росту МТ ми можемо оцінити як

$$\tau_{\text{growth}} = \int_{L_{\min}}^{L_{\max}} \frac{dL}{v(L)} \approx \tau_{01} \exp\left[\frac{Ea^2}{k_B T}\right] + \tau_{02} \exp\left[\frac{Ea^2}{k_B T \varepsilon}\right]. \quad (2.6)$$

Перший доданок у (2.6) з'являється на нижній інтегральній межі та має порядок поверхневої енергії кінчкової зони. Другий член має той самий порядок за деформацією, що й енергія нуклеації МТ  $E_{\text{nucl}} = U(\sigma, L_{\min}) = Ea^2/\varepsilon$ . Таким чином, можна зробити висновок: якщо враховується спрямована термоактивована дифузія, часи зародження та росту мають один і той же порядок, і є в  $\varepsilon^{-1}$  разів меншими за значення, передбачені теорією Гріффітса [1]. Рівняння (2.6), як показано в [11], добре описують еволюцію мікропорожнин (або кластерів вакансій). Експериментальні дослідження показують [5], що саме за таким механізмом (нуклеації, росту та коалесценції пустот всередині крихких твердих тіл) відбувається дефектоутворення.

### 3. Вплив взаємодії між краями МТ на її характерні розміри

Слід зауважити, що профіль МТ у вигляді (2.2) вибирався лише з певних модельних міркувань [10]. Немає фізичних причин [3] для того, щоб похідна  $dy(x)/dx$  розбігалася при  $x = L$ . Навпаки, експериментальні [6, 7] та теоретичні дослідження [3, 14] показують, що зона країв МТ є достатньо гострою незалежно від механізмів її формування. Згідно моделі Френкеля [2], уявімо що два береги МТ знають рівномірної розтягуючої деформації під впливом зовнішніх полів. Міжатомну взаємодію між краями МТ (на одиницю довжини)

<sup>1</sup>Цікаво зауважити, що мінімальна довжина МТ  $L_{\min}$  має такий самий скейлінг за деформацією, як і  $E_{\text{nucl}}$ , див. рівн.(2.4). З іншого боку, такий самий порядок має відношення максимальної та мінімальної довжин МТ,  $L_{\max}/L_{\min} \sim 1/\varepsilon$ .

можна вибрати у формі

$$f(y(x)) = \frac{E}{a} y(x) \exp\left[-\frac{y(x)}{a}\right]. \quad (3.1)$$

Очевидно, що не існує однозначних критеріїв вибору такої взаємодії [7], і у подальшому ми розглядатимемо складніші проте більш реалістичні типи взаємодії між краями МТ. Тим не менше, зробивши вибір на користь (3.1), можна обчислити енергію, яку слід затратити на розштовхування берегів тріщини на відстань  $y(x)$  один від одного,

$$\gamma(y) = \int_0^y f(y') dy' = Ea[1 - (y/a + 1) \exp(-y/a)]. \quad (3.2)$$

Експериментальні дослідження показують [7], що поверхнева енергія тривимірної МТ є порядку кількох меВ при значеннях модуля Юнга 10 ГПа, і рівн. (3.2) узгоджується з такими оцінками при  $\gamma(y \rightarrow \infty)$ .

Зазвичай, для пошуку точного профілю мікродефекту слід розв'язати задачу статички пружно деформованого твердого тіла [3] у наближенні суцільного середовища. Наприклад, уявляючи формування мікродефекту як незначний згин (вибраного) прямокутного паралелепіпеда всередині твердого тіла, слід розв'язати краєву задачу

$$EI \frac{d^4 y(x)}{dx^4} + cf(y(x)) - c\sigma = 0, \quad (3.3)$$

$$y(-L) = y(L) = y'(-L) = y'(L) = 0,$$

де  $2L$  означає довжину МТ,  $b$  – висоту та  $c$  – ширину, причому момент інерції такого стержня становить  $I = cb^3/12$ .

Зрозуміло, що нелінійне диференціальне рівняння (3.3) можна розв'язати лише числовим способом. Однак, якщо вважати, що міжатомна взаємодія є малою,  $f(y) \ll \sigma$ , можна опустити другий доданок у (3.3) та отримати наступний аналітичний вираз для профілю МТ:

$$\tilde{y}(x) = \frac{\varepsilon(\tilde{x}^2 - \tilde{L}^2)^2}{24\tilde{I}}, \quad (3.4)$$

де введено безрозмірні величини  $\tilde{y} = y/a$ ,  $\tilde{x} = x/a$  і  $\tilde{I} = \tilde{c}\tilde{b}^3/12$ . Таким чином, рівн. (3.4) визначає МТ з максимальним розкриттям

$$\tilde{y}(0) = \frac{\varepsilon\tilde{L}^4}{24\tilde{I}}. \quad (3.5)$$

Зрозуміло, що нехтування силою взаємодії між берегами МТ у рівн. (3.3) вносить деякі зміни у профіль  $y(x)$ . Однак, якщо розглядати МТ з достатньо великим розкриттям, поправки до  $y(x)$  будуть незначними і заторгнуть виключно зону країв МТ. І хоча поверхнева дифузія, яка модифікує вершинну зону [10, 11], є найбільш суттєвою в околі  $x = \pm L$ , у подальшому ми зосередимось на наближеній аналітичній формі профілю МТ. Саме таке спрощення дозволить нам якісно а часом і кількісно оцінити, які частини більш реалістичних (і складніших) потенціалів взаємодії відповідають за формування локальних мінімумів на кривих повної енергії МТ. Це дозволить дати певні рекомендації щодо поведінки з метастабільними мікродефектами всередині твердих тіл.

В кінці даного розділу спробуємо отримати деякі кількісні характеристики мікродефектів, профіль яких описується рівн. (3.4). Енергію, яка вивільняється при формуванні МТ, можна асоціювати з пружною енергією плоского перерізу,

$$U_1(\varepsilon, L) = -\frac{1}{2}\sigma \int_{-L}^L dx y(x) = -\frac{\varepsilon^2 E a^2 L^5}{45I}. \quad (3.6)$$

Надалі ми будемо опускати знак тільди для всіх просторових характеристик у їх безрозмірній формі. Енергію міжатомного притягання між берегами МТ при великих  $L$  можна записати як

$$U_2(\varepsilon, L) = \int_{-L}^L \gamma(y(x)) dx \approx 2Ea^2 \left( L - \frac{3\sqrt{\pi}}{8L} \sqrt{\frac{24I}{\varepsilon}} \right). \quad (3.7)$$

Перший доданок у (3.7) пов'язаний з  $\gamma(\infty)$  і має фізичний зміст енергії повністю розкритої МТ; другий член описує зміну поверхневої енергії внаслідок взаємодії між краями МТ.

У протилежному випадку малих  $L$  можна записати наступні розвинення:

$$U_2(\varepsilon, L) \approx 2Ea^2 \left[ \frac{64}{315} \left( \frac{\varepsilon}{24I} \right)^2 L^9 - \frac{1024}{9009} \left( \frac{\varepsilon}{24I} \right)^3 L^{13} \right], \quad (3.8)$$

які визначають нелінійну залежність  $U_2(\varepsilon, L)$  на малих відстанях. Як було показано у роботі [15], повна енергія  $U(\varepsilon, L) = U_1(\varepsilon, L) + U_2(\varepsilon, L)$  має мінімум при

$$\tilde{L} = \left( \frac{35I}{2} + \frac{6125I}{297}\varepsilon \right)^{1/4} \quad (3.9)$$

та максимум при

$$L_c = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{24I} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{24I}{\varepsilon}}. \quad (3.10)$$

Значення (3.10) отримано на основі пошуку максимуму повної енергії, де для її другої складової використовувався асимптотичний вираз (3.7). Мікродефекти завдовжки  $L \geq L_c$  приводять до дуже швидкого руйнування матеріалу. Водночас МТ завдовжки  $\tilde{L}$  дуже швидко заліковуються, оскільки при незначних деформаціях їх розміри набагато менші за

$$L_{\min} = (24I/\varepsilon)^{1/4}. \quad (3.11)$$

Останнє значення отримується з виразу (3.4) шляхом прирівнювання його до одиниці. Крім того, корисно отримати вираз для довжини кінчкової зони МТ, який визначається зі співвідношення  $y(L - s(L)) = 1$ , і дорівнює

$$s(L) \approx \frac{1}{2L} \sqrt{\frac{24I}{\varepsilon}} = \frac{1}{2} \frac{L_{\min}^2}{L}. \quad (3.12)$$

Незважаючи на свою простоту, формула (3.12) має глибокий фізичний зміст: при не надто малих деформаціях  $\varepsilon$  довжина кінчкової зони є малою для довгих МТ, що певною мірою підтверджує слушність нехтування другим доданком у рівнянні статички (3.3) і представлення профілю мікродефекту у вигляді (3.4).

Насамкінець зауважимо, що процеси термоактивованої дифузії в рамках модифікованої теорії Гріффітса, про які йшлося в розділі 2, не будуть предметом наших подальших досліджень. Далі ми зосередимось на аналізі профілю повної поверхневої енергії МТ при різних типах взаємодій між її берегами. Лише в кінці розділу 5 ми ненадовго повернемося до цього питання.

#### 4. Проникнення чужорідних частинок всередину мікродефектів

Зрозуміло, що в реальних твердих тілах можливі не тільки процеси поверхневої дифузії всередині МТ за участю материнських частинок (*host*-частинок), а також проникнення всередину мікродефекту чужорідних частинок (*guest*-частинок). У такому випадку поверхнева енергія МТ послаблюється внаслідок розриву міжатомних зв'язків під впливом як певних деструктивних чинників (наприклад, через радіаційне опромінення зразка), так і суто геометричних ефектів



розштовхування берегів *guest*-частинкою при збільшенні розкриття МТ, яке вже дозволить чужорідній частинці зайти в цей мікродфект. Можлива також і протилежна ситуація хімічної модифікації граней МТ, що призводить до утворення певних місткових зв'язків між краями тріщини [7].

Враховуючи вищезазначені чинники, які зменшують поверхневу енергію  $U_2(\varepsilon, L)$ , виберемо міжатомну взаємодію між гранями МТ у наступній формі:

$$f(y(x)) = A \frac{E}{a} \exp\left(-\frac{ky(x)}{n}\right) \sin(\pi ny(x)) \Theta(2n - y(x)), \quad (4.1)$$

де  $\Theta$  – функція Хевісайда. З рівн. (4.1) випливає, що на початковому етапі проникнення *guest*-частинки всередину МТ (при малих розкриттях тріщини) міжмолекулярні сили все ще протистоять входженню *guest*-частинки, але на наступному етапі *guest*-частинка повністю розриває міжатомні зв'язки і розштовхує береги МТ. Вибір сили взаємодії у вигляді (4.1) дозволяє широкий діапазон моделювання поверхневої енергії

$$\gamma(\infty) = \int_0^{\infty} f(y) dy = A E a^2 \frac{[1 - \exp(-2k)] \pi n}{k^2 + \pi^2}. \quad (4.2)$$

при повністю розкритій МТ. Наявність параметра  $A$  дозволяє моделювати процеси послаблення міжатомних зв'язків внаслідок вищезгаданих деструктивних чинників. Вибір сили взаємодії у вигляді (4.1) істотно змінює повну поверхневу енергію МТ, як це видно з Рис. 1.

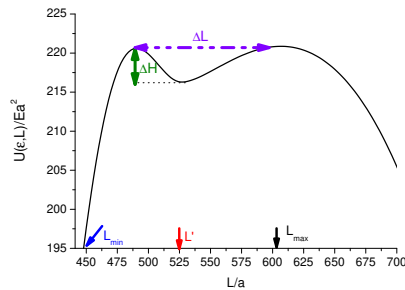


Рис. 1. Поверхнева енергія МТ в залежності від її довжини при  $\varepsilon = 0.0525$ . Міжатомна сила взаємодії вибрана у вигляді (4.1) з  $A = 1$ , та  $n = k = 1$ . Стрілки позначають величини  $L_{\min}$  (3.11),  $L'$  (4.3) та  $L_{\max}$  (4.4).

Можна показати, що при не надто малих деформаціях  $\varepsilon$ , утворюються стійкі МТ з довжиною

$$L' = \sqrt[4]{2n} L_{\min}. \quad (4.3)$$

Ці дефекти не заліковуються внаслідок термоактивованої дифузії *host*-частинок, оскільки їх характерна довжина перевищує  $L_{\min}$ . Це означає, що проникнення чужорідної частинки всередину МТ зменшує довговічність твердого тіла, оскільки матеріал стає крихким через велику кількість довгоживучих початкових мікродфектів. Ситуація стає особливо цікавою, коли значення  $L'$  та  $L_{\min}$  збігаються (при  $n \sim 1/2$ ): це означає, що будь-яка початкова МТ завдовжки  $L_{\min}$  є стійкою. Критичне значення  $L_{\max}$  довжини МТ при проникненні *guest*-частинок всередину дефекту зменшується порівняно з випадком суто притягальної взаємодії (3.1) як

$$L_{\max} = L_c / \sqrt[4]{4nk}, \quad (4.4)$$

де  $L_c$  означено в (3.10). Числові розрахунки показують, що ширина

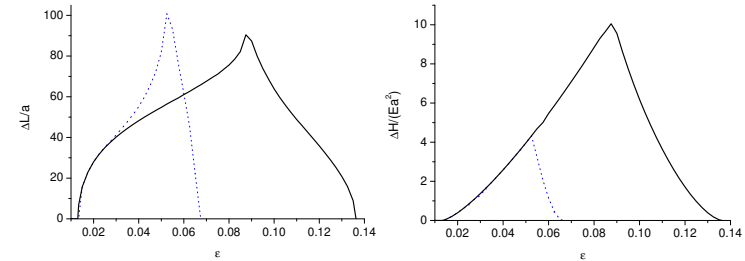


Рис. 2. Залежність ширини  $\Delta L/a$  (зліва) та глибини  $\Delta H/\varepsilon a^2$  (справа) потенціальної ями повної поверхневої енергії МТ (див. Рис. 1) від деформації при відсутності (точки) та наявності (суцільна крива) місткових зв'язків.

потенціальної ями (див. Рис. 2) досягає кількох десятків міжатомних відстаней. Можна зробити висновок, що розподіл характерних довжин новоутворених МТ може бути достатньо широким. Глибина потенціальної ями також є немонотонною: спочатку вона зростає майже лінійно з деформацією приблизно до  $5Ea^2$ , а потім спадає до нуля при  $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_{cr} = 0,065$ . Порогове значення  $\varepsilon$ , при якому починають утворюватися стійкі МТ, дорівнює 0.013.

Як уже зазначалося, міграція *guest*-частинок всередину МТ може мати не лише руйнівний ефект, але і сприяти зміцненню мікродфектів. Вважається, що можуть виникати місткові зв'язки притягальної

природи між *guest*- і *host*-частинками, якщо провести певну хімічну модифікацію поверхні МТ [7]. Щоб дати кількісний опис такої ситуації, трішки модифікуємо рін. (4.1), записавши його наступним чином:

$$f_{\text{bridge}}(y(x)) = A \frac{E}{a} \exp\left(-\frac{ky(x)}{n}\right) \sin(\pi ny(x)) \Theta(3n - y(x)). \quad (4.5)$$

Видно, що крім суто відштовхувального взаємодії з'являється і притягальна гілка  $f_{\text{bridge}}(y)$  при розкриттях МТ  $2 \leq y \leq 3$ . Ця взаємодія є незначною: інтегральний внесок від місткових зв'язків становить лише близько 10% від загальної взаємодії. Проте притягальна гілка суттєво змінює деякі основні характеристики мікрodefектів (див. Рис. 2), а саме: і) глибини локальних мінімумів потенціальної енергії  $U(\varepsilon, L)$  (суцільна крива) зростають більш ніж вдвічі у порівнянні з результатами для моделі з чистим відштовхуванням (пунктирна крива); ii) “вікно” значень  $\varepsilon$ , при якому утворюються стійкі МТ, зростає в понад два рази у порівнянні з суто відштовхувальною моделлю і охоплює майже всю область неруйнівних полів деформацій; iii) розподіл типових довжин МТ може бути досить широким.

Результати, представлені на Рис. 1 і 2, були отримані числовим інтегруванням для знаходження повної поверхневої енергії МТ  $U(\varepsilon, L) = U_1(\varepsilon, L) + U_2(\varepsilon, L)$ , де дві її складові були означені у інтегралах рівнянь (3.6)-(3.7). Очевидно, що для з'ясування чинників, від яких залежить положення мінімумів потенціальних ям, їх глибина і, зрештою, конфігурація профілю повної енергії, необхідно отримати певні аналітичні вирази. І мова йде в першу чергу не про залежність просторових чи енергетичних характеристик МТ від параметрів системи, а про з'ясування мікроскопічних механізмів, які формують вищезгадані профілі. Ця задача буде предметом детального дослідження у наступному розділі.

## 5. Залежність повної поверхневої енергії МТ від міжчастинкової взаємодії та параметрів системи

Узагальнимо вирази для міжатомних сил (4.1) та (4.5) при проникненні чужорідної частинки всередину мікрodefекту шляхом введення додаткового параметра  $\alpha$ , який моделює кількість областей з притягальною та відштовхувальною взаємодією:

$$f(y(x)) = A \frac{E}{a} \exp\left(-\frac{ky(x)}{n}\right) \sin(\pi ny(x)) \Theta(\alpha n - y(x)). \quad (5.1)$$

Використаємо рін. (3.2) для розрахунку енергії (на одиницю довжини МТ), яку слід затратити для розведення країв мікрodefекту на відстань  $y$ . Як і у випадку суто притягальної взаємодії, про яку йшлося у розділі 3, таке інтегрування можна провести аналітично, що дасть нам наступний результат:

$$\gamma(y) = \gamma_{\text{close}}(y) \Theta(\alpha n - y) + \gamma_{\text{far}}(\alpha) \Theta(y - \alpha n), \quad (5.2)$$

$$\gamma_{\text{close}}(y) = A \frac{E}{a} n \exp\left(-\frac{ky}{n}\right) \frac{\exp\left(\frac{ky}{n}\right) \pi n^2 - \pi n^2 \cos(\pi ny) - k \sin(\pi ny)}{k^2 + \pi^2 n^4},$$

$$\gamma_{\text{far}}(\alpha) = A \frac{E}{a} n \exp(-\alpha k) \frac{\exp(\alpha k) \pi n^2 - \pi n^2 \cos(\pi \alpha n^2) - k \sin(\pi \alpha n^2)}{k^2 + \pi^2 n^4}.$$

У рін. (5.2) ми розділили внесок  $\gamma_{\text{close}}(y)$  від т. зв. “ближньої зони”, коли розкриття МТ  $y < \alpha n$ , та “дальньої зони”  $\gamma_{\text{far}}(\alpha)$ , коли виконується протилежна нерівність  $y > \alpha n$ . Енергія розведення берегів МТ у ближній зоні, коли відстані між краями мікрodefекту є малими, залежить від профілю МТ  $y(x)$  і не залежать від значення параметра  $\alpha$ . Для дальньої зони ситуація є протилежною, як це видно з останнього рівняння (5.2).

Задавши умову переходу “ближня зона – дальня зона” у вигляді  $y(x) = \alpha n$ , з рівняння (3.4) для профілю МТ ми отримуємо вираз

$$x_{\text{tip}} = \sqrt{L^2 - 2\sqrt{\frac{6\alpha n I}{\varepsilon}}}, \quad (5.3)$$

який визначає координату переходу між ближньою та дальньою зонами. Прирівнявши вираз (5.3) до нуля, ми отримуємо умову того, що дальня зона взагалі відсутня, тобто ближня починається в точці  $x = 0$ . У такому випадку довжина МТ з відсутньою дальньою зоною дорівнюватиме

$$L_{\text{tip}} = \sqrt[4]{\frac{24\alpha n I}{\varepsilon}}. \quad (5.4)$$

На Рис. 3 наведено типові профілі енергій розкриття МТ при різних значеннях параметра  $\alpha$ , який визначає наявність ( $\alpha = 3$ ) або відсутність ( $\alpha = 2$ ) місткових зв'язків, в залежності від координати  $x$  всередині мікрodefекту та його фіксованої довжини  $L$ . На Рис. 3а **точка 1**, де закінчується дальня зона <sup>2</sup>, визначається умовою другого нуля у виразі для сили міжчастинкової взаємодії (5.1), а саме

<sup>2</sup>Ближня зона реалізується при великих значеннях  $x$ , коли розкриття МТ  $y(x)$  є малим. Навпаки, дальня зона реалізується при менших значеннях  $x$ , коли відстань  $y(x)$  між берегами МТ є достатньо великою.

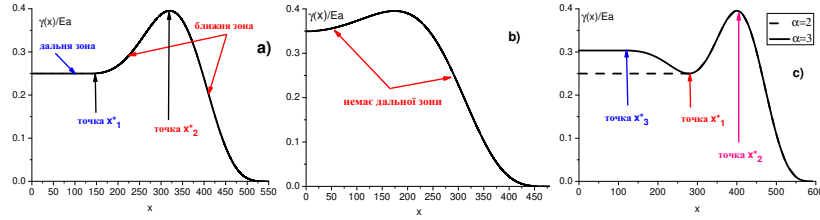


Рис. 3. Залежність енергії розкриття МТ  $\gamma(x)$  від координати. Параметри системи:  $L = 550$ ,  $\alpha = 2$  (а),  $L = 480$ ,  $\alpha = 2$  (б) та  $L = 600$ ,  $\alpha = 2, 3$  (в). Значення деформації  $\varepsilon = 0.05$  та безрозмірного моменту інерції  $I = 10^9/12$  є спільними для усіх трьох випадків.

$\sin(\pi n y) = 0$ ,  $\pi n y = 2\pi$ , що дасть вираз

$$x_1^* = \sqrt{L^2 - \sqrt{\frac{48I}{n\varepsilon}}} \quad (5.5)$$

для її координати.

Подібним чином, з умови  $\sin(\pi n y) = 0$ ,  $\pi n y = \pi$  для першого нуля у виразі (5.1) можна знайти координату **точки 2**

$$x_2^* = \sqrt{L^2 - \sqrt{\frac{24I}{n\varepsilon}}}, \quad (5.6)$$

де енергія розкриття МТ досягає найбільшого значення. Зрозуміло, що точка 2 відповідає закінченню притягальної області сили міжчастинкової взаємодії (5.1), а точка 1 – закінченню відштовхувальної області. Зауважимо, що умова  $x_2^* = 0$  автоматично приводить до виразу (5.4).

Насамкінець, задаючи умову  $\sin(\pi n y) = 0$ ,  $\pi n y = 3\pi$ , коли зникає друга притягальна гілка в енергії міжчастинкової взаємодії при наявності місткових зв'язків (третій нуль у виразі (5.1)), можна знайти координату **точки 3** початку ближньої зони:

$$x_3^* = \sqrt{L^2 - \sqrt{\frac{72I}{n\varepsilon}}}. \quad (5.7)$$

Зауважимо, що у цьому випадку точка 1 відповідатиме мінімуму  $\gamma(y(x))$  і, як це добре видно з Рис. 3с, співпадатиме з координатою початку ближньої зони за відсутності місткових зв'язків, коли  $\alpha = 2$ .

У випадку, зображеному на Рис. 3б, дальня зона взагалі відсутня, оскільки згідно рівн. (5.4) значення  $L_{\text{tip}} = 531$ , що перевищує довжину мікрodefекту  $L = 480$ . Зауважимо, що параметри Рис. 3с визначають наступні умови існування дальньої зони:  $L_{\text{tip}} = 531$  для випадку без місткових зв'язків ( $\alpha = 2$ ) та  $L_{\text{tip}} = 589$  при наявності місткових зв'язків ( $\alpha = 3$ ). Оскільки обидві величини є меншими ніж вибрана довжина МТ  $L = 600$ , на графіках чітко видно дальню зону, яка закінчується в точці  $x_3^*$  при  $\alpha = 3$  та в точці  $x_1^*$  при  $\alpha = 2$ .

Також слід підкреслити наступну суттєву деталь: якщо вираз (5.4) при  $\alpha = \{2, 3\}$  визначає мінімальну довжину, яку повинна мати МТ для появи дальньої зони при відсутності/наявності місткових зв'язків, то поклавши у ньому  $\alpha = 1$ ,  $n = 1$ , ми отримаємо мінімальну довжину мікрodefекту, при якій він ще не заліковується внаслідок термоактивованої дифузії *host*-частинок, див рівн. (3.11). В загальному випадку можна знайти ще один мінімум на кривій повної поверхневої енергії МТ в точці  $\bar{L}$ , як це було зроблено в роботі [15]. У випадку сили міжатомних взаємодій (5.1) він визначається розкладом  $\gamma_{\text{close}}(y)$  в ряд за малими розкриттями з точністю до  $y^2$ . Тоді повна енергія дорівнює (тут і надалі ми поклали  $A = 1$ )

$$\begin{aligned} U(\varepsilon, L) &= -\frac{1}{2}\sigma \int_{-L}^L y(x) dx + \frac{En}{2a} \int_{-L}^L y(x)^2 dx \\ &= -aE^2 \left( \frac{\varepsilon^2 L^5}{I} - \frac{2\pi n \varepsilon^2 L^9}{1225I^2} \right), \end{aligned} \quad (5.8)$$

а її мінімум знаходиться в точці

$$\bar{L} = \sqrt[4]{\frac{35}{2\pi n}} I \quad (5.9)$$

та співпадає з виразом (3.9) при  $n = 1/\pi$  та малих деформаціях  $\varepsilon$ . Оскільки  $\bar{L} \ll L_{\text{min}} \sim \varepsilon^{-1/4}$ , то МТ з такими довжинами є нестабільними і відразу заліковуються.

Натомість, взявши наступний член розкладу, отримаємо  $\gamma_{\text{close}}(y) \approx \frac{Ea}{6}\pi y^2(3n - 2ky)$ , що дає точку максимуму повної поверхневої енергії

$$L_{\text{max1}} = \left\{ \frac{3}{20\varepsilon k} \left( 99In + \sqrt{\frac{33}{\pi} I^2 (297\pi n^2 + 700\varepsilon k)} \right) \right\}^{\frac{1}{4}}. \quad (5.10)$$

Числові розрахунки показують (див. Рис. 4), що максимум повної енергії дійсно реалізується в околі цієї точки.



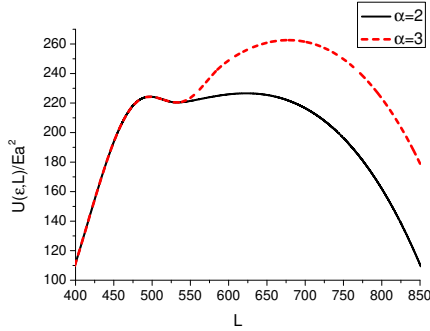


Рис. 4. Повна поверхнева енергія МТ при відсутності (суцільна крива) та наявності (штрихована крива) місткових зв'язків. Параметри моделі:  $n = k = 1$ ,  $I = 10^9/12$ ,  $\varepsilon = 0.05$ .

З іншого боку, при великих значеннях  $L$  повну поверхневу енергію можна записати як

$$U(\varepsilon, L) = U_1(\varepsilon, L) + U_2(\varepsilon, L) \quad (5.11)$$

$$= -Ea^2 \left\{ \frac{\varepsilon^2 L^5}{45I} - 2 \left( \gamma_{\text{far}} x_{\text{tip}} + \int_{x_{\text{tip}}}^L \gamma_{\text{close}}(y(x)) dx \right) \right\}.$$

Зрозуміло, що з врахуванням форми профілю МТ (3.4) ми не зможемо знайти явний вираз для внеску ближньої зони, тобто для інтегрального доданку у (5.11). В такому випадку доцільно замість точної форми (3.4) взяти її квадратичну апроксимацію  $y(x) \approx -\frac{\varepsilon L^2 x^2}{12I}$ , що дасть змогу знайти значення гаусового інтегралу. Шукаючи точки екстремуму  $U(\varepsilon, L)$ , можна отримати аналітичний проте досить громіздкий вираз для другої точки максимуму  $L_{\text{max}2}$  повної поверхневої енергії. Цікаво зауважити, що  $L_{\text{max}2} \sim \varepsilon^{-1/2}$ , тоді як  $L_{\text{max}1} \sim \varepsilon^{-1/4}$  (див. рівн. (5.10)), тобто при збільшенні деформації обидві точки зближуються.

На Рис. 4 зображено повну поверхневу енергію МТ  $U(\varepsilon, L)$  при відсутності та наявності місткових зв'язків. Характерні просторові масштаби, обчислені за допомогою рівн. (3.11), (5.10) і (5.4), становлять  $L_{\text{min}} = 447$ ,  $L_{\text{max}1} = 470$  та  $L_{\text{tip}} = 532$ . Аналітичні вирази для величин  $L_{\text{max}2}$ , в околі яких реалізуються максимуми поверхневої енергії, як уже зазначалось, є досить громіздкими і не приводяться у цьому розділі. Тим не менше, розрахунок цих величин дає  $L_{\text{max}2} = 612$  для випадку  $\alpha = 2$  та  $L_{\text{max}2} = 656$  при  $\alpha = 3$ ,

відповідно. Напрошується загальний висновок, що вищенаведені величини дійсно знаходяться в околі відповідних екстремумів кривих, розрахованих числовим способом та зображених на Рис. 4.

Також з Рис. 4 видно, що точка мінімуму на кривій  $U(\varepsilon, L)$  співпадає зі значенням (5.4) при  $\alpha = 2$ . Згідно означення (5.4) переходу “ближня зона–далжня зона”, профіль повної поверхневої енергії ліворуч від  $L_{\text{tip}}$  формує ближня зона, а праворуч – далжня. Оскільки  $\gamma_{\text{close}}(y)$  не залежить від параметра  $\alpha$ , то і при наявності місткових зв'язків, і при їх відсутності ліва частина графіків на Рис. 4 має ідентичний вигляд.

Прирівнявши  $L_{\text{tip}} = L_{\text{max}2}$  при  $\alpha = 2$ , можна оцінити значення поля деформації, при якому зникає мінімум повної поверхневої енергії МТ при відсутності місткових зв'язків. Цікаво, що обчислена величина  $\varepsilon_2^* = 0.0864$  досить близька до точного значення  $\varepsilon_{\text{exact}2}^* = 0.069$ , яке отримується з лівої частини Рис. 2 при  $\Delta L = 0$ . Подібним чином, поклавши  $L_{\text{tip}}|_{\alpha=2} = L_{\text{max}2}|_{\alpha=3}$ , можна знайти значення  $\varepsilon$ , при якому зникає мінімум на кривій повної поверхневої енергії МТ при наявності місткових зв'язків. Як і в попередньому випадку, розраховане нами значення  $\varepsilon_3^* = 0.1171$  є досить близьким до точного  $\varepsilon_{\text{exact}3}^* = 0.136$ .

## 6. Висновки

Ми розвинули феноменологічну теорію тріщиноутворення в твердих тілах на основі модифікованої теорії Гріффітса. Отримані раніше результати [16] для випадку притягальної взаємодії між берегами МТ, а також при умові входження чужорідної частинки у вершинну зону мікродфекту [15] були проаналізовані кризь призму явних виразів для характерних масштабів цих мікродфектів. Це дозволило з'ясувати, які саме частини потенціалу міжчастинкової взаємодії є відповідальними за той чи інший профіль МТ, що не вдавалось зробити раніше на основі лише числових розрахунків. Ми свідомо обмежились врахуванням лише “незбуреного” профілю МТ, коли для отримання залежності  $y(x)$  в рівняннях статички нехтувалось силою міжчастинкової взаємодії. На наш погляд, таке врахування має сенс лише при роботі з мікродфектами наперед визначеної топології і жодною мірою не допомагає при розрахунках типових просторових характеристик мікродфектів, ширин та глибин потенціальних ям тощо. Отримані результати дуже добре доповнюють та пояснюють дані числових розрахунків, отриманих у роботі [15].

Вважаємо за потрібне коротко зупинитись на аналізі деяких ва-

жливих результатів, отриманих у розділах 4 та 5. Співпадіння кривих, які описують ширини та глибини потенціальних ям на Рис. 2 як функцій деформації при малих  $\varepsilon$  незалежно від наявності/відсутності місткових зв'язків є наслідком домінування внесків від ближніх зон МТ (які не залежать від параметра  $\alpha$ ). При зростанні полів деформацій МТ розкриваються все більше, і внесок у повну енергію від дальніх зон (які залежать від значень параметра  $\alpha$ ), стає все вагомішим. Це і пояснює різні результати при наявності та відсутності місткових зв'язків у проміжку  $0.07 < \varepsilon < 0.14$ . Однак, оскільки внесок від ближньої зони у вираз для  $U_2(\varepsilon, L)$  можна розрахувати аналітично лише апроксимувавши підінтегральні вирази у (5.11) гаусовими функціями, то процес визначення полів деформацій, при яких поведінка повної енергії стає різною, не може претендувати на особливу точність і обмежується лише числовими методами. З подібних міркувань ми не проводили аналіз внесків ближньої та дальньої зон в глибину потенціальної ями при різних деформаціях.

Окремо слід сказати кілька слів про застосовність модифікованої теорії Гріффітса для випадку, розглянутого у розділах 4 та 5. Зрозуміло, що основні постулати цієї теорії не мали б зазнавати ревізії у випадку, коли чужорідні частинки проникають всередину мікродефекту. Якщо оцінювати час росту МТ на основі рівн. (2.6), то видно, що з врахуванням (4.4) значення верхньої межі інтегралу буде меншим при тому, що нижня границя залишається незмінною. Більше того, саме поняття кінчкової зони мало б зазнати певної модифікації. Внаслідок того, що у вершинній зоні МТ знаходиться *guest*-частинка, проникнення в цю область *host*-частинок стає утрудненим. Отже, з'являються підстави вважати закінченням вершинної зони точку  $L_{\text{tip}} > L_{\text{min}}$ , що вкотре зменшує область інтегрування в (2.6) і формально працює на зменшення загального часу росту МТ.

З іншого боку, утруднений доступ *host*-частинок в околі кінчкової зони МТ перешкоджає поверхневій дифузії і, як наслідок, згідно модифікованої теорії Гріффітса [10, 11, 15] збільшує  $\tau_{\text{growth}}$ . Крім того, термодифузійні ефекти в околі кінчкової зони є дуже чутливими до точного профілю МТ, розрахунок якого не проводився. Відтак, обчислення часів росту МТ є окремою цікавою задачею, яку можна розглянути в рамках нашого феноменологічного підходу, який дозволяє отримувати точні аналітичні вирази для майже всіх характерних масштабів МТ при проникненні всередину них чужорідних частинок.

Загалом, запропонований нами феноменологічний підхід можна вважати ефективним доповненням реальних експериментів з вивче-

ння природи тріщиноутворення в твердих тілах, а також комп'ютерного моделювання таких процесів. Він дозволяє робити низку цікавих висновків, виходячи з відносно простих моделей тріщиноутворення та отриманих для них аналітичних та числових результатів. Зокрема, вартою уваги ідеєю є впровадження всередину МТ комплексів чужорідних частинок, здатних формувати місткові зв'язки та укріплювати береги тріщини по мірі її розкриття. Зрозуміло, що перспективність подібного роду підходів мала б зростати при об'єднанні зусиль теоретиків, експериментаторів та інженерів, які працюють над посиленням стійкості твердих тіл.

## Література

1. Griffith A. A. VI. The phenomena of rupture and flow in solids // Philosophical transactions of the Royal society of London. Series A. — 1921. — Vol. 221, no. 582-593. — P. 163–198.
2. Френкель Я. И. Теория обратимых и необратимых трещин в твердых телах // Журнал технической физики. — 1952. — Т. 22, № 11. — С. 1857–1866.
3. Landau L. D., Lifshitz E. M., Kosevich A. M., Pitaevskii L. P. Theory of elasticity: volume 7. — Elsevier, 1986. — Vol. 7.
4. Alava M. J., Nukala P. K. V. V., Zapperi S. Statistical models of fracture // Advances in Physics. — 2006. — Vol. 55, no. 3-4. — P. 349–476.
5. Marliere C., Prades S., Célerié F., Dalmas D., Bonamy D., Guillot C., Bouchaud E. Crack fronts and damage in glass at the nanometre scale // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2003. — Vol. 15, no. 31. — P. S2377.
6. Abraham F. F. How fast can cracks move? A research adventure in materials failure using millions of atoms and big computers // Advances in Physics. — 2003. — Vol. 52, no. 8. — P. 727–790.
7. Ишлинский А. Ю., Чёрный Г. Г. Механика. Новое в зарубежной науке. Атомистика разрушения. — 1987.
8. Baryakhtar V., Gonchar V., Zhidkov A., Zhydkov V. Radiation damages and self-sputtering of high-radioactive dielectrics: spontaneous emission of submicronic dust particles // Condensed Matter Physics. — 2002. — Vol. 5, no. 3. — P. 449–471.
9. Ewing R. C., Weber W. J., Clinard Jr. F. W. Radiation effects in nuclear waste forms for high-level radioactive waste // Progress in nuclear energy. — 1995. — Vol. 29, no. 2. — P. 63–127.

10. Golubović L., Feng S. Rate of microcrack nucleation // *Physical Review A*. — 1991. — Vol. 43, no. 10. — P. 5223.
  11. Golubović L., Peredera A. Mechanism of time-delayed fractures // *Physical Review E*. — 1995. — Vol. 51, no. 4. — P. 2799.
  12. Santucci S., Vanel L., Guarino A., Scorretti R., Ciliberto S. Thermal activation of rupture and slow crack growth in a model of homogeneous brittle materials // *Europhysics Letters*. — 2003. — Vol. 62, no. 3. — P. 320.
  13. Santucci S., Vanel L., Ciliberto S. Slow crack growth: models and experiments // *The European Physical Journal Special Topics*. — 2007. — Vol. 146, no. 1. — P. 341–356.
  14. Pugno N. M., Ruoff R. S. Quantized fracture mechanics // *Philosophical Magazine*. — 2004. — Vol. 84, no. 27. — P. 2829–2845.
  15. Ignatyuk V. Some semi-phenomenological approaches to description of microcrack formation in solids // *AIP Conference Proceedings / American Institute of Physics*. — Vol. 1198. — 2009. — P. 64–71.
  16. Верхоляк Т. М., Ігнатюк В. В. Аналіз найпростіших моделей формування мікротріщин // *Препринт ІСМР*. — 2005. — № 05-16U. — С. 1–15. — Режим доступу: <https://www.icmp.lviv.ua/preprints/2005/05-16u>.
-

# 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; "Referatyvnyj Zhurnal"; "Dzherelo".

**EDITOR IN CHIEF:** Ihor Yukhnovskii.

**EDITORIAL BOARD:** T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk (Associate Editor), *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Coventry*; R. Folk, *Linz*; L.E. Gonzalez, *Valladolid*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch (Associate Editor), *Lviv*; M. Holovko (Associate Editor), *Lviv*; O. Ivankiv (Managing Editor), *Lviv*; Ja. Ilnytskyi (Assistant Editor), *Lviv*; N. Jakse, *Grenoble*; W. Janke, *Leipzig*; J. Jedrzejewski, *Wroclaw*; Yu. Kalyuzhnyi, *Lviv*; R. Kenna, *Coventry*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; O. Lavrentovich, *Kent*; M. Lebovka, *Kyiv*; R. Lemanski, *Wroclaw*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Loktev, *Kyiv*; E. Lomba, *Madrid*; O. Makhanets, *Chernivtsi*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod (Associate Editor), *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; O. Pizio, *Mexico*; N. Plakida, *Dubna*; G. Ruocco, *Rome*; A. Seitsonen, *Zürich*; S. Sharapov, *Kyiv*; Ya. Shchur, *Lviv*; A. Shvaika (Associate Editor), *Lviv*; S. Sokołowski, *Lublin*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; J. Strečka, *Košice*; S. Thurner, *Vienna*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; V. Vlady, *Ljubljana*; 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: +38(032)2761978; Fax: +38(032)2761158  
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua    <http://www.icmp.lviv.ua>