

розрахунках припусків на обробку, а також при визначенні кількості проходів ( $i$ ) з глибиною  $t$  на етапі чистової обробки з метою усунення чи зменшення відхилення від площинності.

Виконані розробки дозволяють вирішити як завдання зниження температури обробки металів з нано- та субмікрокристалічною структурою, так і забезпечити потрібні значення увігнутості при плоскому торцевому шліфуванні. Це створює передумови для подальшого розширення технологічних можливостей процесів плоского торцевого шліфування на верстатах з вертикальним розташуванням шпинделя.

Надалі представляє певний інтерес питання дослідження впливу умов обробки на зміну площі контакту робочої поверхні круга з поверхнею деталі, що підлягає обробленню.

#### *Література*

1. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: [http://www.valve-industry.ru/pdf \\_ site/73/73 - Kochanov.pdf](http://www.valve-industry.ru/pdf_site/73/73-Kochanov.pdf).
2. Грабченко А.І. Комп'ютерне моделювання зони контакту торцевого круга з деталлю на плоскошліфувальних верстатах / А. І. Грабченко, І. М. Пижов, В. Г. Клименко // Важке машинобудування. Проблеми та перспективи розвитку. Матеріали 11 міжнародної науково-технічної конференції. – Краматорськ: 2013. – С. 62.

УДК 519.711.53:669.01:62

### **РАЗВИТИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ: СОВРЕМЕННЫЕ ТЕНДЕНЦИИ И ПЕРСПЕКТИВЫ**

***к.т.н., доц. Колесников В.А.***

*ГУ «Луганский национальный университет имени Тараса Шевченко»*

От развития прикладного материаловедения зависело и зависит будущее нашей цивилизации. Все современные достижения в науке и технике, так или иначе, связаны с решением материаловедческих проблем. Для того чтобы получить сплав (материал), а в последствии деталь, необходимо провести целую серию экспериментов. Однако, это не гарантирует то, что полученный функциональный материал, будет удовлетворять всем заранее заданным свойствам, а временные и ресурсные затраты на его разработку могут оказаться огромными. Одним из выходов из данной проблемы является развитие *вычислительного материаловедения (computational materials science)*.

В последнее время все большее распространение в физике твёрдого тела приобретают методы *ab initio* расчётов, основанные на использовании метода функционала плотности [1].

Достоинством расчётов из первых принципов является точное описание атомного взаимодействия с учётом квантовых эффектов. Недостатком — невозможность расчёта за разумное время систем с достаточно большим числом атомов (на практике редко более 100).

Если расположить современные методы моделирования, используемые в физике, по возрастанию размеров моделируемых систем и времени моделирования, то картина получится следующей:

1. Ab initio методы, не использующие приближений;
2. Ab initio методы, использующие приближения;
3. Методы молекулярной динамики, использующие полуэмпирические потенциалы;
4. Метод Монте-Карло;
5. Методы конечных элементов;

Аналогично от 1-5 увеличивается количество упрощений и различных приближений, которые могут влиять на корректность получаемого результата [2].

Приведем краткий перечень компьютерных программ и приложений, используемых при моделировании («из первых принципов»): Gaussian, CPMD, NWChem, ABINIT, VASP, WIEN2K, PC GAMESS, GAMESS (US), ORCA, CRYSTAL.

Существуют также коммерческие приложения, требующие членства в виртуальных организациях Gaussian или Turbomole. Перечислим программы и приложения, которые касаются рассмотренных выше научных направлений: HONDO, MOLCAS, MOLPRO, MPQC, NAMD, Priroda, PQS, PSI, Q-Chem, TURBOMOLE, GROMACS, FANTOM, Ascalaph Designer.

При решении данных задач широко применяются грид-вычисления. Например, известен грид-интерфейс CHARON. Грид-вычисления (англ. *grid* — решётка, сеть) — это форма распределённых вычислений, в которой «виртуальный суперкомпьютер» представлен в виде кластеров соединённых с помощью сети, слабосвязанных, гетерогенных компьютеров, работающих вместе для выполнения огромного количества заданий (операций, работ). Грид (Information Power Grid) с точки зрения сетевой организации представляет собой согласованную, открытую и стандартизованную среду, которая обеспечивает гибкое, безопасное, скоординированное разделение вычислительных ресурсов и ресурсов хранения информации, которые являются частью этой среды, в рамках одной виртуальной организации [3, 4].

Выводы. Вычислительное материаловедение будет развиваться, параллельно с информационными технологиями. Повысить эффективность расчетов свойств можно благодаря применению грид-

вычислений. Использование перечисленных выше возможностей должно существенным образом способствовать целенаправленному созданию материалов с заранее заданными свойствами.

#### *Литература*

1. Колесников В. А. Краткий обзор новых достижений в области вычислительного материаловедения / В. А. Колесников, А. И. Балицкий, О. А. Погорелов, В. В. Кузнецов, А. В. Калинин//*Вісник Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля* –№ 9 (180). – Ч.2. 2012.–С. 58–63.Режим доступа: [http://www.nbuv.gov.ua/portal/soc\\_gum/vsunu/2012\\_9\\_2/Kolesnikov.pdf](http://www.nbuv.gov.ua/portal/soc_gum/vsunu/2012_9_2/Kolesnikov.pdf).
2. Леваков А. Суперкомпьютерные технологии и проекты в США. Часть 3. [Электронный ресурс]. Публикации Daily.Sec.Ru. Режим доступа: <http://daily.sec.ru/publication.cfm?rid=17&pid=10632&pos=9&stp=25>.
3. Грид [Электронный ресурс]. Википедия электронная энциклопедия. Режим доступа:<http://ru.wikipedia.org/wiki>.

УДК 331.47(100)

## **РЕСПИРАТОРНАЯ ЗАЩИТА ЧЕЛОВЕКА ОТ НЕГАТИВНОГО ВЛИЯНИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ**

***д.т.н., проф. Защепкина Н. Н., аспирант. Терентьева Н. Р.***  
*Киевский национальный университет технологий и дизайна*

Воздух, которым мы дышим, является частью атмосферы – смеси различных газов, окружающих Землю. Эти газы обеспечивают жизнь всем живым организмам и защищают нас от вредного воздействия солнечных лучей.

Сжигание ископаемых видов топлива привело к колоссальным выбросам двуокиси углерода и других газов, особенно после появления автомобилей в конце XIX века.

Опасные вещества могут быть в форме твердых или жидких аэрозольных частиц, газов, паров или испарений. Чем меньше размер частиц пыли, тем дольше они находятся в воздухе во взвешенном состоянии и тем выше вероятность того, что они попадут внутрь с воздухом, проникнут в легкие.

Частицы нетоксичной пыли, попадая в легкие, могут задерживаться там длительное время. Вокруг каждой пылинки постепенно разрастается соединительная ткань, которая уже не способна участвовать в процессе газообмена организма.

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**

**Державний заклад**

**«Луганський національний університет імені Тараса Шевченка»  
Територіальне управління Держгірпромнагляду у Луганській області  
Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля**

**Луганська регіональна торгово-промислова палата**

**Державна інспекція ядерного регулювання України**

**Департамент освіти та молоді Луганської міської ради**

**Інститут хімічних технологій СНУ ім. В. Даля**

**Українська інженерно-педагогічна академія**

**Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка НАН України**

**Наукова рада НАН України з проблеми**

**«Фізико-хімічна механіка матеріалів»**

**Західнопоморський технологічний університет**

**м. Щецин(Польща)**

**ПрАТ «Інститут «Спецавтоматика»**

**НВМСП «ОПЫТ»**

**НОВІ МАТЕРІАЛИ І ПЕРСПЕКТИВНІ ТЕХНОЛОГІЇ,  
ОХОРОНА ПРАЦІ І ПРОФЕСІЙНА ОСВІТА**

---

***Матеріали Всеукраїнської науково-практичної  
Інтернет-конференції  
з міжнародною участю***

***4 квітня 2014 року, м. Луганськ***

**Луганськ  
ДЗ «ЛНУ імені Тараса Шевченка»  
2014**

УДК [67 +331.45 + 378] – 048.35

ББК 30 + 65.246 + 74.48

Н73

**Редакційна колегія:**

**Чесноков О. В.** – д-р техн. наук, професор;

**Орешкін М. В.** – д-р с.-г. наук, ст. наук. співробітник;

**Колесніков В. О.** – канд. техн. наук, доцент;

**Бурдун В. В.** – канд. пед. наук, доцент;

**Нові матеріали** і перспективні технології,  
Н73 охорона праці і професійна освіта : матеріали Всеукр.  
наук.-практ. інтернет-конф. з міжнар. участю  
(м. Луганськ, 4 квіт. 2014 р.). – Луганськ : Вид-во  
ДЗ «ЛНУ імені Тараса Шевченка», 2014. – 196 с.

Збірник містить матеріали доповідей провідних науковців, наукових співробітників, викладачів, пошукувачів, аспірантів України та зарубіжжя. Представлені роботи, які висвітлюють актуальні питання та сучасний стан і напрями впровадження матеріалів і перспективних технологій, актуальні питання охорони праці, професійної та технологічної освіти.

Для студентів ВНЗ, аспірантів та наукових працівників.

Матеріали надруковано мовою оригіналу у авторській редакції. Автори опублікованих матеріалів несуть відповідальність за об'єктивність добору і точність викладених фактів, за використання відомостей, що не підлягають відкритому опублікуванню.

**УДК [67 + 331.45 + 378] – 048.35**

**ББК 30 + 65.246 + 74.48**

*Рекомендовано до друку Вченою радою  
Луганського національного університету імені Тараса Шевченка  
(протокол № 9 від 25 квітня 2014 року)*

© Колектив авторів, 2014  
© ДЗ «ЛНУ імені Тараса Шевченка», 2014

## Зміст

|                                                                                                                                                                            |           |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>РОЗДІЛ 1 НОВІ МАТЕРІАЛИ І ПЕРСПЕКТИВНІ ТЕХНОЛОГІЇ .....</b>                                                                                                             | <b>10</b> |
| <b>Гутько Ю.И., Бер Р., Колесников В.А.</b><br>Технологии прототипирования в литейном производстве .....                                                                   | 10        |
| <b>Балицкий А.И., Колесников В.А., Елиаш Я.</b><br>Влияние проскальзывания в условиях трения качения на износостойкость высокоазотистых сталей .....                       | 12        |
| <b>Попов В.М., Латынин А.В.</b><br>Повышения прочности клеевых соединений на основе клеев, модифицированных воздействием комбинированных физических полей .....            | 14        |
| <b>Калинина Н.Е, Мусина Е.А., Вилищук З.В., Григорчук Н.П., Павлов Д.Р.</b><br>Модифицирующий эффект в литейных силуминах.....                                             | 16        |
| <b>Бечке К.В., Санин А.Ф.</b><br>Формирования интерметаллидных упрочняющих фаз в порошковом алюминиевом сплаве .....                                                       | 18        |
| <b>Лужецкий В.С., Горб'як Т.М.</b><br>До оцінювання міцності труби дефектного газопроводу за підходами механіки руйнування.....                                            | 20        |
| <b>Мандзюк І.А., Присяжна К.О., Диха О.В.</b><br>Перспективи розробки змашувальних матеріалів технічного призначення а основі відновлювальної природної сировини.....      | 21        |
| <b>Павловський Ю.В.,Яким Р.С., Павловська Н.Т., Островський І.П.</b><br>Нові низькорозмірні матеріали на основі SiGe .....                                                 | 24        |
| <b>Пижов І.М., Клименко В.Г.</b><br>Збереження властивостей металів з нано- та субмікрокристалічною структурою при плоскому торцевому шліфуванні .....                     | 26        |
| <b>Колесников В.А.</b><br>Развитие вычислительного материаловедения: современные тенденции и перспективы.....                                                              | 28        |
| <b>Защепкина Н. Н., Терентьева Н. Р.</b><br>Респираторная защита человека от негативного влияния окружающей среды.....                                                     | 30        |
| <b>Вітренко В.О., Чесноков О.В., Чорна В.І.</b><br>Силова взаємодія інструменту з оболонкою при ротаційному витяганні оболонкових деталей без навмисного стоншування ..... | 33        |

**Нові матеріали і перспективні технології, охорона праці і професійна освіта** – матеріали конференції.

У збірнику статей проведено аналіз проектування та технологічного забезпечення властивостей нових матеріалів. Акцентовано увагу на перспективному використанні матеріалів, що володіють підвищеними експлуатаційними властивостями. Розглянуто наноструктуровані сталі і сплави, композиційні матеріали, а саме наноккомпозити, високоазотисті сталі та інші. Приведено короткий огляд властивостей нових матеріалів. Наведені зростаючі можливості обчислювального матеріалознавства та застосування адитивних технологій і 3D принтерів.

Розглянуто застосування інтеграційного підходу до формування професійних вмінь і навичок у майбутніх інженерів - педагогів. Відзначено організаційні передумови розвитку системи ступеневої підготовки кваліфікованих фахівців. Наведено приклади підвищення якості проведення аудиторних занять за рахунок автоматизації методів контролю засвоєння матеріалу студентами. Розглянуто методи проведення навчального процесу (в тому числі інноваційні) при підготовці працівників, що виконують висотно - верхолазні роботи. Розглянуто питання охорони та безпеки праці, а також інформаційної безпеки. Розглянуто особливості охорони праці при промисловому виготовленні нових матеріалів, у навчальних закладах технічного та гуманітарного профілів. Результати досліджень радіаційної безпеки Донецького кряжа і його відрогів і басейну річки Сіверський Донець. Проаналізовано пожежна безпека промислових, транспортних та інноваційних об'єктів.

*Ключові слова:* матеріали, технології, прикладне матеріалознавство, охорона праці, педагогіка, інновації, трудове навчання, професійне навчання.

**Новые материалы и перспективные технологии, охрана труда и профессиональное образование** - материалы конференции.

В сборнике статей проведен анализ проектирования и технологического обеспечения свойств новых материалов. Акцентируется внимание на перспективном использовании материалов обладающих повышенными эксплуатационными свойствами. Рассмотрены наноструктурированные стали и сплавы, композиционные материалы наноккомпозиты, высокоазотистые стали и другие. Сделан краткий обзор свойств новых материалов. Приведены возрастающие возможности вычислительного материаловедения и применения аддитивных технологий и 3D принтеров.

Рассматривается применение интеграционного подхода к формированию профессиональных умений и навыков у будущих инженеров - педагогов. Отмечены организационные предпосылки развития системы ступенчатой подготовки квалифицированных специалистов. Приводятся примеры повышения качества проведения аудиторных занятий за счет автоматизации методов контроля усвоения материала студентами. Рассмотрены методы

проведения учебного процесса (в том числе инновационные) при подготовке работников выполняющих высотно-верхолазные работы. Рассмотрены вопросы охраны и безопасности труда, а также информационной безопасности. Рассмотрены особенности охраны труда при промышленном изготовлении новых материалов, в учебных заведениях технического и гуманитарного профилей. Результаты исследований радиационной безопасности Донецкого кряжа и его отрогов и бассейна реки Северский Донец. Проанализирована пожарная безопасность промышленных, транспортных и инновационных объектов.

*Ключевые слова:* материалы, технологии, прикладное материаловедение, охрана труда, педагогика, инновации, трудовое обучение, профессиональное обучение.

**New materials and advanced technology, labor and professional education - proceedings.**

The collection of articles analyzes the design and technological support for the properties of new materials. The attention is focused on the prospective use of materials with enhanced performance characteristics. It considers nanostructured steels and alloys, composites, nanocomposites, and other high-nitrogen steels. There is a brief review of the properties of new materials. The increasing possibility of computational materials science and application of additive technologies and 3D printers are examined.

The work defines the application of an integrated approach to the formation of professional skills of future engineers - teachers. It marks organizational prerequisites for the development of speed training of qualified specialists. There are examples of improving the quality of classroom teaching owing to the automation of the control methods of material acquisition by students.

It studies the methods of the educational process (including innovation ones) in the preparation of workers doing high-altitude steeplejack work. Health and safety problems, as well as information security are also included. The work makes a careful study of the features of labor protection in the industrial manufacturing of new materials, in technical schools and schools pertaining to the humanities. It presents the results of studies of radiation safety of the Donets Ridge and its spurs and Seversky Donets Basin. The fire safety of industrial, transport and innovative facilities was analyzed.

*Keywords:* materials, technology, applied materials, labor safety, pedagogy, innovations, job training, vocational training.

Наукове видання

**НОВІ МАТЕРІАЛИ І ПЕРСПЕКТИВНІ ТЕХНОЛОГІЇ,  
ОХОРОНА ПРАЦІ І ПРОФЕСІЙНА ОСВІТА**

*Матеріали Всеукраїнської науково-практичної  
Інтернет - конференції  
з міжнародною участю*

*4 квітня 2014 року, м. Луганськ*

**Відповідальний за випуск:**

д. т. н., проф. О. В. Чесноков

**Комп'ютерне макетування:**

О. О. Кириленко

---

Здано до складання 31.03.2014 р. Підписано до друку 30.04.2014 р.  
Формат 60×84 1/16. Папір офсет. Гарнітура TimesNewRoman.  
Друк ризографічний. Ум. друк. арк. 12,15. Наклад 200 прим. Зам. № 00.

---

***Видавець і виготовлювач***

**Видавництво Державного закладу**

**«Луганський національний університет імені Тараса Шевченка»**

вул. Оборонна, 2, м. Луганськ, 91011. Тел./факс: (0642) 58-03-20.

e-mail: [alma-mater@list.ru](mailto:alma-mater@list.ru)

*Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3459 від 09.04.2009 р.*

**Колесников В.А.** Развитие вычислительного материаловедения: современные тенденции и перспективы // Нові матеріали і перспективні технології, охорона праці і професійна освіта *Матеріали Всеукраїнської науково-практичної Інтернет-конференції з міжнародною участю 4 квітня 2014 року, м. Луганськ.* – 28 - 30 с.

Колесніков В.А. Розвиток обчислювального матеріалознавства: сучасні тенденції і перспективи // Новые материалы и перспективные технологии, охрана труда и профессиональное образование *Материалы Всеукраинской научно-практической Интернет-конференции с международным участием 4 апреля 2014 года, г. Луганск.* – 28 - 30 с.

Kolesnikov V.A. The development of computational materials science: current trends and prospects // New materials and promising technologies, labor protection and vocational education *Materials of the All-Ukrainian scientific and practical Internet conference with international participation April 4, 2014, Lugansk.* - 28 - 30 p.

Kolesnikov V.A. Rozwój obliczeniowej nauki o materiałach: aktualne trendy i perspektywy // Nowe materiały i obiecujące technologie, ochrona pracy i edukacja zawodowa *Materiały Ogólnoukraińskiej naukowej i praktycznej konferencji internetowej z udziałem międzynarodowym 4 kwietnia 2014 r. Ługańsk.* - 28 - 30 s.

Kolesnikov V.A. Die Entwicklung der rechnergestützten Materialwissenschaften: aktuelle Trends und Perspektiven // Neue Materialien und vielversprechende Technologien, Arbeitsschutz und Berufsbildung *Materialien der vollukrainischen wissenschaftlichen und praktischen Internetkonferenz mit internationaler Beteiligung 4. April 2014, Lugansk.* - 28 - 30 s.

[https://www.researchgate.net/publication/333582344\\_Kolesnikov\\_VA\\_Razvitie\\_vycislitelnogo\\_materialovedenia\\_sovremennyye\\_tendencii\\_i\\_perspektivy\\_Novi\\_materiali\\_i\\_perspektivni\\_tehnologii\\_ohorona\\_praci\\_i\\_profesijna\\_osvita\\_Materiali\\_Vseukrainskoi\\_naukovo-pr](https://www.researchgate.net/publication/333582344_Kolesnikov_VA_Razvitie_vycislitelnogo_materialovedenia_sovremennyye_tendencii_i_perspektivy_Novi_materiali_i_perspektivni_tehnologii_ohorona_praci_i_profesijna_osvita_Materiali_Vseukrainskoi_naukovo-pr)

