

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ АВІАЦІЙНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ НЕПЕРЕРВНОЇ ОСВІТИ

АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ В СИСТЕМІ ОСВІТИ: «ЗАГАЛЬНООСВІТНІЙ
НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД – ДОУНІВЕРСИТЕТСЬКА ПІДГОТОВКА – ВИЩИЙ
НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД»

Матеріали III Всеукраїнської науково-практичної конференції
27 квітня 2017 року



КИЇВ 2018

Актуальні проблеми в системі освіти: загальноосвітній навчальний заклад – доуніверситетська підготовка – вищий навчальний заклад : зб. наук. праць матеріалів III Всеукраїнської науково-практичної конференції, 27 квітня 2017 р., м. Київ, Національний авіаційний університет / наук. ред. Н. П. Муранова. – К. : – НАУ, 2018. – 320 с.

До наукового збірника увійшли статті та тези доповідей учасників III Всеукраїнської науково-практичної конференції «Актуальні проблеми в системі освіти: загальноосвітній навчальний заклад – доуніверситетська підготовка – вищий навчальний заклад» (27 квітня 2017 року, м. Київ), що проводилася в Навчально-науковому інституті неперервної освіти Національного авіаційного університету спільно з науковими установами та навчальними закладами освіти України. Адресований науковцям, аспірантам, викладачам ЗНЗ і ВНЗ та працівникам у галузі освіти.

Редакційна колегія:

Муранова Н. П., доктор педагогічних наук, професор, директор Навчально-наукового інституту неперервної освіти Національного авіаційного університету (голова);

Черінько С. І., заступник директора Навчально-наукового інституту неперервної освіти Національного авіаційного університету;

Бруяка О. О., кандидат технічних наук, доцент, завідувач підготовчого відділення громадян України Навчально-наукового інституту неперервної освіти Національного авіаційного університету;

Приходько О. Ю., кандидат педагогічних наук, доцент, завідувач кафедри базових і спеціальних дисциплін Навчально-наукового інституту неперервної освіти Національного авіаційного університету;

Максимчук О. В., кандидат філологічних наук, в. о. директора центру допрофесійної підготовки Навчально-наукового інституту неперервної освіти Національного авіаційного університету;

Бугайов О. Є., кандидат технічних наук, доцент, кафедри базових і спеціальних дисциплін Навчально-наукового інституту неперервної освіти Національного авіаційного університету.

Рекомендовано до друку

Науково-методично-редакційною радою Навчально-наукового інституту неперервної освіти Національного авіаційного університету (протокол № 3 від 25.10.2017 р.).

За достовірність наведених даних і посилань несе відповідальність автор публікації.

ЗМІСТ

<i>Авер'янова Наталя.</i> Змішане навчання як інноваційна технологія в освітньому просторі вишів I-II рівнів акредитації	6
<i>Анненков Віктор.</i> Формування професійної компетентності в навчально-виховному процесі підготовки молодших спеціалістів	9
<i>Anpiloňova Tetiana.</i> Ways to Stimulate Mental Activity of Students during English for Specific Purposes (ESP) Classes	12
<i>Багорка Анна.</i> Сутність комунікативної компетентності майбутніх фахівців фізичної культури і спорту	14
<i>Бауманівський Олексій.</i> Вирівнювання двомовних корпусів як сучасна технологія вдосконалення навичок читання у процесі вивчення англійської мови	16
<i>Безносок Олександр.</i> Неперервна освіта і самоосвіта в контексті освітніх реформ	18
<i>Беценко Тетяна.</i> Лінгвокультурологічний аналіз художнього тексту як комплексний різновид науково-інтелектуальної філологічної діяльності	21
<i>Бешок Тетяна.</i> Узагальнені результати діагностики рівнів сформованості медіаграмотності у студентів педагогічних ВНЗ	25
<i>Біліченко Світлана.</i> Проблеми формування системи безперервної освіти: шляхи використання в Україні закордонного досвіду	28
<i>Білоус Олена.</i> Формування просторового мислення при розв'язку математичних задач: від школи до університету	32
<i>Бірюкова Тетяна, Гуцул Оксана.</i> Впровадження у навчальний процес інноваційних технологій	36
<i>Бірюкова Тетяна, Федів Володимир, Олар Олена, Микитюк Орися.</i> Компетентнісний підхід в неперервній освіті	37
<i>Борисенко Надія.</i> Навчально-методичний комплекс «Основи художньо-технічної творчості» у підготовці майбутніх учителів технологій	40
<i>Бруйка Ольга.</i> Методика расчета технологических параметров получения наноструктур	42
<i>Бугайов Олександр.</i> Можливості застосування сучасних інформаційних технологій на практичних заняттях з іноземної мови	47
<i>Варенко Галина.</i> Графічні методи розв'язування задач з параметрами	48
<i>Василевич Леонід, Василевич Олена.</i> Управління портфелем педагогічних методик	52
<i>Величко Ольга.</i> Особливості процесу організації та впровадження технологій дистанційного навчання при підготовці інженерів-будівельників	57
<i>Velko Oksana, Moiseeva Natalia.</i> Mathematical Modeling in Professional Activity of Students of Social-Humanities Specialities	60
<i>Весельська Галина.</i> Вивчення системи сурядних сполучників української мови в старшій та вищій школі	62
<i>Ветрова Дар'я, Гришко Ніна, Ткачук Наталія.</i> Зміни в англійській мові за останні 100 років	65
<i>Власюк Оксана, Погребняк Віталій, Солоденко Алла, Дашковська Олена.</i> До проблем розроблення освітніх програм та навчальних планів	68
<i>Волкова Неоніла, Руденко Наталія.</i> Критичне мислення як метод розвитку творчих можливостей учнів	71
<i>Вольних Наталія.</i> Дистанційне навчання як спосіб реалізації вищої неперервної професійної освіти	74
<i>Воробйова Антоніна.</i> Краєзнавчий інноваційний проект у змісті освітньої діяльності учителів ЗНЗ	76
<i>Гарань Наталія, Шаталова Наталія.</i> Дистанційне навчання й інноваційні технології як умова підвищення якості вищої освіти України	80
<i>Грибан Галина.</i> Використання інноваційних технологій на уроках української мови як необхідна умова формування творчого мислення учнів	82
<i>Гримашевич Галина.</i> Українська діалектологія в контексті сучасної системи освіти	85
<i>Гулай Ольга, Шемет Василина.</i> Особливості професійної підготовки будівельників в умовах неперервної освіти	88
<i>Дараган Тетяна, Тимошенко Наталія, Власюк Оксана.</i> Використання інформаційно-комунікаційних технологій у викладацькій діяльності	91
<i>Даценко Вита.</i> Электронные презентации как метод повышения качества образования	93
<i>Дубчак Галина.</i> Психологічні особливості прояву стресостійкості студентів на різних етапах навчання у ВНЗ	97
<i>Yehorenkov Anatoliy, Pashchenko Viktoria.</i> Integration of Humanitarian and Natural Knowledge in Learning Biophysics and Bioethics in the System of Higher Medical Education	99
<i>Єгорова Лілія.</i> Впровадження сучасних інформаційних технологій у процес навчання	101

Актуальні проблеми в системі освіти: ЗНЗ – доуніверситетська підготовка – ВНЗ

Єрмеєв Олександр. До проблеми застосування міжпредметних зв'язків на заняттях з історії України в контексті сучасних тенденцій розвитку науки	104
Жиленко Тетяна. Застосування модуля числа при розв'язанні математичних завдань у загальноосвітній школі	108
Іванова Тамара. Стратегія освітньої діяльності вищого навчального закладу – вимога світових стандартів вищої освіти	112
Іванчук Марія. Особливості доуніверситетської підготовки іноземних громадян із математики	114
Калюжка Наталія. Професійна готовність майбутніх учителів початкової школи до педагогічної діяльності в умовах компетентнісного підходу	116
Кипоренко Оксана. Місце предметних компетентностей у системі освітніх компетентностей	119
Кожевникова Алла. Удосконалення структури та змісту навчальної дисципліни «Теорія та практика вищої професійної освіти»	122
Коляда Віталіна. Використання інформаційно-комп'ютерних технологій для формування вмінь опрацювання інформації як необхідного фактору здатності до пожиттєвої освіти	125
Котикова Олена. Переваги та недоліки комп'ютерного тестування у підготовці майбутніх фахівців	127
Котлова Людмила. Конфліктологічна компетентність в системі безперервної освіти	130
Котловий Сергій. Соціалізація особистості в дозвілєвій діяльності	133
Крамаренко Любов. Андрагогічний підхід до формування особистісно-професійної компетентності педагогічних працівників у системі підвищення кваліфікації	135
Кресан Ольга. Переживання та усвідомлення студентами життєвих подій за допомогою їх нарративізації	138
Криштанович Світлана. Роль і значення інноваційних технологій у системі неперервної освіти фахівців із фізичної культури і спорту	141
Кумеда Олена. Актуальні проблеми викладання дисциплін історико-лінгвістичного циклу у вищій школі	145
Khobotova Elina. A Differentiated Approach in Chemistry Studies	148
Лаврут Ольга. Забезпечення підручниками в Україні: історичний аспект	151
Мажець Боженна. Інноваційна діяльність дошкільних навчальних закладів в Польщі	153
Максимчук Віра, Ящук Марина. Навчально-виховний проект як засіб формування особистісної компетентності студентів коледжу	157
Максютенко Ірина. Методика виконання слухачами випускних робіт при підвищенні кваліфікації ...	159
Makhrova Yevgeniia. Professional Orientation Work Features of Medical Informatics in Medical Higher Education Institutions	162
Makhrova Yevgeniia, Klepikovskiy Andrey. Teaching Features of Medical Informatics for International Students in Medical Higher Education Institutions	165
Мединець Наталія. Інноваційні технології в системі освіти України	167
Мержвинська Анна. Дослідження суті та переваг дистанційної форми навчання в сучасних умовах	169
Нагорний Вадим, Щербина Андрій, Щербина Вікторія. Особливості навчання тригонометричних рівнянь майбутніх абітурієнтів	172
Носаченко Тетяна. Сучасні засоби профорієнтаційної роботи педагогічного факультету мистецького профілю	174
Олендер Катерина. Формування комунікативної культури студентів у процесі вивчення ділової англійської мови	177
Осійська Вікторія. Розвиток освіти як одна з головних функцій держави на шляху подолання проблем молоді на ринку праці	180
Осійський Юрій. Вплив досвіду концепцій безперервної освіти дорослого населення за кордоном на визначення його розвитку в Україні	183
Островська Людмила. Обдарована дитина у сучасній школі	187
Плотніков Євген, Чепур Ольга. Психолінгвістичні особливості навчання майбутніх інженерів-технологів професійно-орієнтованого англомовного читання	190
Плужник Оксана. Професійна підготовка вчителів початкових класів до роботи з обдарованими учнями	192
Поліщук Оксана, Муранова Наталія. Досвід реформування системи освіти в Чехії	195
Пономарьова Наталія. Інтернет-ресурси з професійної орієнтації школярів на ІТ-спеціальності	199
Потапчук Ольга. Застосування хмарних технологій в системі сучасної вищої освіти	202
Приймак Тамара. Дистанційне навчання – вимога сьогодення	205
Приймак Марина. Методична основа розвитку фізичних якостей у дітей шкільного віку	210
Приходько Оксана, Приходько Петро. Школа як психічна і фізична травма в малій прозі українських і польських письменників другої половини XIX – початку XX століття	212

Матеріали III Всеукраїнської науково-практичної конференції 27 квітня 2017 року

Приходько Петро. Синтез соціалістичних та ліберальних ідей у політичних поглядах Михайла Драгоманова.....	215
Рудик Олександр, Андрійчук Роман. Впровадження SolidWorks у систему неперервної освіти.....	218
Свенницька Валентина. Застосування елементів дистанційного навчання для активізації самостійної роботи слухачів підготовчих курсів	222
Семенець-Орлова Інна. Методи організаційного розвитку сучасного ВНЗ	226
Сіткар Віктор, Сіткар Степан. Освіта й наука як чинники соціальної стабільності та розвитку суспільства	230
Скорочод Георгій. Про важливу інваріантну складову змісту неперервної освіти	233
Сторубльов Олександр, Абрамян Олександр. Інноваційні педагогічні технології як предмет сучасних наукових досліджень	236
Строгонова Тетяна. Аналіз особливостей конкурсного відбору в медичні університети Великої Британії.....	239
Тарасюк Василь, Муранов Андрій. Використання елементів вищої математики на заняттях зі слухачами підготовчих курсів.....	242
Тищенко Інна. Застосування сучасних програмно-графічних калькуляторів на уроках математики ..	245
Ткаченко Лариса. Особливості навчальної діяльності молодших школярів	249
Ткаченко Лідія. Філософсько-освітні нотатки щодо соціалізації сучасних учнів в Інтернет-просторі....	252
Ткаченко Маргарита. Інформаційні технології у житті сучасного учня: аспект охорони здоров'я	256
Трегубова Галина. Методологічні засади організації управління самостійною роботою студентів ВНЗ.....	261
Триколенко Софія. Природні мотиви у творчості молодих ювелірів.....	264
Федина-Дармохвал Володимира. Вивчення особливостей мотивації здобуття фаху в студентів-сходознавців.....	266
Федоренко Олена. Використання інформаційно-комунікативних технологій і електронних засобів на уроках української мови та літератури.....	269
Федорова Ніна, Муранова Наталія. Особливості інтелектуального розвитку старшокласників	273
Халецька Лілія. Розвиток загальнокультурної компетентності вчителів у системі післядипломної педагогічної освіти у контексті парадигми «Освіта протягом життя»	281
Хмельницька Олена. Формування особистості вихованця у процесі застосування технології коучингу	284
Хребет Валерій, Каряка Інна. Особливості використання інтерактивних методів навчання в процесі викладання дисциплін природничого циклу.....	287
Чалий Олександр, Гур'янов Віталій, Храпійчук Галина. Використання новітніх технологій при вивченні медичної та біологічної фізики	291
Черкашина Людмила. Розкриття сутності поняття трудового виховання учнів	294
Шванова Оксана, Гензель Марина. Значення подкастів у вивченні іноземної мови	296
Ямкова Тетяна. Педагогічні умови застосування тестів успішності в навчальному процесі.....	299
Ямковий Олександр, Шевченко Олександр, Незгода Людмила. Навчально-виробничі практики як складова професійної підготовки майбутніх фахівців галузі геодезії, картографії та землеустрою.....	302
Янчук Наталія. Орфографічна грамотність як складова фахової підготовки майбутніх учителів-філологів.....	305
Яригіна Єлизавета. Деякі питання щодо моніторингу якості освіти в університеті.....	308
Яценко Володимир. Ключові чинники, які впливають на формування навчального матеріалу сучасного підручника географії	310
Відомості про авторів	313

МЕТОДИКА РАСЧЕТА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПОЛУЧЕНИЯ НАНОСТРУКТУР

Настоящая статья посвящена методике расчета технологических параметров получения наноструктур с использованием квантово-механического подхода, а также классического подхода для оценки диапазона размеров наноструктур.

Ключевые слова: нанотехнологии, нанообъекты, нанотехника, наносистемы, самосборка, наноматериалы, биоподобные структуры, нановолокна.

The article presents a calculation procedure for technological parameters of obtaining nanostructures with the use of the quantummechanical approach. The classical approach to evaluating the range of nanostructure sizes is also considered.

Keywords: nanotechnology, nano-objects, nanoengineering, nanosystems, self-assembly, nanomaterials, biosimilar structures, nanofibers.

По мнению многочисленных экспертов, XXI век ознаменуется новой научно-технической революцией, связанной с нанотехнологиями и наноматериалами. Хотя для понятия «нанотехнология», введенного, как известно, Ричардом Фейнманом в 1959 г., нет четкого однозначного определения, из аналогии с существующими микротехнологиями следует, что нанотехнологии – это технологи, оперирующие величинами порядка нанометра. Другими словами, это технологи высочайшего уровня, позволяющие работать с небольшими группами атомов или молекул и даже с отдельными атомами. Основная идея нанотехнологий заключается в том, что практически любая химически стабильная структура может быть, если это не запрещено физическими законами, построена (собрана) искусственно путем соответствующей манипуляции отдельными атомами или их группами. Поэтому переход от

«микро» к «нано» - это уже не количественный, а качественный переход – скачок от манипуляции веществом к манипуляции отдельными атомами.

Возможности нанотехнологий представляются поистине неограниченными – от производства компьютеров с терагерцовой тактовой частотой до создания молекулярных роботов-врачей, которые «жили» бы внутри человеческого организма, предотвращая или устраняя все повреждения, включая генетические.

Рассмотрим методику расчета технологических параметров получения наноструктур, которая будет базироваться на следующих аспектах: рассматриваем квантово-механические основы уникальных свойств наноструктур; проводим оценку диапазона размеров наноструктур, для которых справедлив классический подход; используем квантово-механический подход для определения теплофизических и термомеханических характеристик материалов. Для нанозерна доля атомов, находящихся в тонком поверхностном слое (его толщину принимают, как правило, порядка 1 нм), по сравнению с мезо- и микрочастицами заметно возрастает. Действительно, доля приповерхностных атомов будет пропорциональна отношению площади поверхности частицы S к ее объёму V . Если обозначить характерный размер частицы (кристаллита) как D , то: $S/V \sim D^2/D^3 \sim 1/D$. У поверхностных атомов, в отличие от находящихся в объёме твёрдого тела, задействованы не все связи с соседними атомами. Для атомов, находящихся на выступах и уступах поверхности, ненасыщенность связей еще выше. В результате в приповерхностном слое наблюдаются сильные искажения кристаллической решётки, приводящие даже к изменению типа решётки. Другим аспектом является тот факт, что свободная поверхность является стоком бесконечной ёмкости для точечных и линейных кристаллических дефектов (в первую очередь, вакансий и дислокаций). При малых размерах частиц этот эффект заметно возрастает, что может приводить к выходу большинства структурных дефектов на поверхность и очистке материала наночастицы от дефектов структуры и химических примесей. В настоящее время установлено, что процессы деформации и разрушения протекают в тонком приповерхностном слое с опережением по сравнению с внутренними объёмами металлического материала, что во многом определяет возникновение ряда физических эффектов, в т.ч. физического предела текучести и физического предела усталости.

Для наночастиц весь материал будет работать как приповерхностный слой, толщина которого оценивается в диапазоне порядка 0,5–20 мкм. Можно также указать на тонкие физические эффекты, проявляющиеся в специфическом характере взаимодействия электронов со свободной поверхностью.

Следующей причиной специфики свойств наноматериалов является увеличение объёмной доли границ раздела с уменьшением размера зёрен или кристаллитов в наноматериалах. При этом можно выделить объёмную долю следующих составляющих: границ раздела, границ зёрен и тройных стыков. Объёмную долю границ раздела (V_{zp}) можно оценить по формуле:

$$\Delta V_{zp} = 1 - [(D - s) / D]^3, \quad (1)$$

где S – толщина границ раздела (порядка 1 нм), а D – характерный размер зерна или кристаллита.

Объёмную долю границ зёрен (V_{z3}) можно определить по формуле

$$\Delta V_{z3} = [3s(D - s)^2] / D^3,$$

а объёмную долю тройных стыков V_{mc} – как разность $\Delta V_{mc} = \Delta V_{zp} - \Delta V_{z3}$. (2)

На рис. 1 представлены рассчитанные по этим формулам зависимости указанных объёмных долей границ раздела, границ зёрен и тройных стыков от размера зерна.

Видно, что с уменьшением размера зерна от 1 мкм до 2 нм объёмная доля межзёренной компоненты (границ раздела) увеличивается с 0,3 до 87,5%. Объёмные доли межзёренной и внутризёренной компонент достигают одинакового значения (по 50%) при размере зерна порядка 5 нм. После уменьшения размера зерна ниже 10 нм начинает сильно возрастать доля тройных стыков. С этим связывают аномальное падение твердости в этом интервале размеров зерна. Комплексные экспериментальные исследования показали, что границы зёрен имеют неравновесный характер, обусловленный присутствием зернограницных дефектов с высокой плотностью.

Эта неравновесность характеризуется избыточной энергией границ зёрен и наличием дальнедействующих упругих напряжений: границы зёрен имеют кристаллографически упорядоченное строение, а источниками упругих полей являются зернограницные дислокации и их комплексы. Неравновесность границ зёрен приводит к возникновению высоких напряжений и искажению кристаллической решётки, изменению межатомных расстояний и появлению значительных смещений атомов, вплоть до потери дальнего порядка. Результатом является значительное повышение микротвёрдости.

Важным фактором, действующим в наноматериалах, является также склонность к появлению кластеров. Облегчение миграции атомов (групп атомов) вдоль поверхности и по границам раздела и наличие сил притяжения между ними, которые для наноматериалов больше по сравнению с

традиційними матеріалами, часто приводять к процесам самоорганізації островкових, столбчатых и других кластерных структур на подложке. Этот эффект уже используют для создания самоорганизованных наноструктур для оптики и электроники.

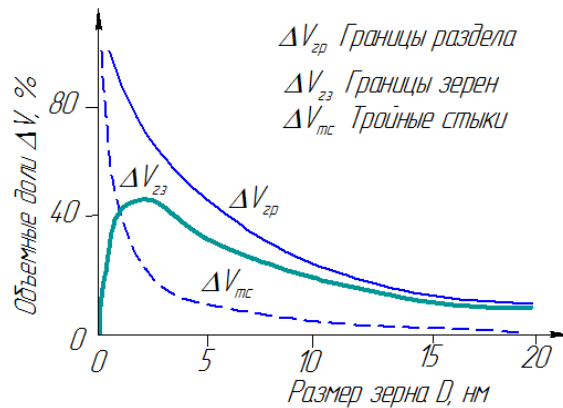


Рис. 1. Залежності об'ємних долей границь розділа, границь зерен і трійних стыків [1.]

Ещё одну причину специфики свойств наноматериалов связывают с тем, что при процессах переноса (диффузия, пластическая деформация) имеет место некоторая эффективная длина свободного пробега носителей этого переноса L_e . При характерных размерах области протекания процессов переноса много больших L_e рассеяние носителей выражено незначительно, но при размерах, меньших L_e , перенос начинает зависеть от размеров и формы весьма значительно. В случае наноматериалов в качестве L_e могут быть, например, диффузионная длина и длина свободного пробега дислокаций.

Для материалов с размерами кристаллитов в нижнем нанодиапазоне $D < 10$ нм ряд ученых указывает на возможность проявления квантовых размерных эффектов. Такой размер кристаллитов становится соизмеримым с длиной волны де Бройля для электрона $\lambda_e \sim (m_e E)^{-1/2}$ (m_e – эффективная масса электрона, E – энергия Ферми). Для металлов $\lambda_e \approx 0,1 \dots 1$ нм, а для ряда полупроводников, полуметаллов и тугоплавких соединений переходных металлов $\lambda_e \approx 10 \dots 100$ нм. Для любой частицы с малой энергией (скорость $v \ll$ скорости света c) длина волны де Бройля определяется как $\lambda_e = h/mv$, где m и v – масса и скорость частицы, а h – постоянная Планка. Квантовые эффекты будут выражаться, в частности, в виде осциллирующего изменения электрических свойств, например проводимости [1].

Видно, что существенного увеличения качественных характеристик наноструктур следует ожидать только при размерах, больших 10 нм, что необходимо учитывать при выборе технологических режимов для получения наноструктур.

В настоящее время есть достаточно много работ по экспериментальному изучению возможности получения наноструктур. Теоретических работ практически нет, за исключением работ [1, 2], но и они не позволяют учитывать энергию, затрачиваемую на образование нанозерна, которая в определенных условиях может быть значительной, что существенно снижает точность проводимых расчетов.

Приняв, что энергия образования зерна равна или несколько больше энергии атомизации зерна, ее можно рассчитать, используя методику работы [3]. Эта энергия может быть определена после первоначального нахождения числа частиц в нанокластере (НК) и определения, что частицы являются атомами или химическими соединениями. Тогда, определив долю атомов и химических соединений в зерне и зная энергию атомизации зерен каждого типа кластера (состоящего из атомов и химических соединений) и умножив на их количество, можно получить энергию, затрачиваемую на образование зерна, как сумму энергий образования кластера из атомов и химических соединений.

Рассчитаем энергию атомизации для нитридов и карбидов металлов. Определив число частиц в НК, мы можем найти энергию атомизации частиц в кластере, которая может быть вычислена с учетом двух энергий – энергии кулоновского отталкивания E_k и энергии ионной связи E_u по выражению:

$$E_{cs} = E_u + E_k = \varepsilon^2 U + (1 - \varepsilon^2)^{1/2} D_0 N = \frac{\varepsilon^2 k A e^2 z^2 N}{R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0} \right) + (1 - \varepsilon^2)^{1/2} D_0 N, \quad (3)$$

где ε – степень ионности; k – коэффициент пропорциональности, называемый электростатической постоянной, который зависит от выбора единиц измерения в Международной системе единиц:

$$k = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \approx 8,987742438 \cdot 10^9 \left[\frac{H \cdot M^2}{Kl^2} \right]; A$$

– константа Моделунга; e – заряд электрона; z – заряд иона; N – количество частиц; R_0 – кратчайшее межатомное расстояние; ρ – степень отталкивания; D_0 – энергия диссоциации одной частицы вещества.

Степень ионности ε для вещества АВ определяем по выражению:

$$\varepsilon = \frac{I_A^V + F_A^V - I_B^V - F_B^V}{I_A^V - F_A^V + I_B^V - F_B^V}, \quad (4)$$

Где I – потенциал ионизации для элемента A в валентном состоянии; F_A^V – сродство к электрону для материала A в валентном состоянии.

Эти величины обычно определяются экспериментально, значения их известны для небольшого числа элементов. Для упрощения вычисления можно использовать упрощенную формулу, дающую менее точное значение:

$$\varepsilon = \frac{X_A - X_B}{X_A + X_B}, \quad (5)$$

где X_A, X_B – степень окисления для элементов A и B по шкале Полиннга.

Константа Моделунга A , вычисляемая суммированием бесконечного ряда, имеет вид

$$A = \sum_j^N \frac{z_i z_j}{P_{ij}}, \quad (6)$$

где z_i, z_j – заряды взаимодействующих ионов.

Энергия электростатического кулоновского взаимодействия

$$\varphi_{ij} = \frac{e^2 z_i z_j}{R_{ij}}, \quad (7)$$

Где R_{ij} – расстояние между зарядами i и j , для удобства оно может быть представлено как $R_{ij} = P_{ij} \cdot R_0$.

Тогда энергия взаимодействия i -го иона со всеми остальными ионами (N) имеет вид

$$U = \frac{1}{2} \left(N \sum_i^N \frac{e^2 z_i z_j}{R_0} \cdot \frac{1}{P_{ij}} + N \sum_j^N \frac{e^2 z_i z_j}{R_0} \cdot \frac{1}{P_{ij}} \right) = \frac{Ne^2}{R_0} \sum_j^N \frac{z_i z_j}{P_{ij}}. \quad (8)$$

В формуле множитель $\frac{1}{2}$ появляется, так как каждая взаимодействующая пара ионов должна учитываться один раз. Очевидно, что постоянная в выражении для электростатической энергии называется константой Моделунга.

Степень отталкивания ρ зависит от величины и характера деформирования зерна.

По мере увеличения сжатия сопротивление кристалла быстро растет, ионы отталкиваются друг от друга и силы отталкивания быстро возрастают по мере сближения ионов друг с другом. Поскольку отталкиваются электронные оболочки ионов, проникающие одна в другую, то правильное описание этих сил возможно только на основе квантовой механики. Однако эвристический (т. е. основанный на правильной догадке) подход был применен М. Борном и его сотрудниками еще до создания квантовой механики (1918). Они предложили две формы потенциала отталкивания: сначала обратную степенную

$\frac{b}{R^n}$, а позже экспоненциальную $Be^{-\frac{R}{\rho}}$. Параметры b и n , B и ρ входящие в эти выражения, могут быть

определены с помощью экспериментальных данных, в частности по сжимаемости кристалла:

$$\frac{1}{\rho} = \frac{2}{R_0} + \frac{9V}{A\beta}, \quad (9)$$

где V – объем моля кристалла; A – константа Моделунга; β – сжимаемость кристалла.

$$D_0 = \sum_{i=1}^m \Delta H_{am}(i). \quad (10)$$

В результате расчетов получаем энергию атомизации для химических соединений при различных зарядовых числах, степенях отталкивания и энергиях диссоциации. Так, для ряда нитридов и карбидов они представлены в табл. 1.

Используя значения энергии атомизации, представленные в таблице, и зная число частиц в НК, получаем энергию, необходимую для получения зерна.

Всё это говорит о том, что энергия кристаллизации является важной величиной и в балансе энергий в зоне образования наноструктуры для ионов малых масс может оказывать существенное влияние. При переходе к ионам больших масс, например гафния, её практически можно не учитывать.

Используя предложенные методики определения энергии образования нанокластеров (нанозерна), мы можем найти более точно технологические параметры потоков ионов (энергия, заряд и сорт иона), при

которых можно получать наноструктуры необходимых размеров, а следовательно, и прогнозировать их физико-механические характеристики, так как они зависят от размера зерна.

Таблиця 1.

Энергия атомизации для нитридов и карбидов металлов при различных зарядовых числах z , степенях отгалькивания ρ и энергиях диссоциации D

Материал покрытий	Степень отгалькивания ρ , [м]	Теория			Эксперимент		Энергия диссоциации D , эВ
		$z = 1$	$z = 2$	$z = 3$	$z = 1$	$z = 2$	
TiN	$0,287 \cdot 10^{-10}$	5,756	9,125	14,74		13,23	4,9035
TiN	$0,854 \cdot 10^{-10}$	5,3989	7,6966	11,526		13,23	4,9035
TiN	$0,4326 \cdot 10^{-10}$	5,664	8,7586	13,9156		13,23	4,9035
TiN	$0,287 \cdot 10^{-10}$	10,347	13,716	19,331		13,23	9,7622
TiN	$0,854 \cdot 10^{-10}$	9,9899	12,288	16,117		13,23	9,7622
TiN	$0,4326 \cdot 10^{-10}$	10,256	13,350	18,507		13,23	9,7622
ZrN	$0,287 \cdot 10^{-10}$	6,874	11,4427	19,0572		14,53	5,8148
ZrN	$0,943 \cdot 10^{-10}$	6,3518	9,3539	14,3574		14,53	5,8148
ZrN	$0,4126 \cdot 10^{-10}$	6,7741	11,0431	18,1574		14,53	5,8148
ZrN	$0,287 \cdot 10^{-10}$	11,760	16,328	23,943		14,53	
ZrN	$0,943 \cdot 10^{-10}$	11,238	14,240	19,244		14,53	
ZrN	$0,4126 \cdot 10^{-10}$	11,66	15,929	23,044		14,53	
AlN	$0,295 \cdot 10^{-10}$	4,476	7,376	12,209		10,169	
AlN	$0,851 \cdot 10^{-10}$	4,153	6,084	9,304		10,169	
AlN	$0,450 \cdot 10^{-10}$	4,386	7,016	11,399		10,169	
HfN	$0,282 \cdot 10^{-10}$	6,740	9,4589	13,9889		16,09899	
HfN	$0,806 \cdot 10^{-10}$	6,4919	8,4629	11,7479		16,09899	
HfN	$0,433 \cdot 10^{-10}$	6,6699	9,1749	13,349		16,09899	
TiC	$0,309 \cdot 10^{-10}$	5,377	7,253	10,380		14,23	
TiC	$0,820 \cdot 10^{-10}$	5,197	6,536	8,766		14,23	
TiC	$0,495 \cdot 10^{-10}$	5,311	6,990	9,790		14,23	
CrN	$0,288 \cdot 10^{-10}$	4,897	7,766	12,547			
CrN	$0,815 \cdot 10^{-10}$	4,590	6,538	9,785			
CrN	$0,445 \cdot 10^{-10}$	4,806	7,390	11,724			
HfC	$0,318 \cdot 10^{-10}$	6,3631	9,444	14,580		16,4895	
HfC	$0,943 \cdot 10^{-10}$	6,024	8,087	11,526		16,4895	
HfC	$0,481 \cdot 10^{-10}$	6,275	9,091	13,785		16,4895	
TiO ₂	$0,293 \cdot 10^{-10}$	16,3935	29,052	50,1495			
TiO ₂	$0,947 \cdot 10^{-10}$	14,823	22,77	36,015			
TiO ₂	$0,424 \cdot 10^{-10}$	16,079	27,794	47,319			
TiO ₂	$0,293 \cdot 10^{-10}$	79,686	29,052	45,93			
TiO ₂	$0,947 \cdot 10^{-10}$	54,558	22,77	33,366			
TiO ₂	$0,424 \cdot 10^{-10}$	260,958	27,794	43,414			
CrC	$0,310 \cdot 10^{-10}$	11,757	13,212	15,637			
CrC	$0,786 \cdot 10^{-10}$	11,616	12,648	14,368			
CrC	$0,511 \cdot 10^{-10}$	12,009	14,22	17,905			
ZrC	$0,309 \cdot 10^{-10}$	13,9275	16,821	21,643		15,6217	
ZrC	$0,902 \cdot 10^{-10}$	13,628	15,624	18,950		15,6217	
ZrC	$0,470 \cdot 10^{-10}$	13,792	16,495	20,909		15,6217	

Литература

1. Екобри Т. Физика и механика прочности твердых тел / Т. Екобри. – М. : Металлургия, 1971. – 264 с.
2. Хеккель К. Техническое применение механики разрушения / К. Хеккель. – М. : Металлургия, 1974. – 63 с.
3. Костюк Г. И. Эффективный режущий инструмент / Г. И. Костюк. – Х. : НАКУ «ХАИ» 2007. – 610 с.
4. Костюк Г. И. Наноструктуры на базе фуллеренов: Физика, свойства, применение / Г. И. Костюк // Вопросы проектирования и производства конструкций летательных аппаратов: сб. научн. трудов Нац. аэрокосм. ун-та им. Н. Е. Жуковского «ХАИ». Х. : – 2007. – Вып. 3(50). – С. 78–96.
5. Костюк Г. И. Об аномально высокой микротвердости слоев из одно- и многокомпонентных покрытий из нитридов, карбидов и карбонитридов металлов / Г. И. Костюк // Вісті АІНУ. – № 3(30). – 2006. – С. 222–231.
6. Костюк Г. И. Трибологические свойства алмазоподобных углеродных покрытий и возможные области их применения / Г. И. Костюк, И. А. Сыпченко // Вісті АІНУ. – № 3(30) – 2006, С. 251 – 259.
7. Костюк Г. И. Научные основы создания современных технологий / Г. И. Костюк // Х. : Нац. аэрокосм. ун-та им. Н. Е. Жуковского «ХАИ», 2008. – 601 с.