

14. Rogovoy S. I. Problema doslidzhennia i realizatsyi diahram stanu betonu v teorii rozrakhunku zalizobetonnykh konstruksiy // Budivelni konstruksiyi. – K. : Budivelnik, 2003. – Vyp. 59. – S. 137 – 142.
15. Skaramtaev B. G. Sposoby opredeleniya sostava betona razlychnykh vidov / B. G. Skaramtaev, P. F. Shubenkin, Y. M. Bazhenov. – M. : Stroizdat, 1966. – 159 s.
16. Sizov V. P. Ratsional'nyy podbor sostavov tyazhelogo betona. – M. : Stroizdat, 1995. – 174 s.
17. Sizova N. D. Otsenka izmeneniya prochnosti betona vo vremeni / N. D. Sizova, I. A. Mikheev // Naukovyy visnyk budivnytstva. – Kharkov: KHNUBA KHOTB ABU, 2013. – № 74. – S. 190 – 195.
18. Sposib vyznachennya skladu vysokomitsnoho, trishchynostiykoho i vodonepronyknoho betonu: Patent Ukrainy 62613 UA / MPK 7C04B28/12/ A. M. Plugin, O. A. Kalinin, S. V. Mirosnichenko, A. A. Plugin ta in. – Zayavl.15.04.2003. – № 2003043396. – Opubl. 15.06.2005. – Bul. № 6.
19. Sposib oderzhannya povnykh diahram stanu: Patent Ukrainy 55204 A, MKI E04C1/04/ S. I. Rogovoy, D. V. Krugliy, R. I. Pahomov. – Zayavl. 19.07.2002. – № 2002076000. – Opubl. 17.03.2003. – Bul. № 3.
20. Fainer M. Sh. Novyye zakonomernosti v betonovedeniy i ikh prakticheskoye prilozheniye. – K. : Naukova dumka, 2001. – 448 s.

УДК: 541.1, 544.2

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КАТИОНА КАЛЬЦИЯ С ПОВЕРХНОСТЬЮ ГРАФЕНА

Решетняк В.В.¹, Ваганов В.Е.², Большаков В.И.²

¹Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых, ²Приднепровская государственная академия строительства и архитектуры

Ключевые слова: графен, кальций, катион-π комплексы, DFT

Введение. Создание композитных материалов на основе углеродных нанотрубок (УНТ) и цементных вяжущих компонентов является перспективным направлением повышения характеристик строительных конструкций [1–6]. Отмечено повышение прочности композитов от 30 до 100 % по отношению к базовому компоненту. В работах [2–6] было показано, что использование УНТ влияет на интенсивность набора прочности [3; 5], микроструктуру и фазовый состав композитов [2; 4], на основании чего выдвинуты предположения об основополагающей роли взаимодействия ионов кальция с поверхностью МУНТ [2; 6]. Однако основной проблемой является нестабильность характеристик получаемых материалов, что может быть обусловлено целым рядом факторов (различная степень ассоциации УНТ, морфологические особенности нанообъектов), среди которых весьма существенным является отсутствие сведений о механизме взаимодействия ионов кальция с поверхностью УНТ. Последнее делает практически невозможным сколь-нибудь достоверное предсказание тенденций в изменение характеристик формируемых композитов.

Следует отметить, что в ряде работ рассмотрены теоретические аспекты взаимодействия углеродных нанообъектов с ионами непереходных [7–9] и переходных металлов [10; 11]. Установлено, что характер взаимодействия в значительной мере зависит от типа ионов и размеров углеродных наночастиц, участвующих во взаимодействии [8–10]. Для ионов переходных металлов характерен перенос заряда при взаимодействии с углеродными нанообъектами, а для ионов непереходных металлов – взаимодействие по электростатическому механизму без переноса заряда.

Среди прочих ионов металлов особое место выделяется ионам тяжелых щелочно-земельных металлов Ca^{2+} и Sr^{2+} [12]. Аспекты взаимодействия этих ионов с углеродными нанообъектами исследовались в работах [13–15]. Указывается возможность взаимодействия этих ионов с различными углеродными наноструктурами как по электростатическому механизму [13], так и по донорно-акцепторному механизму [15], что объясняется зависимостью

характера взаимодействия от структуры наночастицы и особенностями электронного строения указанных ионов.

Теоретическое исследование взаимодействия ионов щелочных и щелочно-земельных металлов (в том числе рассмотрены ионы Ca^{2+}) с поверхностями графена и углеродных нанотрубок различного диаметра и хиральности выполнено в работе [15]. При моделировании углеродных наночастиц использовалась кластерная модель, в которой рассматривается фрагмент наночастицы конечных размеров с атомами водорода на границах. В работе [15] выполнена оптимизация металлоуглеродных комплексов, расчет энергии связи ионов с поверхностью методом функционала электронной плотности (Density Functional Theory, DFT) [16] системы, находящейся в равновесном связанном состоянии. Одним из основных результатов работы является анализ характера взаимодействия от типа иона и структуры углеродного нанобъекта.

В настоящей работе методом DFT выполнено исследование взаимодействия ионов Ca^{2+} с поверхностью однослойного графена в рамках модели двумерного кристалла. Выполнен анализ кривых зависимости энергии взаимодействия от расстояния между ионом и графеновой поверхностью. Показано, что взаимодействие осуществляется по обменному механизму и сопровождается переносом заряда, определена энергия взаимодействия, изучено влияние концентрации кальция на характеристики взаимодействия.

Выбор объекта моделирования связан с тем, что по электронной структуре и химическим свойствам графен близок к поверхности УНТ большого диаметра (> 5 нм), которые реально и используются при формировании композитных материалов. Энергия электронных состояний углеродных однослойных УНТ выражается суммой соответствующей энергии для графена и добавки, учитывающей кривизну поверхности УНТ, причем величина добавки пропорциональна отношению длины углерод-углеродной связи к диаметру УНТ [17]. Таким образом, с ростом диаметра идеальные однослойные УНТ по электронной структуре асимптотически приближаются к графену [18].

Расчет выполнялся с использованием метода плоских волн [19] для периодической структуры. Такой подход представляется более корректным для решения поставленной задачи, по сравнению с альтернативным кластерным подходом, использованным в [15], исходя из следующих соображений. Как известно, электронная структура и химические свойства молекулярных фрагментов графена и УНТ существенно зависят от их размеров. С увеличением размеров, электронная структура фрагментов приближается к электронной структуре графена и нанотрубок [20; 21]. В работе [20] было показано, что удовлетворительное совпадение электронной структуры графена и его молекулярных фрагментов достигается для молекул, состоящих более чем из 600 атомов. Решение подобных задач методом DFT с использованием современной вычислительной техники не представляется возможным, поэтому, как правило, применение кластерного подхода сопряжено с чрезмерным уменьшением размеров кластеров.

Модели и методы. Выполнено рассмотрение структур, включающих 18 и 50 атомов углерода (рис.1), что соответствует значениям концентраций ионов кальция на графеновой поверхности 15,6 % масс. и 6,3 % масс.

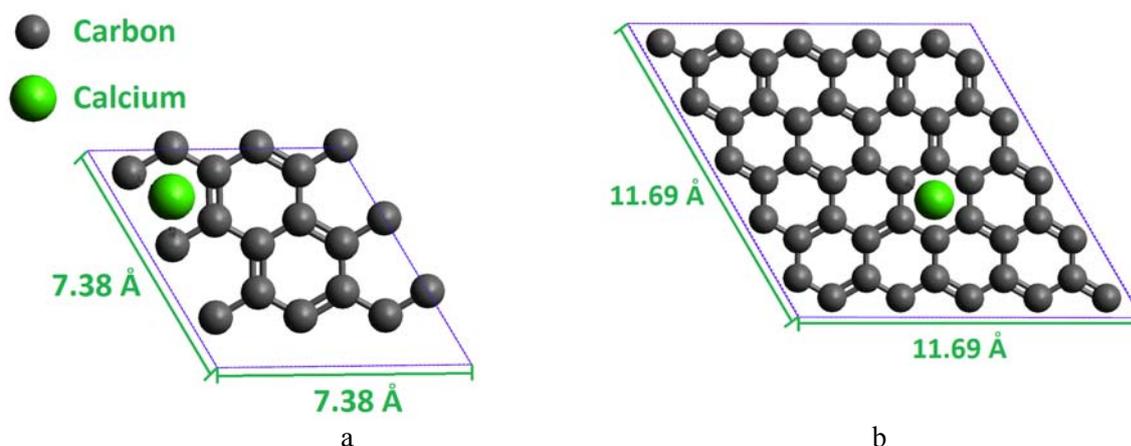


Рис.1. Структура элементарной ячейки комплекса кальций-графен, с различными концентрациями кальция: а – концентрация 15,6 % масс, b – концентрация 6,3 % масс

Для расчета электронных волновых функций использовались периодические граничные условия. Расчеты выполнялись с использованием программного пакета Quantum Espresso [22] методом DFT с использованием функционала Пердью-Бурке-Эрнцерхофа, модифицированного для эффективного описания плотноупакованных структур (PBESol) [23], и релятивистских псевдопотенциалов Хартвигсена-Гоздекера-Хаттера [24], разработанных для всех элементов от H до Rn. Обменно-корреляционный функционал PBESol не содержит эмпирических констант, хорошо подходит для расчета электронной структуры и физико-химических свойств графена и, в то же время, с высокой точностью описывает энергии диссоциации молекул [23; 25]. При расчетах использовалась схема генерации k-точек по методу Монхорста-Пака [26] с плоской сеткой 9x9, которая включает в себя точки высокой симметрии K и K', что необходимо для правильного расчета электронной структуры и химических свойств графена.

Примененный подход позволяет успешно описывать не только взаимодействия в металлах, ионных и ковалентных кристаллах, но так же катион-π взаимодействия в металлоуглеродных комплексах [10; 15; 27].

Результаты и обсуждение. Оптимизация структуры рассмотренных соединений, представленных схематически на рис. 1, свидетельствует о существовании для них локального минимума потенциальной энергии, соответствующего структуре в которой ион кальция располагается по оси симметрии гексагона, образованного атомами углерода графеновой поверхности. Расстояния между атомами кальция и углерода различны для разных концентраций, и составляют 2.59 Å при концентрации кальция 6,3 % масс, 2,89 Å при концентрации кальция 15,6 % масс.

Взаимодействие иона кальция с графеновой поверхностью сопровождается переносом заряда. Анализ заселенности по Лёвдину свидетельствует о том, что заряд кальция, связанного с графеновой поверхностью, равен 1.43 и 1.33 при концентрациях кальция 15,6 % масс и 6,3 % масс соответственно. Энергия взаимодействия ионов кальция с графеном так же зависит от концентрации, и увеличивается с увеличением размеров фрагмента графена. При этом вакантная 3d орбиталь кальция частично заселяется и перекрывается с π-орбиталью графена, образованной 2p орбиталями ближайших шести атомов углерода. Заселенность 3d орбитали кальция составляет 0,30 при концентрации кальция 15,6 % масс и 0,40 при концентрации кальция 6,3 % масс. В результате ион кальция связывается с графеном по обменному механизму. Связь не является насыщенной, поскольку электронная плотность распределяется равномерно между шестью ближайшими атомами углерода и атомом кальция.

На рис. 2 представлена карта распределения зарядовой плотности в системе Ca²⁺ - графен (концентрация 15.6% масс), положительным значениям зарядовой плотности соответствует электронная плотность, а отрицательным — плотность распределения «дырок». Рисунок 2a соответствует распределению электронной плотности системы в плоскости, перпендикулярной плоскости графена (светлая полоса внизу на рисунке 2a соответствует линии пересечения плоскостей) и проходящей через ион кальция (яркое пятно вверху, над графеновой плоскостью), с учетом всех электронов системы, за исключением входящих в псевдопотенциальные ионные остовы. На рисунке 2b распределение заряда в этой же плоскости, за вычетом электронной плотности отдельных фрагментов (иона Ca²⁺ и графена). Анализ разности электронной плотности связанной системы и отдельных фрагментов позволяет выделить перераспределение электронной плотности в системе в результате образования связи. На рис. 2c — распределение заряда в плоскости и расположенной посередине между ионом кальция и графеновой плоскостью и параллельной плоскости графена, за вычетом электронной плотности отдельных фрагментов.

Из рисунка 2b видно, что взаимодействие между ионом кальция и графеновой плоскостью сопровождается переносом электронной плотности от атомов углерода к иону кальция, который связывается с графеном по обменному механизму. Рисунок 2c свидетельствует о том, что обменное связывание осуществляется симметрично с шестью ближайшими к иону кальция атомами углерода. Таким образом, связи не насыщаемы и имеют не ковалентную природу.

Спектры плотности электронных состояний 3d орбитали кальция и 2p орбитали одного из соседних атомов углерода представлены на рисунке 3.

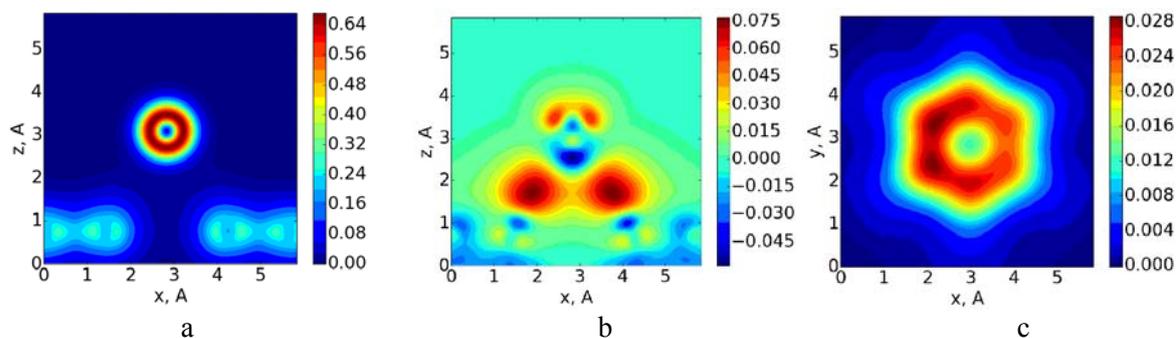


Рис.2. Карты распределения электронной плотности в плоскости перпендикулярной (a, b) и параллельной (c) графеновой. a — учтены все электроны системы, для которых рассчитывались волновые функции b, c — электронная плотность за вычетом электронной плотности отдельных фрагментов системы: иона Ca^{2+} и графена

Таким образом, о перекрывании атомных орбиталей иона кальция с π -орбиталью графена свидетельствует анализ распределения зарядовой плотности на рисунке 2, анализ плотности состояний для этих орбиталей, а так же анализ заселенностей атомных орбиталей по Лёвдину. Следует заметить, тем не менее, что подобный механизм взаимодействия с π -структурами более характерен для ионов переходных металлов, имеющих активную вакантную d-оболочку [7–15].

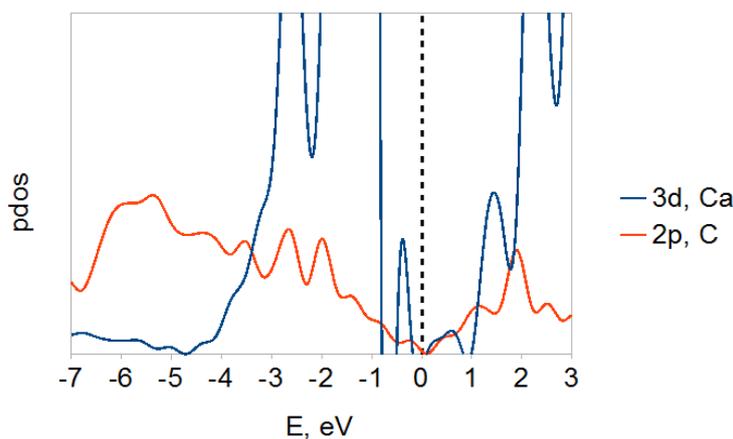


Рис.3. Плотности электронных состояний 2p орбитали атома углерода графеновой поверхности и 3d орбитали связанного с этим атомом иона кальция

Кроме обменного взаимодействия между ионом кальция и графеновой поверхностью существует электростатическое отталкивание: в результате перезарядки заряд атома кальция остается положительным, хотя его значение и уменьшается. Атомы углерода так же приобретают положительный заряд, который распределяется по графеновой поверхности, минимизируя энергию кулоновского отталкивания. Распределение заряда в графеновой плоскости для равновесной структуры Ca^{2+} – графен представлено на рисунке 4. На этих картах распределения зарядовой плотности представлено распределение электронной плотности в плоскости графена, связанного с ионом кальция, за вычетом электронной плотности отдельных фрагментов. Отрицательным и положительным значениям соответствует плотность «дырок» и электронов. При построении рисунка размеры фрагментов поверхности выбраны одинаковыми с учетом периодичности структуры.

Из рисунка видно, что распределение зарядовой плотности в плоскости графена характеризуется однородностью: минимальные и максимальные значения зарядовой плотности в 3–10 раз меньше соответствующих значений в перпендикулярной плоскости, представленных на рисунке 2b. Причем, снижение концентрации кальция способствует снижению среднего значения зарядовой плотности (при увеличении площади поверхности фрагмента в 2,5 раза суммарный заряд всех атомов углерода этого фрагмента меняется на 15%), однако не существенно влияет на максимальное и минимальное значения, что свидетельствует о более

неоднородном распределении. Снижение среднего значения зарядовой плотности и ее перераспределение в плоскости графена способствует уменьшению энергии кулоновского отталкивания, что может выступать в качестве одной из причин увеличения энергии связи при снижении концентрации кальция. Уменьшение энергии кулоновского отталкивания является одной из возможных причин увеличения энергии и уменьшения длины и увеличения энергии металлоуглеродных связей в комплексах Ca^{2+} – графен, которое наблюдается с уменьшением концентрации кальция.

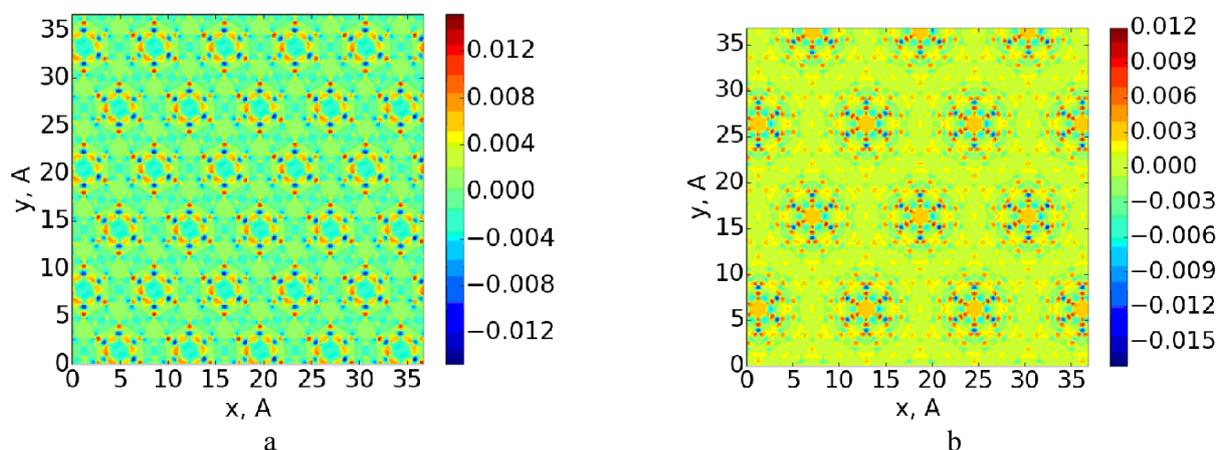


Рис. 4 Распределение зарядовой плотности в плоскости графена, связанного с ионами кальция *a* — концентрация кальция 15,6 % масс, *b* — концентрация кальция 6,3 % масс

Второй возможной причиной увеличения энергии связей с уменьшением концентрации кальция является зафиксированное увеличение заселенности связывающей молекулярной орбитали. Анализ заселенности по Лёвдину свидетельствует о том, что при концентрации кальция 15,6 % масс заселенность 3d орбитали иона кальция, связанного с графеном, составляет 0,30, при концентрации 6,3 % масс — заселенность 3d орбитали 0,40. В следствие роста заселенности 3d орбитали, которая участвует в гибридизации с π -орбиталью графена, увеличивается заселенность связывающей молекулярной орбитали, что так же способствует увеличению энергии связи.

Распределение электронной плотности в плоскости, параллельной плоскости графена и расположенной посередине между ионом кальция и графеновой поверхностью, для разных концентраций ионов кальция представлено на рисунке 5. Видно, что с увеличением концентрации значение электронной плотности, пересекающей линии связи, увеличивается примерно на 14 %, что так же объясняет заметное увеличение равновесного расстояния от кальция до графеновой поверхности при повышении концентрации до 15,6 % масс.

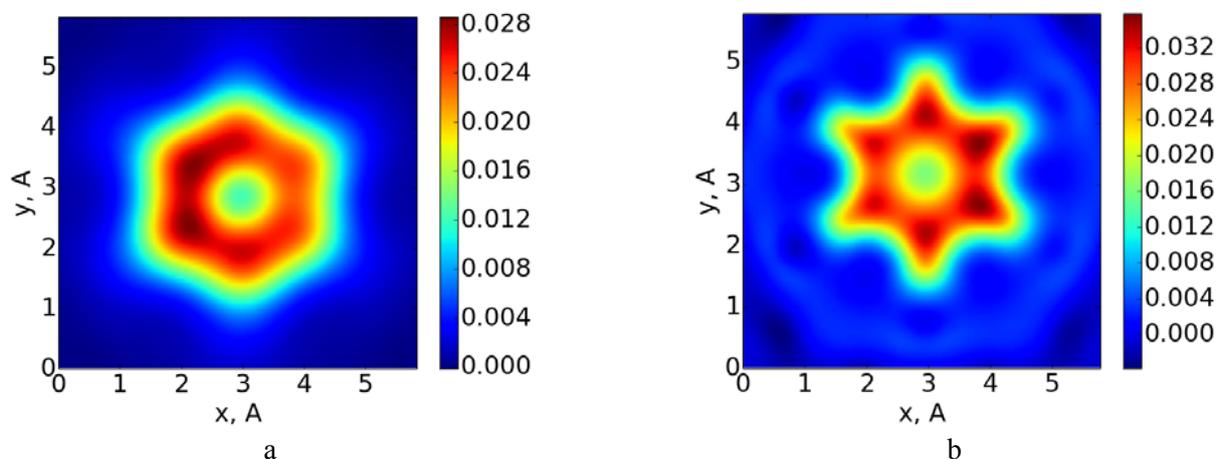


Рис.5. Распределение электронной плотности в плоскости параллельной графену и расположенной посередине между графеном и ионом кальция. *a* — концентрация кальция 15,6 % масс, *b* — концентрация кальция 6,3 % масс

При увеличении расстояния между ионом кальция и графеном осуществляется разрыв связи, после чего фрагменты взаимодействуют по механизму кулоновского отталкивания. Для определения энергии связи был выполнен расчет зависимости потенциальной энергии системы от расстояния между ионом кальция и графеном. Графики зависимости потенциальной энергии от расстояния при разных концентрациях кальция представлены на рис.6. За нулевое значение потенциальной энергии было принято максимальное значение энергии системы кальций-графен.

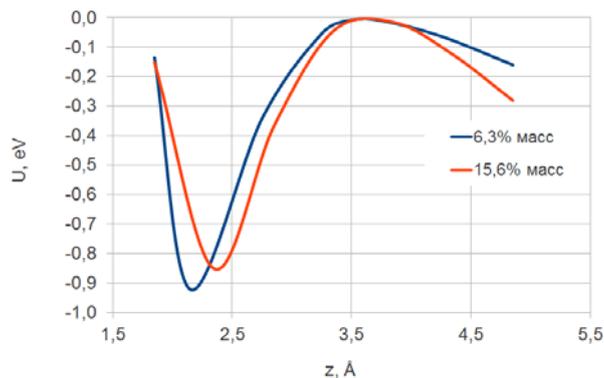


Рис. 6. Потенциальная энергия системы в зависимости от расстояния между ионом кальция и графеновой плоскостью

Из графика видно, что разрыв связи соответствует расстоянию 3,50 Å между ионом кальция и графеном. При концентрации кальция 15,6 % масс энергия связи составляет примерно 0,85 эВ, а при концентрации 6,3 % масс энергия связи немного выше, и равна 0,95 эВ.

С увеличением расстояния между ионом кальция и графеновой плотностью после разрыва связи потенциальная энергия системы начинает уменьшаться. Градиент потенциальной энергии при этом зависит от концентрации кальция: чем выше концентрация, тем больше среднее значение средней зарядовой плотности графена, и тем больше градиент потенциальной энергии.

Выводы. В работе изучено взаимодействие катиона кальция с графеновой поверхностью. Показано, что взаимодействие осуществляется с переносом заряда и сопровождается перекрыванием 3d орбитали кальция с π -орбиталью графена. При этом возможно образование комплексов, с энергией связи порядка 1 эВ. Связи между кальцием и углеродом в таких комплексах не насыщаемы и имеют обменную природу. Следует заметить, что механизм взаимодействия катиона кальция с графеновой поверхностью отличается от типичного для π -комплексов непереходных металлов катион-квадрупольного электростатического взаимодействия, которое не сопровождается значительным переносом заряда.

ИСПОЛЬЗОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Chaipanich A., Nochaiya T., Wongkeo W., Torkittikul P. // Materials Science and Engineering: A. - 2010. – 527, N 4-5. - P. 1063.
2. Li G.Y. Wang P.M., Zhao X. // Carbon. - 2005. – 43, N 6. - P. 1239.
3. Konsta – Gdoutos M.S., Metaxa Z.S., Shah S.P. // Cement and Concrete Research. - 2010. - 40, N 7. - P. 1052.
4. Sobolkina A., Mechtcherine V., Bellmann C., et. al. // Journal of colloid and interface science. – 2014. – 413. – P. 43.
5. Попов М.Ю., Петрунин С.Ю., Ваганов В.Е., Закревская Л.В. // Нанотехнологии в строительстве. – 2012. – 6, № 22. – 41.
6. L. I. Nasibulina, I. V. Anoshkin, A. G. Nasibulin, et. al. // Journal of Nanomaterials. – 2012. – 2012. Article ID 169262, 6 pages
7. Ma J. C., Dougherty D. A. // Chem. Rev. – 1997. -97, N 5. – P. 1303
8. D. Vijay, G. N. Sastry // J. Phys. Chem. A. – 2006. – 110, N 3. – P. 10148
9. D. Vijay, G. N. Sastry // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2008. – 10, N 4. – P. 582

10. J. Molina Molina, J. A. Dobado, S. Melchor // Journal of Molecular Structure (Theochem). – 2002. - 589-590. – P. 337.
11. H. Huang, L. Liao, X. Xu, et. al. // Talanta. – 2013. – 117. – P. 152
12. S. Harder // Chem. Rev. – 2010. – 110, N 7. – P. 3852
13. M. Swart // Inorganica Chimica Acta. – 2007. – 360, N 1. – P. 179
14. J. S. Overby, T. P. Hanusa // Organometallics. – 1996. – 15, N 9. – P. 2205
15. D. Umadevi, G. N. Sastry // Chemical Physics Letters. – 2012. – 549. – P. 39
16. В. Кон // УФН. – 2002. - 172, № 3. – С. 336
17. Bhupesh Ch. Synthesis and electron transport in known chirality single wall carbon nanotubes. Ph. D. thesis, Columbia university, 2009
18. R. Nizam, S. M. A. Rizvi, A. Azam // International Journal of Science and Technology. – 2011. - 1, N. 4. – P. 153.
19. Blöchl P. E. // Phys. Rev. B. – 1994. – 50. – P. 17953.
20. M. R. Philpott, F. Cimpoesu, Y. Kawazoe // Materials Transactions. – 2008. – 49, N 11. – P. 2448
21. L. G. Bulusheva, A.V. Okotrub, D.A. Romanov, D. Tomanek // J. Phys. Chem. A. – 1998. – 102, N 6. – P. 975.
22. P. Giannozzi, S. Baroni, et. al. // J. Phys.: Condens. Matter. – 2009. – 21, N 39. – P. 395502.
23. J.P. Perdew, A. Ruzsinszky, G.I. Csonka, et. al. // Phys. Rev. Lett. – 2008. - 100. - 136406-1:4
24. C. Hartwigsen, S. Goedecker, and J. Hutter // Phys. Rev. B. – 1998. - 58. – P. 3641
25. В.В. Ильясов, В.Ч. Нгуен, И.В. Ершов, Д.Ч. Нгуен // Журнал структурной химии. – 2014. – 55, № 2. – С. 209
26. H. J. Monkhorst, J. D. Pack // Phys. Rev. B. – 1976. – 13. – P. 5188.
27. B. Soleimani, S. Rostamnia, A. Ahmadi // Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures. – 2010. – 5, N 1. – P. 153

SUMMARY

Predstavlen results of the study by funktsyonalna density interaction with calcium cations poverhnostyu DIFFERENT concentrations in graphene components. Shown that on Interaction osushchestvljaetsja obmennomu mehanyzmu and accompanied by charge transfer, something not tyrychno for π -complexes metal ions neperehodnyh. The established connection energy dependence from concentrations of calcium, obsuzhdayutsya vozmozhnye Mechanisms of the given effect.

REFERENCES

1. Chaipanich A., Nochaiya T., Wongkeo W., Torkittikul P. // Materials Science and Engineering: A. - 2010. – 527, N 4-5. - P. 1063.
2. Li G.Y. Wang P.M., Zhao X. // Carbon. - 2005. – 43, N 6. - P. 1239.
3. Konsta – Gdoutos M.S., Metaxa Z.S., Shah S.P. // Cement and Concrete Research. - 2010. - 40, N 7. - P. 1052.
4. Sobolkina A., Mechtcherine V., Bellmann C., et. al. // Journal of colloid and interface science. – 2014. – 413. – P. 43.
5. Popov M.Iu., Petrunin S.Iu., Vaganov V.E., Zakrevskaia L.V. // Nanotekhnologii v stroitel'stve. – 2012. – 6, № 22. – 41.
6. L. I. Nasibulina, I. V. Anoshkin, A. G. Nasibulin, et. al. // Journal of Nanomaterials. – 2012. – 2012. Article ID 169262, 6 pages
7. Ma J. C., Dougherty D. A. // Chem. Rev. – 1997. -97, N 5. – P. 1303
8. D. Vijay, G. N. Sastry // J. Phys. Chem. A. – 2006. – 110, N 3. – P. 10148
9. D. Vijay, G. N. Sastry // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2008. – 10, N 4. – P. 582
10. J. Molina Molina, J. A. Dobado, S. Melchor // Journal of Molecular Structure (Theochem). – 2002. - 589-590. – P. 337.
11. H. Huang, L. Liao, X. Xu, et. al. // Talanta. – 2013. – 117. – P. 152
12. S. Harder // Chem. Rev. – 2010. – 110, N 7. – P. 3852
13. M. Swart // Inorganica Chimica Acta. – 2007. – 360, N 1. – P. 179
14. J. S. Overby, T. P. Hanusa // Organometallics. – 1996. – 15, N 9. – P. 2205
15. D. Umadevi, G. N. Sastry // Chemical Physics Letters. – 2012. – 549. – P. 39

16. V. Kon // UFN. – 2002. - 172, № 3. – S. 336
17. Bhupesh Ch. Synthesis and electron transport in known chirality single wall carbon nanotubes. Ph. D. thesis, Columbia university, 2009
18. R. Nizam, S. M. A. Rizvi, A. Azam // International Journal of Science and Technology. – 2011. - 1, N. 4. – P. 153.
19. Blöchl P. E. // Phys. Rev. B. – 1994. – 50. – P. 17953.
20. M. R. Philpott, F. Cimpoesu, Y. Kawazoe // Materials Transactions. – 2008. – 49, N 11. – P. 2448
21. L. G. Bulusheva, A.V. Okotrub, D.A. Romanov, D. Tomanek // J. Phys. Chem. A. – 1998. – 102, N 6. – P. 975.
22. P. Giannozzi, S. Baroni, et. al. // J. Phys.: Condens. Matter. – 2009. – 21, N 39. – P. 395502.
23. J.P. Perdew, A. Ruzsinszky, G.I. Csonka, et. al. // Phys. Rev. Lett. – 2008. - 100. - 136406-1:4
24. C. Hartwigsen, S. Goedecker, and J. Hutter // Phys. Rev. B. – 1998. - 58. – P. 3641
25. V.V. Il'iasov, V.Ch. Nguen, I.V. Ershov, D.Ch. Nguen // Zhurnal strukturnoi' himii. – 2014. – 55, № 2. – S. 209
26. H. J. Monkhorst, J. D. Pack // Phys. Rev. B. – 1976. – 13. – P. 5188.
27. B. Soleimani, S. Rostamnia, A. Ahmadi // Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures. – 2010. – 5, N 1. – P. 153

Відомості про авторів:

Большаков Володимир Іванович, д. т. н., професор, ректор Придніпровської державної академії будівництва та архітектури, e-mail: postmaster@pgasa.dp.ua.

Ваганов Виктор Евгеньевич, к. т. н., доцент Приднeпpовской государственной академии строительства и архитектуры, e-mail: postmaster@pgasa.dp.ua.

Решетняк В.В. Владимирского государственного университета им. Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых, e-mail: postmaster@pgasa.dp.ua.

УДК 658.5

ПЛАНУВАННЯ ОБСЯГІВ І МІСЦЕРОЗТАШУВАННЯ ОБ'ЄКТІВ БУДІВНИЦТВА ДОСТУПНОГО ЖИТЛА

С. П. Броневицький, к. т. н., доц.

Ключові слова: житлове будівництво; доступне житло; соціальне житло; вартість.

Постановка проблеми. Сьогодні розвиток населених пунктів України характеризується значними відмінностями в рівнях їх соціально-економічного розвитку, неузгодженістю ряду законодавчих і нормативно-правових актів з містобудівним законодавством, недостатньо чітко визначеною загальнодержавною стратегією. Спостерігається надмірна концентрація населення і виробництва у великих містах, неефективний, сповільнений розвиток більшості середніх і малих міст, селищ і сіл, значні територіальні диспропорції економічного розвитку країни, істотні недоліки в територіальній організації суспільства, в системі поселень. Це спричинило погіршення демографічної ситуації в країні, стану зайнятості, зниження якості життя населення, до певної міри зумовило занепад сільської місцевості. В усіх областях України посилюються процеси депопуляції населення, чисельність якого, починаючи з 1991 року, постійно скорочується [6; 8; 10].

Водночас спостерігається тенденція збільшення загальної площі територій населених пунктів. При цьому землі використовуються нераціонально. Значні площі зайняті під складування відходів виробництва (відвальними породами, шламонакопичувачами), під сміттєзвалища тощо. Здебільшого неефективно використовуються землі, відведені під об'єкти промисловості, транспорту, енергетики, а також землі рекреаційного призначення [10; 12].

До числа спільних для більшості населених пунктів проблем належать наступні:

- житлова проблема – необхідність збільшення площі житла та кількості квартир, поліпшення їх споживчих якостей, зниження вартості житла та експлуатаційних витрат на його утримання;
- проблема реконструкції житлових будівель, перш за все будівель перших масових серій;