

*Колесніков В.О. доц., к.т.н., доц.
зав. кафедри інженерних дисциплін
Краснодонського факультету інженерії
та менеджменту СНУ ім. В. Даля,
Куриной Е.В., студент СНУ ім. В. Даля, гр. РТ- 911
Дрьомов А.О. – студент гр. РПМ - 09а,
Інститут гірництва та геотехнологій
Донецького національного технічного університету
«Донецький політехнік»
kidkrasnodon@mail.ru*

АНАЛІЗ НОВИХ ДОСЯГНЕНЬ В ОБЛАСТІ ОБЧИСЛЮВАЛЬНОГО МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА, ЯК ІНСТРУМЕНТУ ЕКОЛОГІЧНОЇ БЕЗПЕКИ

Проведено короткий огляд новітніх досягнень в галузі обчислювального матеріалознавства. Показано, що в даний час є можливість моделювання структур з наперед заданими властивостями, завдяки сучасним досягненням в комп'ютерній та експериментальній техніці.

Ключові слова: обчислювальне матеріалознавство, обчислювальна хімія.

Стан проблеми. Стрімке виснаження природних ресурсів, а також розвиток науки і техніки сприятиме створенню нових матеріалів, що володіють більш високим комплексом властивостей в порівнянні з вже існуючими. Одним з пріоритетних наукових напрямів у цій галузі є обчислювальне матеріалознавство (computational materials science) [1, 2]. Даний науковий напрямок об'єднує в собі цілий комплекс взаємопов'язаних напрямів: фізичне матеріалознавство, інформатику, фізику, хімію. Причому розвиток нанотехнологій зумовило розвиток такого напрямку, як обчислювальна хімія (computational chemistry). Обчислювальна хімія фактично являє собою новий спосіб проведення наукових досліджень в хімії - комп'ютерний експеримент і комп'ютерне моделювання. Традиційно експериментатори проводять хімічні експерименти з реальними хімічними системами, а потім теоретики пояснюють результати цих експериментів у рамках розвинених моделей і теорій. Такий підхід до останнього часу був успішним. Сьогодні ми знаємо основні закони, що описують хімічні явища і процеси. Однак часто їх точне аналітичне описання можливе тільки у випадку дуже простих моделей. Наближені аналітичні методи дозволяють розширити набір вирішуваних завдань. Розвиток комп'ютерів протягом останніх 60 років надав можливість вирішувати багато проблем не тільки в разі спрощених моделей, але і для реальних хімічних процесів і структур [3].

Ціль статті. Зробити короткий огляд опублікованого матеріалу, присвяченого обчислювальному матеріалознавству, а також чисельним обчисленням електронних структур молекулярних систем ab initio.

Аналіз останніх досліджень та публікацій. Існує два підходи до проблем хімії: обчислювальна квантова хімія і невчислітельна квантова хімія. Обчислювальна квантова хімія має справу з чисельними обчисленнями електронних структур молекулярних систем ab initio і напівемпіричні методи, а невчислітельна квантова хімія – з отриманням аналітичних виразів для властивостей молекулярних структур і хімічних реакцій. Журнали з обчислювальної хімії: Reviews in Computational Chemistry <http://www.chem.iupui.edu/rcc/rcc.html>, а також Journal of Theoretical and Computational Chemistry <http://www.worldscinet.com/jtcc/jtcc.shtml>. Наукові та технічні досягнення в цій галузі обчислювального матеріалознавства висвітлюються у періодичному журналі «Computational Materials Science» видавництва ELSIVIER (www.elsevier.com). Ab initio (лат. від початку) в фізиці - рішення задачі з перших основоположних принципів без

залучення додаткових емпіричних припущень. Звичайні, але мається на увазі пряме рішення рівнянь квантової механіки. Незважаючи на назву при цьому найчастіше робляться які-небудь припущення та спрощення. Дані спрощення дозволяють розраховувати системи з великим числом атомів або атоми, що мають більше число електронів. Прикладом такого спрощення є використання PAW-потенціалів.

Термін фактично іменує один з напрямків сучасної теоретичної фізики твердого тіла. Означає сукупність фізичних наближень, процедур вирахування та оптимізації, що використовуються для розрахунку електронних і фононних спектрів з метою знаходження термодинамічних і кінетичних характеристик матеріалу, таких як коефіцієнт теплового розширення, електрична провідність та інші. Наприклад, для розрахунку енергії сублімації атома використовується різниця енергій атома в кристалічному стані і ізолизованого атома, поміщеного в клітинку великого розміру (що аналогічно вільному атому). Першими із серйозних досягнень у цьому напрямку можна вважати концепцію самоузгодженого поля та рівняння Хартрі і їх прями уточнення, рівняння Хартрі-Фока. Ці рівняння з різними варіаціями є основою обчислювальних методів в квантовій хімії.

Останнім часом все більшого поширення у фізиці твердого тіла набувають методи ab initio розрахунків, засновані на використанні методу функціоналу густини.

Перевагою розрахунків з перших принципів є точний опис атомної взаємодії з урахуванням квантових ефектів. Недоліком - неможливість розрахунку за розумний час систем з достатньо великим числом атомів (на практиці рідко більше 100).

Якщо розташувати сучасні методи моделювання, що використовуються у фізиці, за зростанням розмірів модельованих систем і часу моделювання, то картина вийде наступною:

1. Ab initio методи, які не використовують наближень.
2. Ab initio методи, що використовують наближення.
3. Методи молекулярної динаміки, що використовують полуемпіричні потенціали;
4. Метод Монте-Карло.
5. Методи кінцевих елементів.

Аналогічно від 1-5 збільшується кількість спрощень і наближень, котрі можуть впливати на коректність одержуваного результату [4].

Наведемо короткий перелік комп'ютерних програм і додатків, які стосуються розглянутих вище наукових напрямків: Gaussian, PC GAMESS, GAMESS, HONDO, MOLCAS, MOLPRO, MPQC, NAMD, Priroda, PQS, PSI, Q-Chem, TURBOMOLE, GROMACS, FANTOM, Ascalaph Designer, CPMD, NWCHEM, ABINIT, VASP, WIEN2K, ORCA, CRYSTAL.

Професор факультету наук про Землю та факультету фізики і астрономії Університету штату Нью-Йорк Артем Оганов в 2006 р. спільно з Коліном Гласс створив новий метод, названий USPEX (Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography), що дозволяє розрахувати структуру мінералу для заданих температури і тиску виходячи тільки з хімічного складу [5, 6]. Комп'ютерна програма USPEX дозволяє передбачити структуру мінералу тільки за хімічною формулою, при будь-яких значеннях температури і тиску, з практично гарантованим, достовірним результатом, що відкриває просто неймовірні горизонти в синтезі нових речовин з абсолютно новими властивостями. У галузі матеріалознавства команда А. Оганова намагається прийти до нових надтвердим (в ідеалі - твердіше за алмаз) і надпровідним матеріалами, а також до вивчення нових матеріалів для водневої енергетики [7].

Якщо ви знаєте кристалічну структуру, то не представляє праці за допомогою сучасних методів прорахувати навіть дуже складні властивості речовини і зрозуміти, чи

буде ця речовина корисною для вас чи ні. Зазвичай експериментатори йдуть в лабораторію, створюють нові з'єднання під різними температурами і тисками, кожен раз вимірюють властивості, кожен раз вимірюють структуру - і після 10 тисяч спроб можуть виявити один цікавий матеріал. Але, як ви дізнаєтеся структуру речовини, якщо вона ще не синтезована? Метод заснований на випадковому промацуванні дуже рідкісною сіткою всій області пошуку. Розрахунок розуміє, де найбільш вигідна область, і все більше і більше структур випробують саме цю низьку енергетичну область до тих пір, доки найбільш стійка структура не буде знайдена [8].

Широке застосування отримали методи: клітинних автоматів (cellular auto-mata), динаміки дислокацій (dislocation dynamics), мережеві методи або вузлові моделі (network (vertex) models), метод молекулярної динаміки [1].

Ці три методи мають такі загальні особливості:

1) моделювання здійснюється чисельним розв'язуванням системи диференціальних рівнянь з використанням методу кінцевих різниць;

2) вони дискретні як у просторі, так і у часі;

3) мікроскопічний підхід, заснований на диференційно-різницевих рівняннях, які описують статистичні і динамічні властивості елементарних дефектів кристалічної будови;

4) вони моделюють мікроструктуру, описуючи і пояснюючи багато явищ взаємодії (взаємодія дефектів на кордоні зерна, домішок, сегментів діслокацій і т.д.);

5) застосовуються детерміновані та статистичні методи моделювання.

Наведемо приклад обчислювального пошуку нових органічних напівпровідників [9]. Основою дослідження стали опубліковані чотири роки тому статті японських учених з Університету Хіросіми, які показали відносно простий спосіб отримання органічного напівпровідника, позначуваного як дінафто [2,3-b: 2', 3'-f] тієно [3,2-b] тіофен (на малюнку нижче він відзначений цифрою 1) та оцінили перспективи його застосування в польових транзисторах. Як з'ясувалося, з'єднання 1 забезпечує хорошу рухливість носіїв заряду і, що важливо, демонструє високу стійкість на повітрі. Остання властивість вигідно відрізняє дінафто [2,3-b: 2', 3'-f] тієно [3,2-b] тіофен від відомого і поширеного органічного напівпровідника пентацену.

Автори, продовживши роботу колег, спробували відшукати похідні з'єднання 1, які мали б ще більш привабливі характеристики. Використовуючи квантові і молекулярно-механічні моделі, вони протестували сім кандидатів, а потім вибрали одне з'єднання, яке виявилось найперспективнішим. Синтезувати його було нескладно, оскільки загальну технологію вже випробували японці.

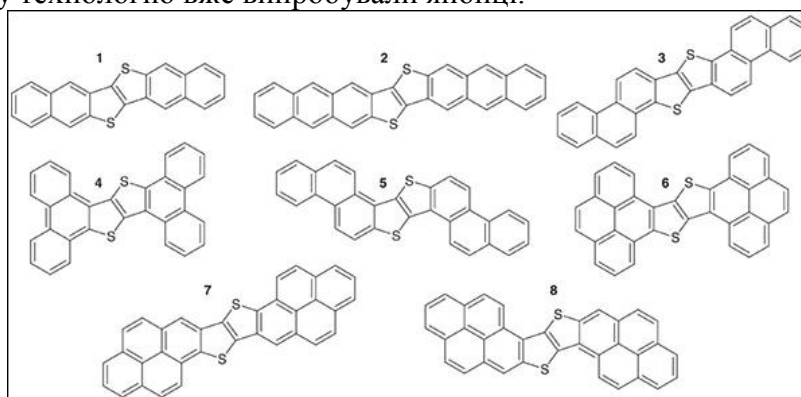


Рис. 1. Структури дінафто [2,3-b: 2', 3'-f] тієно [3,2-b] тіофену і семи його похідних (ілюстрація з журналу Nature Communications)

Спочатку американці створили на базі отриманого напівпровідника тонкоплівкові транзистори з 40-нанометровим шаром [2] і золотими електродами стоку і витоку. У

наступних експериментах були зареєстровані відношення струмів у відкритому і закритому стані, приблизно рівне $4 \cdot 10^6$, і середня рухливість носіїв у $0,51 \pm 0,06 \text{ см}^2 \cdot \text{В-1} \cdot \text{с-1}$, причому шестимісячне зберігання на відкритому повітрі ніяк не позначилося на параметрах транзисторів. Зазначена рухливість невелика, що пояснюється недостатньо високим ступенем очищення матеріалу.

Після цього вчені приступили до випробувань польових транзисторів на монокристалах. Тут рухливість носіїв доходила вже до 12,3 в режимі насичення і $16,0 \text{ см}^2 \cdot \text{В-1} \cdot \text{с-1}$ в лінійному режимі, що можна назвати чудовим результатом: дуже небагато органічні напівпровідники дають рухливість вище $10 \text{ см}^2 \cdot \text{В-1} \cdot \text{с-1}$.

Шестимісячне витримування таких пристроїв на повітрі приводило до зниження рухливості, але зміни становили менше 10%. Аналогічні обчислювальні методи хіміки використовують для відбору органічних молекул, які могли б бути запропонованими виробникам сонячних елементів. Дослідники планують розглянути близько 3,5 млн з'єднань, відзначити тисячі самих цікавих і опублікувати відповідно потенціалу цієї тисячі дані розрахунків.

Значних результатів у сфері обчислювального матеріалознавства можна досягти завдяки грід-обчисленням. Грід-обчислення (англ. grid - решітка, мережа) - це форма розподілених обчислень, в якій «віртуальний суперкомп'ютер» представлений у вигляді кластерів, з'єднаних за допомогою мережі, слабозв'язаних, гетерогенних комп'ютерів, що працюють разом для виконання величезної кількості завдань (операцій, робіт). Ця технологія застосовується для вирішення наукових, математичних задач, що вимагають значних обчислювальних ресурсів. Наприклад, грід-система ЦЕРНу, призначена для обробки даних, одержуваних з великого андронного колайдера, має ієрархічну структуру. Сама верхня точка ієрархії, нульовий рівень - CERN (отримання інформації з детекторів, збір «сирих» наукових даних, які будуть зберігатися до кінця роботи експерименту). За перший рік роботи планується зібрати до 15 петабайт (тисяч терабайт) даних першої копії. Перший рівень, Tier1 - зберігання другої копії цих даних в інших куточках світу (11 центрів: в Італії, Франції, Великобританії, США, на Тайвані, а один центр першого рівня - CMS Tier1 - в ЦЕРНі). Центри володіють значними ресурсами для зберігання даних. Tier2 - наступні в ієрархії, численні центри другого рівня. Наявність великих ресурсів для зберігання даних не обов'язково; володіють достатніми обчислювальними ресурсами. Російські центри: у Дубні (ОІЯД, Об'єднаний інститут ядерних досліджень), три центри в Москві (НДІЯФ МГУ, ФІАН, ІТЕФ - Інститут теоретичної та експериментальної фізики), Троїцьку (ІЯД, Інститут ядерних досліджень), Протвино (ІФВЕ, Інститут фізики високих енергій) в Гатчині (ПІЯФ). Крім того, в єдину мережу з цими центрами пов'язані і центри інших країн учасниць ОІЯД - у Харкові, Мінську, Єревані, Софії, Баку і Тбілісі. Більше 85% всіх обчислювальних задач БАК зараз виконується поза ЦЕРНу, з них більше 50% на центрах другого рівня.

Розвиток комп'ютерних технологій дозволяє проводити моделювання мікроструктури на різних рівнях ієрархії, враховувати вплив легуючих елементів на міцнісні та фізико-механічні властивості як матеріалу, так і деталі і самої конструкції, враховувати вплив різних середовищ (наприклад, воденьовмісних) [11 - 16].

Висновок. Обчислювальне матеріалознавство буде розвиватися паралельно з такими напрямками, як обчислювальна хімія, інформаційні технології і т.д. Підвищити ефективність розрахунку властивостей нових матеріалів можна завдяки грід-обчисленням. В цілому це дозволить створювати нові матеріали, минаючи «проміжні сплави», які не володіють необхідним комплексом властивостей, що повинно суттєвим чином відбитися як на економічній, так і на екологічній складових наукових проєктів.

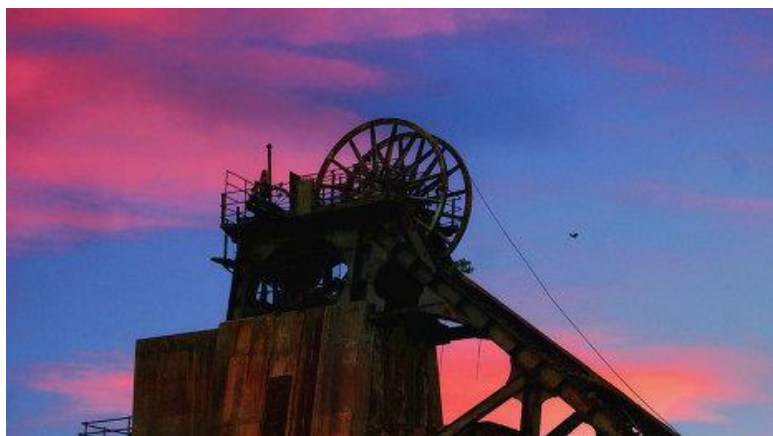
Список літератури

1. Кундас С. П. Вычислительное материаловедение – современное состояние и перспективы развития XLIII Международная конференция «Актуальные проблемы прочности» 27 сентября – 1 октября 2004 г., Витебск, Беларусь. С. 3 – 10.
2. Dierk Raabe Computational materials science, Wiley-VCH, 1998 – 380 p.
3. Вычислительная химия [Электронный ресурс]. Википедия электронная энциклопедия. Режим доступа: <http://ru.wikipedia.org/wiki>.
4. Ab initio [Электронный ресурс]. Википедия электронная энциклопедия. Режим доступа: <http://ru.wikipedia.org/wiki>.
5. Артем Оганов – в рейтинге 50-и россиян, добившихся успеха за пределами России [Электронный ресурс]. Газета «Еркрамас» 24 октября 2011 г. Режим доступа: <http://www.yerkramas.org/2011/10/24>.
6. Oganov A.R., Glass C.W. Crystal structure prediction using evolutionary algorithms: principles and applications // J. Chem. Phys. 2006. No. 124, art. 244704.
7. USPEX Артема Оганова [Электронный ресурс]. Газета «Троицкий вариант» № 4 (812) 27 мая 2008 г. Режим доступа: http://www.scientific.ru/trv/2008/004/ogonov_uspex.html.
8. Как научить компьютер открывать новые материалы [Электронный ресурс]. Газета «Полит.ру» 18 августа 2011 г. Режим доступа: <http://polit.ru/article/2011/08/18/ogonov2011txt>.
9. Вычислительный поиск новых органических полупроводников [Электронный ресурс]. Нанотехнологии: Nanonewsnet.ru. Режим доступа: <http://www.nanonewsnet.ru/news/2011>.
10. Грид [Электронный ресурс]. Википедия электронная энциклопедия. Режим доступа: <http://ru.wikipedia.org/wiki>.
11. Верительник Е.А., Колесников В.А., Колесникова Е.Б. Новые компьютерные программы для расчета прочностных свойств материалов и конструкций. ЧАСТЬ 1. // Вісник Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля // Вид-во СХУ ім. В.Даля, 2010. – № 9(151). – Частина 2. – с.11 - 15.
12. Колесников В.А. Развитие новых компьютерных технологий в Германии // Вісник Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля // Вид-во СХУ ім. В.Даля, 2008. – № 6(124). Частина 2. – С.170-175.
13. Тупельняк О. Л., Колесников В.А., Савченко Е. А., Курылёв В. О. Краткий обзор возможностей компьютерного атомно-кристаллического моделирования материалов // тези доповідей Міжнародна науково-практична конференція "Комп'ютерні науки для інформаційного суспільства", 22-23 грудня 2010 року, м. Луганськ. – С. 78. – 80.
14. Колесніков В.О., Дев'яткін Ю. С., Дев'яткін Д. С. Комп'ютерне моделювання сплавів з урахуванням впливу водню / XXI відкрита науково-технічна конференція молодих науковців і спеціалістів КМН – 2009 // Фізико-механічний інститут ім. Г.В. Карпенка НАН України. – Львів. – 2009. – С. 258 – 261.
15. В.А. Колесников, А.И. Балицкий, О.А. Погорелов, В.В. Кузнецов, А.В. Калинин Краткий обзор новых достижений в области вычислительного материаловедения // Вісник Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля № 9 (180) Ч.2. 2012. - С. 58 – 63. Режим доступа: http://www.nbu.gov.ua/portal/soc_gum/vsunu/2012_9_2/Kolesnikov.pdf.
16. Аптекарь М.Д. проф.. к. х.н., Колесников В.А., Кузнецов В.В. ас Краткий обзор новых достижений в области вычислительной химии и материаловедения, как инструмента экологической безопасности // Вісник СХУ ім. В. Даля № 2 (173) 2012 – с. 279 – 284.

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ,
СХІДНОУКРАЇНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ім. ВОЛОДИМИРА ДАЛЯ, ЛУГАНСЬК,
КРАСНОДОНСЬКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
ІНЖЕНЕРІЇ ТА МЕНЕДЖМЕНТУ СНУ ім. ВОЛОДИМИРА ДАЛЯ,
КРАСНОДОН,
АНТРАЦИТІВСЬКИЙ ФАКУЛЬТЕТ ГІРНИЦТВА ТА ТРАНСПОРТУ
СНУ ім. ВОЛОДИМИРА ДАЛЯ, АНТРАЦИТ,
ІНСТИТУТ ХІМІЧНИХ ТЕХНОЛОГІЙ СНУ ім. ВОЛОДИМИРА ДАЛЯ,
РУБІЖНЕ,
ФАКУЛЬТЕТ ЛІНГВІСТИКИ ТА СЛОВЕСНОСТІ,
ФГАОУ «ПІВДЕННИЙ ФЕДЕРАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»,
РОСТОВ-НА-ДОНУ, РОСІЙСЬКА ФЕДЕРАЦІЯ,
ДОНЕЦЬКИЙ ФІЛІАЛ ІНСТИТУТУ УПРАВЛІННЯ, БІЗНЕСУ ТА ПРАВА
ПІВДЕННОРОСІЙСЬКОГО УНІВЕРСИТЕТУ,
ДОНЕЦЬК, РОСІЙСЬКА ФЕДЕРАЦІЯ
ФІЗИКО-МЕХАНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
ім. Г. В. КАРПЕНКА НАН УКРАЇНИ, ЛЬВІВ,
НАУКОВА РАДА НАН УКРАЇНИ З ПРОБЛЕМИ
«ФІЗИКО-ХІМІЧНА МЕХАНІКА МАТЕРІАЛІВ»,
ЗАХІДНОПОМОРСЬКИЙ ТЕХНОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ,
ЩЕЦІН, ПОЛЬЩА,
КРАСНОДОНСЬКИЙ ОБЛАСНИЙ ОРДЕНА ДРУЖБИ НАРОДІВ МУЗЕЙ
«МОЛОДА ГВАРДІЯ», КРАСНОДОН

МАТЕРІАЛИ
VI МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВО – ПРАКТИЧНОЇ
КОНФЕРЕНЦІЇ "ЕКОНОМІЧНІ, ЕКОЛОГІЧНІ ТА
СОЦІАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ ВУГІЛЬНИХ РЕГІОНІВ
СНД"

19 квітня 2013 р.



КРАСНОДОН 2013

УДК 658+504+364.14

ББК 65.30+65.28+65.27

Рецензенти:

Рамазанов С.К. – професор, д.т.н., д.е.н.

Харковський Б.Т. – професор, к.т.н.

УДК 658+504+364.14

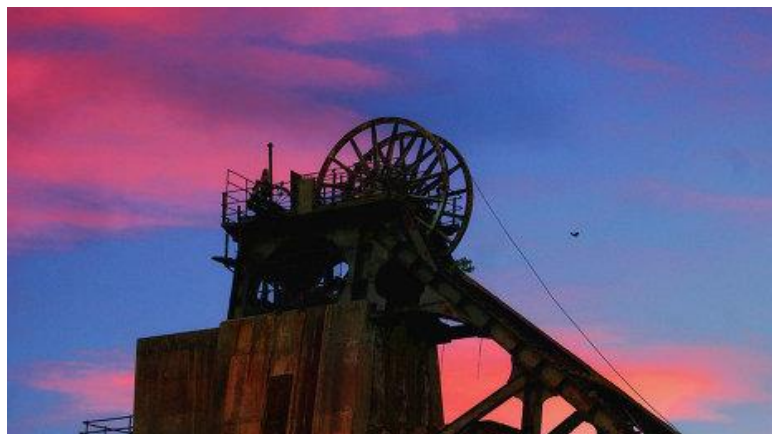
ББК 65.30+65.28+65.27

Рекомендовано до друку Вченою радою Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ УКРАИНЫ,
ВОСТОЧНОУКРАИНСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. ВЛАДИМИРА ДАЛЯ, ЛУГАНСК,
КРАСНОДОНСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
ИНЖЕНЕРИИ И МЕНЕДЖМЕНТА ВНУ им. ВЛАДИМИРА ДАЛЯ,
КРАСНОДОН,
АНТРАЦИТОВСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ ГОРНОГО ДЕЛА И ТРАНСПОРТА
ВНУ им. ВЛАДИМИРА ДАЛЯ, АНТРАЦИТ,
ИНСТИТУТ ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ ВНУ им. ВЛАДИМИРА ДАЛЯ,
РУБЕЖНОЕ,
ФАКУЛЬТЕТ ЛИНГВИСТИКИ И СЛОВЕСНОСТИ, ФГАОУ
«ЮЖНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»,
РОСТОВ-НА-ДОНУ, РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ,
ДОНЕЦКИЙ ФИЛИАЛ ИНСТИТУТА УПРАВЛЕНИЯ, БИЗНЕСА И ПРАВА
ЮЖНОРОССИЙСКОГО УНИВЕРСИТЕТА,
ДОНЕЦК, РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ.
ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
им. Г. В. КАРПЕНКО НАН УКРАИНЫ, ЛЬВОВ,
НАУЧНЫЙ СОВЕТ НАН УКРАИНЫ ПО ПРОБЛЕМЕ
«ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА МАТЕРИАЛОВ»,
ЗАПАДНО ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ,
ЩЕЦИН, ПОЛЬША,
КРАСНОДОНСКИЙ ОБЛАСТНОЙ ОРДЕНА ДРУЖБЫ НАРОДОВ МУЗЕЙ
«МОЛОДАЯ ГВАРДИЯ», КРАСНОДОН**

МАТЕРИАЛЫ

***VI МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКОЙ
КОНФЕРЕНЦИИ
"ЭКОНОМИЧЕСКИЕ, ЭКОЛОГИЧЕСКИЕ И
СОЦИАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ УГОЛЬНЫХ РЕГИОНОВ
СНГ"
19 апреля 2013 г.***



КРАСНОДОН, 2013

ЗМІСТ

№ п/п	ПІБ авторів та назва публікації	стор.
1.	<i>Артеменко В.О.</i> ПІДВИЩЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ РЕГУЛЮВАННЯ ЗОВНІШНЬОЕКОНОМІЧНИХ ЗВ'ЯЗКІВ РЕГІОНУ КРАСНОДОНЩИНИ	4
2.	<i>Василенко Н.А., Костенко И.Г.</i> ФАЗОВИЙ СОСТАВ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ ПОКРЫТИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ В НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЕ МЕТОДОМ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ	7
3.	<i>Кладов М.Б.</i> О ВАЖНОСТИ МАРКЕТИНГОВЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ В УЧРЕЖДЕНИЯХ КУЛЬТУРЫ	10
4.	<i>Галич Р.В.</i> ОЧИСТКА ВОЗДУХА ОТ ПЫЛИ В ШАХТАХ ДОНБАССА ВИХРЕВЫМИ АППАРАТАМИ СО ВСТРЕЧНЫМИ ЗАКРУЧЕННЫМИ ПОТОКАМИ	14
5.	<i>Косоногова Л.Г., Рябичев В.Д., Каверзина В.В.</i> РОЛЬ ГОСУДАРСТВА В РАЗВИТИИ КОНЦЕПЦИИ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ ТРАНСПОРТНЫХ СИСТЕМ	18
6.	<i>Черных А.В.</i> ПРИМЕНЕНИЕ ЭКСЕРГЕТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА К УСТАНОВКАМ УТИЛИЗАЦИИ ТЕПЛОТЫ С НИЗКОКИПЯЩИМ РАБОЧИМ ТЕЛОМ	21
7.	<i>Черних В.І., Чернишева О.К.</i> ЗАСТОСУВАННЯ БІОЛОГІЧНОГО МОНІТОРИНГУ ДЛЯ КОНТРОЛЮ	24
8.	<i>Колесніков В.О., Куриной Е.В., Дрьомов А.О.</i> АНАЛІЗ НОВИХ ДОСЯГНЕНЬ В ОБЛАСТІ ОБЧИСЛЮВАЛЬНОГО МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА, ЯК ІНСТРУМЕНТУ ЕКОЛОГІЧНОЇ БЕЗПЕКИ	27
9.	<i>Балицький О.І., Еліаш Я., Колесніков В.О.</i> СУЧАСНІ УЯВЛЕННЯ ПРО ВОДНЕВЕ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО ТА ВОДЕНЬ	32
10.	<i>Дёмушкина Ю.В.</i> ПОВЫШЕНИЕ КВАЛИФИКАЦИИ ГОСУДАРСТВЕННЫХ СЛУЖАЩИХ КАК ОДИН ИЗ ФАКТОРОВ УЛУЧШЕНИЯ КАЧЕСТВА ПРЕДОСТАВЛЕНИЯ УСЛУГ БЕЗРАБОТНЫМ НА ЛУГАНЩИНЕ	39
11.	<i>Артеменко В.О., Артеменко Д.В.</i> ФІСКАЛЬНА ПОЛІТИКА ТА МЕТОДИКА АДМІНІСТРУВАННЯ В ОПОДАТКУВАННІ МАЙНОВОГО СТАНУ ПІДПРИЄМСТВ КРАСНОДОНЩИНИ	43
12.	<i>Чепракова М.А.</i> ФОРМИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКОЙ КУЛЬТУРЫ СТУДЕНТА С ТОЧКИ ЗРЕНИЯ ПЕДАГОГИЧЕСКОЙ НАУКИ	47
13.	<i>Ковалева А. Ю., Григорьева А.А.</i> ВЕРНАДСКИЙ В. И. – ФИЛОСОФ ЖИВОГО ВЕЩЕСТВА	51
14.	<i>Черних В.І., Чернишева О.К.</i> ЗАСТОСУВАННЯ БІОМОНІТОРИНГУ ДЛЯ КОНТРОЛЮ ЯКОСТІ ВОДИ В ПРОМИСЛОВИХ РЕГІОНАХ	54
15.	<i>Шеховцов Ю.І., Заїграєв Л.С.</i> СТАЛІЙ РОЗВИТОК МІСТА ЛУГАНСЬК В АСПЕКТІ АВТОМОБІЛІЗАЦІЇ	57

МАТЕРІАЛИ

**VI МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВО–ПРАКТИЧНОЇ
КОНФЕРЕНЦІЇ "ЕКОНОМІЧНІ, ЕКОЛОГІЧНІ ТА
СОЦІАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ ВУГІЛЬНИХ РЕГІОНІВ СНД"**

Укладач:

Валерій Олександрович Колесніков

Редактор Пузанкова Н.М.
Техн. редактор
Оригінал-макет Колесніков В.О.

Підписано до друку _____
Формат 60841/16 □Папір друкар. Гарнітура Times.
Друк офсетний. Вим. друк. л. 1,0. Навч.-вид. л. _____.
Тираж ___ примірників. Видавництво № _____. Замовлення № _____. Ціна
договірна.

Видавництво Східноукраїнського національного університету
імені Володимира Даля
Краснодонський факультет інженерії та менеджменту

Адреса видавництва: 91034, м. Луганськ, кв. Молодіжний, 20а
Телефон: (0642) 41-34-12, факс. (0642) 41-31-60
E-mail: uni@snu.edu.ua <http://www.snu.edu.ua>

111. Колесніков В.О., Куриной Е.В., Дрьомов А.О. Аналіз нових досягнень в області обчислювального матеріалознавства, як інструменту екологічної безпеки // Матеріали VI Міжнародної науково-практичної конференції “Економічні, екологічні та соціальні проблеми вугільних регіонів СНД 19 квітня 2013 р., м. Краснодон. С. 27 -32.

Анализ новых достижений в области вычислительной материаловедения, как инструмента экологической безопасности

An analysis of new advances in computational material science as an instrument of environmental safety

https://www.researchgate.net/publication/334710855_Kolesnikov_VO_Kurinoj_E_V_Dromov_AO_Analiz_novih_dosagnen_v_oblasti_obcislualnogo_materialoznavstva_ak_instrumentu_ekologichnoi_bezpeki_Materiali_VI_Miznarodnoi_naukovo-prakticnoi_konferencii_Ekonomichn