

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
УДМУРТСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ

Том 12, № 3

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ



Том 12, № 3

Ижевск-2010

Главный редактор: **А.М. ЛИПАНОВ**, академик РАН, д.т.н., профессор

Члены редакционной коллегии:

В.П.Бегишев, д.х.н., профессор (Пермь),
А.А.Берлин, д.х.н., профессор, академик РАН (Москва),
А.Л.Бучаченко, д.х.н., профессор, академик РАН (Москва),
Г.Е.Заиков, д.х.н., профессор (Москва),
В.И.Кодолов, д.х.н., профессор (**зам. гл. ред.** - Ижевск),
А.В.Косточко, д.т.н., профессор (Казань),
М.А.Корепанов, д.т.н., доцент (**отв. секретарь** – Ижевск),
В.И.Корнев, д.х.н., профессор (Ижевск),
А.А.Малыгин, д.х.н., профессор (С.-Петербург),
В.А.Трапезников д.т.н., профессор (Ижевск),
А.В.Трубачев, к.х.н., доцент (Ижевск),
И.Н.Шабанова, д.ф.-м.н., профессор (Ижевск),
Н.А.Халтуринский, д.х.н., профессор (Москва),
А.И.Холькин, д.х.н., профессор, член-корреспондент РАН (Москва),
О.Н.Чупахин, д.х.н., профессор, академик РАН (Екатеринбург),
Ю.В.Фролов, д.ф.-м.н., профессор (Москва),
С.А.Цыганов, д.ф.-м.н., профессор (Москва).

***Журнал издается Удмуртским научным центром
Уральского отделения Российской академии наук***

Тематика журнала

1. Процессы горения и взрыва.
2. Математическое моделирование физико-химических процессов.
3. Кластеры, кластерные системы и материалы.
4. Межфазные слои и процессы взаимодействия в них.
5. Квантово-химические расчёты.
6. Нелинейные кинетические явления.
7. Нанoeлектронные приборы и устройства.

ISSN 1727-0227 (Print), ISSN 1727-0529 (Online)

ISSN 1727-0227



9 771727 022002

© ИПМ УрО РАН, 2010
УдНЦ УрО РАН, 2010

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Альес М.Ю. ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СВОЙСТВ СИММЕТРИИ ЗАДАЧИ ПРИ КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОМ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ДЕФОРМИРОВАНИЯ.....	297
Бендерский Б.Я., Чернова А.А. МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ВНУТРИКАМЕРНЫХ ПРОЦЕССОВ В МНОГОСОПЛОВЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УСТАНОВКАХ.....	301
Вахрушев А.В., Андреев В.В. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОЧАСТИЦ С МИКРОТРЕЩИНОЙ.....	307
Кириллов В. В. РАСЧЁТ РАЗЛОЖЕНИЯ ГРАНУЛЫ ОХЛАДИТЕЛЯ.....	313
Копысов С.П., Сагдеева Ю.А. МЕТОД ВЕЙВЛЕТ-ОСРЕДНЕНИЯ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЭФФЕКТИВНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ПРОНИЦАЕМОСТИ.....	318
Макаров С.С. ИССЛЕДОВАНИЕ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ ТЕПЛООБМЕНА ПРИ СПРЕЙЕРНОМ ОХЛАЖДЕНИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ИЗДЕЛИЙ.....	325
Наймушин Ю.Н., Рединова Т.Л., Тимофеев А.А., Метелева Т.Ю., Ефремов С.М., Шелковников Ю.К. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭЛЕКТРОМЕТРИЧЕСКИЙ КОНТРОЛЬ ПРОЧНОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ.....	333
Новикова Т.А., Обухов А.А., Обухов А.В., Лебедев В.Г. ВАРИАЦИОННЫЕ ПРИНЦИПЫ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ КРИТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ.....	338
Саушин П.Н. РАСЧЕТ ТЕПЛООБМЕНА В РЕГУЛЯТОРЕ РАСХОДА ИГОЛЬЧАТОГО ТИПА СРЕДСТВАМИ СОВРЕМЕННЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ПАКЕТОВ.....	348
КЛАСТЕРЫ, КЛАСТЕРНЫЕ СИСТЕМЫ И МАТЕРИАЛЫ	
Алалыкин А.С., Алалыкин С.С., Крылов П.Н. ЦИФРОВАЯ ОБРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ В РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОМ АНАЛИЗЕ НАНОСТРУКТУР. Часть 2. Программная реализация.....	353
Канунникова О.М., Маратканова А.Н., Шаков А.А., Марьин М.В., Решетников С.М. ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ЗАВИСИМЫХ СВОЙСТВ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ МОЧЕВИНЫ.....	360
Крылов П.Н., Романов Э.А., Федотова И.В. ИССЛЕДОВАНИЯ ПОЛИМОРФНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ СУЛЬФИДА ЦИНКА.....	368

МЕЖФАЗНЫЕ СЛОИ И ПРОЦЕССЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В НИХ

Альес М.Ю., Евстафьев О.И. ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ВЯЗКОУПРУГОСТИ ПОЛИМЕРИЗУЮЩИХСЯ ВЫСОКОНАПОЛНЕННЫХ ЭЛАСТОМЕРНЫХ (НАНО) КОМПОЗИТОВ.....	372
Доценко С.А., Фомин Д.В., Галкин К.Н., Галкин Н.Г. ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО СИЛИЦИДА Mg ₂ Si НА Si(111) В ОБЛАСТИ ТЕМПЕРАТУРНОЙ СТАБИЛЬНОСТИ.....	376
Никонова Р.М., Дорофеев Г.А., Ладьянов В.И., Пушкарев Б.Е. МЕХАНОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ НАНОКОМПОЗИТОВ Mg С РАЗЛИЧНЫМИ ФОРМАМИ УГЛЕРОДА.....	382
Семенова М.Г., Корнев В.И., Меркулов Д.А. МЕТИЛГЛИЦИНДИАЦЕТАТЫ НЕКОТОРЫХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ.....	390
Черепанов И.С., Тарасов В.В., Трубачев А.В. ОБ ОСОБЕННОСТЯХ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ В ЭЛЕКТРОЛИТАХ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ НАНЕСЕНИЯ ГАЛЬВАНОПОКРЫТИЙ НА МИКРОКАТОДЫ В ПРИЖИМНЫХ ЯЧЕЙКАХ.....	395
Шиховцева Е.С., Назаров В.Н. НЕЛИНЕЙНОЕ ПРОДОЛЬНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ КАК ФАКТОР, ОПРЕДЕЛЯЮЩИЙ КОНФОРМАЦИОННУЮ ДИНАМИКУ БИСТАБИЛЬНЫХ КВАЗИОДНОМЕРНЫХ МАКРОМОЛЕКУЛ.....	400

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

Бабкин В.А., Цыканов А.В., Бузинова О.П., Рахимов А.И., Заиков Г.Е. О ГЕОМЕТРИЧЕСКОМ И ЭЛЕКТРОННОМ СТРОЕНИИ МОНОАМИНОКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ.....	410
Бусыгина Е.Л. ОПТИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ И ПЛЕНОК ФУЛЛЕРИТА C ₆₀	417
Кораблев Г.А., Кодолов В.И., Заиков Г.Е. ЗАВИСИМОСТЬ СКОРОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОСТРУКТУР ОТ ПРОСТРАНСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СВОБОДНЫХ АТОМОВ.....	425
Соболев В.В., Соболев В.Вал., Мокрушин С.С., Шушков С.В. ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ СПЛАВОВ КРЕМНИЙ-ГЕРМАНИЙ, РАССЧИТАННЫЕ НА ОСНОВЕ СПЕКТРОВ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПОГЛОЩЕНИЯ И ПРЕЛОМЛЕНИЯ.....	432

О КОНФЕРЕНЦИЯХ

IX Всерос. конф. «Физикохимия ультрадисперсных (нано-) систем».....	437
7 Всерос. конф. «По внутрикамерным процессам и горению в установках на твердом топливе и ствольных системах (ISOC'2011)».....	438
РЕФЕРАТЫ.....	440
Требования к оформлению статей.....	444