

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
УДМУРТСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ



Том 16, № 3

Ижевск-2014

Главный редактор: А.М. ЛИПАНОВ, академик РАН, д.т.н., профессор
Члены редакционной коллегии:

В.И. Кодолов, д.х.н., профессор (зам. гл. ред., Ижевск),
М.А. Корепанов, д.т.н., доцент (отв. секретарь, Ижевск),
А.К. Аржников, д.ф.-м.н., профессор (Ижевск),
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),
А.В. Вахрушев, д.ф.-м.н., профессор (Ижевск),
Г.Е. Заиков, д.х.н., профессор (Москва),
В.И. Корнев, д.х.н., профессор (Ижевск),
А.В. Косточко, д.т.н., профессор (Казань),
В.И. Ладыянов, д.ф.-м.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),
Ю.В. Фролов, д.ф.-м.н., профессор (Москва),
А.И. Холькин, д.х.н., профессор, академик РАН (Москва),
С.А. Цыганов, д.ф.-м.н., профессор (Москва),
О.Н. Чупахин, д.х.н., профессор, академик РАН (Екатеринбург),
И.Н. Шабанова, д.ф.-м.н., профессор (Ижевск),
Ю.К. Шелковников, д.т.н., профессор (Ижевск),
Eli M. Pearce, PhD, Professor (USA),
Victor M.M. Lobo, PhD, Professor (Portugal),
Slavcho Rakovsky, PhD, DSc, Professor (Bulgaria)

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

Тематика журнала включает в себя: процессы горения и взрыва; математическое моделирование физико-химических процессов; кластеры, кластерные системы и материалы; межфазные слои и процессы взаимодействия в них; квантово-химические расчёты; нелинейные кинетические явления; наноэлектронные приборы и устройства.

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



© ИМ УрО РАН, 2014
УдНЦ УрО РАН, 2014

СОДЕРЖАНИЕ

Шаклеин А.А., Карпов А.И., Корепанов М.А. МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТУРБУЛЕНТНОГО ПЛАМЕНИ ПО ВЕРТИКАЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ ГОРЮЧЕГО МАТЕРИАЛА.....	331
Алексеев Д.В., Казунина Г.А., Чередниченко А.В. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ АНСАМБЛЯ КЛАСТЕРОВ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ В НАГРУЖЕННЫХ МАТЕРИАЛАХ 3D-ВЕРОЯТНОСТНЫМ КЛЕТОЧНЫМ АВТОМАТОМ.....	340
Ваулин С.Д., Карташева М.А., Карташев А.Л. ПРОФИЛИРОВАНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ КОЛЬЦЕВЫХ СОПЕЛ ТВЕРДОТОПЛИВНЫХ РАКЕТ- НОСИТЕЛЕЙ С МНОГОФАЗНЫМ РЕАГИРУЮЩИМ РАБОЧИМ ТЕЛОМ ПРИ НАЛИЧИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ.....	348
Вахрушев А.В., Молчанов Е.К. ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СОВМЕСТНОГО ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ НА ВРАЩАЮЩИЙСЯ ЦИЛИНДРИЧЕСКИЙ ЭЛЕКТРОД. Часть 3. Эволюция диффузионного слоя.....	357
Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Северюхин А.В., Суворов С.В. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОЛУЧЕНИЯ СПЕЦИАЛЬНЫХ НАНОСТРУКТУРНЫХ СЛОЕВ В ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ ДЛЯ УТОНЧЕННЫХ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ.....	364
Вахрушев А.В., Шушков А.А., Зыков С.Н., Клековкин В.С. ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОДУЛЯ УПРУГОСТИ ЮНГА НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ. Часть 1. Методологические основы численного моделирования.....	381
Корепанов М.А., Еремин В.Н., Шаклеин А.А. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА УТИЛИЗАЦИИ РАКЕТНОГО ДВИГАТЕЛЯ НА СМЕСЕВОМ ТВЕРДОМ ТОПЛИВЕ В ГОРНОМ КАРЬЕРЕ.....	388
Семенов В.И., Михеев К.Г., Шурбин А.К., Михеев Г.М. ФИЛЬТРАЦИЯ ИЗОБРАЖЕНИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ С ПОМОЩЬЮ ОПТИЧЕСКОГО МИКРОСКОПА, С ПРИМЕНЕНИЕМ КРАТНОМАСШТАБНОГО АНАЛИЗА.....	399
Полётов Я.А., Васильченко Ю.М., Кодолов В.И. ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА МОДИФИКАЦИИ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА МЕДЬ/УГЛЕРОДНЫМ НАНОКОМПОЗИТОМ С ПОМОЩЬЮ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ.....	405
Тринеева В.В., Королева М.Р. ЭФФЕКТ УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА АКТИВНОСТЬ ТОНКОДИСПЕРСНЫХ СУСПЕНЗИЙ МЕДЬ/УГЛЕРОДНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ В СРЕДЕ ИЗОМЕТИЛТЕТРАГИДРОФТАЛЕВОГО АНГИДРИДА.....	413

Шабанова И.Н., Кодолов В.И., Терехова Н.С., Трапезников В.А., Ломова Н.В., Сапожников Г.В., Обухов А.В., Полетов Я.А., Исупов Н.Ю. РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СОДЕРЖАНИЯ МЕТАЛЛ/УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР НА СТЕПЕНЬ МОДИФИЦИРОВАНИЯ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА.....	419
Круглов А.А., Сисанбаев А.В., Руденко О.А., Лутфуллин Р.Я. ДЕФОРМАЦИОННЫЙ РЕЛЬЕФ ПОВЕРХНОСТИ ТИТАНОВОГО СПЛАВА ПОСЛЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СВЕРХПЛАСТИЧЕСКОЙ ФОРМОВКИ.....	425
Ломаева С.Ф., Сюгаев А.В., Маратканова А.Н., Розанов К.Н., Петров Д.А., Ульянов А.Л., Тимошенкова О.Р. ВЛИЯНИЕ СРЕДЫ ИЗМЕЛЬЧЕНИЯ (ПАРАФИН, ПОЛИЭТИЛЕН, ПОЛИСТИРОЛ) НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ, СТРОЕНИЕ ПОВЕРХНОСТИ И СВЧ СВОЙСТВА ПОРОШКОВ Fe.....	431
Писарева Т.А., Харанжевский Е.В. ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОЁМКОСТИ НАНОКОМПОЗИТА АКТИВИРОВАННЫЙ УГОЛЬ– МЕТАЛЛ ОТ ВНУТРЕННЕГО СОПРОТИВЛЕНИЯ АКТИВНОГО СЛОЯ.....	444
Холзаков А.В., Пономарев А.Г., Сапожников Г.В., Шабанова И.Н. РФЭС ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ БИНАРНЫХ РАСПЛАВОВ НА ОСНОВЕ НИКЕЛЯ.....	452
Алабдулла Г.Ф., Батуева Е.В., Кропачева Т.Н., Корнев В.И. МОДЕЛИРОВАНИЕ РАВНОВЕСИЙ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ КОБАЛЬТА(II) С ДИЭТИЛЕНТРИАМИНПЕНТАУКСУСНОЙ КИСЛОТОЙ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ.....	461
Шумилова М.А., Петров В.Г., Новикова Н.В. ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ СОРБЦИИ ПОЧВОЙ ИОНОВ ПЕРЕХОДНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ.....	466
РЕФЕРАТЫ.....	474
КОНФЕРЕНЦИИ	
Заиков Г.Е., Зиминова Л.А., Арцис М.И. СЕДЬМАЯ МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «ВРЕМЯ ПОЛИМЕРОВ И КОМПОЗИТОВ» (ТОР-7).....	479
Требования к оформлению статей.....	482

УВАЖАЕМЫЕ КОЛЛЕГИ!

Приглашаем Вас в число авторов журнала «Химическая физика и мезоскопия», издаваемого Удмуртским научным центром Уральского отделения Российской академии наук.

Тематика журнала включает в себя: процессы горения и взрыва; математическое моделирование физико-химических процессов; кластеры, кластерные системы и материалы; межфазные слои и процессы взаимодействия в них; квантово-химические расчеты; нелинейные кинетические явления; нанoeлектронные приборы и устройства.

Журнал включен в Реферативный журнал и Базы данных ВИНТИ РАН.

Сведения о журнале ежегодно публикуются в международной справочной системе по периодическим и продолжающимся изданиям «Ulrich's Periodicals Directory».

Индекс по Объединенному каталогу «Пресса России» т.1 Газеты и журналы 86198.

С 2007 г. журнал включен в Перечень российских рецензируемых научных журналов, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук. Периодичность: 4 номера в год. Плата за опубликование рукописей аспирантов отсутствует.

Адрес редакции: 426067, Ижевск, ул. Т.Барамзиной, 34, Удмуртский научный центр УрО РАН,

редколлегия журнала «Химическая физика и мезоскопия».

Адрес в сети Интернет: <http://www.udman.ru/journal>

ТРЕБОВАНИЯ К ОФОРМЛЕНИЮ СТАТЕЙ

1. Статья представляется в одном экземпляре отпечатанная с одной стороны листа формата А4. Шрифт - Times New Roman, кегль 12. Поля: сверху, снизу, слева и справа - 20 мм. Межстрочный интервал - 1,0.

2. К статье прилагается электронная копия.

3. Индекс УДК должен содержать не менее 7 значащих символов.

4. После заглавия указываются фамилия, имя и отчество (полностью) автора(ов), ученая степень, звание, место работы, должность, тел., e-mail.

Аннотация к статье должна содержать не более 700 символов.

Ключевые слова - не более 7 терминов.

5. Иллюстративные материалы представляются в следующем виде:

а) растровые изображения (фотографии) отдельными файлами в формате BMP, TIF, JPG с разрешением 300 dpi или вставленными в текст;

б) иллюстрации, созданные средствами Word, должны быть сгруппированы, векторные изображения, созданные в Corel Draw, Adobe Illustrator - в отдельных файлах.

6. Каждая строка формул набирается как отдельный элемент редактора формул Equation Editor 3.0. В формулах по возможности не применять индексы из букв русского алфавита. В десятичных дробях ставятся запятые.

7. Рисунки и таблицы необходимо пронумеровать и подписать. Если в статье один рисунок (таблица), то название рисунка (таблицы) указывается без номера. Текст обязательно должен содержать ссылки на иллюстрации (таблицы). Единицы измерений физических величин в соответствии с ГОСТом 8.417-2002.

8. Список литературы приводится в алфавитном порядке или по мере упоминания в конце статьи в соответствии с ГОСТом Р 7.0.5-2008. В тексте ссылки на источники указываются в квадратных скобках.

9. В конце статьи на английском языке приводятся:

Название статьи, Фамилия, И.О. автора(ов), место работы, аннотация и ключевые слова.

10. Статья должна быть подписана автором.

Научное издание
ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ

Главный редактор: академик РАН А.М. ЛИПАНОВ

Члены редакционной коллегии:

В.И. Кодолов - зам. гл. редактора, Ижевск

М.А. Корепанов - отв. секретарь, Ижевск

А.К. Аржников, Ижевск

В.П. Бегишев, Пермь

А.А. Берлин, Москва

А.Л. Бучаченко, Москва

А.В. Вахрушев, Ижевск

Г.Е. Заиков, Москва

В.И. Корнев, Ижевск

А.В. Косточко, Казань

В.И. Ладьянов, Ижевск

А.А. Малыгин, С.-Петербург

В.А. Трапезников, Ижевск

А.В. Трубачев, Ижевск

Ю.В. Фролов, Москва

А.И. Холькин, Москва

С.А. Цыганов, Москва

О.Н. Чупахин, Екатеринбург

И.Н. Шабанова, Ижевск

Ю.К. Шелковников, Ижевск

Е.М. Pearce, USA

V.M.M. Lobo, Portugal

S. Rakovsky, Bulgaria

Ответственный секретарь журнала: М.А. Корепанов

426067, г. Ижевск, ул. Т.Барамзиной, 34

Тел.(3412) 20-34-76

e-mail: xfm@udman.ru

Компьютерная верстка Е.Г. Вершининой

Подписано в печать 08.09.2014. Формат 60×84 $\frac{1}{8}$.

Бумага «Комус. Standard».

Печать офсетная. Усл. печ. л. 17,04. Уч.-изд. л. 18,48. Тираж 400 экз.

НИСО Института механики УрО РАН