

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
УДМУРТСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ



Том 12, № 4

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

ПРОЦЕССЫ ГОРЕНИЯ И ВЗРЫВА

Рубцов Н.М., Сеплярский Б.С., Цветков Г.И., Черныш В.И. ВЛИЯНИЕ СОСТОЯНИЯ ПОВЕРХНОСТИ РЕАКТОРА И ХИМИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ДОБАВОК НА ВОСПЛАМЕНЕНИЕ ГАЗОВЗВЕСИ, СОСТОЯЩЕЙ ИЗ УГОЛЬНОГО ПОРОШКА, ПРИРОДНОГО ГАЗА И КИСЛОРОДА.....	451
---	-----

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Андреев В.Вен., Андреев В. Вяч. ОПРЕДЕЛЕНИЕ НАИБОЛЕЕ ЭФФЕКТИВНОГО МЕТОДА ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ОБРАБОТКИ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ.....	458
Шестаков И.А., Вахрушев А.В., Федотов А.Ю. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМБИНИРОВАННОГО НАНОДВИГАТЕЛЯ.....	467

КЛАСТЕРЫ, КЛАСТЕРНЫЕ СИСТЕМЫ И МАТЕРИАЛЫ

Александрович Е.В., Степанова Е.В., Федотова И.В., Стырова Л.Ю., Костенков Н.В., Закирова Р.М. МИКРОСТРУКТУРА И МОРФОЛОГИЯ ПЛЕНОК, ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ СТЕКЛА $\text{Ge}_{10}\text{Se}_{90}$	474
Арбузов А.А., Нигматуллин Р.Р. ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ДРОБНО-СТЕПЕННЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ С КОМПЛЕКСНЫМИ ПОКАЗАТЕЛЯМИ В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СПЕКТРАХ.....	480
Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Вахрушев А.А., Шушков А.А., Шушков А.В. ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ, ОПРЕДЕЛЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ И СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНООБЪЕКТОВ И КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ИХ ОСНОВЕ.....	486
Дементьев В.Б., Спичкин Н.А., Соловьев С.Д. К ВОПРОСУ ОБ УСЛОВИЯХ ГЕНЕРАЦИИ НАНОРАЗМЕРНЫХ КАРБИДОВ В СТАЛИ 30ХН2МФА ПРИ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОМ УПРОЧНЕНИИ.....	496
Когай В.Я. О КИНЕТИКЕ РЕЛАКСАЦИИ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ В НАНОРАЗМЕРНОЙ ПЛЕНКЕ СЕЛЕНА.....	504
Овчаренко П.Г., Дементьев В.Б., Лещев А.Ю. ВЛИЯНИЕ ХРОМА И КАРБИДА БОРА НА СОСТАВ И СТРУКТУРУ ЛЕГИРОВАННЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ОТЛИВОК ИЗ НИЗКОУГЛЕРОДИСТЫХ СТАЛЕЙ ПРИ ЛИТЬЕ ПО ГАЗИФИЦИРУЕМЫМ МОДЕЛЯМ.....	507

МЕЖФАЗНЫЕ СЛОИ И ПРОЦЕССЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В НИХ

Альес М.Ю., Евстафьев О.И., Карпов А.И., Барсуков А.К. О ФОРМУЛИРОВКЕ МЕЗОСКОПИЧЕСКОГО ПОДХОДА В МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ СТРУКТУРЫ МОДИФИЦИРОВАННОГО ИММУНОГЛОБУЛИНА.....	513
Бурнышев И.Н., Валиахметова О.М., Лыс В.Ф. МНОГОКОМПОНЕНТНОЕ ДИФфуЗИОННОЕ НАСЫЩЕНИЕ МЕДНЫХ СПЛАВОВ.....	519

Осипов В.В., Соломонов В.И., Иванов М.Г., Таранов А.В., Хазанов Е.Н., Карбань О.В., Гончаров О.Ю. ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ, ФАЗОВОГО СОСТАВА И СТРОЕНИЯ ИНТЕРФЕЙСНЫХ ОБЛАСТЕЙ КЕРАМИКИ Y_2O_3 В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА.....	526
Тарасов В.В., Бурнышев И.Н. К ОЦЕНКЕ ИЗНОСОСТОЙКОСТИ ДИСКРЕТНЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СТРУКТУР.....	533
Трубачева Л.В., Дидик М.В., Чернова С.П., Слободина В.Ш. СТАНДАРТНЫЕ ОБРАЗЦЫ. К ВОПРОСУ О СОЗДАНИИ И АТТЕСТАЦИИ.....	539
Черепанов И.С., Тарасов В.В., Трубачев А.В. ВЫБОР МОДЕЛИ ДЛЯ ОПИСАНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МЕТАЛЛА ПО ПОВЕРХНОСТИ КАТОДОВ МАЛЫХ РАЗМЕРОВ ПРИ ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИИ ГАЛЬВАНОПОКРЫТИЙ В ПРИЖИМНЫХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ЯЧЕЙКАХ.....	543
Шумилова М.А., Петров В.Г., Жиделева Т.Г. ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛЕЙ КОНЦЕНТРАЦИИ ПОЛЛЮТАНТОВ ВДОЛЬ ГОРОДСКИХ АВТОДОРОГ.....	548
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ	
Бабкин В.А., Дмитриев В.Ю., Савин Г.А., Заиков Г.Е. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ ПРЯМОГО АЦИЛИРОВАНИЯ БИЦИКЛОФОСФИТОВ АЦИЛГАЛОГЕНИДАМИ.....	553
Магомедов Г.М., Амиршихова З.М., Козлов Г.В., Заиков Г.Е. СЕТЧАТЫЕ ПОЛИМЕРЫ КАК ЕСТЕСТВЕННЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ: МЕХАНИЗМ УСИЛЕНИЯ В ИСПЫТАНИЯХ НА СЖАТИЕ.....	562
Стерхова Ю.А., Мокрушин С.С., Соболев В.В., Соболев В.Вал. СПЕКТРЫ ОПТИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ НАНОКРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ, ИЗОЛИРОВАННЫХ В МАТРИЦЕ КВАРЦА.....	569
НАНОЭЛЕКТРОННЫЕ ПРИБОРЫ И УСТРОЙСТВА	
Маклецов В.Г., Гуляев П.В., Шелковников Е.Ю., Тюриков А.В., Гафаров М.Р. ИССЛЕДОВАНИЕ КОРРОЗИОННО-ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ НАНОСТРУКТУРНЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА С ПРИМЕНЕНИЕМ ГИБРИДНОГО ТУННЕЛЬНОГО МИКРОСКОПА.....	573
Михеев К.Г. ПОНДЕРОМОТОРНЫЕ СИЛЫ, ДЕЙСТВУЮЩИЕ НА ДИАМАГНИТНЫЙ МАТЕРИАЛ В ПОЛЕ ПОСТОЯННОГО МАГНИТА.....	578
Стяпшин В.М., Зонов Р.Г., Михеев Г.М. АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ОРИЕНТАЦИОННЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ОПТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ОТКЛИКА В ПРОВОДЯЩИХ ПЛЁНКАХ.....	587
ЮБИЛЕИ	
Заиков Г.Е. Николай Маркович ЭМАНУЭЛЬ. К 95-летию со дня рождения.....	592
РЕФЕРАТЫ.....	594
Требования к оформлению статей.....	598