

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.Зайков, 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. Нанозлектронные 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

<b>Рубцов Н.М., Сеплярский Б.С., Цветков Г.И., Черныш В.И.</b> 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

<b>Андреев В.Вен., Андреев В. Вяч.</b> ОПРЕДЕЛЕНИЕ НАИБОЛЕЕ ЭФФЕКТИВНОГО МЕТОДА ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ОБРАБОТКИ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ.....	458
---	-----

<b>Шестаков И.А., Вахрушев А.В., Федотов А.Ю.</b> МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМБИНИРОВАННОГО НАНОДВИГАТЕЛЯ.....	467
---	-----

### КЛАСТЕРЫ, КЛАСТЕРНЫЕ СИСТЕМЫ И МАТЕРИАЛЫ

<b>Александрович Е.В., Степанова Е.В., Федотова И.В., Стырова Л.Ю., Костенков Н.В., Закирова Р.М.</b> МИКРОСТРУКТУРА И МОРФОЛОГИЯ ПЛЕНОК, ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ СТЕКЛА $Ge_{10}Se_{90}$ .....	474
--	-----

<b>Арбузов А.А., Нигматуллин Р.Р.</b> ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ДРОБНО-СТЕПЕННЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ С КОМПЛЕКСНЫМИ ПОКАЗАТЕЛЯМИ В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СПЕКТРАХ.....	480
--	-----

<b>Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Вахрушев А.А., Шушков А.А., Шушков А.В.</b> ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ, ОПРЕДЕЛЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ И СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНООБЪЕКТОВ И КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ИХ ОСНОВЕ.....	486
--	-----

<b>Дементьев В.Б., Спичкин Н.А., Соловьев С.Д.</b> К ВОПРОСУ ОБ УСЛОВИЯХ ГЕНЕРАЦИИ НАНОРАЗМЕРНЫХ КАРБИДОВ В СТАЛИ 30ХН2МФА ПРИ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОМ УПРОЧНЕНИИ.....	496
--	-----

<b>Когай В.Я.</b> О КИНЕТИКЕ РЕЛАКСАЦИИ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ В НАНОРАЗМЕРНОЙ ПЛЕНКЕ СЕЛЕНА.....	504
---	-----

<b>Овчаренко П.Г., Дементьев В.Б., Лещев А.Ю.</b> 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

<b>Альес М.Ю., Евстафьев О.И., Карпов А.И., Барсуков А.К.</b> О ФОРМУЛИРОВКЕ МЕЗОСКОПИЧЕСКОГО ПОДХОДА В МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ СТРУКТУРЫ МОДИФИЦИРОВАННОГО ИММУНОГЛОБУЛИНА.....	513
--	-----

<b>Бурнышев И.Н., Валиахметова О.М., Лыс В.Ф.</b> МНОГОКОМПОНЕНТНОЕ ДИФфуЗИОННОЕ НАСЫЩЕНИЕ МЕДНЫХ СПЛАВОВ.....	519
---	-----

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