

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
УДМУРТСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ



Том 15, № 2

Ижевск-2013

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. Ладьянов, 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).

***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)



© ИМ УрО РАН, 2013
УДНЦ УрО РАН, 2013

СОДЕРЖАНИЕ

ПРОЦЕССЫ ГОРЕНИЯ И ВЗРЫВА

Алиев А.В., Суворов С.В. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОГРЕВА ТВЕРДЫХ ТОПЛИВ.....	163
Набоко И.М., Рубцов Н.М., Сеплярский Б.С., Черныш В.И., Цветков Г.И. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПЛАМЕН ВОДОРОДО-ВОЗДУШНЫХ И МЕТАНО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ С МЕЛКОЯЧЕИСТЫМИ ПРЕПЯТСТВИЯМИ ПРИ ИНИЦИИРОВАНИИ ИСКРОВЫМ РАЗРЯДОМ.....	170
Чумаков Ю.А., Князева А.Г. ВЛИЯНИЕ СЖИМАЕМОСТИ ТЯЖЕЛЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ НА МАКРОКИНЕТИКУ ИХ РАЗЛОЖЕНИЯ ПОД ДЕЙСТВИЕМ СВЧ-ИЗЛУЧЕНИЯ.....	179
Шишкина В.А., Рыбаков Н.А., Козлов А.Н., Рыбаков А.П. ВЛИЯНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПЕРВОГО РОДА НА ФОРМУ УДАРНОЙ АДИАБАТЫ ТВЕРДОГО ТЕЛА.....	188

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Альес М.Ю. ЭВОЛЮЦИОННЫЕ СХЕМЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ НЕНЬЮТОНОВСКИХ ПОЛЗУЩИХ ТЕЧЕНИЙ.....	193
Вахрушев А.В., Молчанов Е.К. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СОВМЕСТНОГО ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ Al_2O_3 В МАТРИЦУ Cu . ЧАСТЬ 2. РАСЧЕТ ОДНОМЕРНОГО ПРОЦЕССА ОСАЖДЕНИЯ.....	201
Глушков Д.О., Кравченко Е.В., Стрижак П.А. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАЖИГАНИЯ СМЕСЕВОГО ТОПЛИВА ИСТОЧНИКОМ ОГРАНИЧЕННОГО ТЕПЛОСОДЕРЖАНИЯ ПРИ УЧЕТЕ ЗАВИСИМОСТИ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МАТЕРИАЛОВ И ВЕЩЕСТВ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ...	208
Копысов С.П., Тонков Л.Е., Чернова А.А. ПОСТАНОВКА ГРАНИЧНЫХ И НАЧАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССА ЗАПУСКА СОПЛА.....	216
Корепанов М.А., Груздь С.А. РАСЧЕТ ДАВЛЕНИЯ НАСЫЩЕННОГО ПАРА С УЧЕТОМ МАЛЫХ АГЛОМЕРАТОВ.....	223
Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ ПО ОТНОШЕНИЮ К ВОДОРОДУ В Pd И Ni	231
Липанов А.М., Болкисев А.А. О МОДЕЛИРОВАНИИ ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ПОЛИБУТАДИЕНА С УЧЁТОМ ОБРАЗОВАНИЯ ПОЛИМЕРНОГО КАРКАСА.....	236

МЕЖФАЗНЫЕ СЛОИ И ПРОЦЕССЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В НИХ

Белаш В.П., Митрохин Ю.С., Быстров С.Г. МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ Ni_3Al , Ni_3Al-Nb , Ni_3Al-Co ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ.....	242
Бурнышев И.Н., Калюжный Д.Г. О ДИФФУЗИОННЫХ ПОТОКАХ ВОДОРОДА ЧЕРЕЗ МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ МЕМБРАНЫ С МОДИФИЦИРОВАННЫМИ ПОВЕРХНОСТНЫМИ СЛОЯМИ.....	248
Дементьев В.Б., Махнева Т.М., Шушков А.А., Ким С.Л. ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕХОДНОЙ ЗОНЫ БИМЕТАЛЛА 12ХМ+12Х18Н10Т, ПОЛУЧЕННОГО СВАРКОЙ ВЗРЫВОМ.....	254
Ерёмина М.А., Ломаева С.Ф., Елсуков Е.П., Бодрова Л.Е., Гойда Э.Ю., Пастухов Э.А. КОМПОЗИТЫ CU -КАРБИД ХРОМА, ПОЛУЧЕННЫЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕХАНОАКТИВАЦИИ ИСХОДНЫХ КОМПОНЕНТОВ В ТВЕРДОМ И ЖИДКОМ СОСТОЯНИЯХ.....	262
Коченгин А.Е., Беленкова Т.Е. СТРУКТУРНЫЕ РАЗНОВИДНОСТИ ГРАФЕНОВЫХ СЛОЕВ И КРИСТАЛЛОВ НА ИХ ОСНОВЕ.....	270
Лапшин О.В., Смоляков В.К. ФОРМИРОВАНИЕ СЛОИСТОЙ СТРУКТУРЫ МЕХАНОКОМПОЗИТОВ ПРИ ИЗМЕЛЬЧЕНИИ БИНАРНОЙ СМЕСИ.....	278
Малышев В.Н., Гантимиров Б.М., Вольхин А.М., Ким С.Л. ПОВЫШЕНИЕ АНТИФРИКЦИОННЫХ СВОЙСТВ ИЗНОСОСТОЙКИХ МДО-ПОКРЫТИЙ.....	285

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

Мерзляков Д.А., Соболев В.В., Соболев В.Вал. ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОКСИДА КАЛЬЦИЯ.....	292
Петров В.Г., Трубочёв А.В., Корепанов М.А. РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ДЛЯ РЕАКЦИЙ С УЧАСТИЕМ ПОЛИХЛОРИРОВАННЫХ ДИБЕНЗО-П-ДИОКСИНОВ, ДИБЕНЗОФУРАНОВ И ИХ АНАЛОГОВ В ИНСИНЕРАТОРАХ.....	296

НАНОЭЛЕКТРОННЫЕ ПРИБОРЫ И УСТРОЙСТВА

Шелковников Е.Ю., Тюриков А.В., Гуляев П.В., Жуйков Б.Л., Липанов С.И. ИССЛЕДОВАНИЕ ТРЕХМЕРНОЙ ДИФФУЗИОННО-КОНВЕКТИВНОЙ МОДЕЛИ ХИМИЧЕСКОГО ТРАВЛЕНИЯ ЗОНДИРУЮЩИХ ОСТРИЙ СТМ.....	304
---	-----

РЕФЕРАТЫ.....	310
Требования к оформлению статей.....	316