

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ  
УДМУРТСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР

# ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ



Том 15, № 3

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. Нанозлектронные приборы и устройства.

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



© ИМ УрО РАН, 2013  
УДНЦ УрО РАН, 2013

## СОДЕРЖАНИЕ

### ПРОЦЕССЫ ГОРЕНИЯ И ВЗРЫВА

**Барановский Н.В., Захаревич А.В.**

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАЖИГАНИЯ ТРАВЯНОЙ ВЕТОШИ  
НАГРЕТОЙ ДО ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР ЧАСТИЦЕЙ УГЛЕРОДА..... 323

**Набоко И.М., Рубцов Н.М., Сеплярский Б.С., Черныш В.И., Цветков Г.И.**

ВОЗНИКНОВЕНИЕ АКУСТИЧЕСКОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ В ВОДОРОДО-ВОЗДУШНЫХ  
СМЕСЯХ В ЗАМКНУТОМ РЕАКТОРЕ ПРИ ЦЕНТРАЛЬНОМ ИНИЦИИРОВАНИИ  
ИСКРОВЫМ РАЗРЯДОМ..... 329

### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

**Альес М.Ю.**

ЭВОЛЮЦИОННЫЕ ИЗОТРОПНЫЕ СХЕМЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ  
КРАЕВЫХ ЗАДАЧ КВАЗИСТАТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ. Часть 1. Особенности  
сходимости нелинейного численного решения в условиях малых деформаций..... 337

**Глушков Д.О., Захаревич А.В., Стрижак П.А.**

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕРМОКИНЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЗАЖИГАНИЯ  
ДИСПЕРГИРОВАННОГО КОНДЕНСИРОВАННОГО ВЕЩЕСТВА В УСЛОВИЯХ  
ЛОКАЛЬНОГО ПОДВОДА ЭНЕРГИИ..... 343

**Евстафьев О.И., Альес М.Ю., Карпов А.И.**

РАСЧЕТ ЭФФЕКТИВНЫХ УПРУГИХ ХАРАКТЕРИСТИК КРИСТАЛЛА ФУЛЛЕРИТА C<sub>60</sub>  
МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ..... 351

### КЛАСТЕРЫ, КЛАСТЕРНЫЕ СИСТЕМЫ И МАТЕРИАЛЫ

**Кодолов В.И., Тринеева В.В.**

К ВОПРОСУ О ТЕОРИИ МОДИФИЦИРОВАНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ  
СВЕРХМАЛЫМИ КОЛИЧЕСТВАМИ МЕТАЛЛ/УГЛЕРОДНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ..... 357

**Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Павловская Е.П.**

ВЛИЯНИЕ ПОСЛЕКАСКАДНЫХ УДАРНЫХ ВОЛН НА СТРУКТУРНЫЕ ТРАНСФОРМАЦИИ  
ВАКАНСИОННЫХ ПОР..... 370

**Трубачев А.В., Шумилова М.А.**

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ МЕТАЛЛОВ  
В МИНЕРАЛЬНО-ОРГАНИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОЛИТАХ..... 378

### МЕЖФАЗНЫЕ СЛОИ И ПРОЦЕССЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В НИХ

**Галкин Н.Г., Безбабный Д.А., Галкин К.Н., Доценко С.А., Чернев И.М., Вахрушев А.В.**

ФОРМИРОВАНИЕ, ОПТИЧЕСКИЕ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК Ca<sub>3</sub>Si<sub>4</sub>  
И ДВОЙНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР Si/Ca<sub>3</sub>Si<sub>4</sub>/Si(111)..... 385

**Дементьев В.Б., Овчаренко П.Г., Лещев А.Ю., Махнева Т.М.**

БОРИРОВАНИЕ УГЛЕРОДИСТЫХ СТАЛЕЙ МЕТОДОМ ЛИТЬЯ ПО ГАЗИФИЦИРУЕМЫМ  
МОДЕЛЯМ..... 393

<b>Канунникова О.М., Михайлова С.С., Мухгалин В.В., Аксенова В.В., Гильмутдинов Ф.З., Ладьянов В.И.</b> СТРУКТУРНО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ЛАКТАТА КАЛЬЦИЯ ПРИ МЕХАНОАКТИВАЦИИ В ВИХРЕВОЙ МЕЛЬНИЦЕ.....	398
<b>Карбань О.В., Абрамович А.А., Хазанов Е.Н., Таранов А.В., Коньгин Г.Н., Саламатов Е.И.</b> ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И КИНЕТИКИ ТЕПЛОВЫХ ФОНОНОВ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ КЕРМЕТОВ НА ОСНОВЕ КОРУНДА, СИНТЕЗИРОВАННЫХ РАЗЛИЧНЫМИ МЕТОДАМИ.....	404
<b>Лубнин А.Н., Дорофеев Г.А., Ладьянов В.И., Мухгалин В.В., Канунникова О.М., Михайлова С.С., Аксенова В.В.</b> МЕХАНОХИМИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТИТАНА С ЖИДКИМИ УГЛЕВОДОРОДАМИ.....	412
<b>Маратканова А.Н.</b> ФОРМИРОВАНИЕ МЕЖФАЗНОГО СЛОЯ В СИСТЕМЕ Fe-ПОЛИСТИРОЛ ПРИ МЕХАНИЧЕСКОМ ИЗМЕЛЬЧЕНИИ В ПРИСУТСТВИИ ПЕРФТОРНОНАНОВОЙ КИСЛОТЫ: I. РЕНТГЕНОСПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ.....	421
<b>Рыбин Д.С., Коньгин Г.Н., Порсев В.Е., Елсуков Е.П., Еремина М.А., Шарафутдинова Д.Р., Гумаров Г.Г., Петухов В.Ю., Гнездилов О.И., Ахметов М.М., Салихов К.М., Болдырев В.В.</b> МЕХАНОХИМИЧЕСКИ ИНДУЦИРОВАННЫЕ СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ГЛЮКОНАТАХ КАЛИЯ, НАТРИЯ И КАЛЬЦИЯ.....	429
<b>КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ</b>	
<b>Анисимов Д.В., Соболев В.В., Соболев В.Вал.</b> РАСЧЕТЫ КОМПЛЕКСА ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ДИИОДИДА РТУТИ.....	441
<b>Кораблев Г.А., Заиков Г.Е.</b> ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ КОРРЕЛЯЦИИ СРОДСТВА К ЭЛЕКТРОНУ СО ЗНАЧЕНИЯМИ ПРОСТРАНСТВЕННО ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ПАРАМЕТРА.....	447
<b>Корнев В.И., Булдакова Н.С.</b> ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НИКЕЛЯ(II) С ЭТИЛЕНДИАМИНТЕТРААЦЕТАТОМ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ АМИНОПРОПИОНОВОЙ КИСЛОТЫ.....	457
<b>Петров В.Г., Шумилова М.А., Набокова О.С.</b> ПАРАМЕТРЫ ПОДВИЖНОСТИ ЗАГРЯЗНЕНИЙ АРСЕНИТОМ НАТРИЯ ДЛЯ ПОЧВ КАМБАРСКОГО РАЙОНА.....	465
<b>Соболев В.В., Соболев В.Вал., Мерзляков Д.А.</b> ЭКСИТОННЫЕ СПЕКТРЫ СУЛЬФИДА СТРОНЦИЯ.....	471
<b>Тарасов В.В., Рыбин Д.С., Бесогонов В.В., Жданова Л.И.</b> ДЕФОРМАЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ФУЛЛЕРЕНА C <sub>60</sub> .....	475
<b>РЕФЕРАТЫ.....</b>	480
Требования к оформлению статей.....	486

## 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.

Все представленные на публикацию материалы проходят рецензию у ведущих научных сотрудников Удмуртского научного центра УрО РАН.

Научное издание

**ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ**

**Главный редактор: академик РАН А.М. ЛИПАНОВ**

Члены редакционной коллегии:

В.И. Кодолов - **зам. гл. ред.**, 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

**Адрес ответственного секретаря журнала М.А. Корепанова:**

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

**Тел.(3412) 20-34-76**

**e-mail: [ipm@udman.ru](mailto:ipm@udman.ru)**

Технический редактор Е.Г. Вершинина

Подписано в печать 29.08.2013. Формат 60×84  $\frac{1}{8}$ .

Бумага «Ballet Classic».

Печать офсетная. Усл. печ. л. 18,84. Уч.-изд. л. 20,16. Тираж 400 экз.

РИО Института механики УрО РАН