

ВЕСТНИК

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Серия 4 | 2010 | ФИЗИКА
Выпуск 4 | Декабрь | ХИМИЯ

НАУЧНО-ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ. ИЗДАЁТСЯ С АВГУСТА 1946 ГОДА

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

- Долматова О. А., Анисимова Г. П., Цыганкова Г. А.* Параметры тонкой структуры и зеемановское расщепление конфигурации $2p^2$ атома углерода 3
- Гейер М. А.* Расчёт синтетических сейсмограмм методом гауссовых пучков с заданной шириной затухания 9
- Пек Б. Э., Самусенко А. В., Стишков Ю. К.* Моделирование катодонаправленного стримера в неоднородном электрическом поле 24
- Поволоцкий А. В., Поволоцкая А. В., Лесик М. А., Маньшина А. А.* Лазерно-индуцированное осаждение меди из водных растворов CuSO_4 , CuCl_2 , $\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ и $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ 35
- Ульянов П. Г., Усачёв Д. Ю., Добротворский А. М., Адамчук В. К., Масликова Е. И., Шевякова Е. П., Балмж К. С., Пушко С. В.* Применение микроскопа атомных сил для исследования субструктуры зёрен конструкционных сталей 44

ХИМИЯ

- Бальмаков М. Д.* Вопросы статистической термодинамики и квантовой теории структурных превращений в наносистемах 49
- Соколов И. А., Мурын И. В., Крийт В. Е., Пронкин А. А.* Влияние сульфатных ионов на электрические свойства стёкол системы $\text{Na}_2\text{O}-\text{P}_2\text{O}_5$ 58
- Конаков В. Г., Борисова Н. В., Харитонов С. Н., Голубев С. Н., Соловьёва Е. Н., Пивоваров М. М.* Электропроводность полиалюминатов натрия 68
- Хакимова Д. К., Шарипов Д. Ш., Бадалов А. Б.* Термическая стабильность и термодинамические функции гидрофторидов бария 75
- Семёнов К. Н., Чарыков Н. А., Летенко Д. Г., Никитин В. А., Постнов В. Н., Крохина О. А.* Синтез и идентификация фуллеренола 83



САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ОСНОВАН В 1724 ГОДУ
1824 – ГОД ВЫХОДА В СВЕТ ПЕРВОГО ИЗДАНИЯ УНИВЕРСИТЕТА

© Авторы статей, 2010

© Издательство
Санкт-Петербургского
университета, 2010

<i>Иванов Н. С., Суходолов Н. Г., Янкович А. И.</i> Получение плёнок Лэнгмюра–Блоджетт, содержащих берлинскую лазурь	91
<i>Иваненко Н. Б., Иваненко А. А., Носова Е. Б., Соловьев Н. Д.</i> Определение токсических и фоновых содержаний ртути в крови атомно-абсорбционным методом с электротермической атомизацией и зеемановской модуляционной поляризационной коррекцией фона	97
<i>Поваров В. Г., Лисовенко Г. Б.</i> Применение кислоторастворимых сорбентов для концентрирования труднолетучих органических веществ из воды	105
<i>Родинков О. В., Журавлёва Г. А., Бугайченко А. С.</i> Угольно-фторопластовые сорбенты для экспрессного концентрирования паров органических веществ при анализе воздуха	113

КРАТКИЕ НАУЧНЫЕ СООБЩЕНИЯ

<i>Колесниченко П. В., Шаров Т. В., Пулькин С. А., Козлов В. В.</i> Теоретическое исследование наноразмерных зондов сканирующих зондовых микроскопов	120
<i>Шефов К. С., Степанова М. М., Макаров А. Н., Стародубов А. Г.</i> Численное моделирование молекулярно-динамических систем с использованием пакета LAMMPS	126
<i>Кавригин П. С., Мерц С. П., Немнюгин С. А., Толушкин С. Г.</i> Использование программных пакетов Fluka и Geant4 для решения задач адронной терапии	131
<i>Бедрина М. Е., Егоров Н. В., Клемешев В. А.</i> Моделирование наноструктур на высокопроизводительном вычислительном комплексе	136
<i>Кастерин Д. С., Степанова М. М.</i> Использование технологий MPI и OpenMP в кластерных системах с локальными менеджерами ресурсов	141
<i>Слюсарева И. В., Козин А. О., Дементьев И. А., Кондратьев Ю. В.</i> Калориметрическое определение энтальпии растворения тетраацетата димолибдена(II) в донорных растворителях	145
<i>Чиркст Д. Э., Лобачёва О. Л., Черемисина О. В.</i> Ионная флотация самария(3+) с додецилсульфатом натрия	149
<i>Монин А. В., Земцова Е. Г., Швейкина Н. Б., Смирнов В. М.</i> Синтез микро- и наночастиц оксида алюминия золь-гель методом	154
<i>Семищенко К. Б., Толстой В. П.</i> Нанослой гибридного соединения комплекса $Ag_2(NH_2CSNH_2)_4^{2+}$ и фосфорновольфрамовой кислоты	158
<i>Каменцев М. Я., Москвин Л. Н.</i> Возможности рН-стэкинга ионов металлов при их капиллярно-электрофоретическом определении в пробах со сложной матрицей	163
РЕФЕРАТЫ	167
SUMMARIES	173
CONTENTS	178
СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ	180
ПЕРЕЧЕНЬ СТАТЕЙ	184

РЕФЕРАТЫ

УДК 539.18

Долматова О. А., Анисимова Г. П., Цыганкова Г. А. **Параметры тонкой структуры и зеемановское расщепление конфигурации $2p^2$ атома углерода** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 3–8.

Полуэмпирическим методом рассчитаны параметры тонкой структуры конфигурации $2p^2$ атома углерода. При диагонализации соответствующих матриц оператора энергии, в котором учтены все возможные взаимодействия (электростатическое, спин–орбита (своя и чужая), спин–спин и орбита–орбита), получены расчётные энергии уровней, практически совпадающие с экспериментальными, коэффициенты промежуточной связи и гироманнитные отношения. Последние сравниваются с имеющимися экспериментальными данными и показывают хорошее согласие. Определён характер связи в рассматриваемой системе. Для подтверждения надёжности полученных результатов построена картина зеемановского расщепления в области магнитного поля 0–500 кЭ и рассчитаны интервалы между магнитными компонентами в полях, где имеются соответствующие экспериментальные данные. Получено хорошее согласие расчётных и экспериментальных величин. Библиогр. 8 назв. Ил. 1. Табл. 4.

Ключевые слова: полуэмпирический расчёт, матрица оператора энергии, тонкая структура, зеемановское расщепление, гироманнитные отношения, коэффициенты связи.

УДК 550.34.01, 550.34.094

Гейер М. А. **Расчёт синтетических сейсмограмм методом гауссовых пучков с заданной шириной затухания** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 9–23.

В работе обсуждается проблема выбора свободных параметров гауссовых пучков, которые непосредственно влияют на его форму (ширину затухания). При их неудачном выборе гауссовы пучки имеют довольно сложную форму, что приводит не только к потере точности вычислений, но и значительно увеличивает время, необходимое для расчёта волнового поля. Предлагается оригинальная методика построения гауссовых пучков любой заранее заданной ширины затухания и одновременно с минимальным количеством осцилляций для заданной ширины. Показано, что с физической точки зрения удобно выбирать ширину гауссова пучка пропорциональной длине волны. Процедура построения такого пучка универсальна – она работает для любых сред, в том числе и при наличии в них гладких границ раздела, и позволяет автоматически сохранять выбранную ширину затухания пучка вдоль всего луча. Эти свойства вместе с тем обстоятельством, что алгоритм вычисления волнового поля не изменяется при наличии каустик или зон критического отражения, делают метод особенно удобным для расчёта теоретических сейсмограмм в моделях реальных сред, имеющих сложную структуру среды. Демонстрируемые в работе численные эксперименты подтверждают работоспособность и эффективность предлагаемой методики. Во всех случаях результаты, полученные с применением новой процедуры построения гауссовых пучков, хорошо согласуются с результатами, полученными другими авторами в своих работах. Написан численный код, реализующий данный метод. Библиогр. 13 назв. Ил. 9.

Ключевые слова: метод гауссовых пучков, синтетические сейсмограммы, начальные параметры гауссовых пучков.

УДК 537.523

Пек Б. Э., Самусенко А. В., Стишков Ю. К. **Моделирование катодонаправленного стримера в неоднородном электрическом поле** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 24–34.

В статье рассмотрено решение задачи о распространении стримера в неоднородном электрическом поле в дрейфово-диффузионном приближении. В качестве газа, в котором развивается процесс, выступает смесь кислорода и азота, моделирующая сухой воздух. Рассматривается три типа частиц: электроны, положительные и отрицательные ионы. Система уравнений включает транспортные уравнения для каждого типа частиц, уравнение Пуассона для электрического потенциала. Особенностью работы является анализ влияния мощности и типа разных источников ионизации на динамику стримера. В качестве источников ионизации рассматривается источник, создающий однородную концентрацию электронов в пространстве, а также фотоизлучение головки стримера. В последнем случае система уравнений дополняется уравнением на концентрацию фотонов. Выявлен начальный участок движения стримера, осуществляемый при помощи электронов, оставшихся от лавинного этапа разряда. Для этого участка характерен рост скорости, а затем спад при переходе стримера через максимум концентрации электронов в лавине. Показано, что при отсутствии фотоионизации либо внешнего источника ионизирующего облучения, на этом рост стримера прекращается. Получены данные о влиянии

мощности ионизирующего излучения, испускаемого головкой стримера, на скорость стримера, радиус его головки, напряжённость поля на переднем фронте стримера. Показано, что увеличение коэффициента поглощения ионизирующего излучения головки воздухом затрудняет развитие стримера. Показано, что качественная картина развития стримера не зависит от рассмотренных типов источников излучения и слабо зависит от интенсивности излучения. Библиогр. 10 назв. Ил. 7. Табл. 1.

Ключевые слова: газовый разряд, положительный стример, воздух, дрейфово-диффузионное приближение.

УДК 535.211

Поволоцкий А. В., Поволоцкая А. В., Лесик М. А., Маньшина А. А. **Лазерно-индуцированное осаждение меди из водных растворов CuSO_4 , CuCl_2 , $\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ и $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 35–43.

Исследован процесс формирования металлических структур из растворов электролитов на основе солей меди CuSO_4 , CuCl_2 , $\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ и $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ методом лазерно-индуцированного осаждения. Проведено лазерно-индуцированное осаждение металла в режиме однократного сканирования при различных условиях осаждения (мощность лазерного излучения, скорость сканирования, исходная температура раствора электролита). Продемонстрирована взаимосвязь ширины получаемых структур с типом используемой соли меди и концентрационными параметрами растворов электролитов, что связано с эффективностью протекания лазерно-индуцированной реакции восстановления меди. Библиогр. 12 назв. Ил. 4. Табл. 3.

Ключевые слова: лазерно-индуцированное осаждение, электролит, медь.

УДК 53.086

Ульянов П. Г., Усачёв Д. Ю., Добротворский А. М., Адамчук В. К., Масликова Е. И., Шевякова Е. П., Балиж К. С., Пушко С. В. **Применение микроскопа атомных сил для исследования субструктуры зёрен конструкционных сталей** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 44–48.

Работа посвящена изучению микроструктуры образцов углеродистых и низколегированных сталей, вырезанных из действующего оборудования нефтеперерабатывающих заводов. Установлено, что АСМ-методика обладает рядом преимуществ по сравнению с оптической микроскопией: существенно возрастает диапазон увеличений, появляется возможность исследовать структуру материалов как на микроуровне, так и при более высоких увеличениях, вплоть до нескольких нанометров. Библиогр. 7 назв. Ил. 5.

Ключевые слова: атомно-силовой микроскоп, сталь, металлография, феррит, перлит, цементит, зёрна.

УДК 519.2:536.758:539.23

Бальмаков М. Д. **Вопросы статистической термодинамики и квантовой теории структурных превращений в наносистемах** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 49–57.

Из первых принципов квантовой механики и статистической физики рассмотрены микроскопические механизмы формирования наноструктур. В рамках адиабатического приближения получены соотношения для вероятностей реализации структурных модификаций различных квазизамкнутых ансамблей. Особое внимание уделено температурному интервалу перехода из одного квазизамкнутого ансамбля в другой. Библиогр. 17 назв. Ил. 1.

Ключевые слова: наносистема, квантовая механика, статистическая физика, структурные превращения.

УДК 544.032.3

Соколов И. А., Мурин И. В., Крийт В. Е., Пронкин А. А. **Влияние сульфатных ионов на электрические свойства стёкол системы $\text{Na}_2\text{O}-\text{P}_2\text{O}_5$** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 58–67.

Изучена температурно-концентрационная зависимость электрической проводимости стёкол системы $\text{Na}_2\text{O}-\text{P}_2\text{O}_5$ и $\text{Na}_2\text{SO}_4-\text{NaPO}_3$. В интервале температур от 25 °С до T_g . Наблюдается линейная зависимость $\lg \sigma = f(1/T)$. Возрастание электрической проводимости сульфатнофосфатных стёкол (по сравнению с чисто оксидными) интерпретировано с точки зрения образования смешанных сульфатнофосфатных полярных фрагментов структуры, прочность закрепления ионов натрия в которых ниже,

чем в чисто оксидных. Линейная зависимость $\lg \sigma = f(1/T)$ свидетельствует о постоянстве механизма миграции носителей тока в указанном интервале температур. Библиогр. 39 назв. Ил. 3. Табл. 6.

Ключевые слова: электрическая проводимость, носители тока, стекло, структура.

УДК 54.165

Конаков В. Г., Борисова Н. В., Харитонов С. Н., Голубев С. Н., Соловьёва Е. Н., Пивоваров М. М. **Электропроводность полиалюминатов натрия** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 68–74.

Методами твердофазного и жидкофазного синтезов при варьировании условий их проведения получены поликристаллические полиалюминаты натрия $\text{Na}_2\text{O} \cdot n\text{Al}_2\text{O}_3$ ($5,5 \leq n \leq 9,5$). Показано, что в интервале температур 313–625 К с увеличением n проводимость падает. На примере образца $\text{Na}_2\text{O} \cdot 6\text{Al}_2\text{O}_3$, синтезированного разными методами, продемонстрировано уменьшение проводимости итоговой керамики с увеличением давления формования. Библиогр. 13 назв. Ил. 3. Табл. 1.

Ключевые слова: проводимость, проводимость по объёму, проводимость по границам зёрен, сопротивление, состав, давление, температура.

УДК 544.31;32

Хакимова Д. К., Шарипов Д. Ш., Бадалов А. Б. **Термическая стабильность и термодинамические функции гидрофторидов бария** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 75–82.

Определены термодинамические характеристики гидрофторидов бария двумя независимыми методами – калориметрией растворения и тензиметрией. Методом калориметрии растворения определено значение энтальпии образования гидрофторидов. Методом тензиметрии с мембранным нульманометром изучено термическое разложение гидрофторидов. Библиогр. 13 назв. Ил. 2. Табл. 6.

Ключевые слова: гидрофториды бария, плавиковая кислота, калориметрия, тензиметрия, энтальпия, энтропия, энергия Гиббса, барограмма, термодинамика, манометр.

УДК 541.123

Семёнов К. Н., Чарыков Н. А., Летенко Д. Г., Никитин В. А., Постнов В. Н., Крохина О. А. **Синтез и идентификация фуллеренола** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 83–90.

Разработана методика синтеза препарата фуллеренола. Проведена идентификация препарата фуллеренола методами: электронной спектроскопии, инфракрасной спектроскопии, оптической микроскопии, высокоэффективной жидкостной хроматографии. Методом изотермического насыщения в ампулах изучена растворимость фуллеренола в дистиллированной воде при 25 °С. Библиогр. 11 назв. Ил. 9.

Ключевые слова: фуллеренол, растворимость.

УДК 539.216.2

Иванов Н. С., Суходолов Н. Г., Янклович А. И. **Получение плёнок Лэнгмюра–Блоджетт, содержащих берлинскую лазурь** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 91–96.

На основе монослоёв катионактивного ПАВ (октадециламин) методом последовательного ввода реагентов в субфазу получен аналог берлинской лазури в монослое. Наличие берлинской лазури в монослое подтверждено анализом изотерм сжатия и спектрофотометрическими исследованиями. Библиогр. 7 назв. Ил. 7.

Ключевые слова: Лэнгмюр, берлинская лазурь, монослой октадециламина.

УДК 543.421

Иваненко Н. Б., Иваненко А. А., Носова Е. Б., Соловьёв Н. Д. **Определение токсических и фоновых содержаний ртути в крови атомно-абсорбционным методом с электротермической атомизацией и зеemanовской модуляционной поляризационной коррекцией фона** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 97–104.

Представлены две методики определения ртути в крови человека на основе метода атомно-абсорбционной спектроскопии с электротермическим вариантом атомизации в модифицированной графитовой печи и зеemanовской модуляционной поляризационной коррекцией фона. Первая методика

разработана для определения токсических содержаний ртути и предполагает прямое введение разбавленной крови в графитовый атомизатор спектрометра. Методика отличается простотой и экспрессностью. Вторая методика позволяет определять фоновые содержания ртути, так как предполагает концентрирование аналита с помощью ртутно-гидридной приставки. Представлены данные по оптимизации температурно-временной программы нагрева атомизатора, выбора перманентных модификаторов и условий восстановления ртути в РГП. Доказана правильность методик и оценены их метрологические характеристики. Разработанные методики можно применять в клинической практике при диагностике ртутных отравлений и при проведении скрининговых исследований. Библиогр. 17 назв. Ил. 3. Табл. 5.

Ключевые слова: анализ крови, атомно-абсорбционная спектрометрия, ртуть, прямой элементный анализ биологических жидкостей.

УДК 54.01

Поваров В. Г., Лисовенко Г. Б. **Применение кислоторастворимых сорбентов для концентрирования труднолетучих органических веществ из воды** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 105–112.

В работе рассмотрен новый метод предварительного концентрирования труднолетучих органических соединений из воды. Измерены константы сорбции ряда органических соединений на ряде кислоторастворимых сорбентов и представлены результаты газохроматографического анализа природной воды и искусственных смесей. Библиогр. 5 назв. Ил. 5. Табл. 3.

Ключевые слова: кислоторастворимый сорбент, концентрирование, анализ.

УДК 543.544:541.123

Родинков О. В., Журавлёва Г. А., Бугайченко А. С. **Угольно-фторопластовые сорбенты для экспрессного концентрирования паров органических веществ при анализе воздуха** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 113–119.

Разработаны поверхностно-слоистые угольно-фторопластовые сорбенты для экспрессного концентрирования паров органических веществ при анализе воздуха. Выявлены закономерности удерживания и десорбции органических веществ на указанных сорбентах и показаны их преимущества по сравнению с обычными активными углями. Библиогр. 21 назв. Ил. 4. Табл. 2.

Ключевые слова: сорбция, газовая фаза, летучие органические вещества, сорбенты, угольно-фторопластовые, поверхностно-слоистые.

УДК 539.21, 539.18

Колесниченко П. В., Шаров Т. В., Пулькин С. А., Козлов В. В. **Теоретическое исследование наноразмерных зондов сканирующих зондовых микроскопов** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 120–125.

С целью калибровки зондов сканирующих зондовых микроскопов методами оптической спектроскопии, а также их возможного использования в качестве кубитов в квантовом компьютере предложены две трёхмерные квантово-механические модели, одна на основе прямоугольной, а другая на основе цилиндрической квантовых ям. Показано, что большинство спектроскопических характеристик практически нечувствительно к форме зонда при одинаковом поперечном размере, что позволяет осуществлять уверенную калибровку зондов по размерам на основе простых теоретических моделей. Найдены спектроскопические характеристики, чувствительные к форме зонда, которые позволяют осуществлять более тонкую калибровку зондов. Библиогр. 4 назв. Ил. 2.

Ключевые слова: зонд, квантово-размерные структуры, квантовая яма, оптическая спектроскопия.

УДК 004.94

Шефов К. С., Степанова М. М., Макаров А. Н., Стародубов А. Г. **Численное моделирование молекулярно-динамических систем с использованием пакета LAMMPS** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 126–130.

Представлены результаты начального этапа разработки методики численного моделирования нового реального эксперимента, направленного на исследование физических условий образования длинных нанотрубок. Целью работы было проведение вычислительных расчётов для задач молекулярной динамики с использованием программного пакета LAMMPS на параллельном вычислительном кластере

и анализ некоторых эмпирических потенциалов межатомного взаимодействия, которыми оперирует данный пакет. Библиогр. 7 назв. Ил. 5.

Ключевые слова: численное моделирование, классическая молекулярная динамика, параллельные вычисления, углеродные нанотрубки.

УДК 004.942

Кавригин П. С., Мерц С. П., Немнюгин С. А., Толушкин С. Г. **Использование программных пакетов Fluka и Geant4 для решения задач адронной терапии** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 131–135.

В работе представлены результаты моделирования процессов распространения пучков протонов и ионов углерода в воде при нормальных условиях. Получены зависимости длины пробега от энергии и сорта частиц, а также зависимости параметров пика Брэгга от энергии и сорта частиц. Получена модифицированная кривая Брэгга для протонов. Рассматриваются различные конфигурации преобразователя, предназначенного для понижения энергии пучка протонов. Моделирование выполнялось с помощью программных пакетов Fluka и Geant4. Библиогр. 9 назв. Ил. 6.

Ключевые слова: лучевая терапия, адронная терапия, математическое моделирование, пик Брэгга.

УДК 546.26:544.144

Бедрина М. Е., Егоров Н. В., Клемешев В. А. **Моделирование наноструктур на высокопроизводительном вычислительном комплексе** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 136–140.

Предложена методика определения свойств и физико-химических характеристик наноструктур с использованием численных методов решения уравнения Шрёдингера на высокопроизводительном вычислительном комплексе в параллельном режиме вычислений. Квантово-химическими методами HF, V3LYP/6-31G, PBE0/6-31G определены равновесные структуры молекулы бакминстерфуллерена C₆₀, димера (C₆₀)₂, кластеров (C₆₀)₉ и (C₆₀)₇, нанотрубок C₁₂₀ и C₂₄₀, а также вычислены структурные параметры [F(PcGaF)₇]⁻ и полимера (PcGaF)_∞ фталоцианината монофторида галлия(III). Для прогнозирования свойств композитных материалов, полупроводниковых и металлических электронных эмиттеров разработана методика расчётов кластерных моделей поверхностного слоя и рассмотрен процесс адсорбции молекулы воды на поверхности кристаллов MgO и ZnO. Изучены взаимодействия атомов и молекул водорода с фуллеренами и углеродными нанотрубками. Библиогр. 7 назв. Ил. 4.

Ключевые слова: V3LYP, фуллерены, металлфталоцианины, водородная энергетика, высокопроизводительный вычислительный комплекс, параллельные вычисления.

УДК 004.75

Кастерин Д. С., Степанова М. М. **Использование технологий MPI и OpenMP в кластерных системах с локальными менеджерами ресурсов** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 141–144.

В статье рассмотрен один из аспектов применения прикладных параллельных программ в вычислительных кластерах, работающих под управлением специализированных систем – локальных менеджеров ресурсов, а именно – учёт ресурсов и контроль прохождения параллельных заданий. Были изучены способы и средства, а также подключаемые к менеджеру сторонние программные пакеты, позволяющие наиболее полно организовать контроль выполнения параллельных программ и обеспечить точный учёт всех используемых программой вычислительных ресурсов. Разработаны варианты конфигурации, реализующие данную функциональность. Библиогр. 14 назв.

Ключевые слова: параллельные приложения, MPI, OpenMP, вычислительные кластеры, локальные менеджеры ресурсов, системы пакетной обработки, SGE, PBS, Torque, Mrihex.

УДК 541.115

Слюсарева И. В., Козин А. О., Дементьев И. А., Кондратьев Ю. В. **Калориметрическое определение энтальпии растворения тетраацетата димолибдена(II) в донорных растворителях** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 145–148.

Методом калориметрии определены энтальпии растворения кристаллического обезвоженного тетраацетата димолибдена(II) в ацетонитриле, диметилформамиде, диметилацетамиде, диметилсульфоксиде при стандартных условиях. Библиогр. 14 назв. Табл. 3.

Ключевые слова: тетракарбоксилаты молибдена(II), тетраацетат димолибдена(II), аддукты тетраацетата димолибдена(II), калориметрия, энтальпия растворения.

УДК 546.65:541.8

Чиркст Д. Э., Лобачёва О. Л., Черемисина О. В. **Ионная флотация самария(3+)** с додецилсульфатом натрия // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 149–153.

Представлены результаты экспериментального и теоретического исследования процесса флотации в системе, содержащей катионы самария(+3) и поверхностно-активное вещество – додецилсульфат натрия. Методом кондуктометрического титрования определены энергии Гиббса образования гидроксида и гидроксокомплексов самария(3+), равные $-1280,16 \pm 3,63$ кДж/моль и $-866,49 \pm 3,60$ кДж/моль соответственно. Получена зависимость коэффициента распределения самария(3+) в процессе ионной флотации с додецилсульфатом натрия от pH равновесной водной фазы. Сопоставление значений pH извлечения с pH гидратообразования позволяет заключить, что самарий флотируется в форме основного додецилсульфата гидроксосамария. Библиогр. 15 назв. Ил. 2. Табл. 1.

Ключевые слова: поверхностно-активные вещества, ионная флотация, самарий, термодинамические характеристики флотационного процесса.

УДК 661.183.82+54.057+54-168

Монин А. В., Земцова Е. Г., Швейкина Н. Б., Смирнов В. М. **Синтез микро- и наночастиц оксида алюминия золь-гель методом** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 154–157.

В работе были изучены условия синтеза порошка наночастиц оксида алюминия. На основе проведения исследования частиц оксида алюминия методом электронной микроскопии и рентгенофазового анализа установлен размер частиц (30–40 нм) и фазовый состав. На основании данных рентгенофазового анализа установлено, что при 900 °С для наночастиц оксида характерен фазовый переход из γ -Al₂O₃ в θ -Al₂O₃, а для микроразмерного оксида алюминия фазовых превращений γ -Al₂O₃ при 900 °С практически не наблюдается. Этот факт говорит о влиянии размера частиц оксида алюминия на фазовые превращения. Библиогр. 4 назв. Ил. 3. Табл. 2.

Ключевые слова: оксид алюминия, нано- и микрочастицы, синтез, золь-гель метод, размер частиц.

УДК 539.216.2

Семищенко К. Б., Толстой В. П. **Нанослой гибридного соединения комплекса Ag₂(NH₂CSNH₂)₄²⁺ и фосфорновольфрамовой кислоты** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 158–162.

В работе впервые определены условия синтеза методом ионного наслаивания на поверхности кремнезёма нанослоёв с использованием в качестве реагентов растворов комплексного соединения Ag₂(NH₂CSNH₂)₄²⁺ и фосфорновольфрамовой кислоты. Исследование синтезированных слоёв выполнено методами сканирующей электронной микроскопии, энергодисперсионного микроанализа, УФ- и ИК-фурье спектроскопии пропускания. На основе анализа экспериментального материала показано, что синтезированный слой состоит из катионов Ag₂(NH₂CSNH₂)₄²⁺ и анионов гетерополикислоты в лакунарной форме. Библиогр. 14 назв. Ил. 4.

Ключевые слова: ионное наслаивание, фосфорновольфрамовая кислота, тиомочевина.

УДК 543.545

Каменцев М. Я., Москвин Л. Н. **Возможности pH-стэкинга ионов металлов при их капиллярно-электрофоретическом определении в пробах со сложной матрицей** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2010. Вып. 4. С. 163–166.

Предложен метод on-line концентрирования ионов металлов по механизму pH-стэкинга в пробах со сложной матрицей. Принцип метода реализован в методике капиллярно-электрофоретического определения цинка(II) и кадмия(II) в человеческой моче. Библиогр. 5 назв. Ил. 1.

Ключевые слова: pH-стэкинг, ионы металлов.

SUMMARIES

Dolmatova O. A., Anisimova G. P., Tsygankova G. A. Fine structure parameters and Zeeman splitting for configuration $2p^2$ of the carbon atom.

The matrix of the energy operator is constructed for the np^2 configuration. The electrostatic, spin-orbit, spin-other-orbit, spin-spin and orbit-orbit interactions are taken into account. Fine-structure parameters, coupling coefficients and gyromagnetic ratios are calculated for the $2p^2$ configuration of the carbon atom. Discrepancies between the calculated and experimental energy are virtually zero. The picture of magnetic level splitting for the $2p^2$ configuration of carbon is calculated with the fine-structure parameters obtained by the semiempirical method. Only the terms linear in the magnetic field strength are taken into account in the matrix elements of the energy operator of interaction of the atom with the magnetic field. In the region of magnetic field strength up to 500 kOe 6 crossings of the magnetic sublevels were found. The results obtained are compared with the experimental results.

Key words: semi-empirical computation, matrix of the energy operator, fine-structure parameters, Zeeman splitting, gyromagnetic values, coupling coefficients.

Geyer M. A. Calculation of synthetic seismograms by summation of Gaussian beams with the given damping width.

The original method for the construction of Gaussian beams with any given damping width and simultaneously with the minimum number of oscillation is proposed. The procedure is universal: It is valid for any medium and automatically keeps the selected width along the whole ray. Due to these features as well as the fact that the algorithm remains unchanged in the vicinities of caustics or critical reflections the method turns out to be convenient for computation of synthetic seismograms in complex media. Numerical modeling proves the efficiency of the proposed method.

Key words: Gaussian beam method, synthetic seismogram.

Pek B. E., Samusenko A. V., Stishkov Yu. K. Simulation of a cathode-directed streamer in non-uniform electric field

Solution of the problem of streamer development in a non-uniform electric field in the drift-diffusion approximation is considered. Models with different types of an ionization source are compared. The data of ionization power and its source type influence on streamer velocity, its head radius, electric field intensity are analyzed.

Key words: gas discharge, positive streamer, air, drift-diffusion approximation.

Povolotskiy A. V., Povolotskaya A. V., Lesik M. A., Manshina A. A. Laser-induced copper deposition from liquid electrolytes on the base of CuSO_4 , CuCl_2 , $\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ and $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$.

The process of metal structure formation from liquid electrolytes on the base of CuSO_4 , CuCl_2 , $\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ and $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ by the method of laser-induced metal deposition was studied. Metal deposition was realized in a single scan regime at different deposition parameters (laser power, scan velocity, initial temperature of liquid electrolyte). The correlation of the width of the deposited structures with the kind of copper salt and electrolyte component concentration was found what can be connected with efficiency of laser-induced copper reduction process.

Key words: laser-induced deposition, electrolyte, copper.

Ulyanov P. G., Usachev D. Yu., Dobrotvorskii A. M., Adamchuk V. K., Maslikova E. I., Shevyakova E. P., Balizh K. S., Pushko S. V. Atomic force microscopy studies of grain substructure in construction steels.

The present work is devoted to the investigation of microstructure and nanostructure of carbonaceous and low-alloyed steel samples by the methods of atomic force microscopy (AFM). These samples were carved of active equipment at Research and Production Plant (reactors of catalytic reforming and hydrofining of diesel fuel, coils of technological ovens, technological pipes). Properties of metals and alloys including steels depend on their chemical composition and structure which are closely related. The paper covers the results of applying AFM to the research of the structures which are widely used in the mechanical engineering of constructive materials.

Key words: atomic force microscopy, metallography, steel, defect, grain.

Bal'makov M. D. Problems of statistical thermodynamics and quantum theory of structural transformations in nanosystems.

From the first principles of quantum mechanics and statistical physics the microscopic mechanisms of structure formation are considered. Within the adiabatic approximation the relations for probabilities of structural modification realization of various quasiclosed ensembles are obtained. The special attention is given to a temperature interval of transition from one quasiclosed ensemble to the other.

Key words: nanosystem, quantum mechanics, statistical physics, structural transformations.

Sokolov I. A., Murin I. V., Kriyt V. E., Pronkin A. A. Influence of sulfate ions on electrical properties of $\text{Na}_2\text{O}-\text{P}_2\text{O}_5$ glasses.

The objective of the present study was to investigate the temperature and concentration dependence of electric conductivity of $\text{Na}_2\text{O}-\text{P}_2\text{O}_5$ and $\text{Na}_2\text{SO}_4-\text{Na}_3\text{PO}_4$ glasses. We have determined the linear dependence relations within the temperature interval from 25 °C to T_g as follows: $\lg \sigma = f(1/T)$. The increase of electric conductivity of sulfate-phosphate glass is explained by the formation of mixed sulfate-phosphate polar fragments of the structure, the ions fixation in sulfate-phosphate systems being lower than in oxide glasses. The linear dependency $\lg \sigma = f(1/T)$ shows the constancy of the migration mechanism of current carriers in the definite temperature interval.

Key words: electrical conductivity, carriers, glass, structure.

Konakov V. G., Borissova N. V., Haritonov S. N., Golubev S. N., Solovieva E. N., Pivovarov M. M. Conductivity of sodium polyaluminates.

Sodium polycrystalline polyaluminates $\text{Na}_2\text{O} \cdot n\text{Al}_2\text{O}_3$ ($5,5 \leq n \leq 9,5$) were synthesized using solid- and liquid-phase methods. It was shown that their conductivity decreases with the increase in n at 313–625 K. The decrease in the conductivity of the final ceramics with the increase in the formation pressure was demonstrated for $\text{Na}_2\text{O} \cdot 6\text{Al}_2\text{O}_3$ sample synthesized by various methods.

Key words: conductivity, volume conductivity, grain boundary conductivity, resistance, composition, pressure, temperature.

Khakimova D. K., Sharipov D., Badalov A. B. Thermal stability and thermodynamic functions of barium hydrofluoride.

The thermodynamic characteristics of barium hydrofluorides are defined by two independent methods: dissolution calorimetry and tensometry. The method of solution calorimetry determined the hydrofluoride formation enthalpy value. Tensometry method with the membrane zero-manometer studied hydrofluoride thermal decomposition.

Key words: barium hydrofluoride plavikovoaya acid, calorimetry, tensometry, enthalpy, entropy, Gibbs energy, barogram, thermodynamics, pressure gauge.

Semenov K. N., Charykov N. A., Letenko D. G., Nikitin V. A., Postnov V. N., Krokhina O. A. Synthesis and identification of fullerenol.

The method of fullerenol synthesis is developed. Identification of the fullerenol was carried out by the methods of electron spectroscopy, infrared spectroscopy, optical microscopy, high-performance liquid chromatography. The solubility of fullerenol in distilled water at 25 °C was measured using an isothermal saturation method in ampoule.

Key words: fullerenol, solubility.

Ivanov N. S., Sukhodolov N. G., Yanklovich A. I. Obtaining Langmuir–Blodgett films containing Prussian Blue.

On the basis of monolayers of octadecylamine the analogue of Prussian Blue was obtained by serial input reactants in the subphase. The presence of PB in the monolayer was confirmed by the analysis of surface pressure–area isotherms and spectrophotometric analysis.

Key words: Langmuir, Prussian Blue, octadecylamine monolayer.

Ivanenko N. B., Ivanenko A. A., Nosova E. B., Soloviev N. D. Determination of toxic and background mercury content in blood by graphite furnace atomic absorption spectrometry with Zeeman high-frequency polarization modulation background correction.

Two methodologies based on graphite furnace atomic absorption spectrometry with modified furnace and Zeeman high-frequency polarization modulation background correction were presented. The first methodology was developed for toxic mercury content determination and it assumes direct diluted blood sample introduction into the atomizer. The methodology is uncomplicated and expressive. The second one allows to determine background mercury content, as it uses concentration of the analyte by means of Mercury-Hydrides Generation (MHG) technique. In the present work the data concerning optimization of the thermo-temporal heating program, choosing permanent furnace modifiers and Mercury reduction conditions in MHG are presented. Both methodologies were validated and analytical figures of merit estimation were performed. Developed methodologies may be applied both in clinical diagnostic of Mercury poisoning and in screening environmental studies.

Key words: blood analysis, atomic absorption spectrometry, mercury, direct element analysis of biological fluids.

Povarov V. G., Lisovenko G. B. The application of acid dissolved sorbent to determination of non-volatile organic compounds in water.

The new method of concentration of non-volatile organic compounds (NVOC) from water are considered. Constants of sorption of some NVOC were measured and the results of GC-MS analysis of natural water and artificial mixtures are presented.

Key words: acid-dissolved sorbent, concentrating, analysis.

Rodinkov O. V., Zhuravleva G. A., Bugaychenko A. S. Coal-teflon sorbents for fast concentration of organic substance vapors by air analysis.

The regularities of organic compound vapor concentration on the composite surface-layer sorbents were detected. Advantages of these sorbents in comparison with pure active coal were shown by gas chromatographic analysis of air.

Key words: sorbtion, gaseous phase, volatile organic substances, sorbents, coal-teflon, surface-layer.

Kolesnichenko P. V., Sharov T. V., Pulkhin S. A., Kozlov V. V. Theoretical study of nano-dimensional probes of scanning probe microscopy.

With the aim of calibration of probes for scanning probe microscopes using methods of optical spectroscopy and also in view of their use as qubits in quantum computers, we propose two three-dimensional quantum-mechanical models. One of these models is based on the rectangular, and the other – on the cylindrical quantum wells. We show that most of spectroscopic characteristics are practically insensitive to the shape of the probe given that the transverse dimensions are kept the same. This observation allows us the straightforward calibration of sizes of the probes basing on the simplest theoretical models. We also find such spectroscopic characteristics that are sensitive to the shape of the probe. They allow us more accurate calibration of probes.

Key words: probe, quantum-size structures, quantum well, optical spectroscopy.

Shefov K. S., Stepanova M. M., Makarov A. N., Starodubov A. G. Numerical simulation of molecular-dynamical systems using LAMMPS package.

The results of the first steps to the development of a new method of real physical experiment simulation aimed at studying physical conditions of carbon nanotube forming. The aim of this work was to make parallel computations for MD problems using LAMMPS package and a computer cluster and to make the analysis of a few empirical potentials of interatomic interaction used by LAMMPS.

Key words: numerical simulation, classical molecular dynamics, parallel computations, carbon nanotubes.

Kavrigin P. S., Merts S. P., Nemnyugin S. A., Tolushkin S. G. Modelling with Fluka and GEANT4 packages for solution of hadron therapy problems.

Bragg's plot is obtained for beams of proton and carbon ions in water. Dependences of track lengths as well as Bragg's peak parameter dependence on energy and the kind of particles are considered. Bragg's

modified peak for protons is obtained. Various configurations of beam transformer designed for energy attenuation are analyzed. Simulations have been performed with Fluka and GEANT4 packages.

Key words: radiation therapy, hadron therapy, computer simulation, Bragg's peak.

Bedrina M. E., Egorov N. V., Klemeshev V. A. Modeling nanostructures on a high performance computing system.

Quantum chemical methods HF, B3LYP/6-31G, PBE0/6-31G are used to analyze the equilibrium structure of the molecule buckminsterfullerene C_{60} , dimer $(C_{60})_2$, clusters $(C_{60})_9$ and $(C_{60})_7$, nanotubes C_{120} and C_{240} . The structural parameters of $[F(PcGaF)_7]^-$ and polymer $(PcGaF)_\infty$ phthalocyaninato monofluoride gallium (III) were computed. To predict the properties of composite materials, semiconductor and metal electron emitters the technique of calculations is developed for cluster models of the surface layer and the process of adsorption of water molecules on the surface of crystals of MgO and ZnO is considered. Interactions of atoms and molecules of hydrogen with fullerenes and carbon nanotubes are studied.

Key words: B3LYP, fullerenes, metalphthalocyanin, hydrogen energy, high performance computing systems, parallel computing.

Kasterin D. S., Stepanova M. M. Application of MPI and OpenMP technologies in compute clusters with local resource management systems.

One aspect of application of parallel programs in computational clusters, operated by specialized local resource management systems, namely – resource accounting and supervision over parallel jobs is presented. Means and third party modules providing rigid supervision and accurate resource accounting are studied. Some configurations are developed that implement this functionality.

Key words: parallel applications, MPI, OpenMP, compute clusters, local resource management systems, batch systems, SGE, PBS, Torque, Mpiexec.

Slyusareva I. V., Kozin A. O., Dementiev I. A., Kondratiev Yu. V. Calorimetric determination of enthalpy of tetraacetate dimolybdenum(II) dissolution in donors.

Enthalpies of dissolution of crystalline anhydrous dimolybdenum(II) tetraacetate in acetonitrile, dimethylformamide, dimethylacetamide, dimethylsulfoxide were calorimetrically determined.

Key words: dimolybdenum(II) tetraacetate, adducts dimolybdenum(II) tetraacetate, calorimetry, enthalpy of dissolution.

Chirkst D. E., Lobacheva O. L., Cheremisina O. V. Ion flotation of samarium(+3) with sodium dodecylsulfate.

The experimental results and thermodynamic investigation of ion flotation of Sm(+3) in aqueous systems with surface active substance are presented. On the base of conductivity data the values of Gibb's energies of Sm(+3) hydroxide formation were determined. Distribution coefficients of Sm(+3) in the process of ion flotation were calculated. It was shown that Sm(+3) is removed in the monohydroxide dodecylsulfate form.

Key words: surface-active substances, ion flotation, Sm(+3), thermodynamic data of the flotation process.

Monin A. V., Zemtsova E. G., Shveikina N. B., Smirnov V. M. Synthesis of micro- and nanoparticles of aluminum oxide by sol-gel method.

The conditions of synthesizing nano aluminum oxide particles are defined. Basing on SEM and XRD data we have drawn the conclusion of its size (30–40 nm) and phase condition. It was shown by XRD that at 900 °C phase conversion from γ to θ is characteristic for nano oxide particles but it cannot practically be observed for micro-sized aluminum oxide. This fact proves the dependence of phase conversion ratio on the particle size.

Key words: aluminum oxide, nano- and micro-sized particles, synthesis, sol-gel method, particle size.

Semisichenko K. B., Tolstoy V. P. Nanolayers of hybrid compound of complex $Ag_2(NH_2CSNH_2)_4^{2+}$ and tungstophosphoric acid.

The conditions of synthesis by the layer-by-layer method of nanolayers of $Ag_2(NH_2CSNH_2)_4^{2+}$ complex and tungstophosphoric acid on the silica surface are determined. The analysis was performed by the following

methods: scanning electronic microscopy, energy dispersive X-ray microanalysis, UV and IR-Fourier spectroscopy. On the basis of the experimental material analysis it was shown that the synthesized layer consists of cations of $\text{Ag}_2(\text{NH}_2\text{CSNH}_2)_4^{2+}$ and anions of heteropolyacid in a lacunary form.

Key words: "layer-by-layer", tungstophosphoric acid, thiourea.

Kamentsev M. Ya., Moskvin L. N. pH-induced stacking performance capabilities for CE determination of metal ions in samples with problematic matrix.

The method of metal ion on-line preconcentration using pH-induced stacking procedure in samples with the problematic matrix is suggested. The method concept is realized in the technique of CE determination of Zn(II) and Cd(II) in human urine.

Key words: pH-induced stacking, metal ions.

CONTENTS

Physics

<i>Dolmatova O. A., Anisimova G. P., Tsygankova G. A.</i> Fine structure parameters and Zeeman splitting for configuration $2p^2$ of the carbon atom	3
<i>Geyer M. A.</i> Calculation of synthetic seismograms by summation of Gaussian beams with the given damping width	9
<i>Pek B. E., Samusenko A. V., Stishkov Yu. K.</i> Simulation of a cathode-directed streamer in non-uniform electric field	24
<i>Povolotskiy A. V., Povolotskaya A. V., Lesik M. A., Manshina A. A.</i> Laser-induced copper deposition from liquid electrolytes on the base of CuSO_4 , CuCl_2 , $\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ and $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$	35
<i>Ulyanov P. G., Usachev D. Yu., Dobrotvorskiy A. M., Adamchuk V. K., Maslikova E. I., Shevyakova E. P., Balizh K. S., Pushko S. V.</i> Atomic force microscopy studies of grain substructure in construction steels	44

Chemistry

<i>Bal'makov M. D.</i> Problems of statistical thermodynamics and quantum theory of structural transformations in nanosystems	49
<i>Sokolov I. A., Murin I. V., Kriyt V. E., Pronkin A. A.</i> Influence of sulfate ions on electrical properties of $\text{Na}_2\text{O}-\text{P}_2\text{O}_5$ glasses	58
<i>Konakov V. G., Borissova N. V., Haritonov S. N., Golubev S. N., Solovieva E. N., Pivovarov M. M.</i> Conductivity of sodium polyaluminates	68
<i>Khakimova D. K., Sharipov D., Badalov A. B.</i> Thermal stability and thermodynamic functions of barium hydrofluoride	75
<i>Semenov K. N., Charykov N. A., Letenko D. G., Nikitin V. A., Postnov V. N., Krokhina O. A.</i> Synthesis and identification of fullerene	83
<i>Ivanov N. S., Sukhodolov N. G., Yanklovich A. I.</i> Obtaining Langmuir-Blodgett films containing Prussian Blue	91
<i>Ivanenko N. B., Ivanenko A. A., Nosova E. B., Soloviev N. D.</i> Determination of toxic and background mercury content in blood by graphite furnace atomic absorption spectrometry with Zeeman high-frequency polarization modulation background correction	97
<i>Povarov V. G., Lisovenko G. B.</i> The application of acid dissolved sorbent to determination of non-volatile organic compounds in water	105
<i>Rodinkov O. V., Zhuravleva G. A., Bugaychenko A. S.</i> Coal-teflon sorbents for fast concentration of organic substance vapors by air analysis	113

Brief scientific notes

<i>Kolesnichenko P. V., Sharov T. V., Pulkin S. A., Kozlov V. V.</i> Theoretical study of nano-dimensional probes of scanning probe microscopy	120
<i>Shefov K. S., Stepanova M. M., Makarov A. N., Starodubov A. G.</i> Numerical simulation of molecular-dynamical systems using LAMMPS package	126
<i>Kavrigina P. S., Merts S. P., Nemnyugin S. A., Tolushkin S. G.</i> Modelling with Fluka and GEANT4 packages for solution of hadron therapy problems	131
<i>Bedrina M. E., Egorov N. V., Klemeshev V. A.</i> Modeling nanostructures on a high performance computing system	136
<i>Kasterin D. S., Stepanova M. M.</i> Application of MPI and OpenMP technologies in compute clusters with local resource management systems	141
<i>Slyusareva I. V., Kozin A. O., Dementiev I. A., Kondratiev Yu. V.</i> Calorimetric determination of enthalpy of tetraacetate dimolybdenum(II) dissolution in donors	145

<i>Chirkst D. E., Lobacheva O. L., Cheremisina O. V.</i> Ion flotation of samarium(+3) with sodium dodecylsulfate	149
<i>Monin A. V., Zemtsova E. G., Shveikina N. B., Smirnov V. M.</i> Synthesis of micro- and nanoparticles of aluminum oxide by sol-gel method	154
<i>Semischenko K. B., Tolstoy V. P.</i> Nanolayers of hybrid compound of complex $\text{Ag}_2(\text{NH}_2\text{CSNH}_2)_4^{2+}$ and tungstophosphoric acid	158
<i>Kamentsev M. Ya., Moskvina L. N.</i> pH-induced stacking performance capabilities for CE determination of metal ions in samples with problematic matrix	163
Papers	167
Summaries	173
List of articles	184

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

- Адамчук Вера Константиновна*: доктор физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, главный научный сотрудник, vkadamchuk@mail.ru
- Анисимова Галина Павловна*: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, старший научный сотрудник, galusinka@mail.ru
- Бадалов Абдулхайр Бадалович*: доктор химических наук, ТТУ им. акад. М. Осими (Душанбе, Республика Таджикистан), декан факультета ХТиМ, badalovab@mail.ru
- Балиж Кирилл Сергеевич*: ЗАО «НТИ»
- Бальмаков Михаил Дмитриевич*: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, balmak1@yandex.ru
- Бедрина Марина Евгеньевна*: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, старший научный сотрудник, m.bedrina@mail.ru
- Борисова Наталья Владимировна*: кандидат химических наук, ООО НТЦ «Стекло и керамика», научный сотрудник, konakov@mail.wplus.net
- Бугайченко Александра Сергеевна*: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирантка
- Гейер Михаил Александрович*: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант, mgeyer@mail.ru
- Голубев Сергей Николаевич*: кандидат химических наук, ООО НТЦ «Стекло и керамика», научный сотрудник, konakov@mail.wplus.net
- Дементьев Илья Александрович*: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, проректор по направлениям математика, механика, процессы управления, физика и химия, доцент, aokozin@mail.ru
- Добротворский Александр Мстиславович*: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, alexmdob@gmail.com
- Долматова Ольга Александровна*: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирантка, lozaolga@yandex.ru
- Егоров Николай Васильевич*: доктор физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, negogo@arpmath.spbu.ru
- Журавлёва Галина Александровна*: Санкт-Петербургский государственный университет, магистрантка
- Земцова Елена Георгиевна*: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, старший преподаватель, ezimtsova@yandex.ru
- Иваненко Анатолий Алексеевич*: кандидат химических наук, ФГУН «Институт токсикологии» ФМБА России, ivanenkoaa@list.ru
- Иваненко Наталья Борисовна*: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, докторантка, nbivanenko@mail.ru

Иванов Никита Сергеевич: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант, macross256@yandex.ru

Кавригин Павел Сергеевич: Санкт-Петербургский государственный университет, студент, mellbenniget@yandex.ru

Каменцев Михаил Ярославович: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант, mkaquencev@narod.ru

Кастерин Дмитрий Сергеевич: Санкт-Петербургский государственный университет, магистрант, dmka@mms.nw.ru

Клемешев Владимир Алексеевич: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент, v-alexeevich@yandex.ru

Козин Андрей Олегович: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент, aokozin@mail.ru

Козлов Виктор Викторович: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, старший научный сотрудник, victor.kozlov@email.com

Колесниченко Павел Владимирович: Санкт-Петербургский государственный университет, студент, saroeiga_basics@mail.ru

Конаков Владимир Геннадьевич: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, konakov@mail.wplus.net

Кондратьев Юрий Васильевич: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, aokozin@mail.ru

Крийт Владимир Евгеньевич: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант, vovik_@list.ru

Крохина Ольга Александровна: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирантка, postnovvn@rambler.ru

Лесик Маргарита Алексеевна: Санкт-Петербургский государственный университет, студентка, rita-lesik@yandex.ru

Летенко Дмитрий Григорьевич: кандидат физико-математических наук, Северо-Западный государственный заочный технический университет, доцент, charukov@ilip.ru

Лисовенко Глеб Борисович: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант

Лобачёва Ольга Леонидовна: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, научный сотрудник, olga-59@yandex.ru

Макаров Алексей Николаевич: Санкт-Петербургский государственный университет, студент, makarovalexey@gmail.com

Маньшина Алина Анвяровна: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент, malina@home.rclph.spbu.ru

Масликова Елена Ивановна: ЗАО «НПО „Ленкор“»

Мерц Сергей Павлович: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант, sergey.merts@gmail.com

Монин Алексей Вадимович: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант, xealey@ya.ru

Москвин Леонид Николаевич: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, заведующий кафедрой, moskvinln@yandex.ru

Мурин Игорь Васильевич: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, igormurin@mail.ru

Немнюгин Сергей Андреевич: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент, snemnyugin@mail.ru

Никитин Владимир Александрович: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский институт машиностроения, доцент, charukov@ilip.ru

Носова Елена Борисовна: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент

Пек Борис Эдуардович: бакалавр физики, Санкт-Петербургский государственный университет, студент, tehnick-8@mail.ru

Пивоваров Михаил Михайлович: кандидат химических наук, ООО НТЦ «Стекло и керамика», научный сотрудник, konakov@mail.wplus.net

Поваров Владимир Глебович: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, povarovvg@rambler.ru

Поволоцкая Анастасия Валерьевна: Санкт-Петербургский государственный университет, студентка, ava2005@mail.ru

Поволоцкий Алексей Валерьевич: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, ассистент, arov@inbox.ru

Постнов Виктор Николаевич: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент, postnovvn@rambler.ru

Пронкин Алексей Алексеевич: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, aaronkin@mail.ru

Пулькин Сергей Александрович: доктор физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, sergpulkin@gmail.com

Пушко Сергей Вячеславович: кандидат физико-математических наук, ЗАО «НТИ»

Родинков Олег Васильевич: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, rodinkov@rambler.ru

Самусенко Андрей Викторович: бакалавр физики, Санкт-Петербургский государственный университет, программист, andreys2004v@yandex.ru

Семёнов Константин Николаевич: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант, semenov1986@yandex.ru

Семиченко Константин Борисович: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант, k.semischenko@gmail.com

Слюсарева Ирина Викторовна: кандидат химических наук, ЗАО «Пластполихим», инженер, aokozin@mail.ru

Смирнов Владимир Михайлович: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, vms11@yandex.ru

Соколов Иван Аристидович: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, igormurin@mail.ru

Соловьёв Николай Дмитриевич: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант, nsolovev@yandex.ru

Соловьёва Елена Николаевна: кандидат химических наук, ООО НТЦ «Стекло и керамика», научный сотрудник, konakov@mail.wplus.net

Стародубов Аркадий Геннадьевич: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, arkstar1@mail.ru

Степанова Маргарита Михайловна: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент, mstep@mms.nw.ru

Стишков Юрий Константинович: доктор физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, stishkov@paloma.spbu.ru

Суходолов Николай Геннадьевич: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент, sng196505@mail.ru

Толстой Валерий Павлович: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, vptol@yandex.ru

Толушкин Семён Григорьевич: Санкт-Петербургский государственный университет, студент, snowman_ii@mail.ru

Ульянов Павел Геннадьевич: магистр физики, Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант, pavel.ulyanov@gmail.com

Усачёв Дмитрий Юрьевич: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, старший научный сотрудник,
usachov.d@googlemail.com

Хакимова Дильбар Кудратовна: кандидат химических наук, ТТУ им. акад. М. Осими (Душанбе, Республика Таджикистан), старший преподаватель,
dilbar110867@mail.ru

Харитнов Сергей Николаевич: ФГУП СПО «Аналитприбор», Смоленск, заведующий лабораторией, konakov@mail.wplu.net

Цыганкова Галина Александровна: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, ассистент,
galusinka@mail.ru

Чарыков Николай Александрович: доктор химических наук, ЗАО «Инновации ленинградских институтов и предприятий» (Санкт-Петербург), профессор, charykov@ilip.ru

Черемисина Ольга Владимировна: кандидат технических наук, Санкт-Петербургский государственный горный институт, доцент, olgacheremisina@yandex.ru

Чиркст Дмитрий Эдуардович: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный горный институт, профессор, olga-59@yandex.ru

Шарипов Додо Шарипович: кандидат химических наук, ТТУ им. акад. М. Осими (Душанбе, Республика Таджикистан), доцент, заведующий кафедрой, sharipov2@mail.ru

Шаров Тарас Владимирович: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант, sharovstr@gmail.com

Швейкина Наталья Борисовна: Санкт-Петербургский государственный университет, магистрантка

Шевякова Елена Петровна: ЗАО «НПО „Ленкор“»

Шефов Константин Сергеевич: Санкт-Петербургский государственный университет, студент, konstontins@gmail.com

Янклович Александр Иосифович: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент

ПЕРЕЧЕНЬ СТАТЕЙ, ОПУБЛИКОВАННЫХ В ЖУРНАЛЕ
«ВЕСТНИК САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО УНИВЕРСИТЕТА»
в 2010 году

СЕРИЯ 4: ФИЗИКА, ХИМИЯ

	Вып.	Стр.
Физика		
<i>Анисимов Ю. И., Машек А. Ч., Метельский К. Е., Рябчиков Е. Л.</i> Импульсное получение паров металлов на основе электродинамических дисперсных сред.....	2	28–31
<i>Ашмарина Ю. Б., Яновская Т. Б.</i> Функция направленности приповерхностного источника типа двойной пары сил.....	3	30–38
<i>Борисов В. Б., Киселёв А. М., Конюшенко И. О., Немец В. М., Нижеев Д. Д.</i> Исследование особенностей формирования и возможностей аналитического применения оптических спектральных образов жидких смесей сложных соединений.....	1	56–64
<i>Вечернин В. В., Лакомов И. А., Пучков А. М.</i> Средний поперечный импульс, множественность и их корреляция в <i>pp</i> -столкновениях в модели слияния струн.....	3	3–16
<i>Гейер М. А.</i> Расчёт синтетических сейсмограмм методом гауссовых пучков с заданной шириной затухания.....	4	9–23
<i>Горбенко А. П., Домелунксен В. Г., Полищук В. А., Славов Д. Г., Тодоров Г. Ц.</i> Аномальные магнитооптические резонансы на состояниях $2p^53s$ в разряде в Ne.....	1	3–11
<i>Долматова О. А., Анисимова Г. П., Цыганкова Г. А.</i> Параметры тонкой структуры и зеемановское расщепление конфигурации $2p^2$ атома углерода.....	4	3–8
<i>Золотухин С. И., Курасов В. Б.</i> Приближённое изучение эффекта перекрытия областей истощения в кинетике зародышеобразования.....	2	8–15
<i>Каликулов О. А., Садуев Н. О., Оскомов В. В.</i> Установка для регистрации электронно-фотонной компоненты космического излучения на высоте 850 м над уровнем моря.....	3	26–29
<i>Кшевцевская М. А., Шевкунов И. А.</i> Моделирование плазмы разряда низкого давления в смеси аргона и паров воды.....	3	48–52
<i>Мальшиев М. Ю., Прохвятилов Е. В.</i> Калибровочно-инвариантная регуляризация КХД на световом фронте в пространстве с поперечной решёткой.....	2	3–7
<i>Манъшина А. А., Поволоцкий А. В., Грунский О. С.</i> Формирование доменной структуры в монокристаллах ниобата лития электрооптическим методом.....	1	65–73
<i>Минаев К. В., Груздев М. В., Обвинникова Н. Е., Вайднер А. О., Иванов В. С., Совков В. Б.</i> Сверхтонкая структура в спектрах двухатомных молекул: точная и приближённая схемы расчётов.....	3	39–47
<i>Михайловский В. Ю., Суханов А. А., Яфясов А. М.</i> Исследование системы германий– C_{60} методами эффекта поля в электролите и инфракрасной спектроскопии.....	1	74–78
<i>Павлов В. А.</i> Отличия нанотермодинамики от классической термодинамики.....	1	24–28

<i>Павлов В. А.</i> Физический механизм уменьшения сопротивления за счёт слабой ионизации пограничного слоя при обтекании тела дозвуковым потоком.....	2	16–22
<i>Пек Б. Э., Самусенко А. В., Стишков Ю. К.</i> Моделирование катодонаправленного стримера в неоднородном электрическом поле	4	24–34
<i>Поволоцкий А. В., Поволоцкая А. В., Лесик М. А., Маньшина А. А.</i> Лазерно-индуцированное осаждение меди из водных растворов CuSO_4 , CuCl_2 , $\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ и $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$	4	35–43
<i>Прохоров Л. В., Ушаков А. С.</i> Несимплектические обобщения гамильтоновой механики.....	1	29–35
<i>Рамазанов Р. Р., Щёголев Б. Ф., Сурма С. В., Касьяненко Н. А.</i> Исследование комплексов <i>цис</i> - и <i>транс</i> -ДЦП с молекулой ДНК методами молекулярной динамики и квантовой химии.....	2	32–40
<i>Стишков Ю. К., Чирков В. А.</i> Структурные особенности электрогидродинамических течений в несимметричных системах электродов.....	1	36–50
<i>Ульянов П. Г., Усачёв Д. Ю., Добротворский А. М., Адамчук В. К., Масликова Е. И., Шевякова Е. П., Баллиж К. С., Пушко С. В.</i> Применение микроскопа атомных сил для исследования субструктуры зёрен конструкционных сталей.....	4	44–48
<i>Цуриков Д. Е., Зубкова А. В., Яфьясов А. М.</i> Эффект Рашбы в кольце: структура энергетического спектра.....	1	51–55
<i>Череватова М. В.</i> Двумерная интерпретация магнитотеллурических данных в зоне сочленения Центрально-Карельского и Беломорского мегаблоков.....	1	12–23
<i>Чугунов В. А.</i> Влияние гидростатического давления на энергию оптических переходов в квантовых точках InAs/GaAs.....	3	17–25
<i>Шаров Т. В., Пулькин С. А., Козлов В. В.</i> Спектроскопическое исследование зондов сканирующих зондовых микроскопов.....	2	23–27

Химия

<i>Бальмаков М. Д.</i> Вопросы статистической термодинамики и квантовой теории структурных превращений в наносистемах.....	4	49–57
<i>Белюстин А. А., Борисова Н. В.</i> Михаил Михайлович Шульц. Краткий очерк научной, научно-организационной, педагогической и общественной деятельности.....	1	81–99
<i>Иваненко Н. Б., Иваненко А. А., Носова Е. Б., Соловьёв Н. Д.</i> Определение токсических и фоновых содержаний ртути в крови атомно-абсорбционным методом с электротермической атомизацией и зеemanовской модуляционной поляризационной коррекцией фона.....	4	97–104
<i>Иванов Н. С., Суходолов Н. Г., Янклочич А. И.</i> Получение плёнок Лэнгмюра–Блоджетт, содержащих берлинскую лазурь.....	4	91–96
<i>Иванов-Павлов Д. А., Конаков В. Г., Голубев С. Н., Ануфриков Ю. А.</i> Исследование взаимосвязи фазового состава керамик Y_2O_3 – TiO_2 – ZrO_2 и их электрохимических характеристик.....	1	142–148
<i>Иванов-Павлов Д. А., Конаков В. Г., Голубев С. Н., Ушаков В. М., Пивоваров М. М., Соловьёва Е. Н.</i> Эволюция гелей на основе систем ZrO_2 , TiO_2 , Y_2O_3 – ZrO_2 – TiO_2 при их последовательной термической обработке.....	3	53–61

<i>Киприанов А. А.</i> Оксигалогенидные электродные стёкла: особенности связывания галогенов стеклообразующим расплавом	1	122–132
<i>Конаков В. Г., Борисова Н. В., Харитонов С. Н., Голубев С. Н., Соловьёва Е. Н., Пивоваров М. М.</i> Электропроводность полиалюминатов натрия	4	68–74
<i>Коротких О. П., Кочурова Н. Н., Виноградова М. С., Абдуллин Н. Г., Гермашева И. И.</i> Изучение поверхностных свойств водных растворов пентадецилсульфата натрия	3	77–81
<i>Крохина О. А., Постнов В. Н.</i> Минерально-углеродные сорбенты для хроматографического разделения фуллеренов	2	79–84
<i>Малев В. В., Соловьёва Т. Г., Никифорова Т. Г.</i> Оценка параметров электроосаждения меди по данным импедансной спектроскопии	2	49–61
<i>Москвин Л. Н.</i> Экоаналитические проблемы атомной энергетики и способы их решения	2	85–94
<i>Пенькова А. В., Маркелов Д. А., Тойжка А. М.</i> Термодинамическое моделирование процесса испарения бинарных растворов через мембрану	3	68–76
<i>Пешкова М. А., Сокальски Т., Михельсон К. Н., Левенстам А.</i> Резкое улучшение нижнего предела функционирования ионоселективных электродов путём оптимизированной гальваностатической поляризации	1	109–121
<i>Писаревский А. М., Полозова И. П.</i> Редокс-измерения в растворах с низкими значениями E_n	1	100–108
<i>Поваров В. Г., Лисовенко Г. Б.</i> Применение кислоторастворимых сорбентов для концентрирования труднолетучих органических веществ из воды	4	105–112
<i>Погуляйченко Н. А., Седунова А. Ю., Толстомятова Е. Г., Кондратьев В. В.</i> Композитные электродные материалы на основе поли-3,4-этилендиокситиофена с включениями частиц золота для создания вольтамперометрических сенсоров на аскорбиновую кислоту и допамин	2	62–70
<i>Полуляхова Н. Н.</i> Исследование кинетики сорбции на синтезированном ионите	2	71–78
<i>Родинков О. В., Журавлёва Г. А., Бугайченко А. С.</i> Угольно-фторопластовые сорбенты для экспрессного концентрирования паров органических веществ при анализе воздуха	4	113–119
<i>Русанов А. И. М. М.</i> Шульц и химическая термодинамика	1	149–152
<i>Русанов А. И.</i> Нанонаука как она есть	2	41–48
<i>Семёнов К. Н., Чарыков Н. А., Летенко Д. Г., Никитин В. А., Постнов В. Н., Крохина О. А.</i> Синтез и идентификация фуллеренола	4	83–90
<i>Соколов И. А., Мурин И. В., Крийт В. Е., Гальперина А. Я.</i> Температурно-концентрационная зависимость электрической проводимости калиево-фосфатных стёкол	3	90–96
<i>Соколов И. А., Мурин И. В., Крийт В. Е., Пронкин А. А.</i> Влияние сульфатных ионов на электрические свойства стёкол системы $Na_2O-P_2O_5$	4	58–67
<i>Столярова В. Л.</i> Роль М. М. Шульца в развитии масс-спектральных термодинамических исследований оксидных систем и материалов	1	133–141
<i>Тойжка А. М.</i> Михаил Михайлович Шульц: встречи и впечатления	1	153–155

<i>Хакимова Д. К., Шарипов Д. Ш., Бадалов А. Б.</i> Термическая стабильность и термодинамические функции гидротригидов бария	4	75–82
<i>Чежина Н. В., Фёдорова А. В.</i> Влияние природы заместителей на эффекты ближнего порядка в магниторезистивных манганитах	3	62–67
<i>Юдович В. М., Морозова С. Е., Юдович М. Е., Тойжка А. М., Пономарёв А. Н.</i> Физико-механические и мембранные свойства наномодифицированного композита эпоксиноволачная смола–астрален	3	82–89

Краткие научные сообщения

<i>Багаев А. А.</i> Замечание о перенормировке эффективного действия и квантовых уравнений движения для модели \sin -Гордона в формализме фонового поля	1	162–164
<i>Бедрина М. Е., Егоров Н. В., Клемешев В. А.</i> Моделирование наноструктур на высокопроизводительном вычислительном комплексе	4	136–140
<i>Белов П. А., Яковлев С. Л.</i> Новый асимптотический подход к проблеме трёхчастичного развала	2	95–98
<i>Виницкий С. И., Гусев А. А., Чулуунбаатар О.</i> Решение краевых задач шрёдингеровского типа методом Канторовича	3	111–115
<i>Гагин А. В., Яревский Е. А.</i> Численное моделирование спектра и структурных свойств ван-дер-ваальсова тримера аргона с помощью трёхмерного метода конечных элементов	2	99–102
<i>Градусов В. А., Яревский Е. А.</i> Нецентральные потенциалы в представлении полного углового момента и 0^+ состояния ядра ^{12}C	2	103–106
<i>Григорьев Ю. А.</i> Программное обеспечение для построения переменных разделения в уравнении Гамильтона–Якоби	2	107–112
<i>Гринюк Б. Е., Сименов И. В.</i> Асимптотические свойства структурных функций ядер ^6Li и ^6He в рамках трёхчастичной модели	3	116–120
<i>Гусев И. М., Скрипкин М. Ю., Бурков К. А.</i> Объёмные эффекты разбавления в системах $\text{NR}_4\text{Br}-\text{H}_2\text{O}$ и $\text{CuBr}_2-\text{NR}_4\text{Br}-\text{H}_2\text{O}$ ($\text{R} = \text{Me}, \text{Et}, \text{nBu}$) при 25°C	2	127–130
<i>Захаров М. Ю., Арефьев К. Н.</i> Аномалии в спектрах ридберговских атомов	1	168–172
<i>Кавригин П. С., Мерц С. П., Немнюгин С. А., Толушкин С. Г.</i> Использование программных пакетов Fluka и Geant4 для решения задач адронной терапии	4	131–135
<i>Каменцев М. Я., Москвин Л. Н.</i> Возможности рН-стэкинга ионов металлов при их капиллярно-электрофоретическом определении в пробах со сложной матрицей	4	163–166
<i>Картавцев О. И., Малых А. В.</i> Универсальные свойства ультрахолодных двухкомпонентных систем трёх частиц	3	121–125
<i>Кастерин Д. С., Степанова М. М.</i> Использование технологий МРІ и OpenMP в кластерных системах с локальными менеджерами ресурсов	4	141–144
<i>Колесниченко П. В., Шаров Т. В., Пулькин С. А., Козлов В. В.</i> Теоретическое исследование наноразмерных зондов сканирующих зондовых микроскопов	4	120–125
<i>Кузнецов Р. А., Богданов Р. В.</i> Ядерно-химические аспекты захоронения концентратов радиоактивных отходов в земной коре	3	126–130

<i>Кучек А. Э., Мельничук Ю. И., Шуткевич В. В., Грибанова Е. В.</i> Исследование адсорбционных свойств наноразмерных ферромагнитных марганец-цинковых шпинелей в сравнении с ферритообразующими оксидами.....	2	131–136
<i>Кшевцевская М. А., Поберовский А. В.</i> Система архивирования солнечных ИК-спектров высокого разрешения для задач дистанционного зондирования атмосферы.....	3	100–104
<i>Лобачёва О. Л., Чиркст Д. Э., Берлинский И. В.</i> Ионная флотация катионов цериевой группы с применением поверхностно-активного вещества..	3	131–134
<i>Монахов В. В., Керницкий И. Б.</i> Аппаратная реализация вычислительных алгоритмов с помощью инструментов алгоритмического синтеза....	2	113–117
<i>Монахов В. В., Керницкий И. Б., Спиридонов В. В., Седов Г. М., Балашова Е. А., Зыкова А. Е., Фомкин С. В.</i> Методика интеграции внешних математических библиотек с языком Java.....	2	118–122
<i>Монин А. В., Земцова Е. Г., Швейкина Н. Б., Смирнов В. М.</i> Синтез микро- наночастиц оксида алюминия золь-гель методом.....	4	154–157
<i>Павлов В. А.</i> Классификация наночастиц аргона по их размерам.....	3	97–99
<i>Пузырев Д. А., Яревский Е. А.</i> Использование CUDA BLAS в решении квантовой задачи трёх частиц методом конечных элементов высоких порядков.....	2	123–126
<i>Пупышев В. В.</i> Строение волновых функций систем трёх частиц вблизи точки тройного удара.....	3	105–110
<i>Семищенко К. Б., Толстой В. П.</i> Нанослой гибридного соединения комплекса $Ag_2(NH_2CSNH_2)_4^{2+}$ и фосфорновольфрамовой кислоты.....	4	158–162
<i>Слюсарева И. В., Козин А. О., Дементьев И. А., Кондратьев Ю. В.</i> Калориметрическое определение энтальпии растворения тетраацетата димолибдена(II) в донорных растворителях.....	4	145–148
<i>Цуриков Д. Е.</i> Графическое правило для термодинамических величин.....	1	165–167
<i>Цуриков Д. Е., Яфясов А. М.</i> Расчёт матрицы рассеяния элемента квантовой сети.....	1	156–161
<i>Чан Куанг Тунг, Молчанов А. П.</i> 1,3-Диполярное циклоприсоединение триарилнитронов к малеимидам.....	3	139–141
<i>Чиркст Д. Э., Литвинова Т. Е., Лобачёва О. Л., Луцкий Д. С., Тойжка М. А.</i> Извлечение церия(III) и иттрия(III) из нитратных сред методами ионной флотации и жидкостной экстракции.....	3	135–138
<i>Чиркст Д. Э., Лобачёва О. Л., Берлинский И. В., Черемисина О. В.</i> Исследование механизма ионной флотации иттербия.....	2	137–142
<i>Чиркст Д. Э., Лобачёва О. Л., Черемисина О. В.</i> Ионная флотация самария(3+) с додецилсульфатом натрия.....	4	149–153
<i>Шефов К. С., Степанова М. М., Макаров А. Н., Стародубов А. Г.</i> Численное моделирование молекулярно-динамических систем с использованием пакета LAMMPS.....	4	126–130