

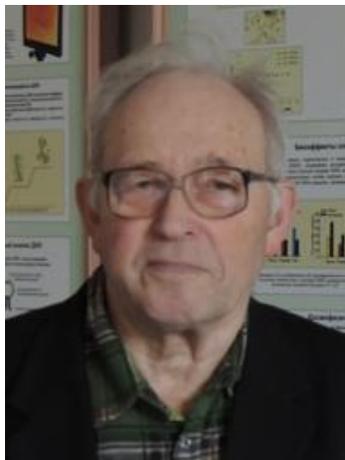
УДК 538.9

DOI: 10.31040/2222-8349-2020-0-2-125-129

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА КАК ОБРАЗ ЖИЗНИ

*Теоретик – это не тот, кто не может держать в руках паяльник,
а тот, кто пишет правильные формулы.*

(народная мудрость кафедры
теоретической ядерной физики МИФИ)



О.А. Пономарев

После тридцати лет знакомства, из которых десять лет – совместная работа в лаборатории теоретической физики сначала Отдела физики, а затем и Института физики молекул и кристаллов УНЦ РАН, написать воспоминания об Олеге Александровиче Пономареве в сухом и официальном стиле было бы совершенно неправильно. К тому же личные качества человека во многом определяют его научные интересы, если этот человек выбирает для себя научную деятельность.

О начале своего пути в науку О.А. Пономарев так пишет в автобиографии: «Родился 22 ноября 1936 г. в г. Челябинске. В 1937 г. семья переехала на Дальний Восток. В 1954 г. окончил среднюю школу с серебряной медалью в городе Имане (ныне Дальнореченск) Приморского края. Справку о здоровье для поступления в вуз долго не выдавали, так как обнаружили затемнения легких. Долго лечили, и поэтому доехать до Москвы, где собирался поступать в МГУ, не успевал. Успел доехать до Томска в последний день подачи документов. В университете медалистов уже набрали, поэтому подал документы в Политехнический институт на фа-

культет ядерной физики, но туда мандатная комиссия не пропустила, разрешили поступить только на энергетический факультет. Со второго курса уже занимался наукой и возглавлял научное студенческое общество на курсе. На третьем курсе вышла первая статья о теплопроводности пористых тел. В 1957 г. перевелся на физический факультет Томского университета, который окончил с отличием в 1960 г. Был распределен в СФТИ (Сибирский физико-технический институт) в проблемную лабораторию спектроскопии инженером-исследователем. Проработал там с 01.09.1960 по 01.09.1965 года. Подготовил диссертацию по квантовой химии. Защита была назначена на осень 1965 г.»

Но тут жизнь делает очередной поворот, и в сентябре 1965 г. О.А. Пономарев поступает в очную аспирантуру Московского физико-технического института (г. Долгопрудный). В 1968 г. успешно оканчивает аспирантуру с представлением диссертации и получает распределение на работу в Башкирский филиал АН СССР (г. Уфа) в Институт химии руководителем группы (10 человек) на правах лаборатории. С 1969 г. – кандидат физико-математиче-

ских наук по специальности «Молекулярная физика». С 1971 по 1980 год – старший научный сотрудник и руководитель группы на правах лаборатории Института химии. С 01.06.1980 по 01.06.1999 – заведующий лабораторией Института физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук (до 1986 г. это был сектор статистической физики Отдела физики и математики, с 1986 г. – лаборатория теоретической физики). С 1989 г. – доктор физико-математических наук, с 1993 г. – профессор по специальности «Химическая физика, в том числе физика горения и взрыва».

В конце 90-х гг. О.А. Пономарев много сил и времени отдавал организации Диссертационного совета, который начал работу в ИФМК УФИЦ РАН в 1998 г. Через девять лет, уже после отъезда Олега Александровича из Уфы, мне довелось организовывать Диссертационный совет в новом составе, сначала как Объединенный диссертационный совет при ИФМК, а через несколько лет еще раз – как собственный Диссертационный совет ИФМК. Исходя из личного опыта могу сказать, что организация Диссертационного совета по физическим специальностям в Уфе отнимает много времени.

Чтобы подготовить себе кадры, начиная с 1970 по 1999 год О.А. Пономарев по совместительству работает доцентом, а затем профессором в Башкирском госуниверситете на кафедре теоретической физики. Ведет курсы термодинамики, статистической физики, квантовой механики, квантовой оптики, квантовой химии, квантовой теории химических реакций (для химиков), концепции современного естествознания (для математиков), истории физики. Руководит курсовыми и дипломными работами. Издает методички по квантовой механике. Читает курс лекций по своим работам, собранным в монографии «Избранные проблемы современной теоретической физики». В результате – кто-то приходил в Отдел физики после окончания Башкирского государственного университета, а кто-то для занятия физикой в более привычной обстановке не уехал из Уфы. Так, после общемосковских теоретических семинаров В.Л. Гинзбурга, лекций А.Б. Мигдала и других теоретиков-универсалов автору этих строк Уфа казалась местом уютным и безнадёжным для общетеоретических дискуссий. Знакомство с Олегом Александровичем давало повод для оптимизма.

В Уфе О.А. Пономарев проработал 31 год. В 1997 г. О.А. Пономареву присвоили почетное звание «Заслуженный деятель науки РБ».

В 90-е гг., когда вся наука переживала не лучшие времена, физикам в Уфе приходилось постоянно переезжать. Все это блистательно описано Виктором Александровичем Мазуновым в книге «Мытарства физиков. Хроника двадцатилетних переездов» (2010 г.). В переездах и погрузках-разгрузках участвовали все сотрудники без скидок на возраст, должности и прочие «смягчающие обстоятельства». Олег Александрович Пономарев всегда брал самые тяжелые вещи, и этому даже никто не удивлялся. Настолько это было в его характере.

В 1999 г. О.А. Пономарев был приглашен на должность ведущего научного сотрудника в Институт биофизики клетки (ИБК) Российской академии наук (г. Пущино, Московская область). В ИБК О.А. Пономарев занимался изучением структуры воды и влиянием слабых электромагнитных и магнитных полей на биологические процессы. В ИБК проработал до 31.12.2007 г.

С марта 2002 по май 2005 года по совместительству работал главным конструктором и руководителем проекта по плазменной модификации топлив и воды и занимался созданием стенда по измерению температурных полей в камере сгорания оптическими методами в НТЦ им. А. Люльки ОАО «НПО «Сатурн» (г. Москва). Работа по проекту прекращена со сменой ориентации акционеров на стандартные технологии и закрытие в связи с этим поисковых исследований на перспективу.

С 01.09.2005 по 01.09.2008 года О.А. Пономарев по совместительству работал в качестве профессора на кафедре физики и химии Московской государственной академии водного транспорта (МГАВТ).

С 01.09.2008 по 31.08.2017 года – профессор кафедры физики Московского государственного университета дизайна и технологий. С 01.01.2008 г. по совместительству работал ведущим научным сотрудником в Институте математических проблем биологии РАН (г. Пущино, Московская область) – филиале Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН (г. Москва).

В результате научной деятельности им опубликовано свыше 200 статей и 5 монографий. Подготовлено 10 кандидатов наук и 4 доктора наук. Эта цифра может показаться не очень большой. Но настоящих теоретиков и не может быть много, теоретическая физика – не массовая специальность. Сотрудники лаборатории теоретической физики часто цитировали его высказывание: «Кто выплывет, тот выплывет», т. е. у кого есть желание и, главное,

способности заниматься теоретической физикой, тот в результате преодолел все трудности. «Выплыли» не все. Кто-то понял, что теоретическая физика – не его путь, кто-то ушел по материальным и иным соображениям. Но те, кто «выплыл», не пожалели об избранном пути.

Научная деятельность О.А. Пономарева осуществлялась в двух основных направлениях: развитие теории проблемы многих тел и прикладные вопросы катализа.

По первому направлению научные исследования посвящены изучению способов обрыва бесконечных цепочек систем дифференциальных уравнений для корреляционных функций (цепочек Н.Н. Боголюбова), получающихся при изучении динамики системы многих тел. Как частные случаи проведено моделирование механизмов радикальных химических реакций в конденсированной фазе, моделирование квантовой химии процессов катализа. Проведено исследование структуры жидкой воды и ее роли в полимеризации, исследование механизмов влияния слабых полей на химические реакции в водных растворах и биологических системах, а также механизмов явлений переноса в наносистемах.

Для этого был разработан специальный метод учета вклада локальной динамики в статистической физике, который позволяет ввести эффективный гамильтониан с параметрами, зависящими от времени, и учитывает при статистическом усреднении локальные свойства вещества (характерные флуктуации) в ограниченном объеме, причем в методе автоматически определяются и учитываются, если необходимо, динамические добавки к средним.

При исследовании наносистем, квазиодномерных систем, где равновесное состояние долго не устанавливается, метод оказался более точным, чем традиционные методы, т.к. учитывает ближний порядок в системе, уточняет выражения для энергетического спектра и вид кинетических уравнений для веществ в конденсированной фазе.

Метод имеет широкую область применения, продолжает уточняться и развиваться дальше в применении к различным объектам и может иметь большое будущее. Для спиновых систем он точнее, чем подход Бете–Пайерса, и хотя он не дал правильных критических индексов, но максимально приблизил полученную теоретически температуру фазового перехода к экспериментальной температуре по

сравнению с другими методами. Для жидкостей подход оказался точнее, чем гиперцепное приближение и приближение Перкуса–Йевика.

Второе направление – прикладная квантовая химия. Модели катализа Циглера–Натта. Механизм катализа и т.п.

Конкретный личный вклад О.А. Пономарева в развитие науки и техники состоит в следующем.

По первому направлению:

1). Разработан метод учета вклада локальной динамики в статистической физике многих тел. Вводится переменное во времени самосогласованное поле, определяемое видом гамильтониана системы, учитываются полностью парные корреляции и динамика ближнего порядка в любой системе и формально сводится к замене бесконечной цепочки линейных уравнений для корреляционных функций на конечную цепочку нелинейных уравнений. Оценена сделанная при этом погрешность.

2). Этим методом исследованы реакции радикальной полимеризации, где была открыта немонотонная зависимость констант скоростей присоединения и обмена радикалов от теплового эффекта реакции. Это свидетельствовало о большом влиянии малых добавок на реакционную способность и позволило предложить способ управления константами скоростей радикальной полимеризации и сополимеризации путем слабого комплексообразования радикала со специальной управляющей добавкой, позволило получать сополимеры нужного состава (через «катализ» радикальных процессов) и сразу нашло практическое применение. Без этого открытия получались сополимеры только одного состава.

3). Была предложена и теоретически исследована модель перехода полиарилефталидов из диэлектрика в высокопроводящее состояние и обратно, основанная на трансформации полимерной цепи. Модель позволила объяснить большинство имеющихся экспериментальных результатов: обратимый скачок проводимости на несколько порядков при приложении малого одноосного давления (порядка 10 Па), отсутствие эффекта при гидростатическом давлении, отсутствие эффекта в толстых пленках и появление его в них при добавлении толченого стекла.

4). Были созданы элементы новой теории жидкой воды и воды в порах. Оказалось, что локальные свойства воды (размеры кластеров) зависят от наличия слабого постоянного и переменного магнитного поля, и эта зависимость позволила предложить способы

управлять биологическими и химическими эффектами.

5). Предложена модель, хорошо описывающая вероятность захвата электрона молекулой и времена жизни отрицательных молекулярных ионов (ОМИ). Модель объяснила почти все экспериментальные данные (компенсационный и антикомпенсационный эффекты, нормальный и аномальный изотопные эффекты, зеркальную симметрию фотоэлектронных спектров ОМИ и сечений захвата электронов молекулами, медленную релаксацию по колебаниям в ОМИ и т.п.).

6). Построена микроскопическая модель поляризации среды (воды и линейных полимеров типа тефлона) в ударной волне.

Для прикладного второго направления исследования механизмов работы катализаторов в процессах полимеризации получено:

1). Данные о структуре комплексов «алюминийалкил: соединения переходного металла», отсутствующие до этого в литературе, необходимые для понимания механизма процесса катализа на них.

2). Для анионной полимеризации изучено теоретически путем квантово-химических расчетов строение реагирующей пары (строение активного центра полимеризации) для литий- и натрий-органических соединений в присутствии мономера. Показано, что реакция полимеризации бутиленов идет в следующей последовательности. Сначала происходит комплексобразование мономеров с положительным противоионом, потом часть теплового эффекта реакции расходуется на возбуждение колебаний в мономере. Это приводит к «проворачиванию» активного центра и стерео-регулированию растущей полимерной цепи. Центр работает как автомат по сборке и позволяет с помощью соответствующей настройки, определяемой квантово-химическими расчетами, регулировать свойства полимера (например, концентрацию цис- и транс-составляющих в цепи). Полученные результаты использованы в промышленности для модификации каталитических процессов.

3). Для катионной полимеризации изучена система с центром «хлористый алюминий: соляная кислота», где протон находится на внешней оболочке. Этот протон переносится к мономеру бутиленов и, взаимодействуя с атомом углерода, запускает процесс роста полимерной цепи. Для центра «хлористый алюминий: вода» атом водорода воды частично переносится на мономер. Это приводит к тому, что скорость полимеризации своя для каждого бутилена. Это позволяет проводить гомополимеризацию, например изобутилена, прямо из

смеси с пропиленом и другими бутиленами без разделения мономеров с селективностью, близкой к единице. Для системы «хлористый алюминий: спирт» при достаточно большом радикале спирта стадия переноса протона отсутствует, и рост цепи сразу начинается на карбокатионе спирта. Это замечено впервые и подтверждено специально проведенными экспериментами.

4). Детально по этапам реакции, указанным ниже, исследован механизм работы биметаллического кристаллического катализатора Циглера-Натта на основе системы «хлористый титан: хлористый алюминий». Показано, что ход реакции следующий: мономер приближается к вакантному месту в координационной сфере титана и хемосорбируется, далее мономер перемещается по поверхности иона в направлении атома углерода, связанного одновременно с титаном и алюминием. В дальнейшем через переходное состояние в результате электронных перестроек формируется сигма-связь между этим атомом углерода и соседним атомом углерода мономера и разрывается двойная связь в мономере. Затем идут процессы релаксации, восстанавливающие активный центр в первоначальной конфигурации. После этого цикл роста цепи повторяется. Доказано, что роль непереходного металла сводится не только к алкилированию хлористого титана, но и к рекуперации энергии в процессе элементарного акта присоединения мономера. Установлено, что в системе имеются изначально два разных по строению центра, концентрация которых определяется температурой и структурой кристаллитов катализатора. Один из центров приводит к образованию изотактического полипропилена, а другой – к атактическому продукту. Полученные теоретические результаты после проверки их экспериментально химиками Башкирского государственного университета использованы для разработки и внедрения в производство новых модификаций катализаторов Циглера-Натта.

Известно, что список трудов может рассказать о научном сотруднике больше, чем официальная биография. Первой печатной работой О.А. Пономарева была статья «К вопросу об аналитическом решении плоской задачи теплопроводности пористых тел», написанная им еще в студенческие годы и опубликованная в «Известиях Томского политехнического института» в 1958 г. в соавторстве с научным руководителем Г.М. Седых. Диссертации: кандидатская «Метод одновременных расцеплений и его применения к некоторым задачам

спиновых систем и органических полупроводников» (1968 г.) и докторская «Исследование динамики электронно-ядерных систем методом переменного самосогласованного поля» (1988 г.). Олег Александрович никогда не искал легких путей и брался за решение задач, имеющих не самую лучшую репутацию среди физиков из-за теоретической сложности и трудности экспериментального исследования явлений, будь то некоторые вопросы биофизики или изучение структуры воды.

О.А. Пономарева отличал классический подход к физическим задачам: проблема должна быть решена принципиально на качественном уровне, затем аналитически, а для решения численных задач не нужно быть теоретиком. С распространением компьютеров даже физический эксперимент стал часто заменяться компьютерным моделированием. Отчасти это было связано с тем, что компьютеры дешевле и проще в обращении, чем реальные экспериментальные установки. А уж сколько пользователей готовых компьютерных программ для решения известных физических задач стали гордо именовать себя теоретиками!

Олег Александрович работал буквально до последнего дня. И это не дежурная фраза. Так оно и было. И было много научных планов на будущее, новых идей. Но 19 декабря 2019 г. пришла печальная весть.

Возвращаясь к эпиграфу, следует отметить, что О.А. Пономарев был не только настоящим теоретиком, но и настоящим мастером. Дома все было сделано его руками. В каждом городе, где он жил, у него был сад (и не один). В садах тоже все было построено его руками. Иногда с чьей-то помощью, а часто и без посторонней помощи.

Автор выражает благодарность В.А. Пономаревой за предоставленную фотографию и сведения о научной деятельности О.А. Пономарева и другие материалы.

Литература

1. Кубарев С.И., Пономарев О.А. Эффекты динамической связи в статистической физике. М.: Наука, 1992. 141 с.

2. Пономарев О.А. Избранные проблемы современной теоретической физики. Уфа: БГУ, 1999. 156 с.

3. Ревизский Ю.В., Дыбленко В.П. и др. Исследование и обоснование механизма нефтеотдачи пластов с применением физических методов. М.: Недра, 2002. С. 259–290.

4. Пономарев О.А., Кузмичева В.А. Механика и молекулярная физика: Учебное пособие. М.: МГАВТ, 2007. 104 с.

5. Шигаев А. С., Пономарев О. А., Лахно В. Д. Методы исследования и виды открытых состояний ДНК. Теоретические и экспериментальные методы изучения открытых состояний ДНК. Кинетика, термодинамика, математические модели. Изд-во LAP LAMBERT Academic Publishing, 2014. 169 с.

6. Пономарев О.А., Шапкарин И.П., Шигаев А.С. Влияние магнитных полей на кинетику элементарных процессов в конденсированной фазе. М.: ФГБОУ ВПО «МГУДТ», 2014. 96 с.

References

1. Kubarev S.I., Ponomarev O.A. The effects of dynamic binding in statistical physics. Monografiya. Moscow, Nauka, 1992. 141p.

2. Ponomarev O.A. Selected problems of modern theoretical physics. Monografiya. Ufa, BGU, 1999. 156 p.

3. Revizsky Yu.V., Dyblenko V.P. Researching and substantiating the mechanism of oil recovery via physical methods. Moscow, Nedra, 2002. 317 p.

4. Ponomarev O.A., Kuzmicheva V.A. Mechanics and molecular physics. Uchebnoe posobie. Moscow, MGAVT, 2007. 104 p.

5. Shigaev A.S., Ponomarev O.A., Lakhno V.D. Methods for DNA research and types of its open states. Theoretical and experimental methods for research of DNA open states. Kinetics, thermodynamics, mathematical models. Monografiya. LAP LAMBERT Academic Publishing, 2014. 169 p.

6. Ponomarev O.A., Shapkarin I.P., Shigaev A.S. The influence of magnetic fields on the kinetics of elementary processes in condensed phase. Monografiya. Moscow, MGUDT. 2014. 96 p.

*Материалы сообщения
подготовила к печати
Е.С. ШИХОВЦЕВА, д.ф.-м.н.*

THEORETICAL PHYSICS AS A MODE OF LIFE

© E.S. Shikhovtseva

Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Centre,
Russian Academy of Sciences,
151, prospekt Oktyabrya, 450075, Ufa, Russian Federation