

«ЗА КОММУНИЗМ»

ЗА РУБЕЖОМ



СЕНЕГАЛ. Университет в Дакаре — один из крупнейших на Африканском континенте. Здесь учатся около трех тысяч человек из многих стран Африки.

Независимый Сенегал испытывает острую нужду в национальных надрах, поэтому правительство всячески поощряет увеличение числа студентов-сенегальцев.

На снимке: в одной из университетских лабораторий.
Фото В. Сметанина.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МАШИНЫ И ПРОГРЕСС ХИМИИ

(Окончание. Начало на 2 стр.)

всейшей частью игра «стоит свет». Как пример можно привести необходимые вычисления расположения электронных уровней при высоких температурах, когда практические измерения затруднены для определения термодинамических функций. Или, например, определение концентрации тех или иных частиц в необычных условиях — в высоких слоях атмосферы и тому подобное. Экспериментально это можно сделать с помощью спектроскопии, измеряя интенсивность поглощения света такими частицами. Но для этого необходимо знать абсолютную интенсивность и соответствующие полосы в спектре, и отдельно выйти молекулы. Определить экспериментально эту интенсивность иногда трудно. Поэтому совместные усилия физиков и математиков затрагиваются за теоретическое ее вычисление, и таким образом получают важные для практики результаты.

Разумеется, и круг решаемых задач, и точность их решения ограничиваются состоянием вычислительной техники. Представим себе, однако, что в этой области проявляется значительный прогресс, что не только увеличился в тысячи раз скорость действия и память вычислительных машин, но и изобретены совершенные принципы записи и обработки результатов, стали доступны самые сложные задачи расчета электронных оболочек молекул. Можно ли будет сказать, что такие почти идеальные машины смогут ответить на все вопросы, которые волнуют химию?

Надо думать, что нет. Дело в том, что вычислительная машина в состоянии решать только те конкретные задачи, которые мы для нее сформулируем. В действительности же в химии (и, разумеется, не только в химии) имеется множество таких задач, которые мы еще не умеем сформулировать не только математически, но и физически. Для химических реакций могут оказаться важными такие факторы, о которых сегодня мы еще не подозреваем. Разумеется, сколь бы совершенной ни была машина, она не сможет открыть эти новые факторы. Только всестороннее исследование, глубокое осмысление изучаемого явления обеспечит настоящий прогресс. Машина же всегда будет важным, но вспомогательным орудием исследования.

Характерен в этом отношении пример выяснения взаимодействия газов с поверхностью твердого тела. На заре развития теории учёные ограничивались очень простой моделью. Они рассматривали молекулу, «сидящую» на поверхности в взаимодействующую с несколькими близкими атомами поверхности, которые называли «активными центрами». Нельзя, что в таких моделях нет никакой спецификации твердого тела, потому что «активные центры» при таком понимании неподвижны, не ставящиеся от молекул в газовой фазе. При такой модели

мые точные, расчеты взаимодействия с помощью машин не привели бы к заметному прогрессу.

Ликвидация разрыва между теорией твердого тела, развивающейся физиками, и теорией адсорбции, которая разрабатывалась физико-химиками, обусловила значительный прогресс в учении о природе взаимодействия молекул с поверхностью твердого тела. Прежде всего, стало ясно, что в проводниках в полупроводниках необходимо учитывать делокализованность электронов во всему кристаллу, а не в отдельных единицах.

Недавно мы вернулись к этой же задаче в лаборатории Института физической химии Академии наук СССР и задались целью найти аналитическое решение, то есть решение не с помощью машины, а с помощью математического анализа, который в принципе дает возможность четко исследовать задачу при любых значениях параметров: соотношении масс, сил, действующих между атомами, и так далее. Машина же для каждого набора значений параметров должна производить отдельный расчет, причем без учета этого обстоятельства невозможно понять наблюдаемых закономерностей.

Однако не могло быть полной уверенности в том, что, сформулировав теорию таким образом, мы учли все факторы, которые могут играть роль при взаимодействии молекул с твердым телом. Так оно впоследствии и оказалось. Совершенно независимо от развития электронной теории адсорбции давно развилась кинетическая теория взаимодействия атомов с поверхностью. Рассматривалась динамика взаимодействия с поверхностью атома или молекулы, налетающей на поверхность из газовой фазы. Решался вопрос о том, с какой вероятностью она будет прилипать к поверхности, при каких условиях, передавать кинетическую

энергию в твердое тело и не будет ли здесь возникнуть каких-либо особенностей? Задача эта очень сложная и для ее решения в последние годы стали применять вычислительную технику.

Просмотрели многие варианты, но не обнаружили каких-либо интересных особенностей.

Недавно мы вернулись к этой же задаче в лаборатории Института физической химии Академии наук СССР и задались целью найти аналитическое решение, то есть решение не с помощью машины, а с помощью математического анализа, который в принципе дает возможность четко исследовать задачу при любых значениях параметров: соотношениях масс, сил, действующих между атомами, и так далее. Машина же для каждого набора значений параметров должна производить отдельный расчет, причем без учета этого обстоятельства невозможно понять наблюдаемых закономерностей.

Такое аналитическое решение удалось найти. Из полученных формул вытекало, что при определенных условиях колебания адсорбированного атома будут существовать очень долго — приблизительно в миллион раз дольше, чем в в тех случаях, которые были рассчитаны в машине. Возникает локальное колебание, за время жизни которого на поверхности могут произойти многочисленные элементарные процессы. Но одному из условий образования такого колебания масса налетающего атома должна быть много меньше, чем масса атомов решетки твердого тела, вследствие чего налетающий атом почти не может «раска-

чать» решетку и передать ей свою энергию. Постепенно эта энергия вследствие негармоничности колебаний все же уходит в решетку, правда, весьма медленно.

Таким образом, аналитическое решение физической задачи помогло найти новый фактор, который, несомненно, играет определенную роль и при адсорбции, и при гетерогенном катализе.

Этот пример показывает, насколько критически следует оценивать результаты расчетов, основанных на приближенных моделях. Иногда необоснованно считается, что неполное соответствие теории эксперименту обусловлено приближенностью математического решения, но при этом упускается из виду, что сама физическая модель может быть слишком ограничена и не учитывает других факторов.

Вычислительная техника всегда будет помогать решать задачи квантовой химии, осмысливать получаемые экспериментальные результаты и вычислять параметры, важные для приложений. Однако нельзя забывать, что для более серьезного прогресса химии необходимо развивать физические теории, физические представления, которые иногда могут решительно отбросить все, что делалось раньше, и привести к выводу, что главный путь развития данной области знаний проходит в несколько ином направлении.

Н. СОКОЛОВ,
доктор физико-математических
наук.
(АНН).

ТЕЛЕВИДЕНИЕ

ПЯТНИЦА, 18 АВГУСТА

11.10 — Телевизионные новости. Кукольный спектакль. Передача из Ленинграда. 13.10 — В эфире «Молодость». 14.10 — «У истоков народной песни». Концерт-открытие. 14.50 — Народный телевизионный музей «За власть Советов». «Ходили мы походами». Передача из Сочи. 15.30 — Телевизионные новости. 15.50 — «Музыкальный маяк». 16.00 — Национальный день СССР на «ЭКСПО-67». 17.00 — На Кубок СССР по футболу. «Динамо» (М) — «Торпедо» (М). В перерыве — Телевизионные новости в «Телевизионное окно сатиры». 19.30 — «Летопись полувека». Телевизионный документальный многосерийный фильм «Год 1918-й». 20.20 — Клуб киноштеченников. 21.15 — Кубок Европы по прыжкам в воду. Передача из Финляндии (в записи). 21.30 — «Неслыханная песня». Телевизионный художественный фильм (Рига). 19.30 — Кубок Европы по прыжкам в воду. Передача из Польши. 21.00 — «Эстафета новостей». 21.55 — «Когда разводят мосты». Передача из Ленинграда. 22.15 — VII Международный фестиваль песни в СССР. Передача из Польши. СУББОТА, 19 АВГУСТА

12.00 — Программа передач.

12.05 — Для младших школьников Е. Шварц — «Сто друзей». Кукольный спектакль. Передача из Ленинграда. 13.10 — В эфире «Молодость». 14.10 — «У истоков народной песни». Концерт-открытие. 14.50 — Народный телевизионный музей «За власть Советов». «Ходили мы походами». Передача из Сочи. 15.30 — Телевизионные новости. 15.50 — «Музыкальный маяк». 16.00 — Национальный день СССР на «ЭКСПО-67». 17.00 — На Кубок СССР по футболу. «Динамо» (М) — «Торпедо» (М). В перерыве — Телевизионные новости в «Телевизионное окно сатиры». 19.30 — «Летопись полувека». Телевизионный документальный многосерийный фильм «Год 1918-й». 20.20 — Клуб киноштеченников. 21.15 — Кубок Европы по прыжкам в воду. Передача из Финляндии (в записи). 21.30 — «Неслыханная песня». Телевизионный художественный фильм (Рига). 19.30 — Кубок Европы по прыжкам в воду. Передача из Польши. Передача из Финляндии (в записи). 21.00 — «Будильник». 10.30 — Гимнастика для всех. 11.00 — Всеобщий фестиваль детского творчества. Передача из Кашинска. 11.30 — «На истории художественного самодеятельности». «Синяя блузка». 12.15 — «Делай с

вами, делай, как мы, делай лучше нас». Передача из ГДР. 13.00 — Для воинов Советской Армии и Флота. «Полвигу 25 лет». О спасении полотна Севастопольской панорамы. 13.30 — Для младших школьников. «Искорка». Передача из Донецка. 14.00 — «В мире искусств». Выставка картин в Сегеде. Передача из Венгрии. 14.30 — Неделя Латвийской ССР в Москве. «Сельское хозяйство Латвии». 15.00 — «Музикальный клюк». 15.30 — Телевизионные новости. 15.45 — «Киношпартер». 16.00 — «Музыкальный маяк». 16.30 — «Киношпартер». 17.00 — На Кубок СССР по футболу. «Динамо» (М) — «Торпедо» (М). В перерыве — Телевизионные новости в «Телевизионное окно сатиры». 19.30 — «Летопись полувека». Телевизионный документальный многосерийный фильм «Год 1918-й». 20.20 — Клуб киноштеченников. 21.15 — Кубок Европы по прыжкам в воду. Передача из Финляндии (в записи). 21.30 — «Неслыханная песня». Телевизионный художественный фильм (Рига). 19.30 — Кубок Европы по прыжкам в воду. Передача из Польши. Передача из Финляндии (в записи). 21.00 — «Будильник». 10.30 — Гимнастика для всех. 11.00 — Всеобщий фестиваль детского творчества. Передача из Кашинска. 11.30 — «На истории художественного самодеятельности». «Синяя блузка». 12.15 — «Делай с

Постановлением правительства от 30 июня 1967 года Всесоюзный заочный энергетический институт (ВЗИ) преобразован в Московский институт радиотехники, электроники и автоматики (МИРЭА).

Соответственно Дубенский фи-

лиал ВЗИ переименован в филиал Московского института радиотехники, электроники и автоматики.

Средней школе № 9 предлага-

ется уборщицы. За справки обращаться по телефонам: 82-80, 82-85.

Завод «Промсвязь» приглашает на постоянную работу рабо-

тров и техников по деревообработке, специалистов тепло-

технических установок. Теплотехникам предоставляется жилье.

Обращаться в отдел кадров пос. Северный, Талдомского рай-

иона, общий — 75-23. Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления принимаются с 25

июня по 15 июля.

Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления принимаются с 25

июня по 15 июля.

Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления принимаются с 25

июня по 15 июля.

Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления принимаются с 25

июня по 15 июля.

Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления принимаются с 25

июня по 15 июля.

Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления принимаются с 25

июня по 15 июля.

Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления принимаются с 25

июня по 15 июля.

Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления принимаются с 25

июня по 15 июля.

Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления принимаются с 25

июня по 15 июля.

Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления принимаются с 25

июня по 15 июля.

Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления принимаются с 25

июня по 15 июля.

Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления принимаются с 25

июня по 15 июля.

Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления принимаются с 25

июня по 15 июля.

Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления принимаются с 25

июня по 15 июля.

Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления принимаются с 25

июня по 15 июля.

Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления принимаются с 25

июня по 15 июля.

Дни выхода газеты — вторник и пятница.

Заявления приним