

Теоретический отдел

Теоретический отдел был создан в 2003 году по инициативе академика С.М. Алдошина, предложившего объединить в единую структуру существовавший математический отдел и несколько теоретических лабораторий Института.

Еще в начале шестидесятых годов академик Н.Н. Семенов принял решение организовать в Институте химической физики математический отдел, которому поручалась разработка математических методов, позволяющих использовать возможности появившихся тогда первых вычислительных машин для решения проблем химической физики. Институт приобрел вычислительную машину М-20, одну из лучших в СССР машин того времени. В математический отдел были приглашены выдающиеся математики (А.Я. Повзнер, А.И. Вольперт, А.Я. Дубовицкий, А.А. Милютин и др.), которые быстро включились в решение новых для них задач. Параллельно группа высококвалифицированных инженеров под руководством А.И. Станиловского ввела в эксплуатацию вычислительную машину М-20.

В 1965 году А.Я. Повзнер пригласил из Харькова очень хороших математиков: В.П. Гурария, В. И. Мацаева и В. Д. Мильмана. Их интересы лежали в области теории функций, функционального анализа, топологии. Хотя они и не занимались непосредственно прикладными задачами, влияние их на математическую жизнь в отделе и, вообще в Черноголовке, было велико. Они активно участвовали в семинаре, расширили связи с учеными из других институтов, приглашали интересных людей на семинар, прочли целый ряд лекций и докладов: Гурарий (по теории вероятностных процессов и гармоническому анализу, Мацаев - цикл докладов по теории интерполяционных неравенств и цикл лекций по когомологиям).

Одной из первых задач, поставленных Н.Н. Семеновым, было создание вычислительного комплекса для автоматической расшифровки структуры кристаллов методами рентгеноструктурного анализа. Уже в 1963 году был создан комплекс программ для расшифровки кристаллов, а через десять лет появился усовершенствованный комплекс программ, использующий возможности значительно более мощной вычислительной машины БЭСМ-6. Эта работа, проводившаяся под руководством Б.Л.Тарнопольского, является ярким примером выдающихся достижений математического отдела, возглавляемого профессором А.Я. Повзнером.

Важным направлением работы математического отдела явилась разработка программ для проведения квантово-химических расчетов. Это была вторая проблема, поставленная Н.Н. Семеновым. Разработанная под руководством

А.Н. Ивановой программа атомных расчетов методом Хартри-Фока была одной из первых в мире.

Задачи горения и взрыва потребовали применения новых математических методов, которые развивали А.И. Вольперт, С.И. Худяев и К.Г. Шкадинский. В результате оказалось возможным решить ряд макрокинетических задач, возникших при анализе проводимых в Институте экспериментов.

Принципиально новые подходы к задачам теории оптимальных процессов привели А.Я. Дубовицкого и А.А. Милютину к созданию теории, обобщающей подходы, основанные на принципе максимума Л.С. Понтрягина.

Важное значение для интерпретации кинетических экспериментов имели методы качественной теории дифференциальных уравнений, развитые для этих целей под руководством А.И. Вольперта и А.Н. Ивановой.

Наряду с математическим отделом в Институте работали и другие теоретические подразделения. Лаборатория профессора В.И. Ошерова получила фундаментальные результаты по динамике атомно-молекулярных процессов и кинетике неравновесных химических реакций. В лаборатории профессора Б.Н. Провоторова была разработана теория многоимпульсных экспериментов ЯМР в твердом теле, предложены методы для исследования динамических процессов и формы линии ЯМР в твердых телах. Развитие фундаментальных основ химической технологии – основное направление лаборатории Л.П. Холпанова.

При организации теоретического отдела важную роль сыграл академик А.Л. Бучаченко, который стал научным руководителем отдела. Выдающийся ученый, лидер современной спиновой химии, А.Л. Бучаченко внес существенный вклад в становление теоретического отдела.

Сегодня теоретический отдел объединяет четыре лаборатории и две группы. В отделе проводятся теоретические исследования элементарных процессов в химических реакциях, многоквантового ЯМР и ЯМР в полимерах, динамики и релаксации электронных и ядерных спинов, спинового компьютеринга, математическое моделирование критических явлений и нелинейных эффектов самоорганизации в физико-химических процессах. В отделе работает семинар, обсуждающий наиболее интересные работы сотрудников. Молодые сотрудники отдела за последние несколько лет защитили четыре кандидатские диссертации. Наши результаты публикуются в ведущих отечественных и международных научных журналах.

Тематика отдела интересна и разнообразна, она охватывает основные проблемы химической физики. Научная работа в отделе требует глубоких знаний по физике, математике и информатике. Работать у нас трудно, но очень

интересно. Мы приглашаем молодежь России поступать к нам для подготовки дипломов бакалавров, магистров и кандидатских диссертаций.