

Э.Э. Шноль

А.Г. ГРИВЦОВ

И МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА – НАЧАЛО *

В конце 50-х – начале 60-х годов в Институте прикладной математики АН СССР (ИПМ) в Москве работал небольшой (неофициальный) семинар, посвященный математическим вопросам естествознания. Его вели Альберт Макарьевич Молчанов и я, а докладчики были не обязательно сотрудники института. Весной 1966 г. по рекомендации Михаила Дмитриевича Корзухина (в то время – аспиранта А.М. Молчанова) в качестве докладчика был приглашен А.Г. Гривцов. Мы просили его рассказать о теории (или теориях) жидкости.

Когда Аллан Георгиевич появился у нас, первое впечатление было: это человек взрослый. Было ему в то время 28 лет, но выглядел он заметно старше, и внешнее впечатление подтвердилось и усилилось впечатлением от его докладов¹: он ясно рассказал нам все, что знал о связи свойств жидкости с ее молекулярной структурой (а знал он, по видимому, все, что было тогда известно).

После последнего доклада (вероятно, в тот же день) у меня состоялся с ним разговор, последствия которого я, конечно, не мог предвидеть. Я рассказал А.Г. примерно следующее. Теории жидкостей несовершенны и не всегда согласуются друг с другом. А нельзя ли "посмотреть" на структуру жидкости, рассчитав взаимодействие и движение ее молекул с помощью вычислительной машины? Мысль моя, как видно, была наивной; никаких работ в этом направлении я не знал и был лишь наслышан (из популярных статей) о сложной структуре воды.

А.Г. моя идея понравилась и он согласился всерьез этим заняться. Ему был выдан постоянный пропуск в Институт прикладной

* При написании этой статьи я использовал запись выступления на семинаре, посвященном памяти А.Г. Гривцова. Семинар был организован М.Н. Родниковой и происходил в Институте общей и неорганической химии Академии наук 19 марта 1991 г. Я довольно сильно изменил содержание, но сохранил стиль: это – воспоминания, а не исторический очерк или обзор работ А.Г. Гривцова.

¹ Сохранились точные даты его выступлений: 4 и 11 февраля, 18 марта 1966 г.

© Э.Э. Шноль, 1996

математики и он стал приходить к нам регулярно – все дни, кроме одного, который он проводил в Пущино². Так началось наше сотрудничество, продолжавшееся несколько лет³.

Роли наши определились естественным образом. Методические (вычислительные и математические) вопросы были в основном на мне. Напротив, при постановке содержательных задач "старшим" был Гривцов. В частности, он сказал, что начинать с воды нельзя, это объект слишком сложный, а нужно начинать с какой-нибудь жидкости, состоящей из одноатомных молекул (типа жидкого аргона). Началась трудная работа по пониманию того, что мы собственно хотим и что возможно: какие ограничения выбранного нами подхода лежат в существе дела, а какие налагает слабость вычислительной техники⁴.

Через некоторое время (не с самого начала) мы познакомились с несколькими работами западных авторов на эту тему, которые разыскал А.Г. (первая из них датирована 1957 годом).

После года плотной совместной работы мы решили, что пора что-то написать и составили отчет. Он назывался "О численном моделировании движения молекул жидкости" и на его титульном листе были указаны два института – прикладной математики и фотосинтеза. Заключительная фраза аннотации к этому отчету звучит так: "Приводятся результаты расчетов двумерного движения 50–100 молекул, в том числе данные о структурировании (упорядочивании) жидкости вблизи отражающей стенки". Эта фраза содержит в зародыше следующую замечательную мысль А.Г., кажущуюся сейчас почти очевидной. Коль скоро мы можем в численных экспериментах работать лишь с небольшим числом молекул, то нельзя ли "обратить слабость в силу" и изучать явления, где участвует относительно немного молекул, скажем явления в приповерхностных слоях? Наблюдение структурирования жидкости у гладкой поверхности послужило (через несколько лет!) темой первой журнальной публикации А.Г. по молекулярной динамике [1]⁵. Насколько я знаю, это была пионерская работа: никто ранее не пытался изучать поверхностные явления, рассчитывая движение отдельных молекул. (Сам Аллан Георгиевич употреблял термин "численные эксперименты динамического типа".)

Приблизительно в это же время, в 1967 г., Аллан Георгиевич составил обширную программу действий по изучению различных проблем посредством численного моделирования движения отдельных молекул.

² В то время А.Г. был сотрудником Института фотосинтеза в Научном центре биологических исследований Академии наук в Пущино. Поскольку он был не связан с экспериментом, ему было разрешено работать в Москве. Вот этой свободой мы и воспользовались.

³ Отделом, в котором тогда работали я и А.М. Молчанов (и штатным сотрудником которого стал А.Г. Гривцов), более 30 лет заведовал замечательный ученый Константин Иванович Бабенко. Понятно, что без его разрешения и содействия наша совместная деятельность не могла развернуться.

⁴ См., в частности, доклад [8].

⁵ Этой публикации предшествовали выступления А.Г. на конференциях, см., в частности, [2] и [3].

К сожалению, соответствующие листки не сохранились и я могу вспомнить лишь часть того, что было в этом списке.

Во-первых, то, что было к тому времени более или менее освоено на Западе. Это – расчеты термодинамических величин для простых систем (в том числе нахождение уравнений состояния), исходя из заданного межмолекулярного взаимодействия. Вторым, отдельным, пунктом значилось изучение структуры и свойств воды. Далее шли системы, в которых особенно важно электростатическое взаимодействие (растворы электролитов и расплавы металлов). Затем полимерные проблемы: жидкости или твердые тела из полимерных молекул. Пятый раздел составляли проблемы сорбции или, шире, взаимодействия поверхности твердого тела с молекулами жидкости или газа. Далее в списке стояло изучение процессов диффузии в жидкости на молекулярном уровне и еще что-то.

Так получилось, что работа по компьютерному (численному) моделированию молекулярной динамики (МД) стала главным направлением научной деятельности А.Г. Гривцова. Впоследствии он привлек к этой работе многих людей, много помогал тем, кто этим уже занимался, сформулировал новые задачи, не входившие в первоначальную программу и т.д. Очень немного об этом будет сказано ниже, а пока вернемся к 1967 г.

Намеченная программа была рассчитана на длительное время и не могла, конечно, выполняться всего двумя исследователями. Нам, естественно, хотелось сосредоточиться на "свежих" направлениях (которыми мало занимались или не занимались вовсе). К сожалению, в последующие годы взаимодействие наше стало не столь интенсивным. А.Г. перешел на работу в Институт физической химии (ИФХ) и стал "насаждать" там вычислительные машины и "прививать" доверие к вычислительному эксперименту. Он был очень занят и не мог уделять так много времени, как раньше, своим занятиям в Институте прикладной математики. Помощников в ИПМ у нас не было. В результате работа наша продвигалась медленно и была более "монохроматичной", чем нам хотелось.

Отмечу, что связи А.Г. с Институтом прикладной математики сохранялись длительное время и он активно ими пользовался для разного рода консультаций, в том числе по техническим проблемам, связанным с большими вычислительными машинами.

Новый этап наступил в 1969 г. ИПМ был в то время базовым институтом Московского физико-технического института. Очередная группа студентов появилась в ИПМ осенью 1969 г. Им была предоставлена некоторая возможность самим выбрать себе тему занятий. Происходило это на собрании, где ведущие сотрудники ИПМ – потенциальные руководители студентов – кратко рассказывали о своих темах. А.Г. уговорил меня пойти на это собрание и рассказать о наших занятиях (к тому времени даже в ИПМ о них мало что было известно). Так у нас появился Николай Балабаев и стало возможным начать работу с цепочечными (полимерными) молекулами. До того никто в мире не

занимался численными экспериментами динамического типа с такими молекулами. Забегая вперед, замечу, что Н.К. Балабаев выполнил на эту тему дипломную работу, а через несколько лет защитил диссертацию; одним из научных руководителей диссертанта был А.Г. Гривцов.

В 1971 г. мы с А.Г. задумали издать серию препринтов. То, что была сразу намечена серия, есть косвенное отражение упомянутой большой программы А.Г. Препринты имели общее название "Численные эксперименты по моделированию движения молекул" и подзаголовки – свои для каждой части. Мы представляли тогда, что будет 10–12 таких частей. На самом деле мы смогли написать только три (см. [4–6]). Третья называлась "Движение изолированной полимерной цепочки" и в ней уже соавтором был Н.К. Балабаев ⁶.

Этот препринт обратил на себя внимание сотрудников Института высокомолекулярных соединений (ИВС) АН СССР в Ленинграде. Завязалось тесное научное взаимодействие, в котором от сотрудников ИВС исходили задачи, а от нас, по крайней мере сначала, – методики. По-видимому, освоение сотрудниками ИВС численных методов молекулярной динамики заметно обогатило их инструментарий и позволило обсуждать ранее недоступные вопросы ⁷.

После 1972 г. наше сотрудничество с А.Г. Гривцовым утратило регулярный характер, хотя никогда не прерывалось полностью ⁸. А.М. Молчанов организовал в Пушкино вычислительный центр "для биологии" (на правах самостоятельного академического института). Он получил название "Научно-исследовательский вычислительный центр АН СССР" (НИВЦ), а сейчас он называется "Институт математических проблем биологии Российской Академии наук (ИМПБ)". Я начал там работать и уделял этой работе все больше сил и времени. Сотрудником нового института стал также Н.К. Балабаев и проводимые нами численные эксперименты с движущимися молекулами постепенно переносились из Москвы в Пушкино ⁹.

О дальнейшей научной деятельности А.Г. мне известно не очень много и я упомяну только о двух его начинаниях. Первое касается замечательной динамической задачи: о деформации (растяжении) кристаллического тела за пределами упругости. При этом кристаллическая решетка частично разрушается, связи рвутся, сила может зависеть от скорости растяжения и т.д. Казалось очень интересным посмотреть на этот процесс на атомном уровне. Соответствующие работы были выполнены А.Г. Гривцовым с коллегами из ИФХ; см. [10, 11].

⁶ Этот препринт послужил позднее основой для статьи [7] (единственной, в которой мы с А.Г. Гривцовым являемся соавторами).

⁷ См., в частности, книгу [9] (с. 10–11 и главу 5).

⁸ В частности, в течение нескольких лет существовал домашний семинар "по молекулам".

⁹ Процесс этот растянулся на несколько лет: в НИВЦ были сначала очень слабые вычислительные машины. В настоящее время Н.К. Балабаев заведует в ИМПБ РАН лабораторией молекулярной динамики.

Второе начинание касалось твердых полимеров (в первую очередь, полиэтилена). А.Г. вступил в контакт со специалистами по полимерам из Института химической физики (ИХФ) и по этому направлению возник "тройственный союз": ИХФ + ИХФ + НИВЦ АН СССР. Началась совместная работа и снова "разглядывание" структуры на молекулярном уровне посредством численного моделирования оказалось интересным и плодотворным (см., в частности, [12]).

Теперь я хочу сказать несколько слов о тех начинаниях Аллана Георгиевича, которые заметно расширили круг лиц, попавших в его "область притяжения" (но значение которых, конечно, этим не ограничилось). Весной 1978 г. А.Г. позвонил мне; он сказал, что хочет созвать Всесоюзный семинар под названием "Математические методы для исследования полимеров" и пригласил меня участвовать. Ему удалось организовать и провести такой семинар в ИХФ 22 мая 1978 г. А.Г. предполагал придать этому мероприятию регулярный характер. В Москве это оказалось сложно и на следующий год Всесоюзное совещание с тем же названием, но более представительное, состоялось в Научном центре биологических исследований АН СССР в Пущино.

В одном из перерывов совещания 1979 г. А.Г. высказал такую мысль: полезно бы устроить в Москве постоянно действующий семинар "Математические методы для исследования полимеров". Участвовавшие в совещании Александр Юльевич Гроссберг и Алексей Ремович Хохлов взяли на себя помощь в организации семинара и, в частности, поговорить со своим научным руководителем Ильей Михайловичем Лифшицем. Илья Михайлович согласился возглавить этот семинар и семинар вскоре начал работать. Заседания этого семинара (под названием "Семинар по теории полимеров") с тех пор регулярно происходят на физическом факультете МГУ. Я хочу напомнить, что первоначальный импульс к созданию этого замечательного семинара исходил от А.Г. Гривцова.

Совещания "Математические методы для исследования полимеров" проводились в Пущино еще три раза – в 1981, 1983 и 1985 гг.¹⁰ Они собирали большую и разнообразную аудиторию – от математиков до биофизиков.

Заканчивая, я должен сказать очевидную вещь: истинный научный ранг А.Г. Гривцова, конечно, не соответствовал формальным признакам – его ученым званиям и степеням. Это был глубокий ученый, склонный годами размышлять над трудными вопросами (чему, надо сказать, внешние условия совершенно не благоприятствовали). Он обладал замечательной интуицией, позволявшей ему видеть дальше многих коллег и придававшей ему уверенность, основания для которой были нам часто непонятны.

Я думаю, что его влияние будет сказываться еще многие годы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гривцов А.Г. О структурировании жидкости у поверхности твердого тела // Докл. АН СССР. 1970. Т. 190. С. 868–871.
2. Гривцов А.Г. Математический эксперимент в теории классических конденсированных сред // Всесоюз. конф. по проблемам теоретической кибернетики (9–13 июня 1969 г.): Тез. докл. Новосибирск: Ин-т математики СО АН СССР, 1969. С. 19–20.
3. Гривцов А.Г. // Основные проблемы теории физической адсорбции. М.: Наука, 1970. С. 347–348, 352–355 [выступления в дискуссии].
4. Гривцов А.Г., Шноль Э.Э. Численные эксперименты по моделированию движения молекул. Ч. 1. Структурирование жидкости у отражающей границы. М., 1971. 27 с. (Препр. / ИПМ АН СССР; № 3).
5. Гривцов А.Г., Шноль Э.Э. Численные эксперименты по моделированию движения молекул. Ч. 2. Адсорбция на гладкой поверхности. М., 1971. 28 с. (Препр. / ИПМ АН СССР; № 4).
6. Балабаев Н.К., Гривцов А.Г., Шноль Э.Э. Численные эксперименты по моделированию движения молекул. Ч. 3. Движение изолированной полимерной цепочки. М., 1972. 38 с. (Препр. / ИПМ АН СССР; № 4).
7. Балабаев Н.К., Гривцов А.Г., Шноль Э.Э. Численное моделирование движения линейной полимерной цепочки // Докл. АН СССР. 1975. Т. 220. С. 1096–1098.
8. Шноль Э.Э. Численные эксперименты с движущимися молекулами. М., 1975. 35 с. (Препр. / ИПМ АН СССР; № 88).
9. Готлиб Ю.Я., Даринский А.А., Светлов Ю.Е. Физическая кинетика макромолекул. Л.: Химия, 1986. 272 с.
10. Юценко В.С., Гривцов А.Г., Шукин Е.Д. Численное моделирование деформации молекулярного кристалла // Докл. АН СССР. 1974. Т. 215. С. 162–165.
11. Юценко В.С., Гривцов А.Г., Шукин Е.Д. Численное моделирование эффекта Риббиндера // Там же. Т. 219. С. 148–151.
12. Mazo M.A., Oleynik E.F., Balabaev N.K., Lunesskaya L.V., Grivtsov A.G. // Molecular dynamic simulation of motion in solid polymer. Rotator phase of *n*-alkane; Polymer Bull. 1984. № 12. P. 303–309.

¹⁰ К названию последних было добавлено: "... и биополимеров."