

Горение свечи и уровни организации

Е. Б. Рудный, 2026, evgenii@rudnyi.ru

Препринт, PREPRINTS.RU.

Аннотация. Горение свечи, рассмотренное в лекциях Фарадея, использовано в качестве примера для обсуждения взаимосвязей между теориями физики на разных уровнях организации: механика сплошных сред на макроуровне и статистическая и квантовая механика на микроуровне. В первой части статьи рассматриваются связи между теоретической и экспериментальной физикой. Теория физики служит основой исследовательской программы, но экспериментальные исследования являются мерой текущего развития. Разумный экстраполяционизм обозначает ситуацию, когда представления теории физики способствуют развитию экспериментальных исследований. С другой стороны, радикальный экстраполяционизм используется для ситуации, когда проводимое обсуждение выходит далеко за пределы экспериментальной физики. Во второй части статьи рассматриваются стрелы объяснений между механикой сплошных сред и статистической механикой и они классифицируются в рамках предложенной терминологии. Рассмотрен расчет свойств вещества из молекулярных постоянных и вывод уравнений механики сплошных сред из статистической механики, а также обсуждается возникаемость при сравнении теорий физики на разных уровнях организации.

Ключевые слова: философия физики, уровни организации, механика сплошных сред, статистическая механика, расчет из первых принципов

Содержание

Введение.....	1
Физика, математика и мир.....	4
Теория и эксперимент в физике.....	4
Уровень экспериментальной физики.....	6
Исследовательская программа как экстраполяционизм.....	7
Разумный и радикальный экстраполяционизм.....	9
Стрелы объяснений.....	10
Расчет свойств вещества из молекулярных постоянных.....	10
Вывод уравнений механики сплошных сред из статистической механики.....	12
Горение свечи на уровне фундаментальных уравнений физики.....	13
Стрелы объяснений и возникаемость.....	15
Обсуждение.....	16
Список литературы.....	17

Введение

Название статьи отталкивается от книги Майкла Фарадея '*История свечи*' 1861 года [1]. В ней Фарадей в популярной форме представил серию экспериментов для понимания процессов при горении свечи. Фарадей отмечал следующее:

'Явления, наблюдающиеся при горении свечи, таковы, что нет ни одного закона природы, который при этом не был бы так или иначе затронут. Рассмотрение физических явлений, происходящих при горении свечи, представляет собой самый широкий путь, которым можно подойти к изучению естествознания.'

За прошедшее время физика ушла вперед, но слова Фарадея во многом остаются в силе. Теплота от горения ведет к плавлению материала свечи (обычно смесь парафина со стеарином) и образованию чашечки жидкого материала в верхней части тела свечи. Жидкий материал поднимается по фитилю (капиллярный эффект) и испаряется. Продукты испарения

вступают в реакцию с кислородом воздуха и разные зоны пламени соответствуют разной степени прохождения реакции окисления продуктов испарения кислородом. В ходе химических реакций выделяется свет и теплота, которая в том числе используется для поддержки поступления топлива из тела свечи. Процесс естественной конвекции приводит к образованию потока воздуха, который идет вдоль тела свечи, формирует столб пламени и при этом подводит кислород, необходимый для процесса горения.

В книге Фарадея процесс горения свечи рассматривался без использования атомных представлений. В настоящее время это соответствует рассмотрению на уровне механики сплошных сред (макроуровень, макропроцессы). В то же время развитие физики со времен Фарадея позволяет в настоящее время провести обсуждение горения свечи на уровне атомно-молекулярных представлений при использовании статистической механики (микроуровень, микропроцессы). Таким образом, горение свечи в настоящей статье используется в качестве примера для обсуждения взаимосвязей между теориями физики, используемых для описания разных уровней организации. В данном случае не требуется теория относительности, ядерная физика и квантовая теория поля, что существенно упрощает рассмотрение.

В физике считается, что законы физики на микроуровне являются фундаментальными, а теории на макроуровне нередко относят к феноменологическим. При этом обычно считается, что феноменологические теории физики уже объяснены в рамках фундаментальных теорий физики. В качестве примера приведу статью Эйнштейна 1936 года *‘Физика и реальность’* [2], в которой он относит механику сплошных сред к феноменологическим теориям:

‘Сюда относятся гидродинамика и теория упругости твердых тел. Эти теории избегают явного введения материальных точек и пользуются фикциями, которые в свете основ классической механики могут иметь только приближенное значение. ... Эти два способа приложения механики принадлежат к так называемой «феноменологической» физике. Этот вид физики характеризуется применением, насколько это возможно, весьма близких к опыту понятий; но именно вследствие этого приходится в значительной мере отказываться от единства фундамента. Теплота, электричество, свет описываются специальными функциями состояния и константами вещества, отличными от механических. Определение взаимной зависимости всех этих переменных было делом скорее эмпирическим. Многие современники Максвелла видели в таком представлении конечную цель физики, которая, думали они, может быть достигнута из опыта чисто индуктивным путем, на основе сравнительно тесного контакта используемых понятий и опыта.’

При этом Эйнштейн подчеркивает, что переход на атомно-молекулярный уровень позволяет объяснить происходящие процессы на макроуровне:

‘По-моему, величайший подвиг механики Ньютона состоит в том, что ее постоянное применение привело к выходу за рамки феноменологических представлений, особенно в области тепловых явлений. Это произошло в кинетической теории газов и в более общем виде в статистической механике. Первая объединила уравнение состояния идеальных газов, вязкость, диффузию газов и установила логическую связь между явлениями, которые, с точки зрения прямого опыта, не имели абсолютно ничего общего. Статистическая механика дала механическую интерпретацию идей и законов термодинамики и открыла предел приложения ее понятий и законов в классической теории теплоты. Кинетическая теория, которая намного обогнала феноменологическую физику в том, что касается логического единства своих основ, кроме того, дала для истинных размеров атомов и молекул определенные значения, которые получились различными независимыми методами и были, таким образом, установлены в областях, где они не могли подвергаться серьезному сомнению.’

Без всякого сомнения Эйнштейн во многом прав и в моем рассмотрении не будет сомнения в правильности теорий физики на микроуровне. Тем не менее, при рассмотрении вопроса о связях между теориями на макро- и микроуровне не стоит спешить. Следует более внимательно рассмотреть значение употребляемых выражений: 'сведение одной теории к другой', 'объяснение одной теории через другую' и т. д.

В книге *'Природа физического мира'* [3] Артур Эддингтон отмечает символичность научного мира и вводит неплохую метафору: 'внешний мир физики превратился в мир теней'. Эддингтон сравнивает микро- и макромир, только он в качестве примера берет два стола. Один стол принадлежит обыденной жизни, а второй - фундаментальным теориям физики:

'Стол №2 – это мой научный стол. ... Мой научный стол состоит по большей части из пустоты. В этой пустоте с большой скоростью мечутся многочисленные электрические заряды, но их совокупный объем составляет лишь миллиардную часть от объема самого стола.'

Отличие от исходного рассмотрения Эддингтона будет в следующем. Я считаю, что в своем примере Эддингтон должен был бы дополнительно ввести в рассмотрение стол на уровне механики сплошных сред. Теория механики сплошных сред, как и фундаментальные теории физики, записывается в виде математических уравнений и в этом отношении также символична. В этом смысле необходимо обсуждение, каким образом мир теней механики сплошных сред и мир теней статистической механики связаны между собой и с горящей свечой.

В первой части статьи дается моя интерпретация мира теней Эддингтона. Теория физики выражается математическими уравнениями и таким образом требуется специальное обсуждение связи математики с миром посредством теории физики. Теория физики тесно связана с проводимыми экспериментами, и это задает связь между миром теней с реальным миром. Однако это не мешает выделению уровня экспериментальной физики, который задает область применения рассматриваемой теории. Такой подход позволяет предложить другую интерпретацию термина Лакатоса исследовательская программа в отношении к теории физики.

Теория физики задает исследовательскую программу, в которой теории физики придается универсальность. Универсальность выводит нас за рамки экспериментальной физики и для обозначения этого обстоятельства используется термин экстраполяционизм. Разумный экстраполяционизм связан с текущим уровнем развития экспериментальной физики в рамках исследовательской программы, когда представления теории физики способствуют развитию экспериментальных исследований. Переход к рассмотрению уравнений, которые не влияют на развитие экспериментальных исследований, выводит нас за пределы экспериментальной физики и для этой ситуации используется термин радикальный экстраполяционизм.

Во второй части статьи рассматриваются взаимосвязи между теориями физики для разных уровней организации при использовании метафоры стрел объяснения из книги Стивена Вайнберга *'Мечты об окончательной теории'* [4]:

'Мы ищем универсальные истины о природе и, когда мы их находим, пытаемся объяснить их, показав, каким образом они выводятся из еще более глубоких истин. Представьте себе пространство научных принципов, заполненное стрелками, указывающими на каждый принцип и исходящими из тех принципов, которыми объясняются последующие. Эти стрелы объяснений уже сегодня выявляют любопытную структуру: они не образуют отдельных, не связанных с другими, скоплений, соответствующих независимым наукам, и они не направлены хаотично и бесцельно. Наоборот, все они связаны, так что если двигаться к началу стрелок, то

кажется, что все они выходят из общей точки. Эта начальная точка, к которой можно свести все объяснения, и есть то, что я подразумеваю под окончательной теорией.'

Таким образом во второй части статьи рассматриваются стрелы объяснений между механикой сплошных сред и статистической механикой и они классифицируются в рамках предложенной терминологии как разумный или радикальный экстраполяционизм.

Физика, математика и мир

Обсуждение уровней организации при горении свечи будет проведено со стороны физиков, которые рассматривают теории физики вместе с проводимыми экспериментами. Это позволяет свести к минимуму обсуждение философских вопросов о природе реальности. При таком подходе нет сомнений, с одной стороны, в реальности физиков и реальности горящей свечи, а с другой, в реальности теории физики и используемых в ней математических уравнений. Понятно, что эти две реальности имеют разные модусы существования, но при таком рассмотрении нет необходимости более подробного обсуждения значения слов реальность и существовать.

Миром теней Эддингтона предлагается считать концептуальные модели физических объектов на основе математических уравнений теории физики. Именно такие объекты участвуют в обсуждении физиков при рассмотрении процессов горения. В ходе обсуждения физиков концептуальные модели проецируются на мир. Например, физик показывает рукой на пламя свечи и говорит о поле температур, о поле концентраций, о химических реакциях, протекающих при горении свечи. Использование таких понятий при сопоставлении с реальным пламенем свечи не вызывает особых проблем в силу наглядности используемых образов. С другой стороны, есть понятия, для которых создание наглядного образа и его связь с миром затруднены. Например, изменение энтропии, энтальпии и энергии Гиббса при протекании химических реакций или обсуждение фазового пространства в статистической механике.

Вначале рассмотрена связь физических величин с миром при проведении реальных экспериментов. Отмечается тесная связь теории физики и эксперимента. Теория вводит физические величины и задает концептуальные модели идеального измерительного устройства и идеального эксперимента. Использование реальных устройств приводит к необходимости введения поправок, а также к наличию ошибок измерения, которые выходят за рамки теории физики.

Далее вводится уровень экспериментальной физики, который можно выделить несмотря на тесную связь теории физики и эксперимента. Этот шаг необходим для обсуждения ситуаций, когда применение теории выходит далеко за пределы области проведенных экспериментов. На примере создания молекулярно-кинетической теории в 19-ом веке вводится термин экстраполяционизм. Исследовательская программа молекулярно-кинетической теории оказалась успешной, но дальнейшее развитие физики привело к отмене базовых положений этой теории. В заключение проведено отличие между разумным и радикальным экстраполяционизмом, когда обсуждение выводится далеко за рамки экспериментальной физики.

Теория и эксперимент в физике

Пьер Дюгем в конце 19-го века разбирал связь математических уравнений физики с экспериментами в книге '*Физическая теория, её цель и строение*' [5], но в дальнейшем в философии физики этому вопросу практически не уделялось внимания. Новое рассмотрение появилось в книге Баса ван Фраассена [6] при введении проблемы координации. Суть

проблемы выражена ван Фраассеном в совместном рассмотрении двух вопросов о физической величине:

- Что можно считать измерением физической величины X?
- Что такое физическая величина X?

Теория физики отвечает на вопрос, что такое физическая величина, а также теория физики приводит к концептуальной модели идеального измерительного прибора, которая служит основой при построении реального измерительного прибора. Подход Дюгема и ван Фраассена использован мною при рассмотрении температуры [7] и термодинамических свойств [8]. Для иллюстрации сказанного приведу несколько цитат из книги Дюгема. Начну с противопоставления идеального и реального инструмента:

'Когда физик производит какой-нибудь опыт, ум его одновременно занимают два прекрасно различаемых представления об инструменте, с которым он работает: одно есть образ конкретного инструмента, с которым он действительно работает, другое - схематический тип того же инструмента, построенный с помощью символов, данных теориями. И именно к этому второму инструменту, идеальному и символическому, он применяет законы и формулы физики.'

Измерения в экспериментах опираются на метрологию, то есть на введение стандартизованных шкал измерения. Разрабатываются процедуры по калибровке приборов для обеспечения воспроизводимости экспериментов, проводимых разными группами физиков. Отличие между реальным и идеальным инструментом приводит к необходимости введению поправок в проводимых измерениях, которые связаны с отличием между концептуальной модели и реальным устройством [5]:

'Будь физический эксперимент простым констатированием факта, было бы абсурдом производить в нем поправки. ... Напротив того, логическая роль поправок становится вполне понятной, если вспомнить, что физический эксперимент есть не только констатирование группы фактов, но и перевод этих фактов на символический язык при помощи правил, заимствованных из физической теории. Отсюда в действительности следует, что физик постоянно сравнивает между собой два инструмента: реальный инструмент, с которым он работает, и инструмент идеальный и символический, о котором он рассуждает.'

Такой подход можно распространить на все свойства веществ в механике сплошных сред, включая измерение констант скоростей химических реакций. При включении в рассмотрение статистической механики появляются эксперименты по определению фундаментальных постоянных и проведению спектроскопических измерений. Подход Дюгема также переносится на эти эксперименты.

В книге Дюгема обращается внимание на погрешности измерения. Сюда включаются ошибки считывания показаний, систематические ошибки, связанные с неучтенными обстоятельствами, на которые невозможно внести поправки, и случайные ошибки. Погрешности измерения является важной частью проводимых экспериментов. В редких случаях погрешности удастся свести до уровня тепловых флуктуаций (теплового шума). Обычно экспериментальные погрешности остаются необъясненными факторами, которые находятся вне используемой теории физики и которые не могут быть объяснены в этой теории.

Важно отметить, что увеличение точности измерений приводит к смене взглядов на протекающие процессы. Например, орбита Марса выглядит эллиптической только при

определенных погрешностях измерения. Как правильно заметил Пуанкаре [9]:

'Давно уже было сказано, что если бы инструменты Тихо были в десять раз точнее, то мы никогда не имели бы ни Кеплера, ни Ньютона, ни астрономии. Для научной дисциплины составляет несчастье возникнуть слишком поздно, когда средства наблюдения стали слишком совершенными.'

Уровень экспериментальной физики

В предыдущем разделе подчеркивалась важность теории физики при организации и проведении экспериментов, но в конечном итоге эксперименты проводятся в реальном мире и их результаты связаны с поведением реальных устройств. Как следствие, можно уравновесить взаимоотношения физика-теоретика и физика-экспериментатора путем введения уровня экспериментальной физики. Речь идет про область применения теории, которая определяется проведенными экспериментами и установившейся метрологией. Например, успешность введения стандартизации измерений физической величины свидетельствует о справедливости соответствующей теории физики в области выполненных измерений.

В философии науки говорится о несоизмеримости теорий после научной революции и смены парадигмы. Приведу несколько примеров, которые показывают, что в случае сложившейся метрологии можно говорить о сохранении проведенных измерений даже после научной революции. В определенном смысле уровень экспериментальной физики остается инвариантным по отношению к научным революциям.

Начну с общих соображений, связанных с горением свечи за рамками физики. В 18-ом веке господствовала теория флогистона, которая была заменена кислородной теорией горения Лавуазье в последней четверти 18-ого века. Налицо смена парадигмы, но нельзя сказать, что сторонники разных теорий по разному видели горящую свечу. Обе стороны давали разные объяснения проводимым опытам, но противоборствующие стороны соглашались с описанием этих опытов. Таким образом, сторонники разных теорий были в состоянии вести общее обсуждение по поводу наблюдаемых явлений и они были способны перевести объяснение из одной теории в альтернативную теорию.

При переходе к физике начну рассмотрение с калориметрии, которая появилась в рамках теории теплорода. Появление термодинамики (взаимные превращения теплоты и работы, тепловой эквивалент работы) привело к отмене теории теплорода [10, 11]. Смена теории физики привела к пересмотру концептуальной модели проводимых экспериментов. Это позволило объяснить эксперименты по адиабатическому расширению газов (например, эксперимент Гей-Люссака 1807 года [10]), которым в рамках теории теплорода нельзя было дать удовлетворительного объяснения.

С другой стороны, большинство калориметрических экспериментов проводилось при постоянном давлении и в этом случае изменился только смысл измеряемых величин. Поскольку теплота перестала быть функцией состояния, результаты измерения в калориметре при постоянном давлении стали относиться к изменению энтальпии. Сама процедура эксперимента осталась такой же и перенос предыдущих измерений свелся к переименованию полученных результатов.

Пример с калориметрией показывает возможность отделения экспериментальной физики от теоретической. Теория придает смысл проводимым экспериментам, но возможны эксперименты, которые выходят за рамки ожиданий теории. Так, эксперименты по адиабатическому расширению газов в случае теории теплорода свидетельствовали о необходимости расширения или замены исходной теории. В то же время старые численные значения проведенных измерений получают просто новую интерпретацию в рамках новой теории.

В следующем разделе рассмотрено развитие молекулярно-кинетической теории. Точно также в данном случае можно отделить уровень экспериментальной физики от теоретической физики. В этом разделе я только приведу в пример развитие спектроскопии в 19-м веке [12]. Концептуальная модель измерения спектра сложилась из простых представлений о взаимодействии света и электромагнитного излучения с веществом. Теории физики 19-го века, включая молекулярно-кинетическую теорию, не могли дать объяснения проводимым измерениям в спектроскопии. Объяснение результатов спектроскопии (серия Бальмера и формула Ридберга) оказалось возможным только при разработке квантовой механике. Следует отметить, что одной из целей развития квантовой механики был именно поиск объяснения спектроскопических экспериментов 19-го века [13]. Это еще раз подчеркивает относительную независимость уровня экспериментальной физики от развития теории физики.

В заключение еще один пример с парадигмальным примером научной революции: переходом от гео- к гелиоцентрической системе. Этот переход не затронул существующие измерительные приборы и данные измерений положения планет. Сторонники гелиоцентрической системы использовали результаты измерений, полученные предыдущими поколениями астрономов. Таким образом, радикальная смена картины мира не затронула измерения положения планет, сделанные в предыдущей картине мира. Старые измерения просто получили новый смысл. Аналогичная ситуация произошла при замене законов Кеплера на законы Ньютона. Введение взаимного притяжения между планетами формально приводит к тому, что орбита Марса перестает быть эллиптической, но разница попадает в пределы погрешности измерений (см. цитату Пуанкаре [9] в предыдущем разделе).

Приведенные примеры показывают справедливость введения уровня экспериментальной физики. В случае установившейся метрологии предсказания новых теорий физики должны согласовываться со старыми измерениями в пределах погрешности измерений. Также история физики приводит примеры экспериментов, результаты которых выходили за рамки ожиданий существующих теорий и тем самым свидетельствовали о необходимости расширения или замены существующих теорий.

Исследовательская программа как экстраполяция

Теория физики придает смысл проводимым экспериментам, а экспериментальная физика задает текущую область применения теории физики. В то же время теории физики придается универсальность и считается, что она выполняется во всех случаях. Такой шаг принадлежит нормальному развитию физики и в дальнейшем рассмотрении он назван экстраполяционизмом. Имре Лакатос ввел термин исследовательская программа. С представленной точки зрения исследовательскую программу в физике можно трактовать в виде экстраполяционизма.

Теория физики задает общую картину и тем самым служит источником идей для постановки новых экспериментов. Выполненные новые эксперименты расширяют область применения теории или ведут к необходимости пересмотра определенных положений. Параллельно идет развитие метрологии и новых технологий, что приводит к расширению возможностей постановки новых экспериментов и увеличения точности измерений.

Рассмотрим озвученную идею на примере развития молекулярно-кинетической теории в 19-м веке. После доказательства превращения теплоты в работу и работы в теплоту и уходе со сцены теории теплорода потребовалось новое объяснение теплоты. Для этого было предложено использовать законы классической механики на уровне атомов. Широкое распространение этой идеи началось с работ Рудольфа Клаузиуса [11, 14], хотя она озвучивалась ранее. В результате теория классической механики стала использоваться вне

области ее применения и термин экстраполяционизм хорошо передает суть становления молекулярно-кинетической теории.

Появление молекулярно-кинетической теории не повлияло на проводимые эксперименты, концептуальные модели которых остались в рамках механики сплошных сред. Целью молекулярно-кинетической теории стало объяснение результатов этих экспериментов исходя из атомно-молекулярных представлений. Таким образом, исследовательская программа состояла в развитии необходимого математического формализма, который позволил бы исходя из законов классической механики для движущихся атомов перейти к экспериментальным величинам на уровне сплошных сред.

Клаузиус показал, что отсутствие взаимодействия между атомами приводит к уравнению состояния идеального газа и что в этом случае температура газа связана со средней кинетической энергией атомов. Это оказалась важным теоретическим результатом для понимания отличия поведения реальных газов от уравнения состояния идеального газа. Вывод Клаузиуса удачно подошел к результатам экспериментов французского физика Анри Реньо, которые показывали отличия в уравнениях состояния реальных газов.

Джеймс Максвелл при использовании молекулярно-кинетических представлений показал, что вязкость идеального газа не зависит от плотности [14]. Это помогло правильной интерпретации проводимых экспериментов по измерению вязкости газов. Далее появилось представление о средней длине пробега, распределения атомов по скоростям и другие интересные результаты. Работы Людвиг Больцмана по поиску стрелы времени с использованием симметричных во времени уравнений классической механики привели к новому взгляду на термодинамическую энтропию [11, 14].

Появление теоремы о равномерном распределении энергии по степеням свободы привело к теоретическим значениям теплоемкостей газов. Однако между теоретическими и экспериментальными теплоемкостями было отличие, которое не удалось разрешить в рамках молекулярно-кинетической теории. Таким образом эксперименты по измерению теплоемкостей газов указывали на внутренние проблемы в базовых постулатах молекулярно-кинетической теории. В известной лекции лорда Кельвина в 1900 году это обстоятельство было отнесено ко второму облачку над классической физикой [15].

Развитие молекулярно-кинетической теории в 19-ом веке не привело к постановке новых экспериментов, специфичных для этой теории. Экспериментальная физика в 19-ом веке оставалась на уровне теории сплошных сред и поэтому среди физиков появились противники молекулярно-кинетической теории. Интересно отметить, что в 1883 году Эрнст Мах из общих соображений усомнился в универсальности законов классической механики (*Механика. Историко-критический очерк ее развития*) [16]:

'Взгляд, что механика должна рассматриваться как основа всех прочих отраслей физики и что все физические процессы должны быть объяснены механически, мы считаем предрассудком. Исторически более старое не обязательно должно оставаться основой для понимания позднее открытого. По мере того, как становятся известными и упорядочиваются новые факты, могут возникнуть и совершенно новые руководящие идеи. Но мы еще совершенно не знаем, какие из физических явлений простираются глубже всего, не являются ли механические как раз наиболее поверхностными или не идут ли все одинаково глубоко. И в самой механике мы ведь не рассматриваем самый древний из законов - закон рычага - как основу для всех прочих законов. Механический взгляд на природу представляется нам исторически понятной, простительной, возможно даже временно полезной, но в целом все же искусственной гипотезой.'

Дальнейшее развитие показало правоту Маха. Классическая механика оказалась непригодной для описания движения на уровне атомов и молекул и атомизм 19-ого века в виде молекулярно-кинетической теории уступил место квантовой механике. Тем не менее, следует признать успешность рассмотренной исследовательской программы. Молекулярно-кинетическая теория в конечном итоге привела к постановке новых экспериментов в 20-ом веке, например, связанных с броуновским движением [17] и сильно разреженными газами (длина свободного пробега больше характерного размера системы). Также введение вероятностей при разработке формализма молекулярно-кинетической теории подготовило физиков к появлению вероятностей в квантовой механике [14]. Но в любом случае дальнейший успех развития экспериментальных исследований оказался связанным с отменой основ, которые были использованы в ходе развития молекулярно-кинетической теории.

Разумный и радикальный экстраполяционизм

Развитие молекулярно-кинетической теории является хорошим примером для обсуждения взаимодействия между теоретической и экспериментальной физики. В основе лежит придание универсальности теории физики, в моей терминологии экстраполяционизм. В этом разделе вводится серая граница между разумным экстраполяционизмом, который обеспечивает развитие исследовательской программы, и радикальным экстраполяционизмом, который находится далеко за рамками экспериментальной физики. В качестве примера последнего можно взять демон Лапласа, поскольку обсуждение демона Лапласа в любом случае лежит вне экспериментальных исследований.

Предлагаемая граница является нечеткой, а также она меняется по ходу времени, по мере развития уровня экспериментальной техники, а также уровня проведения расчетов. Физика является количественной наукой и по мере усложнения рассматриваемых систем в экспериментальных исследованиях нельзя забывать про необходимость проведения требуемых расчетов. Это касается решения дифференциальных уравнений в частных производных в механике сплошных сред, решения уравнения Шрёдингера в квантовой химии и вычисления конфигурационного интеграла в статистической механике. В этом смысле развитие экспериментальной физики дополняется развитием численных эффективных алгоритмов для решения соответствующих уравнений, при этом последнее связано с развитием доступных вычислительных мощностей.

Таким образом, предложенную границу нельзя провести априори, но рассмотрение истории физики дает основания для апостериорного отличия. Важно отметить, что далеко не всякий экстраполяционизм в физике приводил к становлению успешно развивающейся исследовательской программы. Так, в 19-ом веке к неудавшимся исследовательским программам можно отнести молекулярную механику Лапласа и вихревую теорию атома (vortex atom theory) Кельвина. В книге датского историка Хелге Крага *'Высшие спекуляции: Величественные теории и неудачные революции в физике и космологии'* [18] приведено немало таких случаев из истории физики вплоть до нашего времени. Это ни в коем случае не означает, что экстраполяционизм бесполезен, поскольку другого способа развития физики не существует.

Тем не менее, это позволяет предложить апостериорную оценку предлагаемой границы. Необходимо следить за связью теоретических обещаний в той или иной исследовательской программе на развитие экспериментальных исследований, а также развития вычислительных возможностей. Отсутствия такой связи характеризует достижение определенных границ, когда теоретические обещания не удается воплотить в виде новых экспериментов.

С другой стороны, экстраполяционизм в ходе обсуждения может уйти настолько далеко от уровня экспериментальной физики, что само представление об исследовательской программе становится невозможным. Это соответствует рассмотрению записанных уравнений 'в принципе', когда проводимое обсуждение невозможно перевести на язык экспериментальных исследований. Например, рассмотрение демона Лапласа в любом варианте не может привести к постановке новых экспериментальных исследований.

Стрелы объяснений

Рассмотрение стрел объяснений со стороны физиков, обсуждающих теории физики и проводимые эксперименты, эквивалентно рассмотрению связей между концептуальными моделями для разных уровней организации. В этом случае речь идет про сравнение теорий на уровне математических формализмов. В рамках метафоры Эддингтона рассмотрение мира теней механики сплошных сред и мира теней статистической механике связывается с горением реальной свечи, но проводимое обсуждение ограничивается сравнением двух миров теней между собой.

В этой части рассмотрены несколько стрел объяснений. В первую очередь рассмотрена успешно развивающаяся исследовательская программа по определению свойств вещества из молекулярных постоянных. В данном случае уравнения механики сплошных сред остаются без изменения, но предполагается, что можно определить численные значения свойств веществ из атомно-молекулярных представлений. Успех статистической механики в значительной степени связан с развитием этого направления. В некоторых случаях удалось провести расчеты из первых принципов до конца с хорошей точностью, но в общем случае получается иерархия аппроксимаций, которая связывается с проводимыми экспериментальными исследованиями.

Следующая стрела объяснений связана с исследовательской программой вывода уравнений механики сплошных сред исходя из фундаментальных уравнений квантовой и статистической механики. В данном случае успех ограниченный, а также связь с экспериментальными исследованиями достаточно опосредованна.

Далее рассматриваются представления в научно-популярной литературе. В них предполагается, что в примере горения свечи весь процесс можно представить таким образом: система переходит из предыдущего состояния в последующее по фундаментальным законам физики. Такие представления переходят в качественные объяснения, в которых появление новых свойств на уровне механики сплошных сред связывается с понятием возникаемости. Рассмотрение возникаемости при сравнении математических формализмов теорий на разных уровнях организации показывает проблематичность использования этого понятия.

Расчет свойств вещества из молекулярных постоянных

В механике сплошных сред для каждого вещества требуется набор свойств, которые должны быть определены экспериментально. Теория задает концептуальную модель идеального эксперимента на базе которого проводятся практические измерения свойства вещества в реальных экспериментах. Далее экспериментально определенные свойства используются при решении практических задач. Статистическая механика предлагает путь расчета свойств вещества из молекулярных свойств и в этом смысле объясняет их связь с молекулярными постоянными. Это обстоятельство отмечалось в цитате Эйнштейна [2] во введении: появилась возможность унификации разных свойств вещества при использовании атомно-молекулярных представлений.

Изначально эта стрела объяснений появилась в молекулярно-кинетической теории, когда

были доказаны соотношения для перехода от потенциала взаимодействия между атомами к уравнению состояния вещества. Правда, в молекулярно-кинетической теории не было концептуальных моделей, которые можно было использовать для экспериментального исследования потенциалов взаимодействия. Предполагалось, что потенциалы взаимодействия должны быть известны, но теория была не в состоянии предложить эксперименты для их определения.

На практике потенциалы взаимодействия могли быть найдены только из значений макросвойств в ходе решения обратной задачи. Это привело к появлению соответствующей исследовательской программы. Выбиралась форма потенциалов взаимодействия с неизвестными параметрами, которые затем определялись в ходе решения обратной задачи с использованием экспериментальных значений макросвойств. Хорошее описание истории становления таких исследований дано в книге Роулинсона '*Сцепление. История изучения межмолекулярных сил*' [19].

Появление квантовой механики существенно поменяло ситуацию, поскольку в ней потенциал взаимодействия можно определить путем решения электронного уравнения Шрёдингера при использовании аппроксимации Борна-Оппенгеймера. Это вызвало волну энтузиазма физиков; например, в 1929 году Поль Дирак сказал [20]:

'Общая теория квантовой механики закончена. Решающие физические законы, необходимые для математической теории большей части физики и всей химии, известны полностью, и трудности заключаются в том, что точное приложение этих законов ведет к слишком сложным для решения уравнений.'

Экстраполяционизм в данном контексте означает переход к универсальности решения после первых успехов. Оптимизм физиков привел к появлению успешной исследовательской программы по развитию алгоритмов численного расчета электронного уравнения Шрёдингера и созданию вычислительной химии [21]. Разумный экстраполяционизм в этом случае связан с пониманием границы возможного, которая характеризует это направление.

Расчете свойств вещества включает два шага. Первый соответствует решению уравнения Шрёдингера и нахождению потенциала взаимодействия. Ему соответствуют экспериментальные исследования в спектроскопии, которые позволяют проверить надежность вычислений. Второй шаг связан с переходом от спектров и потенциала взаимодействия к свойствам веществ. В общем случае межмолекулярный потенциал взаимодействия приводит к появлению конфигурационного интеграла, а в случае многоатомного идеального газа достаточно только внутримолекулярного потенциала взаимодействия.

Для сравнительно простых систем удастся довести расчеты из первых принципов до точности, превышающей экспериментальную [22], но при переходе к более сложным веществам появляется иерархия аппроксимаций [23]. Расчеты из первых принципов заменяются полуэмпирическими методами, в которых в схему расчетов вносятся упрощения; как следствие появляются некоторые величины, определяемые из экспериментов. Далее идут расчеты молекулярной механики и молекулярной динамики с эмпирическим силовым полем, когда, условно говоря, по мере усложнения системы приближение подгоняется приближением. Вводимые аппроксимации сочетаются с проводимыми параллельно экспериментальными исследованиями, которые позволяют выбрать надлежащий уровень аппроксимации при решении той или иной задачи.

Вычисление конфигурационного интеграла в общем случае связано с использованием молекулярной динамики и метода Монте-Карло. В данном случае показательна статья 2019 года '*Термофизические свойства флюида Леннарда-Джонса: база данных и анализ данных*' [24]. Речь идет про гипотетическое вещество из точечных масс, между которыми действуют

силы взаимодействия, описываемые потенциалом Леннарда-Джонса. Эта мысленная модель полностью выражена математическими уравнения классической механики; тем самым ей должно соответствовать вполне определенное уравнение состояния газа и жидкости. В статье сравнены результаты многих расчетов для определения уравнения состояния и других термодинамических свойств:

'Взаимное согласие среди разных данных составляет приблизительно $\pm 1\%$ для давления пара, $\pm 0,2\%$ для плотности насыщенной жидкости, $\pm 1\%$ для плотности насыщенного пара и $\pm 0,75\%$ для энтальпии испарения – за исключением области, близкой к критической точке.'

Речь идет не о сравнении результатов проводимых экспериментов, а это сравнение между результатами расчетов разных групп. Таким образом это свидетельствует о точности имеющихся численных алгоритмов для сравнительно простой системы.

Таким образом, разумный экстраполяционизм заключается в проведении реальной границы возможностей расчета свойств вещества из молекулярных постоянных в настоящее время и реалистичных прогнозов развития. Без всякого сомнения со времени высказывания Дирака виден значительный прогресс в разработке алгоритмов численного решения и в развитии компьютерных мощностей. Означенная граница не остается на месте, но по-прежнему остается много открытых проблем. В первую очередь переход к более сложным системам невозможен в силу экспоненциального роста требований к вычислительным мощностям. Также следует отметить, что для ряда свойств, например, для констант скоростей, сами принципы расчета из первых принципов находится в зачаточном состоянии.

Теперь вернусь к утверждению Дирака в буквальном смысле слова. В этом случае утверждение о завершенности теории для абсолютно всех химических систем относится к радикальному экстраполяционизму. Для проверки этого утверждения требуется проведение расчетов и сравнения результатов с экспериментами. Без этого невозможно утверждать, что все проблемы связаны только с решением уравнений и недостатком вычислительных мощностей. Однако такая проверка в настоящее и в обозримое время в будущем невозможна. Другими словами, такое утверждение ведет к разрыву с экспериментальными исследованиями и никак не способствует их развитию.

Вывод уравнений механики сплошных сред из статистической механики

Математика позволяет доказать общие теоремы даже в тех случаях, когда решение уравнений невозможно, и таким образом появляются новые стрелы объяснений. Задачей становится вывод уравнений механики сплошных сред из фундаментальных теорий физики в общем виде. Интересно отметить, что подобная программа составляет суть шестой проблемы Гильберта [25]:

'С исследованиями по основаниям геометрии близко связана задача об аксиоматическом построении по этому же образцу тех физических дисциплин, в которых уже теперь математика играет выдающуюся роль: это в первую очередь теория вероятностей и механика.'

'Что касается аксиом теории вероятностей, то мне казалось бы желательным, чтобы параллельно с логическим обоснованием этой теории шло рука об руку строгое и удовлетворительное развитие метода средних значений в математической физике, в частности в кинетической теории газов.'

'Об основах механики имеются значительные исследования с точки зрения физической. Укажу на сочинения Маха, Герца, Больцмана и Фолькмана. При этом

было бы очень желательно, чтобы и математики взялись за исследование основ механики. На эту мысль наводит, например, книга Больцмана о принципах механики, в которой следовало бы строго математически обосновать и провести те изложенные в ней процессы предельного перехода, которые ведут от атомистического понимания к теории движения твердого тела.'

В равновесной статистической механике существует вывод основного уравнения классической термодинамики [26]. Он используется в том числе при доказательстве связи изменения энергии Гельмгольца со статистической суммой. Это позволяет говорить об определенной стреле объяснений термодинамики на базе статистической механики. Правда, этот вывод лежит за пределами идеалов Гильберта, поскольку он основан на использовании ряда дополнительных предположений, не содержащихся в исходных уравнениях классической механики: априорная равновероятность микросостояний в микроканоническом ансамбле, постулат о стреле времени и необходимость экспериментального определения численного значения константы Больцмана [27]. Более того этот вывод ограничен рассмотрением только работы расширения.

Ситуация существенно хуже в случае попыток доказательства неравенства Клаузиуса и рассмотрения стрелы времени в неравновесной статистической механике. Стрела объяснений на приемлемом уровне существует только при рассмотрении одноатомного идеального газа в статистическом обосновании Больцмана второго закона. Обобщение Гиббсом энтропии системы в общем случае сталкивается с особенностями теоремы Лиувилля, когда энтропия системы формально остается постоянной в ходе необратимого процесса. Попытка переноса идей Больцмана в Γ -пространство остается на уровне качественного рассмотрения [28].

Уравнения механики сплошных сред в отличие от термодинамики содержат время в явном виде и они несимметричны относительно времени. Практические работы в неравновесной статистической механике всегда содержат дополнительные постулаты, которые приводят к стреле времени. Вопрос стрелы времени в статистической механике обсуждается в течении длительного времени, но удовлетворительного решения не существует. Более того, обсуждение этот вопроса не затрагивает экспериментальные исследования.

Горение свечи на уровне фундаментальных уравнений физики

Определенные успехи статистической механики при расчетах свойств вещества из молекулярных постоянных приводят к радикальному экстраполяционизму в виде утверждений, что весь процесс горения свечи можно описать непосредственно на уровне фундаментальных теорий физики. В качестве примера возьму книгу Шона Кэрролла 'Вечность. В поисках окончательной теории времени' [29]. В ней говорится, что мир переходит из предыдущего состояния в последующее посредством законов физики. Пара цитат из книги:

'Физические законы можно представлять себе как машину, которая исходя из текущего состояния мира дает предсказание, каким мир станет мгновением позже'

'Это традиционный способ применения законов физики к реальному миру ... Расскажите о состоянии всего мира (скажем, о положении и скорости каждой частицы во Вселенной) в определенный момент времени, и законы физики услужливо сообщат, каким мир станет мгновение спустя.'

Кэрролл говорит о мире, но я ограничусь процессом горения свечи, для определенности в изолированной системе. Рассмотрим представление о локальном демоне Лапласа для описания такой системы.

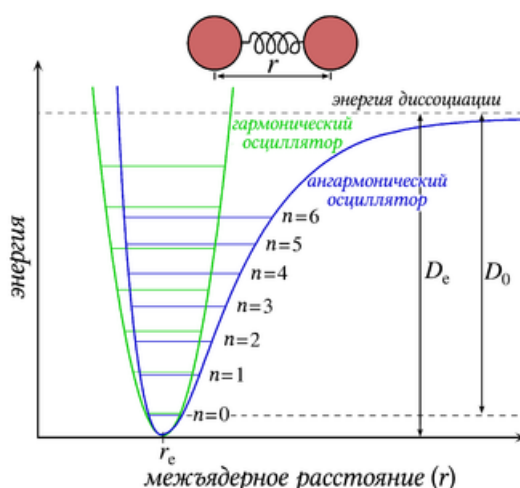
Развитие численных методов на базе конечных элементов и конечных объемов вместе с увеличением вычислительных мощностей привело к созданию программного обеспечения, которое делает доступным механику сплошных сред для инженеров. Процесс моделирования ведется в удобной среде графического интерфейса, в которой производится дискретизация трехмерной модели с использованием сеточных генераторов, а потом формируется расчетная задача. Полный расчет горящей свечи на этом уровне уже возможен, хотя инженеры предпочитают разбить задачу на части и таким образом найти более эффективные пути решения практических задач.

В таком варианте утверждение Кэрролла правильно передает суть дела, но Кэрролл имел в виду фундаментальные законы физики. В этом случае мы приходим к системе уравнений, которые в принципе нельзя решить, поскольку включение в рассмотрение такого числа частиц невысказуемо. Даже полная запись такой системы уравнений становится невозможной, не говоря о ее решении. Такого типа разговоры являются несомненным признаком радикального экстраполяционизма в духе обсуждения демона Лапласа. В такой форме связь с экспериментальными исследованиями полностью отсутствует.

Более того, возникают серьезные проблемы даже на понятийном уровне, поскольку становится непонятно, какие законы следует использовать для расчета перехода изолированной системы с горящей свечой из предыдущего состояния в последующее. Сказанное Кэрроллом относится к классической статистической механике, которая лежит в основе численных алгоритмов молекулярной динамики. Однако такой уровень аппроксимации слишком грубый. При горении свечи требуется включение в рассмотрение химических реакций, но концептуальную проблему можно показать на существенно более простой задаче - учете колебательных движений в многоатомных молекулах.

Как уже говорилось, в 19-м веке отличие экспериментальных теплоемкостей двухатомных молекул от предсказаний молекулярно-кинетической теории было одним из первых сигналов о неприменимости классической механики для описания движения молекул. Включение в рассмотрение колебательного движения приводило к завышенным предсказаниям теплоемкости двухатомного газа. При этом дальнейшие эксперименты показали, что теплоемкость зависит от температуры.

Рисунок из Википедии ([Спектроскопия в ближней инфракрасной области](#)) [30] помогает лучше понять проблему колебательного движения:



На нем представлена потенциальная энергия в зависимости от расстояния между атомами. Зеленой линией изображено приближение гармонического осциллятора, а синей — реальная кривая, когда увеличение расстояния приводит к диссоциации молекулы. Такую

потенциальную кривую можно рассчитать при решении электронного уравнения Шрёдингера. Колебательная энергия дискретна и разница между колебательными уровнями при обычной температуре превышает доступную тепловую энергию.

При повышении температуры происходит возбуждение достаточного количества колебательных уровней, что соответствует как бы включению колебательной степени свободы в классическом рассмотрении. При низких температурах все молекулы находятся практически на основном колебательном уровне и происходит как бы отключение колебательного движения. В этой связи в свое время появился термин 'замороженная степень свободы'. В молекуле существовали степени свободы, которые при низких температурах переставали быть активными. В классической механике такое поведение описать невозможно.

Непонятно, какие законы следует использовать, чтобы правильно учесть колебательные движения молекул при переходе всей системы из предыдущего состояния в последующее. Квантовая механика вводит в рассмотрение колебательную волновую функцию, но непонятно как можно сочетать колебательную волновую функцию с классической механикой, чтобы прийти к описанию Кэрролла. Переход на уровень эволюции волновой функции всей системы с горящей свечой делает ситуацию еще хуже, поскольку становится неясно, как в этом случае перейти к процессу горения как таковому. В этом одна из проблем квантовой механики, в ней отсутствует плавный переход от квантовомеханических явлений к классическим.

Как уже говорилось, на практике используется иерархия аппроксимаций, но в этом случае стройная картина Кэрролла нарушается. Для выбора правильного уровня аппроксимации требуется понимание конкретных условий в решении задачи. Возвращение к экспериментальным исследованиям возможно только в случае отказа от языка радикального экстраполяционизма.

Стрелы объяснений и возникаемость

Рассмотрим возникаемость (emergence) - про нее нередко идет речь при обсуждении разных уровней организации. Обычно разговор про возникаемость возникает в обсуждении на качественном уровне предыдущего раздела о переходе мира из предыдущего состояния в последующее по законам физики. В таком обсуждении под возникаемостью понимается возникновение макросвойств вещества из свойств атомов, но обсуждение этого вопроса ведется исключительно на уровне качественных рассуждений. Говорится, что свойства вещества должны каким-то образом возникнуть из движения атомов, а далее идет рассмотрение вопроса, может ли возникшее таким образом новое на более высоком уровне организации влиять на поведение более низкого уровня.

Ниже краткий взгляд на эту проблему в рамках позиции, принятой в этой статье. Представим себе физиков, обсуждающих математические формализмы теорий физики на макро- и микроуровне. В этом случае становится непонятным, как можно связать качественные рассуждения возникаемости с теориями физики. Рассмотрим несколько примеров.

В настоящее время в философии химии идет обсуждение приближения Борна-Оппенгеймера как примера возникаемости в химии [31]. Идея в том, что химия основана на представлении о структуре молекул, которую невозможно найти до введения приближения Борна-Оппенгеймера. Такое обсуждение возникаемости структуры молекул вызывает много вопросов, поскольку утверждение 'приближение Борна-Оппенгеймера возникает' не выглядит осмысленным. В этом случае более правильно сказать, что отсутствует строгий переход от

уравнений фундаментальной физики к привычным в химии молекулярным структурам.

В первом разделе обсуждалась связь между свойствами вещества в механике сплошных сред и молекулярными постоянными. Обычно в таких расчетах используется приближение Борна-Оппенгеймера, но такая связь остается и без введения приближения Борна-Оппенгеймера. В этом случае значительно усложняется проведение расчетов и тем самым на практическом уровне в настоящее время это возможно только для крайне простых систем. Таким образом с такой точки зрения возникает опять типичный вопрос о пределе применимости исходных уравнений в ходе квантово-механических расчетов.

Аналогичным образом нельзя сказать, что направленность времени возникает при переходе от статистической механики к механике сплошных сред. Более правильное утверждение заключается в том, что определенные элементы механики сплошных сред не удастся найти в статистической механике без введения дополнительных предположений. Другими словами, не следует говорить, что стрела времени возникает при рассмотрении математических уравнений, более правильно говорить об ограниченности проведенных математических доказательств.

Точно также следует рассматривать появление температуры. В равновесной статистической механике есть эквивалент термодинамической температуры в виде параметра распределения канонического ансамбля Гиббса. В неравновесной статистической механике есть состояния, в которых температура отсутствует, но в этом случае говорится о процессах релаксации, которые приводят к установлению локального термического равновесия. Таким образом, температура устанавливается, а не возникает.

Обсуждение

Существуют интересные и полезные результаты, которые связывают теории физики в механике сплошных сред и на атомно-молекулярном уровне. Тем не менее, при современном развитии физики нельзя строго вывести уравнения механики сплошных сред из уравнений квантовой и статистической механики. Шестая проблема Гильберта остается нерешенной и таким образом невозможно сказать, что все принципиальные вопросы уже разрешены. Переход к утверждению, что эти проблемы разрешены в принципе, выводит обсуждение за рамки физики как естественной науки.

Предлагаемая терминология позволяет более четко охарактеризовать текущий статус обсуждений разных уровней организации в современной физике. Например, рассмотрение текущего статуса исследовательской программы определения макросвойств из молекулярных постоянных позволяет отделить разумный экстраполяционизм от радикального. Если обсуждение в конечном итоге приводит к развитию и расширению экспериментальных или вычислительных возможностей, то оно принадлежит разумному экстраполяционизму в ходе развития текущей исследовательской программы. В противном случае осуществляется переход к радикальному экстраполяционизму, что далее выводит обсуждение на ту или иную философскую позицию. Такие обсуждения также полезны, но в этом случае следует признать разрыв с экспериментальной физикой.

Предлагаемая граница между разумным и радикальным экстраполяционизмом не является абсолютной, поскольку она сдвигается по ходу времени. Тем не менее, такое разделение позволяет более точно следить за развитием физики и наблюдать динамику этого развития - какие изменения произошли за последние десять, двадцать, тридцать и т.д. лет. Это в свою очередь позволяет делать более осмысленные прогнозы на последующее развитие. В противном случае обсуждение позиции, что квантовая механика уже включает в себя всю химию, сводится к неконструктивному диалогу ниже:

-За: 'Успехи квантовой механики ограничивает исключительно недостаток вычислительных мощностей.'

-Против: 'Успеете ли вы рассчитать реальную химическую систему до тепловой смерти вселенной?'

В заключение приведу пример, когда развитие технологий сделало возможным интересные эксперименты на мезоуровне [32]. В этом случае требуется явный учет влияния флуктуаций, что в свою очередь привело к созданию формализм стохастической термодинамики. Новые экспериментальные результаты и новый формализм дали толчок к обсуждению связи между механикой сплошных сред и статистической механикой. Таким образом экспериментальные исследования на мезоуровне оказали влияние на дальнейшее развитие статистической механики. Сказанное подчеркивает правильность введения уровня экспериментальной физики и необходимости включения в рассмотрение этого уровня при обсуждении философии физики.

Список литературы

1. М. Фарадей, *История свечи*, 2022. Первое издание на английском: M. Faraday, *The Chemical History of a Candle*, 1861.
2. А. Эйнштейн, *Физика и реальность* (1936), *Собрание научных трудов в четырех томах*, т. 4, с. 200 - 227, 1967.
3. A. S. Eddington, *The Nature of the Physical World*, 1928, *Introduction*.
4. С. Вайнберг, *Мечты об окончательной теории: Физика в поисках самых фундаментальных законов природы*, 2004. S. Weinberg, *Dreams of a Final Theory: The Scientist's Search for the Ultimate Laws of Nature*, 1993.
5. П. Дюгем, *Физическая теория, её цель и строение*. СПб., 1910. (Репринт: М.: КомКнига, 2007)
6. В. С. van Fraassen, *Scientific Representation: Paradoxes of Perspective*, 2008, Part II: *Windows, Engines, and Measurement*.
7. Е. Б. Рудный, *Проблема координации: Температура как физическая величина*, 2025, PREPRINTS.RU. [doi:10.24108/preprints-3113833](https://doi.org/10.24108/preprints-3113833)
8. Е. Б. Рудный, *Проблема координации: Энтропия как физическая величина в классической термодинамике*, 2025, PREPRINTS.RU. [doi:10.24108/preprints-3113966](https://doi.org/10.24108/preprints-3113966)
9. А. Пуанкаре, *Наука и гипотеза*, в кн. А. Пуанкаре, *О науке*, 1983.
10. И. Р. Кричевский, *Понятие и основы термодинамики*, 1970.
11. Я. М. Гельфер, *История и методология термодинамики и статистической физики*, 2-е изд., 1981.
12. П. С. Кудрявцев, *История физики*, т. 1, *От древности до Менделеева*, 1956.
13. T. Arabatzis, *Representing Electrons*, 2005.
14. S. Brush, *The Kind of Motion We Call Heat*, 1976.
15. Lord Kelvin, *Nineteenth century clouds over the dynamical theory of heat and light*. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science 2, no. 7 (1901): 1-40.
16. Э. Мах, *Механика. Историко-критический очерк ее развития*, 2000. Перевод с

- шестого издания Е. Mach, *Die Mechanik in ihrer Entwicklung historisch-kritisch dargestellt*, 1908. Первое издание, 1883.
17. G. E. Smith, R. Seth, *Brownian Motion and Molecular Reality*, 2020.
 18. H. Kragh, *Higher Speculations: Grand Theories and Failed Revolutions in Physics and Cosmology*, 2011.
 19. J. S. Rowlinson, *Cohesion. Scientific History of Intermolecular Forces*, 2002.
 20. А. А. Печенкин, *Взаимодействие физики и химии: редукционизм и самоорганизация*, 2022.
 21. S. Kampouridis, *Bytes as Test Tubes: The Emergence of Computational Quantum Chemistry*, PhD dissertation, 2022.
 22. G. Garberoglio, C. Gaiser, R. M. Gaviolo et al. *Ab initio calculation of fluid properties for precision metrology*. Journal of Physical and Chemical Reference Data 52, no. 3 (2023).
 23. A. R. Leach, *Molecular Modelling: Principles and Applications*, 2009.
 24. S. Stephan, M. Thol, J. Vrabec, H. Hasse. *Thermophysical properties of the Lennard-Jones fluid: Database and data assessment*. Journal of chemical information and modeling 59, no. 10 (2019): 4248-4265.
 25. Д. Гильберт, *Избранные труды*. Т. II. 1998. *Математические проблемы* (1901). 6. *Математическое изложение аксиом физики*. с. 415-416.
 26. А. Я. Борщевский, *Физическая химия, Том 2, Статистическая термодинамика*, 2023.
 27. В. В. Нестеренко. *О роли ансамблей Гиббса в статистической термодинамике*. Объединенный институт ядерных исследований. Дубна, 2008.
 28. Е. Б. Рудный, *Энтропия в статистической механике: Назад к Больцману*, 2026, PREPRINTS.RU. [doi:10.24108/preprints-3114372](https://doi.org/10.24108/preprints-3114372)
 29. Ш. Кэрролл, *Вечность. В поисках окончательной теории времени*, СПб.: Питер, 2016. S. Carroll, *From Eternity to Here: The Quest for the Ultimate Theory of Time*, 2010.
 30. Википедия. [Спектроскопия в ближней инфракрасной области](#). Раздел *Приближение гармонического осциллятора*, доступ 20.02.2026.
 31. *Philosophical Perspectives in Quantum Chemistry*, 2022.
 32. U. Seifert, *Stochastic thermodynamics, fluctuation theorems and molecular machines*. Rep. Prog. Phys. 2012. V. 75. 126001. P. 1-58.