

Komandiruotės į Didžiąją Britaniją nuo 1969 m. balandžio 15 d. iki gegužės 6 d. pagal TSRS mokslų akademijos ir Londono Karališkosios draugijos mokslininkų mainų programą

ATASKAITA

Visa komandiruotė buvo skirta vizitams, paskaitų skaitymui ir pokalbiams grupių teorijos atvaizdų ir atomo teorijos klausimais įvairiuose Didžiosios Britanijos universitetuose. Komandiruotės laiko neužteko įvykdyti visiems britų mokslininkų, besidominčių mano ir bendradarbių bei kitų TSRS grupių atliktais darbais, pageidavimams. Todėl negalėjau išsamiau susipažinti su darbais tų grupių, kurias aš aplankiau, kur skaičiau paskaitas bei diskutavau. Dėl perkrautos darbotvarkės teko mažinti paskaitų skaičių ir jas skaityti kartu dviejų gretimų vietovių mokslininkams. Tačiau tai nedaug ką keitė, nes paskaitų skaitymas vargina mažiau negu pokalbiai su žmonėmis, tegu ir tais pačiais klausimais. Mano pageidavimu į programą buvo papildomai įtrauktas vizitas į Braitoną, kur dirba plačiai žinomas profesorius J.Murrellis (Dž.Marelis): mane domino jo darbai.

Mano vizitai prasidėjo nuo *Oksfordo universiteto*, kur aš geriausiai susipažinau su šio universiteto Matematikos institutu, vadovaujamu prof. C.Coulsono (Č.Koulsonas) (būtent jis parodė didžiausią iniciatyvą pakviečiant mane į Didžiąją Britaniją). Šiame institute plėtojama atomų ir molekulių teorija. C.Coulsono grupės darbuotojai taiko išplėstinį metodą, tačiau jų rezultatai gerokai atsilieka nuo to, ką mes gauname Vilniuje, nes jie bendru pavidalu neatskiria radialiųjų kintamųjų nuo kampinių ir sukinių. Įdomus jų naudojamas staigaus nusileidimo metodas ieškant stacionarių būsenų.

Be Matematikos instituto, taip pat lankiausi Klarendono laboratorijoje, kurioje vykdomi fizikos tyrimai, tai – Oksfordo universiteto fizikos institutas. Čia dirba prof. Brincas (Brinkas), kuris įsivainavo judėjimo kiekio momento teorijos metodus, išplėtotus Vilniuje ir aprašytus mano ir mokinių monografijoje. Antrajame savo knygos „Judėjimo kiekio momento teorija“ leidime jis vykusiai, nors ir šiek tiek pakeistu pavidalu, išdėsto mūsų metodą. Toje pačioje laboratorijoje mūsų metodą naudoja ir dr. P.Sandersas (F.Sandersas) (su juo aš susipažinau Italijoje, kur mes abu buvome Tarptautinės vasaros mokyklos dėstytojai).

Aplankiau taip pat Oksfordo universiteto Fizinės chemijos laboratoriją, čia kalbėjau su dr. W.Richardsu (V.Ričardsas), dirbančiu atomų ir mažų molekulių teorijos srityje. Dabar jis ir trys jo mokiniai plėtoja sukinių ir orbitos sąveikos dviatomėse molekulėse skaičiavimo metodiką.

Antrasis mano vizito punktas buvo *Kembridžo universitetas*, kur aš geriausiai susipažinau su Chemijos laboratorijos fizikų teoretikų grupės, vadovaujamos dr. S.Boyso (S.Boisas), darbais. Šis mokslininkas yra plačiai žinomas mokslo pasaulyje. Jis savo mokslinę veiklą pradėjo prieš dvidešimt metų – tada jis išreiškė viso atomo banginę funkciją per įvairių konfigūracijų funkcijų, sudarytų iš vienelektronių analizinių banginių funkcijų, tiesinę kombinaciją. Šiuo metu jis plėtoja metodą, kuris artimas nepilno kintamųjų atskyrimo metodui; didelį indėlį į pastarojo teoriją įnešė akad. V.Foko mokykla, jai priklausau ir aš pats. Deja, dr. S.Boysas nežino nei V.Foko ir jo mokinių, nei mano ir mokinių darbų, nes jis visai nemoka rusų kalbos. Jis, kaip ir V.Fokas, banginę funkciją daugina iš simetriškos funkcijos, priklausančios nuo tarpelektronių atstumų, ir po to sprendžia atitinkamą tikrinių verčių lygtį, naudodamasis įprastinio skaičiavimo metodo banginių funkcijų baze. Skirtumas tik tas, jog kairiąją banginę funkciją jis daugina iš funkcijos, atvirkštinės operatoriaus dešinėje esančiai funkcijai. Tarybinių mokslininkų darbų nežinojimas gerokai sumenkina jo darbų svarbą. Tai lemia ir jo žmogiškosios ypatybės. Jis talentingas žmogus, bet individualistas ir nemėgstantis bendrauti su kitomis mokslininkų grupėmis bei dalytis patyrimu. Tačiau man jis buvo labai malonus ir aiškino savo darbus, nesistengdamas išgauti daugiau žinių iš manęs. Vis dėlto aš nurodžiau V.Foko ir mano tos srities darbus.

Po D.Hartree'o (D.Hartris), vieno iš Hartree'o ir Foko metodo kūrėjų, mirties atomo teorijos darbai Kembridžo universitete prigeso, o Longet-Higginsui (Longetas-Higinsas) išvykus į Edinburgą dirbti kibernetikos srityje, tas pat ištiko ir molekulių teoriją. Mano prašymu lankymosi Kembridže programa buvo papildyta, kad aš galėčiau susitikti ir pasišnekėti su dr. Berta Jeffreys-S.Swirles (Berta Džefris-S.Svelz) – prof. D.Hartree'o senų laikų bendradarbe. Ji man papasakojo apie kai kurias D.Hartree'o mirties aplinkybes ir suteikė daug žinių apie jo asmeninį gyvenimą ir mokslinę veiklą. Pokalbyje dalyvavo ir jos vyras Haroldas Jeffreysas (Haroldas Džefrisas) – jis kartu su žmona parašė plačiai žinomą knygą „Matematinės fizikos metodai“, kuri yra verčiama ir į rusų kalbą ir bus išleista trimis tomiais.

Glazgo universitete aš aplankiau chemijos laboratorijas, kuriose atomo teorijos darbus vykdė dr. G.Doggettas (Dž.Dogetas) ir dr. B.Websteris (B.Vebsteris). Pirmasis turi didelį patyrimą ir vadovauja visai, nors ir negausiai grupei. Jos pagrindinė darbo kryptis – geminalių metodo taikymas lengviesiems atomams ir mažoms molekulėms. Visos sistemos banginę funkciją jie išreiškia geminalių tiesine kombinacija. Tos geminalės savo ruožtu išreiškiamos dviejų eksponentinių funkcijų tiesine kombinacija, kurios koeficientai surandami naudojantis variaciniu principu. Šiame metode vargu ar galima rasti naujų idėjų, tai tik naujas būdas eksponentinių funkcijų tiesi-

nėms kombinacijoms sudaryti. Gal taip įmanoma pagreitinti konvergenciją, tačiau kol kas anksti daryti konkrečias išvadas, nes išsamių skaičiavimų jie patys dar nėra atlikę. Taip pat šiose laboratorijose naudojantis C.Froese Fischer (Š.Frizo Fišer) (Kanada) programa, perrašyta elektroninės mašinos kalba, Hartre'o ir Foko metodu gaunamos banginės funkcijos, kurios naudojamos molekuliniais skaičiavimams.

Edinburgo universitete aš aplankiau Matematinės fizikos institutą, kuriam vadovauja prof. N.Kemmeris (N.Kemeris). Jis moka rusų kalbą ir yra išvertęs keletą knygų iš rusų kalbos į anglų. Institute kabo buvusio Kijevo universiteto profesoriaus M.Avenariaus (M.Avenarijus) (mirusio 1895 m.) portretas. Jis susirašinėjo mokslo klausimais su prof. Tirtu (Tetas), šio instituto direktoriumi. Avenarius yra prof. N.Kemmerio prosenelis iš motinos pusės. N.Kemmeris – žinomas elementariųjų dalelių teorijos specialistas. Jis pirmasis XX a. penktajame dešimtmetyje pritaikė sukiniio formalizmą izosukiniui aprašyti. Šiame institute atomai ir molekulės nėra tiriami.

Jorko universitete aš aplankiau Matematikos ir Chemijos skyrius. Atomo teorija yra plėtojama Matematikos skyriuje, kuriam vadovauja dr. R.Crossley (R.Kroslis). Su juo aš susipažinau 1967 m. Tarptautinėje vasaros mokykloje Italijoje, ten jis buvo mano klausytojas. Jis taiko judėjimo kiekio momento teorijos metodus, išdėstytus knygoje „Judėjimo kiekio momento teorijos matematinis aparatas“ [96], kurią aš parašiau kartu su J.Levinsonu ir V.Vanagu (ji išversta į anglų kalbą 1962 m.). R.Crossley'o darbų pagrindinė kryptis – perturbacijos teorijos taikymas atomams ir molekulėms. Jis taip pat atlieka ir šuolių tikimybių skaičiavimus. Chemijos skyriuje vykdomi kvantinės chemijos darbai: plėtojama mažų molekulių teorija. Pastaruoju metu daugiausia dėmesio skiriama dr. S.Boyso (Kembrižas) naudojamiems metodams, apie kuriuos jau buvo rašyta.

Šefildo universitete aš susipažinau su Chemijos skyriumi, kurio darbai sutelkti atomų ir molekulių teorijos srityje. Šiems tyrimams vadovauja žinomas specialistas prof. R.McWeeny (R.Makvinis), kvantinės chemijos monografijos autorius (ją netrukus išleis „Academic Press“). Knygą jis parašė kartu su savo mokiniu B.Sutcliffe'u (B.Satklifas), kuris dabar dirba Jorko universitete ir vadovauja kvantinės chemijos darbams šio universiteto Chemijos skyriuje. Minėtame Šefildo universiteto skyriuje atomo teoriją plėtoja Cheesholmo (Čyzholmas) grupė, ji apibendrina Hylleraaso (Hilrosas) metodą, naudodama geminales. Cheesholmas nežino tos srities Leningrado ir Vilniaus fizikų teoretikų darbų, kas gerokai sumenkina jo tyrimų vertę. Tai pasakyti na tiek apie jį, tiek apie S.Boysą ir B.Sutcliffe'ą iš Jorko.

Notingemo universitete teko būti Matematikos institute, kuriame vykdomi kai kurie teorinės fizikos darbai. Jie gerokai išsklaidyti: vienas žmogus daro viena, kitas

– kita. Atomo teorijos srityje dr. C. Laughlinas (Č. Loflinas) tiria sužadinto helio atomo autojonizaciją, taikydamas daugiakonfigūracinį artutinumą. Dr. Reesas (Risas) nagrinėja trūcias radialiausias bangines funkcijas, o jo bendradarbiai domisi įvairiais kitais klausimais.

Londone aš lankiausi *Londono universiteto koledžo* Fizikos skyriuje. Čia atomo fiziką plėtoja prof. M. Seatonas (M. Sitonas) grupė. Ji daugiausia dėmesio skiria svarbiems astrofizikoje atomams ir jonams, turintiems nedaug elektronų: skaičiuojami tokių atomų ir jonų spektrai bei elektronų sklaida atomais. Taikomas konfigūracijų superpozicijos metodas, banginės funkcijos skaičiuojamos naudojant C. Froese Fischer programą FORTRAN kalba, yra galinga skaičiavimo mašina IBM. Tačiau teoriniu požiūriu jų metodas yra pasenęs, nes jie naudoja determinantines viso atomo bangines funkcijas. O tai įmanoma tik turint galingą mašiną su 128 000 ląstelių atmintimi.

Taip pat lankiausi *Londono universiteto Imperiškajame koledže*, kur vykdomi labai platūs ir aukšto lygio eksperimentinės spektroskopijos darbai, tačiau teorinė grupė maža. Ji atlieka įdomius darbus, aiškindama kvadratinio Zeemano (Zemanas) efekto ypatybes. Tai interpretuojama optinio elektrono orbitinių kvantinių skaičių susimaišymu, kai pagrindinio kvantinio skaičiaus vertė yra tarp 30 ir 40. Grupės darbuotojai yra gavę rezultatų ir tirdami dvielektronus šuolius, bet nėra jų paaiškinę teoriškai; mūsų išplėtos tokių šuolių teorijos nežino. Laboratorija turi daug prietaisų, nes juos remia Atominės energijos komisija.

Braitono universitete aplankiau Chemijos skyrių, kurio dekanas yra prof. J. Murrellis (jo knyga „Valentingumo teorija“ yra išversta į rusų k.). Jis yra pripažintas molekulių teorijos specialistas, plačiai žinomos knygos „Organinių molekulių elektroninių spektrų teorija“ autorius. Šiame skyriuje atomo teorijos darbų atliekama mažai. Čia atsižvelgiama į koreliacijas išreiškiant radialiąją orbitalę tiesine orbitalių kombinacija. Tai atitinka kai kurių konfigūracijų sumaišymą.

Bristolio universitete aš viešėjau Chemijos mokykloje (atitinkančioje mūsų fakultetą). Teorinės chemijos grupei čia vadovauja prof. A. Buckingham (A. Bakingemas), žurnalo „Molecular Chemistry“ redaktorius. Čia atliekami darbai, naudojant neortogonaliausias radialiausias orbitales. Šios grupės naudojamas metodas panašus į mano ir bendradarbių išplėtotą atomams. Bristolyje sėkmingai nagrinėjama kvadrupolinė molekulių spinduliuotė. Darbai atliekami glaudžiai bendradarbiaujant su eksperimentininkais, kurie sukūrė originalią aparatūrą elektriniams kvadrupoliniams molekulių momentams matuoti.

Mančesterio universitete aplankiau Chemijos skyrių, vadovaujamą prof. W. Byers-Brown (V. Bajersas-Braunas), bei kalbėjau su prof. D. Cruickshanku (D. Kruk-

šenkas) ir prof. R.Sacku (R.Sekas) iš Salfordo universiteto. Pastarasis universitetas yra toje Mančesterio dalyje, kuri vadinama Salfordu. Profesorius D.Hartree ilgą laiką gyveno ir dirbo Mančesteryje. Deja, D.Hartree'o darbai čia nėra tęsiami. Netgi jo vardas nėra tinkamai pagerbtas: tarp auditorijų, pavadintų žymių pasaulio fizikų vardais, nėra jo vardo auditorijos. Prof. Sackas – vienintelis mokslininkas Mančesteryje, kurio darbai susiję su Hartree'o ir Foko suderintinio lauko metodo teorija ir taikymu. Deja, jo grupė maža ir pastaruoju metu nėra produktyvi.

Prieš trisdešimt metų man teko gana ilgai stažuotis Anglijoje. Lyginant dabartinę ir to meto mokslo padėtį matyti, jog dabar mokslui skiriamas gana didelis dėmesys. Tai ypač pastebima pastaruoju metu. Čia mokslo raida glaudžiai susijusi su universitetų raida. Pastarąjį dešimtmetį buvo organizuota daug naujų universitetų, kaip antai: Sasekso (Braitonas), Kenterberio, Jorko, Stirlingo, Notingemo, Salfordo ir kiti. Tų universitetų miesteliai pastatyti ir statomi pagal paskutinį technikos žodį. Laboratorijos gerai aprūpintos, o svarbiausia, yra gero lygio skaičiavimo technika: universitetuose veikia galingos savo šalies ar JAV gamybos skaičiavimo mašinos. Yra daug doktorantų, dauguma baigusiujų doktorantūrą lieka dirbti „postdokais“. Tačiau pastaraisiais metais pastebimas mokslo darbuotojų perteklius. Į vieną vakansinę mokslinio pedagoginio personalo vietą kartais pretenduoja dešimtys žmonių.

Universitetuose dėstytojai ir studentai nėra perkrauti paskaitomis ir kitais užsiėmimais. Pirmaisiais mokslo metais studentai turi ne didesnę kaip dvidešimties valandų per savaitę krūvį (kartu su laboratorine praktika), o personalas – ne didesnę kaip dešimties valandų, o dažnai, ypač žymūs profesoriai, – dar mažiau. Todėl studentams lieka daug laiko savarankiškam darbui, o personalui – moklinei veiklai. Vis dėlto pastebima nepakankama darbų organizacija ir koordinavimas. Daugelis mokslo darbuotojų užsiima tuo, kas jiems patinka. Taip pat trūksta informacijos apie darbus, atliekamus Tarybų Sąjungoje. Todėl kartais tyrimai vykdomi naudojantis pasenusia metodika. Pavyzdžiui, Londono universitete atominiai skaičiavimai atliekami naudojantis Slaterio (Slateris) determinantų pavidalo banginėmis funkcijomis. Tą patį galima pasakyti apie Glazgo ir Šefildo universitetus.

Didžiojoje Britanijoje atomo teorijai skiriama daug dėmesio, nes ja yra suinteresuota Atominės energijos komisija. Antai Londono universiteto Imperiškojo koledžo atominės spektroskopijos laboratorija buvo aprūpinta nauja aparatūra iš Atominės energijos komisijos lėšų.

Universitetų darbuotojai palaiko glaudžius ryšius su JAV mokslininkais. Nepakankami ryšiai su TSRS. Pagrindinė priežastis – gana reti tarpusavio vizitai. Susirašinėjimas vyksta lėtai (laiškai oro paštu keliauja į Angliją 10–15 dienų ir tiek pat atgal).

Siekiant išsamiau susipažinti su Didžiosios Britanijos mokslininkų darbais ir metodais, siūlau pakviesti į Tarybų Sąjungą vykdant mainų programą šiuos mokslininkus:

- 1) Prof. R. McWeeny (Šefildo universitetas),
- 2) Prof. J. Murrellį (Sasekso universitetas),
- 3) Prof. J. Eliotą (Dž. Eliotas) (Sasekso universitetas),
- 4) Prof. A. Buckinghamą (Bristolio universitetas).

Organizuojant tarptautinius simpoziumus nereikėtų taip griežtai riboti kviečiamų užsienio mokslininkų skaičiaus. Pavyzdžiui, į Tarptautinį simpoziumą atomų ir molekulių elektroninių sluoksnių teorijos klausimais, kuris vyks Vilniuje 1969 m. birželio mėnesį, leista pakviesti tik dešimt mokslininkų iš kapitalistinių šalių, be to, dalis pakviestųjų neatvažiuos. Tą patį galima pasakyti ir apie mūsų mokslininkų dalyvavimą konferencijose užsienyje. Ten siunčiama mažai mūsų mokslininkų. Pavyzdžiui, aš pats esu pakviestas į Trečiąjį Kanados teorinės chemijos simpoziumą Toronte (1969 m. rugpjūtis). Ten bus išsamiai aptariamas daugiakonfigūracinio artutinumo metodas, kurį plėtodamas esu daug padaręs su savo bendradarbiais. Tačiau kelionė mažai tikėtina, nors visas išlaidas apmoka kviečiančioji šalis.

Apskritai kelionės į užsienį yra organizuojamos labai neoperatyviai. Pasirengimas kelionei, už kurią čia atsiskaitau, irgi buvo varginantis: daug susirašinėjimo, atidėliojimų, neaiškumų. Dėl man nežinomų priežasčių ji buvo perkelta iš kovo mėn. į balandžio mėn., nors Anglijos universitetuose manęs laukė kovo mėnesį. Tiesa, vėliau jie buvo informuoti apie pakeistą vizito laiką.

Susipažinę su užsienyje atliekamais darbais, mūsų mokslininkai gali sėkmingiau vykdyti mokslinius tyrimus, o susipažinimas su mūsų metodais užsienyje užtikrina mūsų prioritetą įvairiose mokslo srityse. Kadangi užsienyje mokslui skiriamas didelis dėmesys, moksliniai ryšiai yra labai naudingi.

LTSR MA akademikas Adolfas Jucys

Vilnius, 1969 m. gegužės mėn. 24 d.

Versta iš rusų k.

Rankraštis (rusų k.) yra LMA bibliotekos rankraščių skyriuje, A. Jucio fonde f. 285, b. 1732, l. 1–10