

### 3.6. Mokslo darbų apžvalga

Šioje apžvalgoje minimi straipsniai nurodomi arabiškais skaitmenimis pagal mokslinių straipsnių sąrašą, o monografijos ir leidiniai – romėniškais skaitmenimis pagal knygų sąrašą. Mažiau reikšmingi darbai visai neminimi. Laikomasi chronologinės tvarkos, bet tai derinama su bendru įvairiais metais paskelbtų straipsnių ciklų aptarimu.

Man pasisekė pradėti mokslinį darbą vadovaujamam prof. Adolfo Jucio, kuris buvo ne tik iškilus mokslininkas, bet ir reiklus pedagogas, mokslinės mokyklos kūrėjas, principingas ir atsidavęs Lietuvos mokslui žmogus.

Kaip rašiau „Nerimtoje autobiografijoje“, aš iš pradžių pasirinkau radiofizikos specializaciją. Tačiau mane labiau traukė bendresni, teoriniai fizikos klausimai, tad ketvirto kurso pradžioje radiofiziką pakeičiau į teorinę fiziką. Prof. Adolfas Jucys mane iš karto įjungė į savo grupės atliekamus mokslinius darbus.

Tuo metu profesorius, paskatintas jo su J. Levinsonu ir V. Vanagu parengtos monografijos „Judėjimo kiekio momento matematinis aparatas“ sėkmės (netrukus užsienyje buvo išleisti net du jos vertimai į anglų kalbą), toliau vykdė ambicingus planus plėtoti atomo teoriją. Remiantis toje monografijoje skelbtais rezultatais, taip pat kilminių koeficientų metodu, išvystytu G. Racah darbuose, buvo gaunamos įvairių atome veikiančių sąveikų operatorių matricinių elementų išraiškos. Mane priskyrė prie mokslų kandidatės Janinos Vizbaraitės, disertaciją rengiančio aspiranto Zenono Rudziko ir kitų artimiausių profesoriaus bendradarbių grupės, mes išvedinėjome elektrostatinės bei sukinio ir orbitos sąveikų operatorių matricinių elementų išraiškas [2, 4].

Kitas svarbus profesoriaus tikslas buvo pasitelkti atominių spektrų tyrimams kompiuterį tada vadintą elektronine skaičiavimo mašina. Didelėmis A. Jucio pastangomis buvo gauta ir MA Fizikos ir matematikos instituto Skaičiavimo centre 1962 m. pradėjo veikti didžioji elektroninė skaičiavimo mašina BESM-2; po ilgo modernizavimo ir derinimo, kuri atliko gamintojai, ji virto BESM-2M. Jucys ragino

savo grupės narius aktyviai naudotis šia naujove. Aš parašiau programą standartinių operatorių  $U^{(k)}$  ir  $V^{(kk)}$  matriciniams elementams skaičiuoti (šiais dydžiais išreiškiami įvairių atominių sąveikų operatorių matriciniai elementai). Tai leido patikrinti ir gerokai papildyti įvairiuose šaltiniuose skelbtas šių dydžių vertes [3]. Naudojantis minėta programa, buvo sudarytos „Lentelės atominių dydžių operatorių matriciniams elementams skaičiuoti“. Profesorius parašė išsamų įvadą, ir 1967 m. tas lenteles išspausdino TSRS MA Skaičiavimo centras [VI]. Po metų jų vertimą į anglų kalbą preprintu išleido JAV Nacionalinė techninės informacijos tarnyba, o 1972 m. pasirodė ir antrasis rusiškas leidimas.

Profesorius mėgo darbščius, jo užduotis greit ir stropiai vykdančius studentus, o aš buvau toks, tad dar studijų metais tapau vieno paskelbto ir trijų priimtų spaudai straipsnių bendraautoriu. Baigęs universitetą, buvau iš karto priimtas į Fizikos ir matematikos instituto aspirantūrą (vadovas A. Jucys). Jau turėjau tam tikrą įdirbį, tad profesorius man numatė nemažus uždavinius.

Man su J. Vizbaraite buvo pavesta gauti dviejų sudėtingiausių atominių sąveikų operatorių – „sukinio ir svetimios orbitos“ bei „sukinio ir sukinio“ – matricinių elementų išraiškas daugiaelektroniams atomams su atvirais elektronų sluoksniais. Tiesa, šių operatorių matriciniai elementai kai kurioms paprastesnėms konfigūracijoms jau buvo pateikti užsienio mokslininkų ir Jucio grupės darbuose, tarp jų ir straipsnyje [4]. Naudojome žinomą matematinį aparatą, reikėjo tik nuosekliai jį taikyti ir daugelį šių operatorių matricinių elementų narių užrašyti standartine forma. Pasinaudojus sąryšiais tarp radialiųjų integralų, pavyko įrodyti kai kurių narių panašumą ir šitaip supaprastinti išraiškas. Jos buvo publikuotos dviejuose straipsniuose [6, 7], o kiek kitokia forma pateiktos A. Jucio ir A. Savukyno monografijoje „Atomo teorijos matematiniai pagrindai“.

Tas teorinis darbas užtruko, nes tuo pačiu metu teko sudarinėti ir programas kompiuteriui. A. Jucys laikė reikalinga parengti straipsnį apie matricinių elementų skaičiavimą kompiuteriu [5]. Aišku, didesnių naujovių ten nebuvo, jį miniu tik kaip pirmą straipsnį, kurio tekstą

aš rašiau (po to jį taisė profesorius). O didžiąją aspirantūros laiko dalį teko skirti bendrai atomo banginių funkcijų skaičiavimo programai kurti. Naudojantis plačiausiai taikomu vienkonfigūraciniu artiniu, banginės funkcijos yra gaunamos sprendžiant integrodiferencialines Hartree ir Foko lygtis. Penktą ir šeštą XX a. dešimtmečius A. Jucio grupėje tokie skaičiavimai paprastesnėms konfigūracijoms būdavo atliekami aritmometru, ir darbas trukdavo mėnesiais. Vakarų šalyse, kur naudoti tobulesni kompiuteriai, jau buvo sukurtos kelios šių lygčių sprendimo programos. A. Jucys palaikė ryšius su vienos tokios programos<sup>1</sup> autore Charlotte Froese ir gavo iš jos šią programą, parašytą FORTRAN kalba. Deja, programa netiko BESM-2M, nes jai skirtas programos reikėjo rašyti tiesioginiais kodais, o operatyvioji atmintis tebuvo tik 10 kB. Be abejo, susipažinti su C. Froese taikomais algoritmais buvo naudinga, tačiau daugelį jų teko keisti, ieškoti literatūroje, bandyti įvairius variantus, kurie leistų gauti sprendinius netgi sunkiems atomams reikiamu tikslumu per realiai įmanomą laiką. Tai man pavyko padaryti – net urano atomo bangines funkcijas suskaičiuodavau per naktį, aišku, jei per tą laiką kompiuteris „nenušimudavo“. Programą iš karto pradėjo naudoti mano bendradarbiai geležies grupės atomų spektrams nagrinėti. Jos algoritmai trumpai aprašyti straipsnyje [9], vėliau išsamiau – kitame darbe [13]. Po keleto metų P. Bogdanovičius šią programą perrašė tobulesniam kompiuteriui BESM-4<sup>2</sup>.

Matricinių elementų išraiškos bei Hartree ir Foko lygčių sprendimas sudarė dvi skirtingas mano kandidatinių disertacijos dalis [IV]. Vis dėlto buvo galima teigti, kad jos papildo viena kitą, nes spektrams skaičiuoti reikalingos ir matricinių elementų išraiškos, ir banginės funkcijos.

Po disertacijos gynimo profesorius man patarė pagalvoti ir po savaitės ateiti su siūlymais, kuo norėčiau užsiimti toliau. Pasvarstęs, aš nutariau pamėginti tikslinti vienkonfigūracinį modelį atsisakant

<sup>1</sup> C. Froese. *Canad. J. Phys.* **41**, 1895 (1963).

<sup>2</sup> P. Bogdanovič, R. Karazija. *Algoritmy i programmy No 1, 23* (1971). GFAP No 000083 (rusų k.).

radialiosioms banginėms funkcijoms ortogonalumo reikalavimo (tai paprastoms konfigūracijoms buvo daryta užsienyje) arba vystyti reliatyvistinę atomo teoriją. Tačiau vadovas nepritarė nei vienam, nei kitam variantui. Jis teigė, kad neužtikrinant funkcijų ortogonalumo gali būti gaunami neteisingi lygčių sprendiniai (vėliau jis vis dėlto pakeitė tą nuomonę ir plėtojo neortogonalijų funkcijų metodą). O reliatyvistinė atomo teorija esanti reikalinga tik sunkesniems atomams, ji sudėtingesnė nei nereliatyvistinė teorija, be to, sėkmingai kuriama užsienyje.

Naudojantis mano sudaryta Hartree ir Foko lygčių sprendimo programa, buvo parengti du straipsniai, kuriuose nagrinėjome elektrinius dipolinius šuolius cinko jono izoelektronėje sekoje [10, 11]. Iš pradžių straipsnį pasiuntėme į sąjunginį žurnalą „Optika i spektroskopija“. Tačiau beveik tuo pačiu metu redakcija gavo ir trijų maskviečių straipsnį, kuriame jos tyrė tuos pačius spektrus. Tačiau dviejų grupių gauti rezultatai skyrėsi, tad abiejų straipsnių spausdinimas buvo sulaukytas. Nepavyko išsiaiškinti ir susitikus maskvietes konferencijoje, vis dėlto vėliau jos savo skaičiavimuose surado sisteminę klaidą. Mes jau įteikėme savo straipsnį į „Lietuvos fizikos rinkinį“, bet maskviečių iniciatyva buvo parengtas ir bendras straipsnis į „Optika i spektroskopija“, tiesa, jame pateikti tik kai kurie mūsų grupės gauti rezultatai.

Z. Rudzikas pasiūlė man prisidėti prie jo atliekamo reliatyvistinių pataisų energijai nagrinėjimo Breito ir Pauli artiniu. Deja, naudojantis neteisinga ankstesnio darbo<sup>3</sup> formule, pirmajame mūsų straipsnyje [14] įsivėlė sisteminė klaida, teko spausdinti klaidų ištaisymą. Antrajame darbe [17] buvo gautas vienas įdomesnis rezultatas: Rudzikiui pastebėjus, kad kontaktinio ir sukininio kontaktinio operatorių dvielektroniai matriciniai elementai skiriasi tik ženklų ir dvejetu, man pavyko įžvelgti, kad tas sąryšis yra bendro pobūdžio: vienkonfigūraciniu artiniu jis turi galioti bet kokioms elektronų konfigūracijoms.

Aš ieškojau ir savos tyrimų krypties. Vilniuje nebuvo nagrinėti lantanoidų atomai su atviru  $4f^N$  elektronų sluoksniu. Jų spektrai dar

<sup>3</sup> Z. Rudzikas. Liet. fiz. rink. **9**, 707 (1969).

tik pradėti tirti ir užsienyje. Be to, šių atomų  $4f^N$  sluoksnis yra vidinis, o ne išorinis, tad ir kietųjų kūnų spektrus galima interpretuoti naudojantis laisvojo atomo teorija. Tad pirmame mano iniciatyva atliktame darbe pateikiami kai kurių lantanoidų jonų energijos lygmenų skaičiavimo rezultatai, kurie lyginami su eksperimentiniais duomenimis [15].

1969 m. atsirado netikėta galimybė išvykti stažuotėn į užsienį. Paryžiaus priemiestyje Orsėje pradėjo veikti Europos atomų ir molekulių teorijos institutas, aprūpintas gerais kompiuteriais. Profesorius dėjo daug pastangų, kad TSRS dalyvautų šio centro veikloje, deja, jam nepavyko įveikti Maskvos nuostatos vengti glaudžių ryšių su Vakarų šalių mokslo centrais. Tad A. Jucys tarėsi su to centro direktoriumi Carlu Moseriu pasiūsti ten padirbėti bent vieną savo mokinį. Buvo numatyta mano 2,5 mėnesio stažuotė, C. Moseris sutiko padengti visas išlaidas Prancūzijoje. Aš tvarkiau dokumentus, gilinausi ne tik į atomų, bet ir į molekulių teoriją. Deja, leidimas išvykti nebuvo duotas.

Netrukus keli moksliniai kontaktai man padėjo susirasti savo tyrimų kryptį – atomo sąveiką su Röntgeno spinduliuote ir procesus vidiniuose atomo elektronų sluoksniuose.

Mūsų institute dirbo kietojo kūno teorijos specialistas J. Bata-rūnas. Jis konsultavo Vilniaus universiteto eksperimentatorius A. Širvaitį ir J. Jakimavičių, nagrinėjančius Röntgeno spindulių sklaidą puslaidininkiais. Norint interpretuoti eksperimentinius rezultatus, jiems buvo reikalingos Röntgeno spindulių sklaidos atomais funkcijos. Tad kreipėsi į mane, kaip į Hartree ir Foko lygčių sprendimo programos autorių (aišku, prieš tai siūlymą suderinę su A. Juciu). Man teko susipažinti su Röntgeno spindulių sklaidos teorija, netgi skaičiau keletą pranešimų darbo grupės seminare. Sklaidos funkcijai skaičiuoti buvo naudojama Hartree ir Wallerio lygtis. Pritaikęs neredukuotinių tenzorių metodą, aš užrašiau bendresnę išraišką, joje atomams su atvirais sluoksniais pasirodė papildomi nesferiniai nariai. Naudojantis tomis išraiškomis, buvo atlikti sklaidos funkcijų skaičiavimai, jų rezultatai atitiko eksperimentinius duomenis [18, 19]. Tačiau man nesinorėjo tęsti panašių skaičiavimų bei jų tikslinti atsižvelgiant į kietojo kūno efektus. Toliau tuos darbus vykdė kitas teoretikas – Z. Kupliauskis.

Panašiu metu profesorius pasiūlė man bendradarbiauti su Leningrado universiteto chemikais. Prof. Levas Makarovas pageidavo, kad Vilniaus teoretikai padėtų jo grupei interpretuoti Röntgeno emisijos linijų cheminių poslinkių eksperimentinius duomenis. Cheminis poslinkis yra Röntgeno linijos energijos pokytis junginyje palyginti su metalu. Kadangi tuo tikslu yra naudojamos diagraminės linijos, atitinkančios elektronų šuolius vidiniuose atomo sluoksniuose, tad nagrinėjant šiuos poslinkius galima taikyti laisvojo atomo modelį. Junginyje atomas, sudarydamas cheminius ryšius su kitais atomais, netenka visiškai ar tik dalinai kai kurių išorinių elektronų. Cheminio poslinkio vertės priklauso nuo pašalintų elektronų skaičiaus ir jų charakteristikų; taigi šis metodas leidžia tirti atomų cheminius ryšius junginiuose.

Norėdamas paskatinti tarpusavio bendradarbiavimą, L. Makarovas pasiūlė ūkiskaitinę sutartį; o patenkintas mūsų rezultatais, jis tokias sutartis organizavo šešerius metus iš eilės. Tad į darbą buvo įtraukti ir kiti skyriaus darbuotojai: D. Grabauskas, A. Kiseliovas, vėliau mano aspirantas A. Udris. Iš pradžių skaičiavimus vykdėme, naudodamiesi žinoma formule, aprašančia Röntgeno linijos energijos pokyčio priklausomybę nuo pašalinamų elektronų skaičiaus ir jų tipo. Vėliau, apibendrinus Koopmanso teoremą, man pavyko išvesti bendresnę formulę, kuri atsižvelgė ne tik į tiesinius, bet ir į kvadratinis atžvilgiu pašalinamų elektronų skaičių narius [24]. Ta formulė buvo plačiai naudojama L. Makarovo grupės darbuose. Vėliau ją užrašėme ir reliatyvistiniu artiniu [32]. Šia tema mūsų vienu ir kartu su eksperimentatoriais buvo paskelbti aštuoni straipsniai. Interpretuojant cheminių poslinkių duomenis, bendruose darbuose buvo tiriamos sunkiųjų elementų urano, torio ir neptūnio elektronų konfigūracijos įvairiuose jų junginiuose [28, 36, 39]. Neptūnio junginiams teko papildomai pasitelkti branduolinio gama rezonanso spektrų izomerinių poslinkių eksperimentinius ir teorinius rezultatus. Baigiant tą darbų ciklą, aš parašiau apžvalginį straipsnį [35], kuriame apibendrinau mūsų teorinius rezultatus, aptariau poslinkių dėsningumus. Kadangi straipsnyje buvo pateiktos plačios parametrų lentelės, jį teko deponuoti VINITI (Sąjunginis mokslinės informacijos institutas) duomenų bazėje.

Emisijos linijos energijos poslinkio, pašalinus išorinius atomo elektronus, tyrimai paskatino panagrinėti platesnę temą – įvairių atomo charakteristikų pokyčius susidarius vakansijoms elektronų sluoksniuose. Tie darbai atlikti kartu su aspirantu Arvydu Udriu. Nagrinėjome vienelektronių ir ryšio energijų, ekranavimo parametrų pokyčius atsiradus vakansijoms vidiniuose sluoksniuose [29, 33, 34]. Pasirodė, kad vakansijos įtaka yra didžiausia ne gretimų sluoksnių elektronams, o silpnai surištiems išoriniams elektronams; jų charakteristikos, pašalinus iš vidinio sluoksnio tik vieną elektroną, gali pasikeisti daugiau negu juos veikiančiam efektingam branduolio krūviui padidėjus dviem ar net trimis vienetais [33]. Kitas nustatytas įdomus dėsningumas:  $n$  elektrono energijos pokytis susidarius  $n^{l'-1}$  vakansijai yra apytiksliai lygus  $n^{l'}$  elektrono energijos pokyčiui susidarius  $n^{l-1}$  vakansijai [29].

Dar vienu postūmiu plėtoti Röntgeno spektrų teoriją tapo bendradarbiavimas su Leningrado universiteto Fizikos fakulteto profesore Tatjana Zimkina. Jos grupė eksperimentiškai užregistravo neįprastus lantanoidų metalų minkštosios Röntgeno spinduliuotės 4d sugerties spektrus: juose dominavo labai intensyvios smailės, pavadintos gigantiškais rezonansais. I. Glembockis, A. Karosienė ir kiti bendradarbiai atliko skaičiavimus, kurie rodė, kad šie spektrai gali būti paaiškinti itin stipriais diskretiniais šuoliais – fotosužadinimu iš uždaro  $4d^{10}$  sluoksnio į atvirą  $4f^N$  sluoksnį (deja, kiek anksčiau tokia šių spektrų interpretacija jau buvo pasiūlyta užsienyje). Mes su A. Karosiene ir A. Kiseliovu ėmėmės nagrinėti šio reiškinių dėsningumus. Dar E. Fermi, naudodamasis Thomaso ir Fermi potencialu, buvo parodęs, kad didėjant elemento numeriui, sužadinto 4f elektrono vidutinis atstumas nuo branduolio staiga labai sumažėja, šis elektronas tampa vidiniu, tada ir pradeda formuotis lantanoidų grupė<sup>4</sup>. Šį reiškinį, pavadintą elektrono banginės funkcijos kolapsu arba tiesiog elektrono kolapsu, aprašė E. Fermi mokinė M. Goepfert-Mayer, vėliau tyrė ir kiti mokslininkai. Jį lemia tai, kad efektinis potencialas, kuris įeina į elektrono radialiosios banginės funkcijos lygtį, susideda iš dviejų narių: tikrojo

<sup>4</sup> E. Fermi. In: *Quantentheorie und Chemie*. Leipzig: S. Hinzl-Verlag, 1928, S. 95.

potencialo ir teigiamo nario  $l(l+1)/2r^2$ , atitinkančio klasikinę išcentrinę energiją dėl  $nl$  elektrono judėjimo orbita. Tas narys tam tikrais atstumais nuo branduolio gali ne tik kompensuoti neigiamą potencialą, bet ir viršyti jį. Taigi efektinis potencialas elektronui su  $l \geq 2$  gali turėti dviejų duobių, atskirtų teigiamo barjero, pavidalą. Esant mažesniai atominiui numeriui, sužadinto elektrono banginė funkcija yra lokalizuota toli nuo branduolio sekloje išorinėje potencinėje duobėje. Tačiau esant didesniai branduolio krūviui vidinė duobė pagilėja, joje atsiranda žemesnis energijos lygmuo, tad įvyksta  $4f$  elektrono kolapsas – jo banginė funkcija (tiksliau – pagrindinis jos pūpsnis) „peršoka“ į šią duobę. Dėl to  $4f$  elektronas atsiranda pagrindinėje konfigūracijoje ir pradeda formuoti lantanoidų grupę. Vidinis atviras  $4f^N$  sluoksniu lemia panašias šių elementų savybes, o stipri  $4f$  ir  $4d$  elektronų banginių funkcijų sanklota – didelę  $4d - 4f$  sužadavimo tikimybę.

Mes nagrinėjome tokio potencinio barjero susidarymą bei kitimą izoelektronėje ir neutralių atomų sekose [21, 22]. Buvo parodyta, kad teigiamas barjeras mažėja ir greitai išnyksta didėjant atomo jonizacijos laipsniui, taigi jis yra būdingiausias neutraliems atomams. Tačiau neutraliuose lantanoidų atomuose, pildantis  $4f^N$  sluoksniui, barjero aukštis monotoniškai auga. Nagrinėdami kolapso reiškinį, mes su Antra Karosiene ir Sigitu Kuču atlikome visą darbų ciklą. Sigitas sugebėdavo suskaičiuoti banginę funkciją kritiniu, beveik kolapsuojančio elektrono, atveju. Mums pavyko nustatyti kai kurias naujas šio reiškinio savybes. Pasirodė, jog elektrono kolapsas gali labai stipriai priklausyti nuo atomo daugiaelektroninių kvantinių skaičių. Antai, esant tai pačiai cezio atomo  $4d^9 4f$  konfigūracijai,  $4f$  elektrono banginė funkcija  $^3P$  termui jau yra kolapsavusi, o  $^1P$  termui dar tebėra išorinėje potencinėje duobėje, vidutinis to elektrono atstumas nuo branduolio skiriasi daugiau nei eile [30]. Bendruose darbuose su Leningrado ir Tartu universiteto eksperimentoriais elektrono kolapso ir potencinio barjero efektais paaikškinome  $3d$  ir  $4d$  fotosužadavimo ir emisijos spektrų ypatumus [25, 42]. Pirmuosiuose jonuose, potenciniam barjerui sumažėjus ir tapus neigiamu, galimas ir dalinis kolapsas: ne tik  $4f$  elektrono, bet ir aukštesnių Rydbergo serijos  $nf$  elektronų banginės



funkcijos pasiskirsto abiejose duobėse. Taigi, atlikus skaičiavimus, pa-  
vyko paaiškinti esminį 4d fotoabsorbcijos spektro pasikeitimą Ba, Ba<sup>+</sup>,  
Ba<sup>2+</sup> sekoje<sup>5</sup>: vietoj vieno didelio maksimumo pasirodo siaurų inten-  
syvių linijų serija [49]. Ilgą laiką mokslo žurnaluose ir konferencijose  
vyko diskusija dėl gigantiškų fotoabsorbcijos rezonansų lantanoiduo-  
se prigimties: skaičiavimo rezultatai rodė, jog šiuose elementuose 4f  
elektronas yra kolapsavęs, todėl rezonansai turi atitikti fotosužadini-  
mą  $4d^{10}4f^N \rightarrow 4d^94f^{N+1}$ , tačiau iki gadolinio jie yra už šio sluoksnio jo-  
nizacijos ribos, vadinasi, turėtų atitikti fotojonizaciją. 4f elektronams  
naudodami ne vieną, o dvi radialiąsias bangines funkcijas, atitinkan-  
čias skirtingas elektrono sukinio projekcijas, mes pademonstravome,  
kad lantanoidų sekoje vienas 4f elektronas gali išlikti nekolapsavęs iki  
pusiau užpildyto 4f<sup>7</sup> sluoksnio, tad šiuose atomuose 4d<sup>10</sup> sluoksnio fo-  
tojonizacija gali nustelbti fotosužaditimą 4d–4f [57, 81].

Apibendrinamas įvairius kolapso ir potencinio barjero nulemtus  
reiškinius atomuose, parašiau du apžvalginius straipsnius. Pirmajame iš jų [44]  
išsamiai apžvelgiau šių tyrimų raidą, taip pat numačiau kai kurias tolesnių  
tyrimų perspektyvas, kaip antai stiprią potencinio barjero įtaką neigiamųjų  
jonų savybėms, nekolapsavusio f elektrono dalyvavimo cheminiame ryšyje  
galimybę, teigiamo potencinio barjero įtaką Auger šuoliams. Tai daugiausia  
cituotas mano straipsnis – apie 70 citavimų. Kitame straipsnyje, parengtame  
kviestinio pranešimo sąjunginėje konferencijoje pagrindu, buvo apžvelgti  
šios krypties mūsų grupės darbai [45]. Būtent tiriant kolapso reiškinį ir tuo  
pat metu cheminius poslinkius, vakansijos įtaką atomo savybėms bei kitus,  
daugiausia su procesais vidiniuose elektronų sluoksniuose susijusius klau-  
simus, ir susidarė grupė, į kurią įėjo A. Karosienė, S. Kučas, A. Udris ir  
J. Grudzinskas. Aišku, bendradarbiauome ir su kitais Atomo teorijos  
skyriaus darbuotojais.

Vienu metu domintis keliomis problemomis, ciklo darbai dažniausiai  
būdavo atliekami su pertraukomis, ilgesnį laikotarpį, nes, paaiškėjus  
naujomis teorijos plėtojimo galimybėms, atsiradus naujiems

<sup>5</sup> T. B. Lucatorto et al. Phys. Rev. Lett. 47, 1124 (1981).

įdomiems eksperimentams, vėl grįždavome prie anksčiau nagrinėtų klausimų. Be to, tyrimų ratas plėtėsi, apimdamas įvairius vidiniuose atomo elektronų sluoksniuose vykstančius procesus. Vienas iš tokių svarbių procesų, konkuruojančių su stipriai sužadinto atomo būsenos suirimu išspinduliuojant fotoną, yra Auger šuoliai, kurių metu atomas pereina į žemesnę būseną išspinduliuodamas elektroną. Tai yra atomo su vakansija vidiniame sluoksnyje autojonizacinis reiškinys. K. Siegbahnui 1954 m. išradus elektroninį spektrometrą ir jį sparčiai tobulinant, tapo įmanoma gauti aukšto tikslumo Auger spektrus. Jiems interpretuoti nebepakako dvielektronio modelio, atsižvelgiančio tik į šuolyje dalyvaujančius elektronus, tad atomams su atvirais sluoksniais iškilo Auger šuolių tikimybių išraiškų poreikis. Aš, pasinaudodamas turima panašių formulių išvedimo patirtimi, užrašiau tas išraiškas Auger šuoliams iš pradinės konfigūracijos su vidine vakansija ir vienu atviru sluoksniu [27]. Tiesa, keliais mėnesiais anksčiau „The Physical Review“ žurnalui buvo pateiktas E. McGuire'o straipsnis<sup>6</sup>, kuriame paskelbtos dar bendresnės išraiškos konfigūracijoms su keliais atvirais sluoksniais, tačiau jose buvo klaidų, tad naujai išspausdintos kitame darbe<sup>7</sup>, kuris į žurnalą atsiųstas jau vėliau nei mūsų straipsnis. Be to, mes pateikėme ir Auger šuolių pilnutinių tikimybių išraiškas.

Pašalinant elektroną iš vidinio sluoksnio, gana smarkiai paveikiami ir kiti elektronai, tad gali išlėkti ar būti sužadintas ir antrasis elektronas. Jeigu išmušamam elektronui suteikiama energija, gero kai didesnė už jo ryšio energiją, ir jis išlekia iš atomo dideliu greičiu, galima daryti prielaidą, kad per tą trumpą akimirką kitų elektronų banginės funkcijos nespėja pasikeisti. Tik po to, relaksuojant atomui į naują, jo konfigūraciją atitinkančią tikrinę būseną, įvyksta antrojo elektrono šuolis. Šis dvipakopis staigios perturbacijos modelis plačiai taikomas nagrinėjant atomo sužadintų būsenų sukūrimą fotonais ir elektronais. Mes gavome išraiškas atskirų lygmenų užpildymui tokių procesų metu [38].

<sup>6</sup> E. McGuire. Phys. Rev. A **10**, 32 (1974).

<sup>7</sup> E. McGuire. Phys. Rev. A **12**, 330 (1975).

Vidinių atomo sluoksnių elektronams yra gana svarbūs reliatyvistiniai efektai. Darbe [37] buvo parodyta, kad, skaičiuojant tokių elektronų ryšio energijas, Röntgeno bei Auger šuolių energijas, į reliatyvistines pataisas galima gana tiksliai atsižvelgti pirmuoju perturbacijų teorijos artiniu, naudojantis Hartree ir Foko banginėmis funkcijomis (Hartree, Foko ir Paulio artinys). Remiantis tuo darbu, šis artinys buvo plačiai taikytas tolesniuose mūsų, taip pat ir kitų grupių darbuose. Palyginę gautus ryšio energijų rezultatus su kitų skaičiavimų bei eksperimentų duomenimis, nustatėme tokį dėsningumą: koreliacinė pataisa vidiniams elektronams, esant duotam pagrindiniam kvantiniui skaičiui  $n$ , mažėja didėjant orbitiniam momentui  $l$ . Tai vėliau buvo paaiškinta autojonizacinio lygmens sąveika su jį supančiu kontinuumu netoli jo krašto<sup>8</sup>.

Darbų tematikos plėtrą skatino ir dalyvavimas sąjunginėse Röntgeno spektroskopijos konferencijose (išvykti į panašias konferencijas užsienyje, deja, nebuvo galimybių). Vienos tokios konferencijos metu užsimezgė bendradarbiavimas su Evelinos Verchovcevos grupe iš Ukrainos MA Žemųjų temperatūrų fizikos ir technikos instituto. Jie vykdė įslaptintus darbus, susijusius su kosminiais tyrimais, registravo inertinių dujų minkštosios Röntgeno spinduliuotės spektrus. Mes kaip tik turėjome skaičiavimo programas ir patyrimo panašiams sudėtingiems spektrams teoriškai nagrinėti. Pasirodė, kad šių spektrų struktūrai turi įtakos procesai, vykstantys jonizuojant atomus elektronų pluoštu ir po to persitvarkant elektronų sluoksniams per radiacinių bei Auger šuolių kaskadą. Mes su S. Kuču atlikome tokio  $L_{2,3}$  emisijos spektro skaičiavimą argonui [40]. Atsižvelgus ir į stiprų kai kurių konfigūracijų maišymąsi, pavyko gana tiksliai atvaizduoti visą eksperimentinio spektro struktūrą. O intensyviausieji šuoliai atitiko ne diagraminę liniją, kuri turėjo vyrauti spektre supaprastintos teorijos požiūriu, o jos satelitą. Šis darbas, atrodo, buvo pirmasis detalus teorinis kaskado tyrimas. Panašų skaičiavimą atlikome ir kriptono bei ksenono ultraminkštosios spinduliuotės spektrams, tačiau gerą

<sup>8</sup> M. H. Chen et al. Phys. Rev. A **31**, 556 (1985).

atitikimą eksperimentui pavyko pasiekti tik kai kuriuose šių spektrų intervaluose [51]. Tie visi rezultatai ir taikomi metodai buvo aprašyti apžvalginiam darbe [46]. Kaskadų atomuose tyrimai vėliau tapo viena iš pagrindinių mūsų grupės darbo krypčių.

Naudodami savas (daugiausia S. Kučo) skaičiavimo programas, taip pat universalią R. Cowano programą, mes turėjome geras galimybes skaičiuoti sudėtingus spektrus. Tačiau aš laikiausi nuostatos neužsiimti standartiniais skaičiavimais, bet ieškoti eksperimentinių rezultatų, pasižyminčių įdomiomis, netikėtomis savybėmis. Būtent jie dažnai suteikia postūmį teoriniams darbams, atveria naujas tyrimų perspektyvas. Be abejo, geriausia naujus probleminius rezultatus gauti „iš pirmų rankų“ – tiesiogiai iš eksperimentatorių per ryšius su jais. Tačiau sekant naują literatūrą ir turint tam tikrų pranašumų, palyginti su kitomis teoretikų grupėmis, irgi įmanoma aptikti įdomių neišspręstų klausimų. Mūsų pranašumai buvo daugiaelektronių atomų teorijos metodai, išplėtoti vilniečių darbuose, bet dar mažai taikyti Röntgeno ir Auger spektrų srityje, bei kai kurios originalios kompiuterių programos.

Mano dėmesį atkreipė prieš dešimtmetį užregistruoti aukšto tikslumo kriptono  $M_{4,5}NN$  ir ksenono  $N_{4,5}OO$  Auger spektrai, kuriuose pasireiškė stiprus konfigūracijų maišymasis. Tačiau tie spektrai buvo interpretuoti tik naudojantis vienkonfigūracinio artinio rezultatais ir empiriniais duomenimis. Mes su aspirante M. Bogdanovičiene šiems Auger šuoliams tirti pritaikėme konfigūracijų maišymosi artinį, tad, ypač ksenonui, patikslinome minėtų spektrų interpretaciją [43]. Antra vertus, šis darbas tapo pradžia vėliau išplėtoto darbų ciklo tiriant to paties komplekso konfigūracijų maišymąsi, vieną svarbiausių atomuose su vakansijomis.

Nagrinėjant konkrečius Röntgeno ir Auger spektrus, pavyko išžvelgti kai kurias naujas atomų simetrijos savybes. Pastebėję, kad sužadintoms  $n_1l^N n_2l^N$  konfigūracijoms, turinčioms du atvirus sluoksnius, besiskiriančius tik pagrindiniu kvantiniu skaičiumi, galimi dviejopi Hartree ir Foko lygčių sprendiniai, mes su P. Bogdanovičiumi pasiūlėme  $n_1l^N n_2l^N$  konfigūracijų būsenas klasifikuoti pagal jų kilmę

sekoje  $n_1 l^{N_1} n_2 l^{N_2} - n_1 l^{N_1+1} n_2 l^{N_2-1} - n_1 l^{N_1+2} n_2 l^{N_2-2} \dots$  [41]. Suvidurkinus  $n_1 l^{N_1} n_2 l^{N_2}$  konfigūracijos energiją pirmą kartą sekoje pasirodančių termų atžvilgiu, buvo gautas funkcionalas, kurį naudojant automatiškai užtikrinamas banginių funkcijų ortogonalumas žemiau esančių tos pačios simetrijos konfigūracijų funkcijoms. Taikant naują klasifikaciją, vienas iš pagrindinių energijos operatoriaus matricinių elementų tampa diagonalus, tad, antra vertus, jį diagonalizuojant įprastinių banginių funkcijų bazėje, galima gauti naują bazę. Remdamasis šiuo darbu, Julius Kaniauskas pritaikė elektronams izosukinio sąvoką ( $n_1 l$  ir  $n_2 l$  elektronai tarsi atitinka dvi nukleono rūšis – protoną ir neutroną), ir atomo teorijoje buvo išplėtotas izosukinio formalizmas<sup>9</sup>.

Skaičiuojant emisijos ar Auger spektrus, būtina atsižvelgti į konfigūracijų su vakansijomis lygmenų natūralųjį plotį. Juk tos stipriai sužadintos atomo būsenos greitai suyra, tad lygmenys turi didelį natūralųjį plotį. Jis priklauso nuo daugiaelektronių kvantinių skaičių, taigi kiekvienam lygmeniui reikia skaičiuoti visų suirimo kanalų indėlius. Tačiau pasirodė, kad kai kurioms konfigūracijoms lygmenų pločiai yra beveik vienodi visiems lygmenims. Pritaikius antrinio kvantavimo metodą, man pavyko teoriškai įrodyti, kad egzistuoja gana plati klasė konfigūracijų, kurioms daliniai ir net pilnutiniai lygmenų radiaciniai bei Auger pločiai pasižymi šia savybe [48]. Tai leidžia gerokai supaprastinti lygmenų pločių bei fluorescencijos našumų skaičiavimus.

Atomo fizikoje svarbų vaidmenį vaidina pagrindinis (žemiausios energijos) lygmuo, kurį įprastinėmis sąlygomis užima dauguma atomų. Būtent per šio lygmens energiją atome bei jone su vakansija yra išreiškiami kai kurie svarbūs fizikiniai ir cheminiai dydžiai. Anot Hundo taisyklės, kuri galioja daugeliui atomų su vienu atviru sluoksniu, pagrindinis lygmuo yra aukščiausiojo multipletiškumo, t. y. jo sukinytis turi didžiausią galimą vertę. Tuomet elektronų sluoksnį galima vienareikšmiškai išskirti į du pasluoksnius, kuriuose elektronų sukiniai yra orientuoti priešingomis kryptimis. Mes su J. Kaniausku, pasinaudoję šiuo modeliu, gavome ne tik pagrindinio lygmens, bet ir kitų

<sup>9</sup> Z. Rudzikas, J. Kaniauskas. *Izospin i kvazispin v teoratoma*. V.: Mokslas, 1984 (rusų k.).

aukščiausiojo multiplietiškumo bei su jais susijusių lygmenų energijų algebrines išraiškas [54]. O  $p^N$ ,  $d^N$  ir  $f^N$  sluoksnių visus pagrindinio lygmens kvantinius skaičius pavyko išreikšti per  $N$  ir orbitinį skaičių  $l$ . Taip pat buvo nustatyti kito ypatingo lygmens – aukščiausiojo – kvantiniai skaičiai bei energijos išraiška. O šio bei žemiausiojo lygmenų energijų skirtumas leidžia, neatliekant viso energijos spektro skaičiavimo, įvertinti jo plotį.

Devintojo dešimtmečio viduryje dar paskelbėme porą darbų, atskleidžiančių kai kuriuos konfigūracijų maišymosi atomuose dėsnin-gumus. Šiam koreliaciniam efektui įvertinti pasiūliau įvesti vidutinę charakteristiką – konfigūracijų maišymosi stiprį. Jis buvo pritaikytas geležies grupės atomų  $(s+d)^N$  konfigūracijų kompleksui tirti, parodyta, kad maišymasis sustiprėja esant vidinei vakansijai [52]. Nustatytos konfigūracijų, besiskiriančių vieno elektrono pagrindiniu kvantiniu skaičiumi, poros, kurioms įvairiais artiniais galioja Brillouino teorema (tarpkonfigūraciniai matriciniai elementai tampa lygūs nuliui) [58].

Taigi mums pavyko laiku įsijungti į besiformuojančią mokslo šaką, vadinamą vidinių atomo sluoksnių fizika (angl. *atomic inner-shell physics*). Greitą jos plėtrą lėmė nauji tos srities eksperimentiniai prietaisai (intensyvus Röntgeno spinduliuotės šaltinis – tam tikslui pritaikytas sinchrotronas, spektrometras su įgaubtuju kristalu bei elektroninis spektrometras ir kt.), skatino plazmos tyrimai, Röntgeno astronomijos atsiradimas, trumpabangių lazerių kūrimas. Pasirodė keli šiai krypciai skirtų straipsnių rinkiniai, bet monografijos nebuvo ne tik TSRS, bet ir užsienyje. Anksčiau minėtais darbais įgijęs patirties taikyti Vilniuje išvystytus atomų su atvirais sluoksniais teorijos metodus Röntgeno ir Auger spektrams interpretuoti, atsižvelgiant į jų specifiką, aš ryžausi rašyti „Įvadą į laisvųjų atomų Röntgeno ir elektroninių spektrų teoriją“. Knygai teko skirti porą intensyvaus darbo metų. Joje norėjosi pateikti išsamią apžvalgą, tad teko peržiūrėti šimtus darbų (literatūros sąrašė jų nurodyta per 300). Aišku, pristaciau ir svarbesnius mūsų rezultatus, bet jie užėmė tik nedidelę knygos dalį. O iš kitų šaltinių paimtas formules reikėjo išvesti iš naujo, tikrinti, vienodinti. Pirmuose keturiuose bendro pobūdžio skyriuose

išdėstyti atomo teorijos pagrindai, apžvelgti svarbesnieji koreliaciniai metodai, konfigūracijų su vakansijomis ypatumai, atomo sužadini-  
mo būdai. Tolesni šeši skyriai skirti įvairių spektrų daugiaelektronei  
teorijai: Röntgeno spinduliuotės sugerties, fotoelektroniams, būdin-  
giesiems emisijos, Auger spektrams, stabdomajai spinduliuotei, Rönt-  
geno spindulių sklaidai, taip pat linijų formai bei pločiui. Monografi-  
ją, parašytą rusų kalba, 1967 m. išleido „Mokslo“ leidykla tūkstančio  
egzempliorių tiražu [I]. Išsiuntus informaciją apie ją į įvairius TSRS  
mokslo centrus, visas tiražas (1000 egz.) buvo išplatintas greičiau nei  
per metus.

1988 m. mano knyga buvo pristatyta Maskvoje vykusioje Tarp-  
tautinėje knygų mugėje. Ten į ją atkreipė dėmesį žinoma JAV ir Angli-  
jos mokslinės literatūros leidykla „Plenum Press“. Ji pasirašė su Sąjun-  
gine autorių teisių agentūra (VAAP) ketinimų sutartį ją išleisti anglų  
kalba, o vėliau ir leidybinę sutartį; aš tik buvau informuotas apie re-  
zultatą. Deja, ši agentūra laiku nepateikė „Plenum Press“ jai reikalingų  
knygos egzempliorių. Apie tai gavęs žinią iš leidyklos, aš pradėjau jai  
tiesiogiai siųsti reikalingą medžiagą: iliustracijas, knygos pataisymus  
bei papildymus. Dar pusantrų metų truko knygos vertimas, tad tik  
1992 m. sulaukiau jos korektūrų. Deja knygą vertė ne atomo teorijos  
specialistas, o chemikas W.R. Welshas, jis ne visur suprato tekstą, var-  
tojo kai kuriuos atomo teorijoje neįprastus terminus. Taigi man teko  
daug taisyti, gal tai darydamas kartais nusizėngiau anglų kalbai. Ga-  
vusi tokias korektūras, leidykla sulaukė knygos spausdinimą, bet man  
apie tai nepranešė. Tuo tarpu leidyklos prospektuose ir žurnale „Phy-  
sics Today“ jau buvo paskelbta apie leidinį. „Plenum Press“ gavo jos  
užsakymų ir 1995 m. nutarė atnaujinti knygos spausdinimą. Manęs  
buvo paprašyta apsiriboti tik svarbiausiais taisymais, ir knyga išėjo,  
deja, prastokai išversta [III].

Devintasis dešimtmetis buvo pats kūrybingiausias mano moks-  
linės veiklos laikotarpis. Tada pradėjau ir naują straipsnių ciklą, kurį  
netrukus apibendrino antroji monografija. Nagrinėjant sudėtingus  
spektrus, patogų įvesti vidutines, arba bendrąsias, jų charakteristikas.  
Atomo fizikoje plačiai taikoma J. Slaterio gauta energijos lygmenų

spekro vidutinės energijos išraiška. Radiaciniams šuoliams tarp dviejų konfiguracijų lygmenų apibūdinti paranku naudoti pilnutinį linijų stiprį. Nagrinėdami Auger šuolius, mes gavome pilnutinės Auger šuolių tikimybės išraiškas [27], jas panaudojome atlikdami kaskadų skaičiavimus inertinių dujų atomuose [46]. Vėliau, kaip jau minėta, konfiguracijų maišymuisi apibūdinti buvo įvestas konfiguracijų maišymosi stipris [52]. Bendriems spektrų dėsningumams tirti, sudėtingiems spektrams modeliuoti patogu pasitelkti ir kitas bendrąsias charakteristikas (statistinius momentus ar jų kombinacijas): dispersiją, kuri apibūdina spektro plotį, asimetrijos ir eksceso koeficientus, kurie aprašo spektro asimetriškumą bei lygmenų ar linijų tankį jame. Padarius prielaidą, kad radialiosios banginės funkcijos nepriklauso nuo termo, o lygmenų užpildos yra proporcingos jų statistiniams svoriams (tai galioja, kai lygmenys yra apgyvendinami vykstant įvairiems procesams arba esant aukštai temperatūrai lokaliosios termodinaminės pusiausvyros sąlygomis), galima gauti algebrines bendrųjų charakteristikų išraiškas. Deja, tuo tikslu reikia sumuoti matricinius elementus, į kurių formules įeina kilminiai koeficientai, neturintys paprasto pavidalo. Esminis žingsnis šia kryptimi buvo žengtas C. Bauche-Arnoult, J. Bauche'o ir M. Klapischo straipsniuose, kuriuose pateiktos energijos lygmenų spektro dispersijos bei emisijos spektro vidutinės energijos (tam tikriems šuoliams) išraiškos, pasiūlytas emisijos spektro pokytis dėl dviejų konfiguracijų maišymosi<sup>10</sup>. Tie rezultatai buvo gauti naudojant antrinio kvantavimo vaizdavimą kartu su algebrinėmis išraiškomis (be kilminių koeficientų) paprastoms konfiguracijoms. Šiuo metodu ir mums su J. Grudzinsku ir L. Rudzikaite pavyko išvesti emisijos ir Auger spektrų vidutinės energijos bendras formules [55, 59]. Bendroji Auger spektro charakteristika buvo apibrėžta ir tirta pirmą kartą. Tačiau bendroms aukštesnių momentų išraiškoms gauti šis metodas pasirodė esąs nepakankamas.

J. Kaniauskas atkreipė mano dėmesį, kad atomo branduolio fizikos specialistas J. Ginocchio yra pasiūlęs bendrą matematinį metodą

<sup>10</sup> C. Bauche-Arnoult, J. Bauche and M. Klapisch. Phys. Rev. A **20**, 2424 (1979); C. Bauche et al. J. Phys. B **20**, 1443 (1987).



operatorių vidurkiams daugelio fermionų sistemų erdvėse rasti<sup>11</sup>. Gal įmanoma jį pritaikyti bendrosioms atominių spektrų charakteristikoms gauti? (vėliau Kaniauskas išsitarė pats mėginęs tai padaryti). Aš ėmiausi gilintis į aukštesniųjų tolydinių grupių  $R(8l+5)$  ir  $U(4l+2)$ , kurių savybėmis remiasi šis metodas, teoriją. Tos grupės nėra patogios atomo būsenoms klasifikuoti, bet tai nėra svarbu atliekant matricinių elementų sumavimą pagal visus kvantinius skaičius, o, antra vertus, operatorių ir banginių funkcijų charakterizavimas tų grupių atvaizdais leidžia bendrąsias spektrų charakteristikas išreikšti per paprastus daugiklius, priklausančius nuo elektronų skaičiaus sluoksniuose, ir tik nuo vienelektronų kvantinių skaičių priklausančius vakuuminis vidurkius. Pastariesiems rasti kitame J. Ginocchio ir S. Ayko darbe<sup>12</sup> buvo pasiūlyta naudoti diagraminę techniką, bet suformuluoti tik jos pradmenys. Taigi man reikėjo pritaikyti šį metodą atomams, nustatyti griežtas diagramų vaizdavimo taisykles, išskirti neekvivalentines diagramas. Tai sėkmingai pritaikius emisijos spektro dispersijos bei energijos lygmenų spektro asimetrijos ir eksceso bendroms formulėms rasti [60, 64], metodas buvo trumpai aprašytas straipsnyje [63]. Atsivėrė geros perspektyvos gauti bendrąsias arba vidutines įvairių spektrų charakteristikų algebrines išraiškas. Taigi 1988 m. pabaigoje aš ėmiausi rengti antrąją monografiją „Atominių dydžių sumos ir vidutinės spektrų charakteristikos“.

Didelę šios monografijos dalį sudaro originalūs rezultatai. Daugiausia dėmesio buvo skirta bendram atominių dydžių sumavimo pagal visus daugiaelektronius kvantinius skaičius metodui ir jo taikymui energijos lygmenų, emisijos ir Auger spektrams vienkonfigūraciniu bei konfigūracijų maišymosi artiniais. Pateikti ir kai kurie originalūs rezultatai, neskelbti atskiruose straipsniuose: (i) pastebėjus, kad sumavimo diagramos yra topologiškai ekvivalentiškos judėjimo kiekio momentų diagramoms, šios pritaikytos sumavimo diagramų indėliams išreikšti surištų momentų bazėje; (ii) gautos operatorių, sudarytų iš

<sup>11</sup> J.N. Ginocchio. Phys. Rev. **C8**, 135 (1973).

<sup>12</sup> S. Ayk and J.N. Ginocchio. Nucl. Phys. **A221**, 285 (1974).

vienetinių tenzorių, algebrinės vidurkių formulės; (iii) užrašyta bendra bet kokio skaičiaus vienelektronių operatorių vidurkio formulė ir kt.

Knygoje buvo susisteminti ir atominių dydžių dalinio sumavimo metodai. Antrinio kvantavimo vaizdavimas leidžia atlikti sumavimą pagal tarpines būsenas<sup>13</sup>. Juo naudojantis, gauta fotosužadavimo spektro vidutinės energijos išraiška, anksčiau paskelbta straipsnyje [55], bei viename priede pateikiamos bendros dviejų tarpkonfigūracinių matricinių elementų dalinės sumos, kurios reikalingos norint įvertinti konfigūracijų maišymosi įtaką lygmenų energijai antruoju perturbacijų teorijos artiniu. Kitais metodais įmanoma išskirti energijos ar kito dydžio priklausomybę nuo nagrinėjamo atveju svarbių kvantinių skaičių – pilnutinio momento, sukinio, kvazisukinio ar izosukinio; tai irgi iliustruojama naujais ir jau skelbtais [61, 62] rezultatais.

Kadangi ir antrąją monografiją „Mokslo“ leidykla išleido rusų kalba [II], bendras atominių dydžių sumavimo pagal visus daugiaelektronius kvantinius skaičius metodas buvo pristatytas apžvalginuose straipsniuose anglų kalba [70, 73].

Didėjant spektro statistinio momento eilei, sumavimo diagramų skaičius sparčiai auga, tad surašyti ranka jų visų indėlius sunkiai įmanoma. Naujas galimybes taikyti tą metodą atvėrė S. Kučo sukurta bendra euristinė programa kompiuteriui. Griežtai suformuluoti metodo algoritmai leido patikėti išraiškų gavimą kompiuteriui. Programa išveda bendrosios charakteristikos formulę tam tikram konfigūracijų tipui ir atlieka tos charakteristikos skaičiavimus. Gaila tik, kad Sigitas, vis tobulindamas programą, neprisiruošė jos publikuoti, nes joks kitas mokslo centras panašaus lygio programos neturi ligi šiol.

Taigi tas metodas ir jo realizacija leido mums sėkmingai tirti bendrąsias spektrų charakteristikas. Prie to nemažai prisidėjo ir po Lietuvos nepriklausomybės atkūrimo atsiradusi galimybė spausdinti straipsnius tarptautiniuose mokslo žurnaluose anglų kalba. Anksčiau tai buvo labai varžoma – reikalauta, kad į užsienį siunčiamo straipsnio

<sup>13</sup> B. Judd. *Second Quantization and Atomic Spectroscopy*. Baltimore: John Hopkins, 1967.

rezultatai jau būtų išspausdinti rusų kalba TSRS, be to, reikėjo specialios komisijos patvirtinimo, jog tame darbe nėra skelbiama jokių slaptų žinių. Taigi, žvelgiant į mano straipsnių sąrašą, matyti staigus pasikeitimas – nuo 1991 m. beveik visi straipsniai pradėti spausdinti anglų kalba.

Žurnale „Physica Scripta“ paskelbėme šešių straipsnių ciklą „Bendrosios atominių spektrų charakteristikos ir jų naudojimas spektrų analizei“, atliktą kartu Sigitu Kuču ir doktorantu Valdu Jonausku (dviejų straipsnių bendraautorai buvo ir eksperimentatoriai Indrekas Martinsonas iš Lundo universiteto bei Seppo Aksela iš Oulu universiteto). Šiame cikle nagrinėjami energijos lygmenų [71, 90], emisijos [72, 102], Auger [74] spektrai ir konfiguracijų maišymasis [77] nereliatyvistiniu ir reliatyvistiniu artiniais. Straipsniuose paskelbtos formulės leidžia skaičiuoti emisijos ir Auger spektrų dispersiją ir asimetriją, o energijos lygmenų spektro – dar ir ekscesą. Teorinės jų vertės lyginamos su eksperimentinių spektrų vertėmis, parodoma, jog šios charakteristikos gali būti gana jautrus artinio tikslumo rodiklis. O įvairių sąveikų indėlis į bendrąsias charakteristikas apibūdina, kokios sąveikos lemia spektro struktūrą, kuris ryšio tipas realizuojasi elektronų sluoksnyje. Nustatyti tų charakteristikų kitimo izoelektronėse, izobranduolinėse bei homologinėse sekose dėsniumai, jų atitikimas normaliajam skirstiniui. Stiprų konfiguracijų maišymąsi atspindi nemonotoniškas bendrosios charakteristikos kitimas sekoje. Parodyta, jog ne tik emisijos, bet ir Auger spektrai dažniausiai būna gerokai siauresni nei energiškai galimi jų šuolių intervalai.

Bendrųjų charakteristikų panaudojimas konfiguracijų maišymuisi (KM) įvertinti ir jo dėsniumams tirti buvo pratęstas straipsnyje [77]. Idant KM stipris tiktų ir Brillouino konfiguracijų įtakai įvertinti, mes su R. Karpuškiene gavome vidutinės energijos tarp dviejų konfiguracijų, besiskiriančių vieno elektrono sužadiniu, išraiškas [86]. Jos buvo panaudotos P. Bogdanovičiaus programoje. Atlikti skaičiavimai parodė, kad KM stipris leidžia gana tiksliai įvertinti pataisinės konfiguracijos vidutinį svorinį koeficientą ir tuo būdu efektyviai parinkti konfiguracijų bazę. Be to, šiame darbe įrodyta, kad egzistuoja

gana plati konfigūracijų klasė, kurių kiekvienas lygmuo vienodai veikia visus kitos konfigūracijos lygmenis.

Vėliau KM stipris ir kitos bendrosios KM charakteristikos buvo naudojamos įvairiuose mūsų darbuose. Siekdami apibendrinti gautus rezultatus ir atkreipti dėmesį į šį perspektyvų būdą KM tirti, mes su S. Kuču parengėme išsamų apžvalginį straipsnį [116]. Jame pateiktos bendros algebrinės šių charakteristikų išraiškos. Jų panaudojimą koreliaciniams efektams atomuose apibūdinti iliustravome skaičiavimų rezultatais svarbiems konfigūracijų maišymosi atvejams: konfigūracijoms su simetrišku simetrijos pasikeitimu bei  $(s+d)^N$  konfigūracijų kompleksui. Parodėme, kad šios charakteristikos gali būti efektyviai naudojamos banginių funkcijų bazei parinkti bei konfigūracijų maišymosi dėsningumams izoelektronėse ir izobranduolinėse sekose tirti.

Bendrosioms atominių spektrų charakteristikoms ir jų taikymui spektrų analizei buvo skirtas mano su S. Kuču kvietinis pranešimas tarptautinėje konferencijoje Edinburge (*The Fifth European Conference on Atomic and Molecular Physics*. Edinburgh, 1995).

Kitam darbų ciklui pradžia davė anksčiau gautos energijos išraiškos pagrindiniam atomo lygmeniui [54]. Jas pritaikėme elektronų ryšio energijų dėsningumams tirti, nes tas svarbus dydis išreiškiamas per žemiausiojo, tai yra pagrindinio, lygmens energijų jone ir atome skirtumą. Chemikai elementams su besipildančiu  $4f^N$  sluoksniu buvo nustatę  $4f$  elektronų ryšio energijoms empirinę intervalų taisyklę: tų dydžių santykis vienodą jonizacijos laipsnį, bet skirtingą šių elektronų skaičių turintiems atomams yra apytiksliai lygus 2 ar  $1^{14}$ . Mes su L. Rudzikaite, panaudoję algebrines ryšio energijų išraiškas, šias taisykles įrodėme teoriškai. Jos galioja ne tik  $f^N$ , bet ir  $d^N$  bei  $p^N$  besipildantiems sluoksniams. Tačiau sunkiuose elementuose, kai ryšys tarp elektronų sluoksnio viduje tampa artimesnis  $jj$ , o ne  $LS$  ryšiui, ši taisyklė pasidaro labai apytikslė.

Intervalų taisyklė iš tikrųjų reiškia, jog egzistuoja papildoma simetrija. Jos tyrimą pratęsėme keliuose darbuose, atliktuose su aspirante

<sup>14</sup> V.I. Spicyn, V.G. Vochmin, T.V. Ionova. Dokl. AN SSSR **294**, 650 (1987).

Aušra Kyniene bei kitais bendradarbiais. Ne tik ryšio energijoms, bet taip pat sistemų skirtumui ( $4f^{N-1}5d$  ir  $4f^N$  konfigūracijų žemiausiųjų lygmenų energijų skirtumas) bei svarbioms cheminėms lantanoidų charakteristikoms – oksidacijos potencialams, suirimo entalpijoms ir kt. – yra būdingas toks kitimas: pildantis elektronų sluoksniui, dydžio vertė auga iki pusės sluoksnio simetriškai ketvirčio sluoksnio atžvilgiu, tuomet patiria staigų šuolį ir toliau pildantis sluoksniui vėl kinta panašiu dėsningumu kaip ir pradinėje dalyje. Šios simetrijos prigimtis buvo aiškinta įvairiai: fizikų – elektrostatinės ar sukinio ir orbitos sąveikos ypatumais, chemikų – kristalinio lauko stabilizacija ar nefeleutiniu efektu. Visi minėti dydžiai išreiškiami per pagrindinio lygmens energiją, tad, turėdami algebrinę jos išraišką, mes teoriškai paaiškinome simetrijos atžvilgiu ketvirčio sluoksnio ypatumus. Iš tikrųjų tai simetrija tarp elektronų ir vakansijų pasluoksnyje su viena kryptimi orientuotais elektronų sukiniais. Tam skirtą vieną mūsų straipsnį paskelbė cheminės fizikos žurnalas [80]. Remdamiesi šia simetrija, kitame straipsnyje mes interpretavome eksperimentatorių pastebėtą panašų dėsningumą stipriausioms lantanoidų spektrų linijoms [76]. Vis dėlto simetriją, išplaukiančią iš paprasto modelio, turėtų iškraipyti daugiaelektroniai ir koreliaciniai efektai, tačiau mums pavyko įrodyti, kad svarbiausios pataisos tos simetrijos nepažeidžia [83].

Tas žemiausiojo lygmens energijos sąryšių nagrinėjimas konfigūracijoms su įvairiu elektronų skaičiumi sluoksnyje paskatino imtis bendresnio klausimo – matricinių elementų sąryšių, kurie išplaukia iš operatorių savybių papildomoje kvazisukinio erdvėje. Buvo sudaryta pilnoji tiesiškai nepriklausomų lygčių sistema standartiniams operatoriams kvazisukinio erdvėje, rasti jos sprendiniai. Jie pritaikyti elektrostatinės sąveikos  $f^N$  sluoksnio viduje ypatumams paaiškinti [82].

Su doktorantu V. Jonausku atlikome du darbus, išspausdintus „Journal of Mathematical Physics“, kuriuose plėtojome reliatyvistinę atomo teoriją. Ji svarbi nagrinėjant sunkiųjų elementų spektrus, ypač esant konfigūracijoms su vidinėmis vakansijomis. Juk atomas reliatyvistiškai aprašomas naudojantis  $jj$  ryšiu, kurį taikant sluoksnis išsiskiria į pasluoksnius, o konfigūracija su atviru elektronų sluoksniu – į

reliatyvistines konfigūracijas su įvairiu elektronų pasiskirstymu pakuoksnuose. Tad energijos ir kitų operatorių matricinių elementų skaičiavimas tampa daug sudėtingesnis negu nereliatyvistiniu artiniu. Tačiau yra įmanoma įvesti efektinį reliatyvistinį operatorių, kurio matricinis elementas nereliatyvistinių banginių funkcijų bazėje būtų lygus reliatyvistinio operatoriaus matriciniam elementui reliatyvistinių banginių funkcijų bazėje<sup>15</sup>. Tada skaičiuojamos tik reliatyvistinės radialiosios banginės funkcijos, o kampinės ir sukulinės matricinių elementų dalys – naudojantis paprastesne nereliatyvistine technika. Darbe [87] buvo gauta bendra reliatyvistinio efektinio operatoriaus išraiška ir užrašytos reliatyvistinės lygtys lygmeniui bei termui esant *LS* ryšii. Kitame darbe [91], naudojantis efektiniumi operatoriumi, nustatyti bendri sąryšiai tarp reliatyvistinių ir nereliatyvistinių integralų, kurie leidžia nereliatyvistinius integralus pakeisti tikslesniais reliatyvistiniais analogais. Vėliau V. Jonauskas tą būdą sėkmingai pritaikė skaičiavimams *R* matricos metodu.

Plėtojome ir Auger spektrų bei lygmenų natūraliųjų plokčių teoriją. Pirmą kartą ėmėme nagrinėti statistines Auger šuolių amplitudžių ir tikimybių savybes [89]. Parodėme, jog jas daugiausia lemia šuolyje dalyvaujančių elektronų orbitiniai kvantiniai skaičiai. Gana didelės amplitudžių skirstinio asimetrijos ir eksceso vertės liudija apie stiprų nukrypimą nuo normaliojo skirstinio. Buvo gautos formulės Auger šuolių tarp dviejų konfigūracijų amplitudžių skaičiui nustatyti.

Sumuojant Auger šuolių tikimybes iš vieno pradinės konfigūracijos lygmens į visus galutinius lygmenis, yra gaunamas lygmens Auger plotis, kurio indėlis į natūralųjį plotį dažnai yra pagrindinis. Tokį sumavimą galima atlikti algebriskai, įvedus efektinį operatorių. Kartu su Gintaru Merkeliu šiuo metodu buvo gautos lygmens Auger pločio išraiškos ir nustatytos konfigūracijos, kurioms šis dydis stipriai ar silpnai priklauso nuo termo [93].

Spektre svarbiausios yra pačios intensyviausios linijos, o intensyvumą dažnai lemia didžiausia šuolio amplitudė. Ji sudėtingu būdu

<sup>15</sup> R. Sandars and J. Beck. Proc. R. Soc. London **289**, 97 (1965).

priklauso nuo abiejų lygmenų daugiaelektronių kvantinių skaičių, taigi atomų sekoje, pildantis atviram sluoksniui, jos vertė turėtų kisti netaisyklingai. Mes su A. Kyniene nutarėme tai patikrinti, ir pasirodė, kad didėjant elektronų skaičiui sluoksnyje, maksimalios Auger šuolio amplitudės vertė kinta siaurame intervale ir gana monotoniškai, o ją atitinkantys abiejų lygmenų kvantiniai skaičiai paklūsta tam tikroms atrankos taisyklėms. Jos liudija apie egzistuojančias papildomas simetrijos savybes [94].

Vidinių atomo sluoksnių fizikoje ilgą laiką buvo naudotas vienelektronis modelis, kuriuo remiantis vakansijos šuolis iš vieno sluoksnio į kitą nagrinėjamas neatsižvelgiant į išorinių atvirų sluoksnių egzistavimą. Iš tikrųjų konfiguracija su vakansija ir atviru sluoksniu turi daug lygmenų, tad vakansijos šuolį atitinka rinkinys šuolių tarp dviejų konfiguracijų daugiaelektronių lygmenų. Tiesa, dėl didelio lygmens su vakansija natūraliojo pločio tų šuolių linijos susilieja, tarsi vyktų tik vienas šuolis tarp dviejų lygmenų. Būtent tą suminį linijų bei lygmenų plotį nustato eksperimentatoriai registruodami spektrus. Deja, jis neretai interpretuojamas ir pateikiamas lentelėse naudojamis vienelektroniu modeliu, neatsižvelgiant į tai, kad eksperimentiškai nustatytas linijos plotis yra daugelio persiklojančių linijų rezultatas. O vadinamasis lygmens plotis nėra vien suvidurkintas natūralusis konfiguracijos lygmenų plotis, bet priklauso ir nuo jų išsidėstymo spektre. Mūsų darbe [99] buvo aptarti šie eksperimentinių ir teorinių duomenų skirtumai ir įvertintos su tuo susijusios paklaidos.

Lygmenų Auger pločiai dažniausiai matuojami ir skaičiuojami atomams su viena vidine vakansija. Tuo tarpu duomenų aukštesniems jonams yra labai mažai, nebuvo tirti jų kitimo dėsningumai to paties elemento jonų sekose. Darbe [112] toks nagrinėjimas atliktas volframo, kurio spektriniai tyrimai yra aktualūs ryšium su šio elemento naudojimu termobranduolinės sintezės reaktoriaus – tokamako – konstrukcijose. Pateikti išsamūs Auger ir fluorescencijos našumų, lygmenų Auger bei radiacinių plokčių skaičiavimo rezultatai volframo jonams su  $4l^{-1}$  ( $l = s, p, d, f$ ) vakansija iki jonizacijos laipsnių, kuriems esant Auger šuoliai tampa negalimi. Šios charakteristikos stipriai

priklauso nuo labiausiai tikėtinų Costerio ir Kronigo šuolių, tad buvo nustatyti jonizacijos laipsnių intervalai, kuriuose šie šuoliai yra leistini energiška. Aptarta pagrindinių Auger šuolių charakteristikų priklausomybė nuo jonizacijos laipsnio ir vakansijos tipo.

Kaip ir mano savarankiško darbo pradžioje, mūsų darbus neretai lemdavo nauji, įdomūs eksperimentiniai rezultatai. Kartais dėl jų interpretavimo į mus kreipdavosi patys eksperimentatoriai. Aišku, tokie pasiūlymai labai priklauso nuo mokslinių ryšių. Deja, mano ryšiai su Vakarų šalių mokslo centrais nebuvo labai glaudūs (iš dalies dėl to, kad, nebūdamas gabus kalboms ir anksčiau mokėsis prancūzų kalbos, aš sunkokai kalbėjau angliškai, antra vertus, man nemažai laiko atimdavo mokslo populiarinimo knygų rašymas). Tačiau aš stengiausi sekti savo srities mokslinę literatūrą, peržiūrėdavau referatinius bei mūsų instituto bibliotekoje gaunamus mokslo žurnalus, kreipdavausi ir tiesiogiai į sudominusių straipsnių autorius. Trumpai aptarsiu kelias mūsų atliktas probleminių spektrų interpretacijas.

Įdomus buvo bendradarbiavimas su prof. Ernesto Kurmaevo grupe iš Rusijos MA Metalų fizikos instituto (Jekaterinburgas) interpretuojant jų nauju būdu registruotus emisijos spektrus. Geležies grupės elementų atomai, esantys magnetiniame junginyje, buvo selektyviai sužadinami į įvairius lygmenis tam tikro dažnio Röntgeno spinduliuote. Tokiu būdu gautų  $L_{2,3}$  spektrų seka bei tame pačiame dažnių intervale užregistruotas sugerties spektras teikia detalios informacijos apie spektro kaitą priklausomai nuo sužadavimo sąlygų. To paties elemento sugerties spektro junginiui ir laisvam atomui panašumas liudijo apie galimybę taikyti laisvojo atomo modelį. Mūsų atlikti skaičiavimai, atsižvelgiant į sužadintų būsenų sukūrimo ir jų suirimo procesus, daugumoje intervalų gana gerai atitiko eksperimentinio spektro struktūrą. Tad eksperimentiniai spektrai ir teorinė jų interpretacija buvo paskelbti bendrame darbe [98].

Naudojantis aukšto efektyvumo Röntgeno spektrometru, pirmą kartą buvo užregistruoti elektriniai kvadrupoliniai šuoliai 3d–2s trims



lantanoidų elementams<sup>16</sup>. Kadangi pradinės ir galutinės konfigūracijų su vidine vakansija lygmenys turi gana didelį plotį, tai atskiros tų šuolių linijos susilieja ir spektre yra stebimos dvi plačios juostos. Joms interpretuoti autoriai pritaikė paprastą modelį: kiekvieną smailę išskyrė į dvi komponentes, atitinkančias šuolius iš pradinių būsenų su priešingai nukreiptais 2s elektrono sukiniais. Mes, naudodamiesi daugiaelektrone teorija, atlikome tų spektrų skaičiavimus visiems lantanoidams. Rezultatai parodė, kad eksperimentatorių taikytas modelis yra labai apytikris: iš tiesų smailę sudaro daug panašaus intensyvumo linijų. Šie rezultatai paaiškino ir apibendrino stebėtą dėsninę: elementuose su dalinai užpildytu  $4f^N$  sluoksniu smailė  $3d_{3/2} - 2s$  yra platesnė nei  $3d_{5/2} - 2s$ , o elementuose su beveik užpildytu sluoksniu yra priešingai; tai lemia  $4f^N$  sluoksnio pagrindinės būsenos pilnutinio momento pasikeitimas [97].

Kitame eksperimentatorių darbe<sup>17</sup> buvo tirti elektriniai kvadrupoliniai 3p–2p šuoliai geležies grupės elementams. Tačiau jų pačių atlikto tų spektrų skaičiavimo rezultatai labai skyrėsi nuo eksperimentinių: pilnutinis intensyvumas gautas 20–30 kartų mažesnis. Mums pavyko įrodyti, kad tų kvadrupolinių linijų srityje dėl konfigūracijų maišymosi egzistuoja už jas intensyvesnės dipolinių 3s–2p šuolių linijos, tad išskirti kvadrupolinius šuolius nėra įmanoma [106].

Net ir atomų su atviru elektronų sluoksniu spektrams kartais galioja paprasti dėsniniai; tai dažniausiai lemia simetrijos savybės. Atomo su pusiau užpildytu sluoksniu linijų intensyvumai fotoelektronų spektre pasirodė esantys proporcingi tik paprastam daugikliui  $2J+1$ . Ypatingą tokio sluoksnio simetriją nagrinėjo dar G. Racah<sup>18</sup>: keičiant elektronus vakansijomis ( $N \rightarrow 4l+2-N$ ), toks sluoksnis pereina pats į save. Dėl to atsiranda papildoma atrankos taisyklė matriciniams elementams, tad daugelis jų tampa lygūs nuliui ir tuomet gana gerai tinka grynojo ryšio modelis. O fotoelektronų spektras atitinka šuolius

<sup>16</sup> P.-A. Raboud et al. Phys. Rev. A **65**, 022512 (2002).

<sup>17</sup> J. Jimenez-Mier et al. J. Phys. B **36**, L173 (2003).

<sup>18</sup> G. Racah. Phys. Rev. **63**, 367 (1943).

iš pagrindinio lygmens su nuliniu orbitiniu momentu ir maksimaliu sukiniu. Tai leido linijos stiprio priklausomybę nuo galutinės jono būsenos nusakyti vienu paprastu tik su terminu susietu daugikliu [107].

Paaiškėjus naujoms kaskado atomuose tyrimo galimybėms, mes ne kartą vėl imdavomės šio sudėtingiausio atomo elektronų sluoksniuose vykstančio reiškinio nagrinėjimo. Būtent šios tematikos darbus atlikome dalyvaudami ES Mokslinio tinklo projekte „Elektronų ir fotonų sąveikos su atomais, jonais ir molekulėmis“ (1994–1996 m.) ir vykdydami Lietuvos mokslo tarybos projektą „Elementariųjų procesų kaskadų sudėtinguose atomuose teorinis tyrimas“ (2010–2011 m.).

Vykstant sudėtingesniai kaskadai, ypač atome su atvirais sluoksniais, radiacinių ir Auger šuolių skaičius gali siekti milijonus, tad jų visų skaičiavimas tampa sunkiai įmanomas. Šuolių tarp atskirų konfigūracijų visumą galima gana tiksliai aprašyti naudojantis bendrosiomis spektrų charakteristikomis. Tą metodą sėkmingai pritaikėme interpretuoti probleminiams lantanoidų jonų išėigos spektrams, išmatuotiems po 4d, 4f, 5s ir 5p sluoksnių fotojonizacijos<sup>19</sup>. Nors šie elementai turi panašias fizines savybes, jų jonų išėigos labai skiriasi: kaskado metu susidaro vieno elemento daugiausia trikartinių jonų, antro – dvikartinių, trečio – tik vienkartinių. Mūsų atliktas kaskadų nagrinėjimas paaiškino tuos skirtumus kai kurių Auger šuolių energiniu draudimu, vienkartinės fotojonizacijos ir papildomos atomo jonizacijos dėl staigios perturbacijos ypatumais [75].

Beje, S. Kučui seminare Paryžiuje papasakojus apie bendrųjų charakteristikų taikymą kaskadams tirti, tame seminare dalyvavęs A. Kočuras tai pasirinko savo pagrindine darbų kryptimi. Jis paskelbė seriją straipsnių, bet, neturėdamas aukštesniųjų momentų skaičiavimo programos, kaskadams modeliuoti naudojo tik dvi paprasčiausias bendrąsias charakteristikas – vidutinę energiją ir pilnutinį šuolių stiprį.

<sup>19</sup> C. Dzionk et al. Phys. Rev. Lett. **62**, 878 (1989); P. Zimmermann. Comment. At. Mol. Phys. **23**, 45 (1989).

Konferencijos darbuose<sup>20</sup> aptikęs užregistruotą aukšto tikslumo europio Auger spektrą, stebėtą po kaskado rezonansiškai  $3d_{3/2} - 4f$  sužadinus atomus, aš kreipiausi į grupės vadovą T. Nagatą, ir jis geranoriškai atsiuntė mums tuos ir dar papildomus duomenis. Šio gana sudėtingo kaskado modeliavimas bendrųjų charakteristikų metodu leido aprašyti visą jo struktūrą ir paaiškinti, kokius Auger šuolius atitinka atskiros smailės [85].

Vienas iš pagrindinių Auger spektrų tyrimo centrų yra Oulu universitetas (Suomija), kur daugelį metų tie spektrai yra tiriami eksperimentiškai ir teoriškai (grupės vadovė prof. Helena Aksela). V. Jonauskas norėjo padirbėti užsienio mokslo centre, ir H. Aksela sutiko jį priimti. Ten nuvykęs Valdas interpretavo ką tik užregistruotus Auger spektrus, stebimus po kaskado ksenone su vakansija  $3d$  sluoksnyje. Po šio sėkmingo tyrimo H. Aksela siūlė V. Jonauskui stažuotę jos grupėje, bet jis pasirinko kitą galimybę – Belfasto universitete vykdyti daugiakrūvių jonų spektrų skaičiavimus.

Prof. A. Jucio šimtmečiui paminėti 2004 m. buvo rengiamas tam skirtas „Lietuvos fizikos rinkinio“, jau tapusio „Lithuanian Journal of Physics“, numeris, kurį sudarė apžvalginiai Lietuvos ir užsienio teoretikų straipsniai. Mes pasinaudojome proga apibendrinti kaskadų atomuose tyrimus: buvo pateikta išsami literatūros apžvalga ir pristatyti mūsų gauti rezultatai – kaskadų modeliavimas spektrų bendrųjų charakteristikų metodu ir jo taikymas konkretiems spektrams interpretuoti [95].

Kai kuriose konfigūracijose su vidinėmis vakansijomis pasireiškia gana stiprus konfigūracijų maišymasis. Dėl to tampa leistini daugiaelektroniai šuoliai. Nagrinėjant kaskadus kriptide po  $3p$  ir  $3d$  sluoksnių fotojonizacijos, buvo įrodyta, kad vykstant atomo persitvarkymui svarbų vaidmenį vaidina diskretinis dvigubas ir hipersatelitinis Auger šuoliai. Be to, galimi ir kiti mažai nagrinėti ar dar visai nestebėti daugiaelektroniai šuoliai: su vakansijos atsiradimu gilesniame sluoksnyje, trigubas bei hipersatelitinis Auger šuoliai su papildomu

<sup>20</sup> G. Kutluk et al. Abstracts of the 17th International Conference X Ray and Inner Shell Processes, Hamburg, 1996, 226.

elektrono sužadiniu. Atsižvelgus į konfigūracijų maišymąsi, pavyko išspręsti įvairaus kartotinumų jonų išėigos eksperimentinių ir skaičiavimo vienkonfigūraciniu artiniu rezultatu neatitikimą [105].

Man pristačius šiuos rezultatus Röntgeno spektrų konferencijoje Paryžiuje 2008 m., prof. P. Lablanqui iš Paryžiaus universiteto pasiūlė kartu atlikti Auger kaskadų, vykstančių kriptone po vakansijų sukūrimo  $3d_{3/2}$  ir  $3d_{5/2}$  pasluoksniuose, tyrimą. Jo grupė taikė naują eksperimentinį metodą, vadinamą daugiaelektrone spektroskopija, kuris leido sutapimų būdu registruoti pradinį fotoelektroną ir po to išlektiančius du Auger elektronus. Mes teoriškai aprašėme šiuos spektrus atsižvelgdami į įvairius kaskado metu vykstančius šuolius ir svarbius daugiaelektronus bei reliatyvistinius efektus. Tai įgalino interpretuoti beveik visą sudėtingą eksperimentinių spektrų struktūrą, priskirti linijas šuoliams, atitinkantiems atskiras kaskado pakopas. Gerai sutapo ir susidarančių jonų pasiskirstymo galutinėse būsenose teoriniai ir eksperimentiniai duomenys [110]. Visa tai liudijo, kad toks teorinis modelis gerai aprašo sudėtingo kaskado vyksmą atomuose.

Panašus teorinis tyrimas buvo pratęstas dar sudėtingesniau Auger kaskadui kriptone po vakansijos susidarymo  $3p_{1/2}$  ir  $3p_{3/2}$  elektronų pasluoksniuose. Suskaičiuotos jonų išėigos labai gerai sutapo su eksperimentiniais duomenimis. Patikslinta eksperimentiškai užregistruotų, pirmosios pakopos metu susidarančių Auger spektrų interpretacija. Pavaizduoti dar eksperimentiškai netirti įvairių pakopų spektrai [113].

Kaskadų atomuose ir jonuose duomenys yra reikalingi ir procesams kosminių Röntgeno šaltinių aplinkoje modeliuoti. Buvo atlikti detalūs kaskadų po vakansijos sukūrimo K sluoksnyje skaičiavimai astrofizikai svarbiems elementams Ne, Mg, Si, S ir Ar [114]. Nustatyta sužadintų lygmenų užpildos pasibaigus Auger šuoliams ir įvairaus kartotinumų jonų pasiskirstymas galutinėse konfigūracijose bei lygmenyse po viso kaskado. Tie duomenys leidžia nagrinėti po to vykstančius radiacinius šuolius. Pirmą kartą iširta kaskado priklausomybė nuo pradinės sužadintos būsenos daugiaelektroninių kvantinių skaičių jonams su išoriniu atviru elektronų sluoksniu, taip pat nustatyti kaskado kitimo izoelektronėse ir izobranduolinėse sekose dėsningumai.

Antrajame darbe [118] buvo atsižvelgta į galimus dvielektronius procesus vykstant K sluoksnio jonizacijai.

Kitas svarbus straipsnių ciklas buvo skirtas įdomiam reiškiniui – siauros intensyvių linijų grupės formavimuisi fotosužadavimo ir emisijos spektruose. Eksperimentiškai intensyvumo koncentracija nedaugelyje spektro linijų buvo pastebėta užregistravus jau minėtus lantanoidų 4d sugerties gigantiškus rezonansus. Sunkesniuose lantanoiduose jie atitinka šuolius į galutinės  $4d^9 4f^{N+1}$  konfigūracijos viršutinius lygmenis, kurių padėtis lemia pakaitinė elektrostatinė sąveika tarp  $4d^9$  ir  $4f^{N+1}$  sluoksnių. Tos sąsajos tarp lygmens padėties ir dipolinių šuolių į jį stiprio priežastis buvo išžvelgta mūsų straipsnyje [56]: viršutinių lygmenų padėtis lemia pakaitinės energijos dipolinė dalis, kuri išreiškia per dipolinių šuolių amplitudes. Dviejų lygmenų grupių su skirtingomis radiacinėmis savybėmis egzistavimas  $nl^{4l+1}n(l+1)^N$  konfigūracijose buvo teoriškai išnagrinėtas ir iliustruotas skaičiavimais tame ir [69] darbuose. Parodyta, kad energiška atskirta viršutinė grupė susidaro tik esant mažam elektronų skaičiui  $N$ . Pasiūlyta įvesti naują banginių funkcijų bazę, gaunamą diagonalizuojant pakaitinės elektrostatinės energijos operatoriaus matricinio elemento dipolinį narį; ši bazė tiksliau aprašo tokios konfigūracijos savybes. Vėlesniame mūsų su Andriumi Bernotu darbe [88] buvo įrodyta, kad toje bazėje galioja papildoma dipolinių šuolių atrankos taisyklė, kuri ir uždraudžia šuolius į apatinės grupės lygmenis.

Dėl tos pačios priežasties – dviejų lygmenų grupių egzistavimo – intensyvumo koncentracija galima ir Auger spektruose; tai pirmą kartą buvo įrodyta mūsų grupės darbe [78]. Tam reiškiniui apibūdinti įvedėme Auger zonos sąvoką.

Siauros intensyvių linijų grupės formavimasis gali turėti ir kitą priežastį – stiprų  $nl^{4l+1}n(l+1)^{N+1}$  ir  $nl^{4l+2}n(l+1)^{N-1}n(l+2)$  konfigūracijų maišymąsi; jis tampa galimas, jei duotam  $n$  egzistuoja  $n(l+2)$  sluoksnis. Kadangi antroji konfigūracija sukuriama simetriškai sužadinus pirmąją, toks konfigūracijų maišymasis vadinamas su simetrišku simetrijos pasikeitimu. Iš tų abiejų konfigūracijų galimi elektriniai dipoliniai šuoliai į pagrindinę  $nl^{4l+2}n(l+1)^N$  konfigūraciją, todėl šis maišymasis

stipriai veikia šuolius iš tų konfigūracijų arba sužadinių į jas. Kaip ir lygmenų išsiskyrimą į dvi grupes, taip ir ši konfigūracijų maišymąsi lemia elektrostatinė sąveika tarp elektronų, o tarpkonfigūracinis matricinis elementas išreiškiamas per šuolio amplitudes; dėl tos priežasties vieni šuoliai tampa beveik uždrausti, o kiti labai sustiprėja [69].

Siauros intensyvių linijų grupės susidarymas ypač atkreipė dėmesį ieškant spinduliuotės šaltinio, reikalingo nanometrų dydžio lusto elementams formuoti. Buvo pageidautinas 13,5 nm bangos ilgio ultravioletinės spinduliuotės šaltinis. Mes su S. Kuču ir A. Momkauskaite įsijungėme į tas paieškas, pritaikę  $4p^5 4f^{N+1} + 4p^6 4d^{N-1} 4f \rightarrow 4p^6 4f^N$  šuoliams atomuose įvertinti bendrąsias spektrų charakteristikas. Atsižvelgus į reikalingą bangos ilgį, šuolių linijų stiprį ir jo koncentraciją siauroje srityje, buvo padaryta išvada, kad atominiu požiūriu labiausiai tinkami yra 9–11 kartų jonizuoti alavo atomai ir 10–11 kartų jonizuoti stibio atomai [100].

Tokie patys šuoliai daugkartiniuose volframo jonuose sukelia nepageidautiną reiškinį – didelius radiacinius tokamako plazmos nuostolius. Volframas, kaip labai atspari medžiaga, yra naudojamas termobranduolinės sintezės reaktoriaus sienelėms padengti, tačiau jo jonai patenka į išlydžio zoną ir intensyviai spinduliuodami vėsina ją. 2000 m. mes kartu su kitais skyriaus darbuotojais įsijungėme į tarptautinį projektą, susijusį su bandomojo termobranduolinės sintezės reaktoriaus ITER kūrimu; buvo nagrinėjamos spektrinės volframo jonų savybės. Intensyviausia volframo jonų spinduliuotė 5 nm srityje kaip tik atitinka anksčiau minėtus šuolius. Mums atsižvelgus ne tik į konfigūracijų maišymąsi, bet ir į reliatyvistinius efektus, pavyko paaiškinti, kodėl tie šuoliai vienuose jonuose koncentruojasi labai siaurame dažnių intervale, o kituose jonuose spektras yra išplitęs. Taip pat buvo interpretuota satelininė linijų grupė ir numatytas kitos, eksperimentiškai dar nestebėtos, linijų grupės egzistavimas [103].

$4p^5 4d^{N+1}$  ir  $4p^6 4d^{N-1} 4f$  konfigūracijų maišymosi dėsnų bei šių koreliacinių efektų įtakos emisijos ir fotosužadavimo spektroms izoelektronėse ir izobranduolinėse sekose tyrimas buvo pratęstas [108] darbe. Nustatytos labai siauros intensyviausių linijų grupės

formavimosi šiuose spektruose sąlygos. Parodyta, kad emisijos spektro kitimas izoelektronėje sekoje yra trijų skirtingų tipų. Paašškinta emisijos ir fotosužadavimo spektrų panašumo priežastis.

Siekdami apibendrinti nustatytus dėsningumus, panašų išsamų tyrimą atlikome ir  $3s3p^{N+1} + 3s^23p^{N-1}3d \rightarrow 3s^23p^N$  šuoliams [111]. Nustatyti jonizacijos laipsniai ir 3p elektronų skaičiai, kuriems esant efektas pasireiškia stipriausiai. Iškelta prielaida, kad tokiems šuoliams, kaip ir vykstantiems iš konfigūracijų, turinčių dvi skirtingas lygmenų grupes, turėtų egzistuoti papildoma atrankos taisyklė, draudžianti daugelį šuolių.

Mūsų grupės bei kituose mokslo centruose gauti rezultatai tiriant siauros intensyvų linijų grupės formavimąsi emisijos ir fotosužadavimo spektruose buvo apibendrinti kvietiniame pranešime tarptautinėje konferencijoje Delyje (*3<sup>rd</sup> International Conference on Current Developments in Atomic, Molecular, Optical and Nano Physics with Applications*. Delhi, 2011) ir jo pagrindu parengtame apžvalginame straipsnyje [115]. Jame apžvelgti abu šio reiškinio atsiradimo mechanizmai, jų tarpusavio ryšys, suformuluoti bendri dėsningumai.

Paskutiniame apžvalginame straipsnyje [117] aš apibendrinau savo su bendradarbiais gautus teorinius rezultatus, kurie atskleidžia papildomas atomų simetrijos savybes: tai – atomo pagrindinės būsenos energijos išraiškos, leidžiančios paaiškinti su ta būsena susijusių dydžių simetriją atžvilgiu ketvirčio sluoksnio; nauja banginių funkcijų bazė, kurioje panaudojamas elektronų sluoksnių su tuo pačiu orbitiniu kvantiniu skaičiumi giminingumas; taip pat netikėtos Auger šuolių maksimalių amplitudžių atrankos taisyklės.

Taigi visi svarbiausi darbų ciklai buvo pristatyti monografijose bei apžvalginiuose straipsniuose [44, 46, 73, 95, 115, 116, 117].

Dauguma šioje apžvalgoje aptartų darbų buvo atlikti nagrinėjant procesus, susijusius su vidiniais atomo sluoksniais, tačiau nemaža dalis rezultatų turi bendresnę reikšmę, galioja ir kitokioms konfigūracijoms bei elektronų šuoliams.

Keletas darbų buvo skirti ir mokslotyrai bei fizikos istorijai. Dar aštuntojo dešimtmečio pradžioje, atkreipęs dėmesį į D. de Solla

Price knygos „Little Science, Big Science“ rusišką vertimą bei V. Na-  
limovo ir Z. Mulčenkos knygą „Naukometrija“, aš ėmiausi nagrinėti  
ir Lietuvos mokslo raidos dėsningumus, rinkau statistinius duomenis  
apie mokslo darbuotojus, jų pasiskirstymą pagal mokslo šakas, apgin-  
tas mokslų kandidato ir daktaro disertacijas. Fizikos ir matematikos  
bei Fizikinių ir techninių energetikos problemų institutų teoriniuose  
metodologiniuose seminaruose, Mokslų akademijos mokslo istorikų  
seminare skaičiau pranešimą „Mokslo raidos dėsningumai“, kuriame  
greta bendrų žinių apie mokslotyra, jos rezultatus pateikiau ir kai ku-  
riuos duomenis apie Lietuvos mokslą. Platesniam skaitytojų ratui ta  
medžiaga buvo pristatyta „Žinijos“ draugijos 1973 m. išleistoje mano  
brošiūroje „Fizikos raidos dėsningumai“ bei dviejuose straipsniuose  
žurnale „Mokslas ir technika“.

Rengdamas savo mokytojo Adolfo Jucio biografiją ir mokslinės  
veiklos apžvalgą jo „Rinkiniams darbams“<sup>21</sup>, aš peržiūrėjau profe-  
soriaus archyvą, surinkau daugelio žmonių atsiminimus, radau Jucį  
liečiančių dokumentų valstybės ir mokslo įstaigų archyvuose. Šią me-  
džiagą panaudojau ne tik straipsniuose [1', 2'], bet ir profesoriaus gi-  
mimo šimtmečiui išleistose knygose: mano parašytoje jo gyvenimo ir  
mokslinės veiklos apžvalgoje „Žalias teorijos medis“ bei dokumentų  
rinkinyje „Akademikas Adolfas Jucys“. Šiame leidinyje išspausdintas  
mūsų su A. Momkauskaite straipsnis [4'], kuriame schemų pavidalu  
pateikti ir aptarti A. Jucio mokslinės, organizacinės ir visuomeninės  
veiklos, jo mokyklos formavimosi, mokslinių ryšių duomenys.

Kartu su ta pačia bendraautore buvo nagrinėti Nobelio fizikos  
premių dėsningumai ir tendencijos [3']; jų pasiskirstymas pagal fizi-  
kos šakas, svarbiausio atradimo metus, atradėjo amžių, šalis ir kitus  
rodiklius. Tie rezultatai išryškino kelias svarbiausių XX a. atradimų  
„bangas“. Parodyta, kad laiko tarpo tarp atradimo ir jo pripažinimo  
skirstinys atitinka lognormalųjį dėsnį.

Papildžius mano anksčiau rinktus statistinius duomenis apie  
Lietuvos fiziką bei pasinaudojus išsamia medžiaga, sukaupta „Lietuvos

<sup>21</sup> Adolfas Jucys. *Izbrannye trudy: Teorija mnogoelektronnych atomov*. V.:  
Mokslas, 1978 (rusų k.).



fizikų ir astronomų sąvade“, buvo tirti kai kurie Lietuvos fizikos raidos XX amžiuje bruožai: mokslo darbuotojų skaičiaus, apgintų disertacijų dinamika, disertantų pasiskirstymas pagal amžių, lytį, baigtą aukštąją mokyklą ir kt. [5].

Mokslotyros duomenis aš panaudojau aptardamas mokslo raidos dėsningumus ir aukštosios mokyklos vadovėlyje „Fizikos metodologija ir filosofija“. Matyt, todėl O. Voverienė savo monografijoje „Mokslotyra“ šį vadovėlį pavadino pirmuoju Lietuvoje mokslotyros vadovėliu ir jam skyrė visą knygos skyrelį<sup>22</sup>.

Dauguma mano rezultatų yra gauti kartu su bendraautoriais – ilgamečiu bendradarbiu Sigitu Kučiu, taip pat su Antra Karosiene, Arvydu Udriu, Loreta Rudzikaite, Valdu Jonausku, Aušra Kyniene, Alina Momkauskaite ir kitais per keturis dešimtmečius kitosios grupės nariais, skyriaus darbuotojais, užsienio mokslininkais. Visiems jiems esu labai dėkingas už kūrybingą darbą, tarpusavio supratimą. Kaip grupės vadovas aš stengiausi būti idėjų ir temų generatoriumi. Sekdamas savo srities literatūrą, mėginamas išvelgti tolesnes mūsų metodų ir rezultatų perspektyvas, aš susidarydavau galimų temų sąrašą, jame dažniausiai būdavo iki dešimties punktų. Kiekvienam iš jų rinkdavau literatūros nuorodas, užsirašydavau savo mintis, pastabas, kylančius klausimus. Be abejo, dalis tų numatytų darbų pasirodydavo sunkiai įgyvendinami, mažai įdomūs ar jau atlikti kitų autorių. Metų pradžioje aš parinkdavau keletą perspektyvesnių temų ir aptardavau jas su grupės nariais, taip planuodavome tų metų darbus. Mano baras buvo gauti teorines išraiškas (vienam ar su bendradarbiu), aptarti skaičiavimo rezultatus, ieškoti dėsningumų. Išskyrus bendrus tyrimus su eksperimentatoriais, aš rašiau straipsnių tekstus. Kiti grupės nariai atliko didelį darbą sudarinėdami programas ir vykdydami skaičiavimus; kartu aptardavome gautus rezultatus.

<sup>22</sup> O. Voverienė. *Mokslotyra*. V.: Diemedis, 2013.