

“Все, что в химии научного, это физика, а остальное - кухня”, - Л. Ландау

«Для наших аспирантов отводили время по ночам...»

О своей интересной работе, заграничных командировках и выдающихся коллегах Химператору рассказал преподаватель квантовой химии Александр Владимирович Тулуб.

— Александр Владимирович, расскажите, пожалуйста, о том, как организовывалась кафедра квантовой химии на нашем факультете?

— Начало 68 года, приказ министерства. Но до этого была проведена большая подготовительная работа. Квантовую химию я начал читать на факультете с 56 года и непрерывно читаю до сих пор. Тогда курс квантовой химии носил описательный характер, между нами говоря, беллетристика, а не теория. Просто рассказ о природе вещей. Задачей образовавшейся кафедры являлась серьезная подготовка студентов, прежде всего в математике, а это требовало создания отдельных программ. Деканат пошел этому навстречу. Андрею Николаевичу Мурину и Михаилу Михайловичу Шульцу факультет обязан созданием кафедры. Окончательную подпись поставил ректор Кирилл Яковлевич Кондратьев, который неоднократно

подчеркивал важность создания этой кафедры. Инициатива исходила также и от сотрудников физического факультета – соединить химию с физикой через квантовую теорию.

— А за границей в то время в каком состоянии находилась квантовая химия?

— Она была значительно продвинута в силу той причины, что, несмотря на то, что у нас были великолепные разработки в плане вычислительных машин, которыми бы могла гордиться отечественная наука, в распоряжении университета, а тем более в распоряжении кафедры не было ни одной сколь либо мощной машины. У нас были маломощные и громоздкие компьютеры, которые не идут ни в какое сравнение с современными ПК. При этом на кафедре были созданы программы численного интегрирования уравнения Хартри-Фока для атомов, сначала нерелятивистский

вариант, а потом и релятивистский вариант. Этой работой руководил Вадим Федорович Братцев. Атомная часть была завершена в пределах тех возможностей, которые у нас были, а вот в молекулярной части наметилось отставание. Не в плане идеологии, а в плане реализации идей, по сравнению с Западной Европой и Америкой. А обмен программами тогда выглядел весьма затруднительно. Мы могли рассчитывать только полуэмпирическими методами органические соединения и были очень ограничены в расчете, скажем, металлоорганических соединений. Но это не значит, что ничего не было сделано. Все, что было сделано – покупалось на средства института в системе академии наук. А там и свои задачи нужно было решать, поэтому для наших аспирантов отводили время по ночам. Поэтому все диссертации наших аспирантов между 70 и 80 годом - это расчеты по ночам.

— А на что вы ориентировались при подготовке специалистов в области квантовой химии?

— Мы всегда ориентировались на то, что наши выпускники будут работать в системе академии наук. Но, к сожалению, многие наши прикладные институты сейчас находятся в плачевном состоянии, и возможность использовать специалистов в области квантовой химии весьма ограничена и не соответствует тем проблемам, которые сейчас стоят перед молекулярной физикой, химией и, в частности, молекулярной электроникой. Однако, многие из наших бывших выпускников стали видными специалистами и работают не только в России, но и в Америке,

Справка

Рой Глаубер (1 сентября 1925, Нью-Йорк США) — американский физик, лауреат Нобелевской премии по физике в 2005 году «за вклад в квантовую теорию оптической когерентности». В настоящее время — профессор физики в Гарвардском университете. Глаубер окончил в Нью-Йорке Высшую школу Бронкса — знаменитую государственную спецшколу. С 1941 г. учился в Гарвардском университете в Кембридже (США). Со второго курса участвовал в манхэттенском проекте, где занимался расчетом критической массы бомбы. Это говорит о его способностях, так как в то время ему было всего 19 лет. После двух лет участия в проекте продолжил обучение, получил степень бакалавра (1946) и докторскую степень (1949) в Гар-

вардском университете. С 1976 года работает профессором в Гарварде. В разные годы работал временно в ЦЕРНе, университете Лейдена и Collège de France в Париже. Исследования в области квантовой оптики. Разработал математическое описание когерентного излучения. Ввел понятие сжатый свет. Также занимался столкновениями высокоэнергетических частиц и адронов. В 2005 году получил половину Нобелевской премии по физике. Другая половина присуждена Джону Холлу и Теодору Хэншу. Является хранителем метлы в комитете Нобелевской премии. Обязан подметать бумажные самолетики после процедуры вручения.



в Германии, в Японии. Это ученики Эварестова, Барановского, Панина. Например, наш выпускник Дмитрий Федоров, когда работал в Америке, участвовал в создании программы GAMESS, которая рассчитывает молекулярные орбитали с учетом спин-орбитального взаимодействия. Сейчас он работает в Японии, рассчитывает биомолекулы.

— **Александр Владимирович, на лекциях вы упоминали, что вам пришлось много путешествовать «по работе». Расскажите, где вам удалось побывать?**

— Я бывал в разных странах и работал в разных местах. В Индии я был как физик и читал лекции по теории газовых лазеров в 66 году. Там мне предлагали стать послом ЮНЕСКО, точнее, руководителем всей груп-

пы ЮНЕСКО. Хотели, чтобы им стал специалист из России, но я не мог принять предложения, поскольку уже шел вопрос об организации кафедры. В Египте преподавал в 68-69 году в Каирском университете и университете города Асьют. Читал лекции в Потсдаме – в 63-64 году. А до этого был в ряде городов в Западной Германии, в том числе в Мюнхене, Гамбурге и во Франкфурте-на-Майне.

Помимо наших аспирантов, под моим руководством двое защитили диссертацию в Египте, в мусульманском мире, и один аспирант в ГДР. А в Германии было очень интересно. Я заканчивал там свою кандидатскую диссертацию. Когда я появился на кафедре Гейзенберга, там с некоторой настороженностью и

недоумением встретили мое появление. Но когда они узнали, что я из Ленинграда и работаю на кафедре Фока (а Фок написал письмо Гейзенбергу), то тут сразу все изменилось. Сразу начали вспоминать общих знакомых. У физиков же имена по статьям знакомые, не обязательно знать друг друга лично. А как-то раз меня повезли на встречу к Гейзенбергу, в академию наук. Но мы попали в огромную пробку. В Мюнхене уже тогда, в 60 году, такие пробки были. Мы только сейчас в такое состояние входим. Гейзенберг нас не дождался и оставил извинительную записку.

Немцы были по-своему обрадованы тем, что начинаются нормальные взаимоотношения между нашими странами. Университет – это общий

→ продолжение на следующем развороте

Компьютер имеет то преимущество перед мозгом, что им пользуются

котел и люди друг друга быстро понимают, говорят на одном языке.

— **А чему была посвящена ваша кандидатская диссертация?**

— Моя работа была посвящена теории полярона. Самое интересное, что в Пушкино-на-Оке, откуда я сейчас только что вернулся с конференции, эту мою работу скрупулёзно разбирали два специалиста. Я и не предполагал, что все это имеет такое отношение к тем исследованиям, которые сейчас ведутся в связи с проводящими свойствами молекулы ДНК. Там рассказывали о таком варианте, когда ключевую роль в молекулярном компьютере играет молекула ДНК. ДНК интересна тем, что это единственная молекула, которая сама себя воспроизводит. Задача старая, она возникла в начале 70 годов. Тогда говорили о новом витке в развитии электроники, поскольку все транзисторы были на полупроводниковых материалах. Да и сейчас вся техника, хоть она и модернизирована - это не уровень молекулярной электроники. Вне сомне-

Справка

Герберт Фрелих (9 декабря 1905, Рексинген, Германия) - английский физик-теоретик, член Лондонского королевского общества. Окончил Мюнхенский университет в 1930 году. В 1935-48 работал в Бристольском университете, в 1948-73 - профессор Ливерпульского университета. Его исследования посвящены физике твердого тела, сверхпроводимости, теории поля, мезонной физике. В 1937 дал полную теорию торможения электронов в ионных кристаллах (теория ударной ионизации Фрелиха), совместно с Ф. Зейтцем предложил количественную теорию зависимости пробивной напряженности поля от толщины (теория пробоя по Фрелиху). Независимо от других в 1939 году развил теорию рассеяния электронов и дырок на оптических колебаниях

решетки. Построил теорию длины свободного пробега электронов в ионных кристаллах. Первый исследовал влияние разупорядочения на спектр электронных состояний. В 1950 году разработал теорию поляронов. Независимо от Дж. Бардина разработал в 1950 теорию сверхпроводимости, основанную на рассмотрении электронно-фононного взаимодействия (модель Фрелиха), в которой предсказал изотопический эффект. В 1953-55 дал феноменологическую теорию возбуждения плазменных колебаний электронами, проходящими через твердое тело, в частности через металл. Независимо от других построил векторную мезонную теорию ядерных сил, предсказал существование нейтрального мезона.

ния, здесь будут сделаны успехи. А построить компьютер на базе ДНК, неизвестно, удастся или нет. А что касается диссертации, то я уже все выкладки позабыл, ведь моя работа была опубликована в 61 году. И специалисты в Пушкино-на-Оке мне

показали листки, на которых они получили мои формулы. Они просидели за выкладками едва ли не месяц и разобрали только треть статьи. А разбирали они ее скорее для интереса, потому что в свое время не поверили, что это можно было сделать. И автор теории полярона тоже смотрел эту работу. Меня в Пушкино-на-Оке спросили, как вы могли перейти к химии, когда у вас такой задел был. Но я им объяснил, какие были внутренние связи между различными центрами, и что я в свою очередь почерпнул из бесед с физиками. Ведь все это основано на гамильтониане Фрелиха.

Я в 69 году познакомился с Фрелихом. А Фрелих в 69 году описал первую модель сверхпроводящего состояния, используя одномерную молекулярную цепочку. А я на физическом факультете уже читал лекции по теории лазеров, по теории сверхпроводимости и по квантовой электродинамике. И когда он узнал о сфере моих интересов, он меня собирався в Ливерпуль пригласить. Но куда уж тут поедешь, когда я уже перешел на химический факультет. Но разговоры с ним дали толчок использовать молекулы ДНК. Я к этому вначале отнесся скептически, а потом и сам начал склоняться. Мне нужно найти отщипки работ, которые

Справка



Поль Адриен Морис Дира́к (8 августа 1902, Бристоль — 20 октября 1984, Таллахасси) — английский физик-теоретик, один из создателей квантовой механики. Лауреат Нобелевской премии по физике 1933 года (совместно с

Эрвином Шрёдингером). Член Лондонского королевского общества (1930), а также ряда академий наук мира, в том числе иностранный член Академии наук СССР (1931), Национальной академии наук США (1949) и Папской академии наук (1961). Работы Дирака посвящены квантовой физике, теории элементарных частиц, общей теории относительности. Он является автором основополагающих трудов по квантовой механике (общая теория преобразований), квантовой электродинамике (метод вторичного квантования и многовременной формализм) и квантовой теории поля (квантование систем со связями). Предложенное им релятивистское уравнение электрона позволило естественным образом объяснить спин и ввести представление об античастицах. К другим известным результатам Дирака относятся статистическое распределение для фермионов, концепция магнитного монополя, гипотеза больших чисел, гамильтонова формулировка теории гравитации и др.

Чем дальше эксперимент от теории, тем ближе он к Нобелевской премии

он мне присылал, а это один из виднейших специалистов. Фрелих написал великолепную книгу по модели Онзагера.

В Пущино-на-Оке меня спросили, для кого я писал работу, которую они разбирали этим летом, потому что понять ее сложно и сейчас. Она как раз касалась той задачи теории полярона, которой Фрелих занимался. Но когда мы с ним второй раз встретились, ни один из нас уже не вспоминал об этом, мы были уже в других задачах, касающихся сверхпроводимости и биополимеров.

— *А еще на лекциях вы как-то упоминали о своем знакомстве с Бозе.*

— Это произошло, когда я работал в Индии. Теория газовых лазеров, которую я там читал, целиком построена на теории вынужденного излучения Эйнштейна, а Бозе — автор статистики Бозе.

Вначале я познакомился с отцом Бозе. У нас с ним была замечательная беседа. А уже потом меня познакомили с его знаменитым сыном. Я попал несколько экспромтом на этот разговор.

Бозе рассказывал мне о своей переписке с Эйнштейном. Они говорили об атоме водорода, поскольку квантовой теории еще не было, была только теория Бора. Бозе написал Эйнштейну следующее: атом водорода, чтобы он излучал, должен быть в некоем окружении других то ли субстанций, то ли тел. Что он понимал под окружением в 25 году, я не берусь сказать. А Эйнштейн ему ответил, что атом водорода будет излучать из возбужденного состояния даже тогда, когда он будет в единственном числе во всей вселенной. Потом я пересказал содержание этой беседы Глауберу и написал ему, что, по-видимому, это редкий случай, когда оба правы. Учтите еще, что с момента их переписки до момента нашей беседы прошло 40 лет, а он рассказывал об этом так, как будто это вчера произошло. По мере того, как он приходил в воодушевление от своих воспоминаний,

Справка



Шатьендранат Бозе (1 января 1894, Калькутта — 4 февраля 1974, там же) — индийский физик, специализировавшийся в математической физике. Один из создателей квантовой механики, статистики (Статистика Бозе — Эйнштейна), теории конденсата Бозе — Эйнштейна. В его честь назвали бозон.

Член Лондонского королевского общества с 1958 года. Национальный профессор Индии с 1958 года. Окончил университет в Калькутте (1915). В 1924—1925 годах работал в Париже у М. Склодовской-Кюри. В 1926—1945 годах профессор университета в Дакке, в 1945—1956 — в Калькутте. Вывел формулу Планка для распределения энергии, излучаемой абсолютно чёрным телом, исходя из предположения, что два состояния системы, отличающиеся перестановкой одинаковых квантов в фазовом пространстве, считаются тождественными.

для него все это оживало, и я словно присутствовал при разговоре с человеком, который только что закончил свою беседу с Эйнштейном, а теперь мне пересказывает, что он тогда сказал.

А вот Глаубер действительно был знаком с Эйнштейном. Он тогда был студентом и вел с ним краткую беседу.

— *А вашим научным руководителем был Владимир Александрович Фок?*

— Формально я не был у него в аспирантуре. Но он написал отзыв на мою кандидатскую диссертацию, чтобы она была представлена в ученый со-

вет. Однако у меня в автореферате нет научного руководителя, что в то время не вызывало особого удивления. Сам работал — сам написал. До войны вообще не было такого статуса — научный руководитель. Фок просматривал мои статьи, но я всегда приходил с уже готовой работой, а потом и с диссертацией пришел, а он просматривал их, как заведующий кафедрой. Я ему сказал, что вроде бы руководитель в моем положении нужен. А Фок ответил так: «Ну если уж вам так нравится, то пожалуйста, но я в этом необходимости не вижу». Я потом решил, что если у меня и есть ошибки, то пусть это будут мои ошибки, а не его.

— *Александр Владимирович, расскажите, пожалуйста, про ваше знакомство с Дираком.*

— Дирака я всегда воспринимал, как человека, нитями связанного с нашим университетом. Фок был в дружеских отношениях с ним. У них есть ряд совместных работ. Случайно получилось так, что во время приезда Дирака, я оказался в ряду тех, кто стоял рядом и слушал. Ему задавали вопросы, а он отвечал. Когда Дирак приехал в Ленинград и его спросили, что вы хотите увидеть, он сказал, что хочет увидеть мамонта. Его сразу повели в зоологический музей и показали мамонтенка.

Звучали и другие великие имена, оживали давние и совсем новые истории. Разговор этот случился осенью и длился более часа, но для слушателя время летело незаметно. А с записью происходили поистине мистические вещи. Диктофоны не записывали, а компьютеры ломались, унося в темноту только законченный текст. Да это и не удивительно, ведь моим собеседником был человек, посвятивший свою жизнь сложной и красивой науке, которую не понимают и боятся студенты, которая для большинства остается неведомой тайной.

Анна Мелехова