

O pięknie fizyki, czyli jak opisać  
602 214 199 000 000 000 000 000 atomów.  
Magnetyzm i fizyka ciała stałego

R. J. Radwanski\*

Centrum Fizyki Ciała Stałego; Św. Filipa 5, Kraków  
Instytut Fizyki Akademii Pedagogicznej, ul. Podchorążych 2, Kraków  
(rozszerzony przedruk artykułu autora wydrukowanego w Koncepcja 2/2005 (22)-  
czasopisma Akademii Pedagogicznej w Krakowie,  
published 31 October 2007; online: [www.actaphysica.eu](http://www.actaphysica.eu))

"Experiments are the only means  
of knowledge at our disposal.  
The rest is poetry, imagination.  
(Max Planck)

### I. CZYMŻE JEST PIĘKNO?

Każdy, a na pewno zdecydowana większość zwykłych zjadaczy chleba, czytając początek tytułu zachnie się: fizyka piękna? Ta niechęć do fizyki ujawnia się na przykład tym, że praktycznie wyrzuciło się ją obecnie ze szkół. Pozostała tylko w gimnazjum czy w liceum jedna godzina w tygodniu. Dorośli, sami niedouczeni i zniechęceni, bo nie rozumieją..., zadbali o to, aby ich dzieci nie za bardzo musiały męczyć się nad zasadami i wzorami, z którymi fizyka jest utożsamiana. A dzieci ze swoją nieustanną ciekawością świata - czy one naprawdę byłyby takie niechętne do uczenia się fizyki, gdyby nie przekazywane z pokolenia na pokolenie straszenie fizyką. Patrząc na otaczający świat kolory kwiatów, tęczy, nieba, liści, krople deszczu, błyskawice, huragany, chmury, gwiazdy. Gdy czasem zadacie sobie pytanie - dlaczego? to już jest pierwszy krok do fizyki. Szukanie odpowiedzi to jest fizyka. Czymże jest piękno fizyki, zapytałby ktoś filozoficznie, gdyby chciał wykazać dobrą wolę i zainteresowanie. Czymże w ogóle jest piękno? Kształtem jest miłości odpowiadają poeci. Nie idąc tak głęboko w uczucia i w odczucia, wobec których opisu fizyka jest jednak bezradna, może trzeba powiedzieć, że piękno fizyki ukrywa się z jednej strony

\* <http://www.css-physics.pl>; Email: [sfradwan@cyf-kr.edu.pl](mailto:sfradwan@cyf-kr.edu.pl)

w prostocie opisu skomplikowanego świata a z drugiej, w fascynacji, że taka mała krucha istota, jaką w istocie swojej jest człowiek, potrafi swoim umysłem zgłębiać tajemnice przyrody i otaczającego nas świata, poczynając od małego atomu aż po krańce Wszechświata. Człowiek potrafi też badać otaczający nas świat w jego historii. Zarówno w tej krótkiej, naszej tożsamości osobistej i narodowej (1000 lat), ale i początków człowieka homo sapiens i homo erectus sprzed 2 milionów lat. Dzisiaj też potrafimy dyskutować (naukowo, a jakże!) o powstaniu Ziemi (3.5 mld lat) jak i wieku Wszechświata (13.7 mld lat). Spekulujemy, naukowo oczywiście, co było przed Wielkim Wybuchem, a także jaka będzie nasza przyszłość, gdy za 2 mld lat spotkamy się z Mgławicą Andromedy (tak, tak przyjdzie do nas i sprawdzi się to, co pisał Lem, tyle tylko, że śmiejemy się czy nasi następcy będą szczęśliwi z tych spotkań 3-ciego stopnia) lub, gdy za 5 mld lat nasze Słońce przestanie świecić - wszystko się kiedyś wypali. To wszystko jest zawarte w zasadach, prawach i równaniach fizyki. Te zasady, prawa i równania są piękne w swojej prostocie i ogólności.

## II. FIZYKA PORZADKUJE NASZE PATRZENIE NA ŚWIAT PRZYRODY

Druga część tytułu to jakaś ogromna liczba. Jej ogrom trudno ogarnąć. A liczba ta, znana w fizyce i chemii jako liczba Avogadro, wiąże nam mikroświat z naszym makroskopowym światem. Liczba ta jest tak wielka, bo atom, z którego cała materia jest zbudowana, jest bardzo, bardzo mały. Dość powiedzieć, że na długości 1 milimetra można ułożyć 10 milionów atomów wodoru, najmniejszego pierwiastka. Innych atomów niewiele mniej, np. atomów żelaza - 4 miliony. Też bardzo dużo. Atomy po prostu są małe. Nie wchodząc w definicję 1 mola (nie tego co zjada ubrania w szafie) liczba powyższa podaje z grubsza liczbę atomów czy cząsteczek w gramowych masach spotykanych w naszym makroskopowym świecie. Taka liczba cząsteczek wody waży 18 gramów i zajmuje objętość 18 centymetrów sześciennych, tj. 1/12 objętości szklanki. Aby wyobrazić sobie jak mały jest atom warto przytoczyć fakt, że w jednej kropli wody jest więcej atomów niż jest kropli wody we wszystkich oceanach na Ziemi!

## III. FIZYK A WIARA

Można powiedzieć, że każdy fizyk wierzy. Tak, każdy fizyk wierzy. Wierzy, że świat, który nas otacza, a który jest przedmiotem badania nauki zwanej fizyką, jest poznawalny i opisywalny. Bez tej wiary jego

codzienna praca, zmierzająca do opisu otaczającego nas świata, nie miałyby sensu. Fizyk w codziennej pracy wiedząc, że otaczający świat jest skomplikowany, wierzy że prawa nimi rządzące muszą dawać się odkrywać. Wiare tę czerpie z doświadczeń swoich poprzedników (Demokryt i inni wielcy starożytni Grecy, Kopernik, Galileusz, Newton, Einstein, ...), ale także z naszej konstrukcji człowieka, który ma w sobie zamontowane zainteresowanie otaczającym światem wyrażające się w potrzebie odkrywania świata przez raczkujące dziecko. Jednocześnie każdy fizyk wie, że pomimo zadziwiającej skuteczności wypracowanej metody nauki, fizyka nie jest w stanie odpowiedzieć na każde pytanie nękające człowieka. Na pewno nie odpowie na pytania o szczęście człowieka ani na pytania z tzw. metafizyki. Po prostu świata Ducha nie da się badać za pomocą szkiełka i oka, nawet wyposażonego w teleskop czy mikroskop elektronowy. Ale jednocześnie fizyk odkrywając prawa przyrody zdumiewa się istniejącym porządkiem świata. Nawet więcej, można powiedzieć, że zdumiewa się sensem świata. Gdyby stałe przyrody były inne, nawet stosunkowo nieznacznie, Świat byłby inny. Gdyby siły przyciągania elektrycznego i budowa atomów wodoru i tlenu była inna, to woda miałaby inne właściwości i np. byłaby płynna w temperaturach pomiędzy 200 a 300 °C, a nie pomiędzy 0 a 100 °C jak obecnie. Na Ziemi nie byłoby wody, byłyby lód. Gdyby gęstość lodu była większa od gęstości wody lód nie pływałby po wodzie. Woda zamarzając w zimie zniszczyłaby całe życie w rzece czy w jeziorze. Gdyby stała grawitacji  $G$  była inna to nasza Ziemia byłaby w innej odległości od Słońca. A w zależności od tego byłoby nam cieplej lub zimniej, ale czy wtedy dałoby się na naszej Ziemi żyć? Jak wtedy wyglądałyby rozumne istoty? To są te fascynacje fizyka, biologa czy astronoma otaczającym światem. Otaczający nas Świat ciągle się zmienia. Fizyka czy astronomia odkrywa niezawodny mechanizm działania przyrody, codziennego wschodu i zachodu Słońca. Gwiazdy rodzą się i umierają - nie tylko te w Hollywood, ale i te na naszym Niebie. Tyle tylko, że mają inny czas życia. Czas naszego życia, pojedynczego człowieka, rzędu miliarda sekund, ale i 40 tysięcletniej obecności świadomego człowieka, to mgnienie oka w historii Wszechświata. Patrząc na ten niezawodny mechanizm przyrody człowiek doznaje zadumy.

#### IV. MAGNETYZM

Jest właściwością przyrody (można też powiedzieć, że tak Bóg stworzył świat), że tzw. cząstki elementarne, najmniejsze cząstki materii, charakteryzują się spinem. Obrazowo można powiedzieć, że takie cząstki jak elektron, proton, neutron zachowują się jak malutki magnes

(mówimy, że mają spin  $s=1/2$ , który może przyjmować tylko dwa kierunki, mieć dwie wartości  $s_z=+1/2$  i  $s_z=-1/2$ ). Proton i neutron mają 1000 razy mniejszy moment magnetyczny niż elektron większość właściwości naszego świata związanych jest z elektronem i z jego spinem. Ten mały magnes ujawnia się, gdy elektron włożymy w pole magnetyczne. Magnetyzm atomu związany jest w zasadzie z magnetyzmem elektronów, które wchodzi w jego skład. W istocie o magnetycznych właściwościach atomu decydują elektrony z ostatnich nie w pełni zajętych powłok elektronowych, bo te z zamkniętych (zajętych) powłok wzajemnie się kompensują. Z ruchem elektronów wokół jądra atomu (po orbitach) związany jest moment orbitalny atomu. Taki krążący ładunek elektryczny to nic innego jak mały obwód kołowy prądu elektrycznego. A taki obwód kołowy (tzw. ramka z prądem) zachowuje się w polu magnetycznym tak jakby miała moment magnetyczny. Wypadkowy moment magnetyczny atomu związany jest z momentami orbitalnymi i spinowymi elektronów z niezajętych powłok. Możemy tylko powiedzieć, że jest związany. Nie ma tu prostych reguł np. dodawania. Określanie momentu magnetycznego swobodnego atomu jest przedmiotem fizyki atomowej. W materii, w której jest wiele, bardzo wiele atomów problem jest jeszcze bardziej skomplikowany, bowiem wpływają one na swoje momenty magnetyczne nawzajem. I w ten sposób dochodzimy do ważnego naukowo problemu opisu, lub co najmniej próby opisu właściwości wielu, bardzo wielu, blisko siebie znajdujących się atomów. Można powiedzieć, że doszliśmy do fizyki ciała stałego.

## V. FIZYKA CIAŁA STAŁEGO

Zajmuje się opisem właściwości ciał takich, z którymi spotykamy się w życiu codziennym. Inna nazwa - fizyka fazy skondensowanej na określenie gęsto upakowanej materii (w przeciwieństwie do stanu gazowego, bardzo rozrzedzonego). W nazewnictwo faza skondensowana, w stosunku do ciała stałego, wchodzi jeszcze ciecz. Zdecydowana większość ciał stałych to substancje krystaliczne. Wtedy atomy tworzą regularnie zbudowaną sieć przestrzenną. Wemy np. tlenek niklu NiO czy tlenek żelaza FeO. Makroskopowy kawałek tlenku niklu zbudowany jest z kryształów o kształcie sześcienu tak jak dobrze nam znana sól kuchenna NaCl. Budowa takiej komórki jest prosta. W trzech wzajemnie prostopadłych kierunkach najbliższy sąsiad to atom przeciwnego rodzaju. Każdy atom ma sześć najbliższych sąsiadów innego rodzaju. Tworzą one oktaedr takie dwie połączone podstawami piramidy - idealna bryła znana już starożytnym Grekom. W efekcie atom niklu czy żelaza znajduje się w środku tego oktaedru. Rodzaj atomu i jego ładunkowe otoczenie de-

cydują o własnościach całego ciała czyste żelazo czy rdza, czerwona miedź czy zielona patyna, bezbarwny  $\text{Al}_2\text{O}_3$  czy czerwony rubin, gdy domieszczy nieco chromu. W idealnym kryształcie np. NiO wszystkie atomy niklu znajdują się w takim samym oktaedrze (niekoniecznie idealnym). Jeżeli tak, to opisując jeden atom niklu opisuje się jednocześnie wszystkie. W ten sposób opisane zostaje zachowanie wszystkich miliardy miliardów atomów całej makroskopowej próbki. Oczywiście nie jest to takie proste jak tutaj to zostało skrótowo opisane, ale przedstawia to ogólne podejście do problemu opisu właściwości ciał w ramach Kwantowej Atomistycznej Teorii Ciała Stałego (QUASST). Teoria ta przyjmuje, że opis makroskopowych właściwości jakiegoś ciała stałego należy zaczynać od opisu pojedynczego atomu w kryształcie. Fizycy mówią, używając pojęć współczesnej mechaniki kwantowej, że coś opisać to znaczy podać funkcję falową. Jest to pojęcie abstrakcyjne, ale znajomość funkcji falowej pozwala wiedzieć wszystko o atomie czy cząstce. W rzeczywistości wykonane doświadczenia fizyczne badające zachowanie się danego atomu np. w polu magnetycznym czy elektrycznym czy też w różnych temperaturach pozwalają składać wiedzę o tej cząstce czy atomie, tj. pozwalają budować jej funkcję falową. O ile funkcja falowa jest abstrakcyjna to dostępne są bezpośredniemu pomiarowi stany energetyczne danej cząstki czy atomu. Opisać atom np. w kryształcie to podać jego stany energetyczne, ich energie i charakterystyki. Zaś zadaniem teorii jest wyjaśnienie tych obserwowanych stanów, ich energii i ich eksperymentalnych charakterystyk, które objawiają się np. w podatności magnetycznej, cieple właściwym, czy barwie. Opracowana, przez autora niniejszego opracowania w Centrum Fizyki Ciała Stałego w Krakowie we współpracy z Instytutem Fizyki AP, Kwantowa Atomistyczna Teoria Ciała Stałego (QUASST) umożliwia wyjaśnienie obserwowanych stanów energetycznych dla związków zawierających atomy z niekompletną powłoką elektronową. Zwane są one powłokami  $3d$  (w atomach z grupy żelaza - tu jest wspomniany Ni w NiO),  $4f$  (w ziemiach rzadkich albo lantanowcach) lub  $5f$  (w aktynowcach zwanych też uranowcami). Okazuje się, że ta nisko-energetyczna struktura energetyczna obserwowana w ciałach stałych może być obliczona korzystając ze znajomości fizyki atomowej (reguły Hunda, oddziaływanie spin-orbita, ...) oraz biorąc pod uwagę oddziaływania w krystalicznym ciele stałym takie jak pole krystaliczne o danej symetrii czy międzywęzłowe oddziaływania spinowe. Symetria pola krystalicznego związana jest z najbliższym otoczeniem ładunkowym atomu/ionu w kryształcie. Teoria QUASST (więcej: [www.css-physics.pl](http://www.css-physics.pl)) została z powodzeniem zastosowana do wielu związków dając spójny opis właściwości ciał stałych w powiązaniu z ich dyskretną strukturą energetyczną. Badane związki

widać ze spisu publikacji autora zamieszczonego w niniejszym numerze, strona 19. Teoria ta opisuje stany energetyczne z ponad 1000 razy większą dokładnością ( $< 1$  meV, meV jest jednostką energii używaną w mikroświecie) niż inne obecne teorie fizyki ciała stałego (kilka eV). Od ponad 20 lat fizycy podkreślają bowiem fakt, że atomy tworząc ciało stałe tracą w znacznym stopniu swoje atomistyczne własności. Teorie te podkreślają tworzenie pasm o szerokości energetycznej nawet kilku elektronowoltów i skupiają się na rozpatrywaniu własności gazu elektronowego. QUASST rozwiązuje problem startując z diametralnie innego punktu startowego, lokalnego i atomistycznego. Każda teoria naukowa jest tak długo prawdziwa jak długo nikomu nie uda się wykazać jej nieprawdziwości. Warto jednak pamiętać o powiedzeniu Maxa Plancka, że "Experiments are the only means of knowledge at our disposal. The rest is poetry, imagination." co znaczy, że eksperyment jest jedyną drogą zdobywania wiedzy - reszta jest poezją, więc decydującym argumentem prawdziwości teorii jest jej zgodność opisywania rzeczywistości.

## VI. TROCHE O FILOZOFII UPRAWIANIA NAUKI

Często w historii nauki zdarzały się przypadki, że krytyka nie była merytoryczna a pozanaukowa, mająca na celu obronę własnych i własnej instytucji interesów czy też związana z emocjami (naukowcy to przecież też ludzie). Zapewne znaczna część krytyki pochodzi od współczesnych "ambitnych" naukowców, nazwałbym ich rygorystami, którzy chcieliby opisać (policzyć) wszystko od początku. Obecnie w fizyce funkcjonuje hasło metody *ab initio* stawiające sobie za cel policzenie wszystkiego od początku. W przypadku ciała stałego znaczy to, obrazowo mówiąc, że do garnka wrzucamy odpowiednią liczbę składników, tj. protonów, neutronów i elektronów (a w prostszej wersji tylko elektronów) oraz prawa fizyki, a potem mieszamy, mieszamy, mieszamy... Liczy za nas bardzo długo komputer symulując różne możliwe sytuacje łączenia się tych protonów, neutronów i elektronów, ich ułożenia w przestrzeni oraz własności, które zgadzałyby się z tym co obserwujemy. Jak na razie tym sposobem nie potrafimy dobrze policzyć nawet zlepka 10-15 atomów (co to jest w porównaniu z miliardem miliardów atomów w gramowej próbce lub w porównaniu do pokazanej w tytule liczby Avogadro). Potrzeba być może lepszych komputerów. Tylko, że te obliczenia i tak doprowadzą nas do odtworzenia atomu tej cegiełki materii. Adekwatność fizyczna QUASST wynika z opisanego obserwowanych stanów energetycznych i wynikających z nich właściwości będących w dobrej zgodności z wynikami eksperymentalnymi (spis opisanych związków:

www.css-physics.pl). Wynika stąd dalej, że rzeczywiście atomy nawet skupione bardzo blisko siebie i tworzące ciało stałe zachowują dużo swoich atomowych właściwości, nawet stając się jonami, tj. oddając czy zyskując w procesie tworzenia związku elektrony. Możliwość opisanie wyników eksperymentalnych, a nawet ich przewidywania jest miarą jakości i prawdziwości teorii naukowej. Pozostaje odwieczne pytanie (filozoficzna refleksja): Dlaczego ten świat jest taki jaki jest? Dlaczego i jak tworzy skomplikowane formy przyrody i życia w oparciu o stosunkowo mało liczbę ogólnych praw i zasad oraz mając stosunkowo niewielką liczbę cegiełek około 90 pierwiastków znanych z tablicy Mendelejewa.

Pomimo ponad 10-letnich prób falsyfikacji, tj. prób wykazania błędów w podejściu proponowanym przez QUASST, przez naukowców Polskiej Akademii Nauk, Uniwersytetu Jagiellońskiego czy Akademii Górniczo-Hutniczej, nie udało się im wykazać błędów. Im ani nikomu innemu w sposób naukowy. Wprost przeciwnie ostatnio profesorowie z UJ potwierdzili nasze obliczenia stanu podstawowego jonu  $Mn^{3+}$  (atom manganu bez 3 elektronów) czy  $V^{3+}$  w polu oktaedrycznym kryształów  $LaMnO_3$ ,  $LaVO_3$  i  $V_2O_3$ . Jest to wielki sukces rozwijanego podejścia teoretycznego. Oczywiście na ogłoszenie definitywnego sukcesu trzeba jeszcze poczekać w zasadzie nie można udowodnić prawdziwości teorii naukowej. Każda teoria naukowa jest tak długo prawdziwa jak długo nikomu nie uda się wykazać jej nieprawdziwości. Ale już sam fakt opracowania w Polsce unikalnej teorii w skali światowej jest ważną sprawą. Tym bardziej, że teoria ta dotyczy bardzo szerokiej klasy związków i ważkiego problemu naukowego: opisu właściwości ciał stałych zawierających atomy metalu przejściowego.

Z potrzebą szybszych komputerów można, a nawet trzeba się zgodzić, to dlaczego z tego powodu należy odrzucać podejście teoretyczne, które zakłada, że elektrony są skupione wokół protonów i neutronów odtwarzając atomy, dokładniej jony, trudno zrozumieć. Już przecież Demokryt 2 500 lat temu powiedział, że materia jest zbudowana z atomów. Z adekwatności fizycznej QUASST, tj. z opisanie obserwowanych stanów energetycznych i wynikających z nich właściwości będących w dobrej zgodności z wynikami eksperymentalnymi, wynika, że rzeczywiście atomy nawet skupione bardzo blisko siebie i tworzące ciało stałe zachowują dużo swoich atomowych właściwości. Najważniejsze jest to, że QUASST opisuje obserwowane stany energetyczne i wynikające z nich właściwości, które są w bardzo dobrej zgodności z wynikami eksperymentalnymi (spis opisanych związków: www.css-physics.pl, www.e-physics.pl). A możliwość opisanie wyników eksperymentalnych, a nawet ich przewidywania jak kilkakrotnie już pokazano

w QUASST, jest miarą jakości i prawdziwości teorii naukowej.

## VII. CO UMOŻLIWIŁO TEN SUKCES?

Charakterystyczną cechą QUASST jest skupienie się na budowie ciał krystalicznych, wprzęgnięciu wiedzy z fizyki atomowej do fizyki ciała stałego oraz systematyczne analizowanie właściwości całych grup związków o tej samej strukturze krystalograficznej (izostrukturalnych). Rozwiązując problem np. NiO staramy się mieć na uwadze właściwości FeO, CoO i innych tlenków. Analogicznie rozwiązując właściwości LaCoO<sub>3</sub> (praca doktorska dr Z. Ropka) mamy na uwadze LaMnO<sub>3</sub>, LaVO<sub>3</sub> i LaTiO<sub>3</sub>. Podobnie serię ErNi<sub>5</sub>, NdNi<sub>5</sub>, DyNi<sub>5</sub> czy PrRu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>, ErRu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>, NdRu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> (praca doktorska dr R. Michalskiego) Takie przejścia od jednego rodzaju atomu do innego umożliwia teoria pola krystalicznego będąca nieodłączną częścią Kwantowej Atomistycznej Teorii Ciała Stałego. Budowa kryształów zaś jest rezultatem działania dobrze już poznanych praw fizyki. A że ponieważ prawa te są zawsze słuszne i ślepe więc umożliwiają naturze budowę dobrych kryształów, tzn., że każdy atom dokładnie wie, które miejsce ma zająć. Problem ten można odwrócić badając różne kryształy można odkrywać coraz szczegółowsze reguły budowy kryształów. Na koniec pozwolę sobie wyrazić przekonanie, że zaprezentowane podejścia naukowe wynikające z diskutowanych powyżej różnych filozofii uprawiania nauki zbiegną się w przyszłości jak będą te super szybkie komputery i przy ich pomocy udowodnimy to co już wiemy od ponad 2 500 lat, że atomy istnieją!! Będziemy szczęśliwi, że udało nam się to udowodnić! Ale za dużo szczęśliwi si jednak chyba nie będziemy.

## VIII. JAK POKAZAĆ PIĘKNO ŚWIATA?

Ponieważ niemożnością jest pokazanie piękna świata i jego barw niewidomemu to dla pokazania piękna świata odślanianego we współczesnej fizyce niezbędna jest znajomość jej języka matematyki oraz filozoficzna refleksja Dlaczego ten świat jest taki jaki jest?. Dlaczego i jak tworzy skomplikowane formy przyrody i życia w oparciu o stosunkowo mało liczbę ogólnych praw i zasad oraz mając stosunkowo niewielką liczbę cegiełek pierwiastków znanych z tablicy Mendelejewa. I jeżeli u czytelnika wywołam taką refleksję będę uważał, że cel niniejszego artykułu został osiągnięty. A dla fizyków i studentów, którzy znają już dużo praw fizyki, to zauważać będą coraz częściej przejawy działania tych praw w codziennym świecie.