

A U T O R E F E R A T
z działalności naukowej, dydaktycznej i
organizacyjnej po uzyskaniu stopnia doktora
habilitowanego (15.02.1990)
do chwili obecnej (7.05.2001)

*R. J. Radwanski**

prof. nadzw. w Akademii Pedagogicznej w Krakowie

Centrum Fizyki Ciała Stałego; Św. Filipa 5, Kraków

Instytut Fizyki Akademii Pedagogicznej, ul. Podchorążych 2, Kraków

(published 31 October 2007; online: www.actaphysica.eu)

I. DZIAŁALNOŚĆ NAUKOWO-BADAWCZA

Po uzyskaniu stopnia doktora habilitowanego opublikowałem 76 oryginalnych prac w czasopismach anglo-języcznych o zasięgu światowym.

Moje zainteresowania i prace naukowo-badawcze ogniskują się wokół problemu struktury elektronowej i magnetyzmu związków zawierających atomy metali przejściowych. Obecnie prowadzone badania są rozszerzeniem badań, podjętych ponad 20 lat temu, nad właściwościami związków zawierających atomy metali ziem rzadkich. Z badań zawartych w rozprawie habilitacyjnej: "Oddziaływania wymienne i anizotropia magnetokrystaliczna w związkach ziemia rzadka z metalem przejściowym 3d" wynikało, że olbrzymia anizotropia magneto-krystaliczna związków ziem rzadkich związana jest z efektami jednojonowymi i istnieniem dyskretnej nisko-energetycznej, <1 meV, struktury elektronowej związanej z obecnością jonów ziem rzadkich. W habilitacji wykazano, że strukturę tę można policzyć w ramach teorii pola krystalicznego, chociaż z dzisiejszej perspektywy widać, że były to obliczenia bardzo uproszczone (bardzo mało było wiadomo np. na temat parametrów pola krystalicznego wyższych rzędów). Hipoteza

* <http://www.css-physics.pl>; Email: sfradwan@cyf-kr.edu.pl

o istnieniu w związkach międzymetalicznych pola krystalicznego i nisko-energetycznej dyskretnej struktury energetycznej była w tamtym czasie nieco kontrowersyjna i budziła szeroką dyskusję w środowisku naukowym. Hipoteza ta jednak, w przeciwieństwie do zdecydowanej większości istniejących teorii, mogła być eksperymentalnie weryfikowana, ponieważ wynika z niej szereg konkretnych właściwości elektronowych i magnetycznych związków. Wykazano, że tę dyskretną strukturę elektronową można liczyć w ramach rozszerzonej teorii pola krystalicznego, zaś wynikające stany energetyczne i ich funkcje falowe są rzeczywiście eksperymentalnie obserwowane.

Badania naukowe prowadzone przez ostatnich 11 lat (po habilitacji) można krótko scharakteryzować jako poszukiwanie potwierdzenia istnienia dyskretnej atomo-podobnej struktury elektronowej w związkach zawierających atomy ziem rzadkich, z jednoczesnym znacznym pogłębieniem zrozumienia współczesnych teorii ciała stałego (ze szczególnym zwróceniem uwagi na magnetyzm) i poszerzeniem aparatu obliczeniowego stosowanej teorii.

Jednocześnie koncepcję dyskretnej struktury elektronowej zastosowano z powodzeniem do znacznie szerszej klasy związków tj. związków zawierających atomy aktynowców $5f$ i z grupy żelaza $3d$. Wykazano jej przydatność do opisu właściwości fizycznych szeregu konkretnych związków (ErNi_5 , $\text{Ho}_2\text{Co}_{17}$, UPd_2Al_3 , UGa_2 , FeBr_2 , NiO) oraz dużą zdolność przewidywania i unifikacji.

Badania prowadzone w okresie tych 11 lat badań można podzielić na trzy okresy:

1. 1990-1994 w okresie tym zweryfikowano eksperymentalnie istnienie dyskretnej atomo-podobnej struktury energetycznej w związkach ziem rzadkich. Przebadano wtedy ErNi_5 , gdzie strukturę energetyczną wynioskowaną z pomiarów w silnych polach magnetycznych (poz. 48) pozytywnie zweryfikowano eksperymentalnie poprzez zainicjowane pomiary ciepła właściwego (poz. 44 i 36). Przebadano także DyNi_5 (poz. 36) i NdNi_5 (poz. 27). Oczywiście wszędzie uwzględniano spinowe oddziaływania między-węzłowe (w przybliżeniu pola molekularnego), niezbędne do utworzenia stanu uporządkowanego magnetycznie. Badania te udowodniły, że w związku międzymetalicznym istnieje subtelna atomo-podobna struktura elektronowa związana z systemem $4f^n$ trójwartościowego jonu ziemi rzadkiej, która współistnieje ze strukturą elektronów wędrownych opisywanych teorią pasmową. Dyskretne poziomy energetyczne zaobserwowano m.in. w eksperymentach nieelastycznego rozpraszania neutronów (poz. 29). W 1992 roku teoretycznie wykazano (poz. 45), że pole krystaliczne o niskiej symetrii

może prowadzić do niemagnetycznego stanu układu atomowego $4f^3$. Jest to wynik niezmiernie ważny biorąc pod uwagę, że system $4f^3$ jest systemem kramersowskim i ma dubletowy stan podstawowy. Ten teoretyczny wynik następnie uogólniono i wprowadzono jako ładunkowy mechanizm tworzenia stanu niemagnetycznego (poz. 32), w analogii do spinowego mechanizmu tworzenia stanu niemagnetycznego domieszki (znanego w literaturze jako efekt Kondo). [Na pewno pole krystaliczne znacznie redukuje moment magnetyczny magnetycznej domieszki]. W okresie tym także eksperymentalnie badano oddziaływania pomiędzy momentami $3d$ i $4f$ (m. in. poz. 76) oraz wpływ silnego pola magnetycznego na wewnętrzną strukturę magnetyczną i proces magnesowania (tworzenie niekolinearnych struktur magnetycznych, m.in. poz. 56).

2. 1993-1996 w okresie tym zastosowano model pola krystalicznego, tj. model z dyskretną nisko-energetyczną strukturą elektronową, do opisu własności związków zawierających atomy aktywnców, m.in. opisując temperaturową zależność ciepła właściwego UPd_2Al_3 (poz. 40). Następnie opisano właściwości UGa_2 (poz. 20) w ramach teorii pola krystalicznego z uwzględnieniem oddziaływań spinowych i elektrostatycznych wyższych rzędów. Wykorzystując otrzymany układ parametrów pola krystalicznego opisano następnie właściwości $NpGa_2$ (poz. 12). Tu na uwagę zasługuje fakt wyjaśnienia, że to samo pole krystaliczne, tworzone przez heksagonalną strukturę, realizuje w przypadku UGa_2 strukturę magnetyczną z momentem w płaszczyźnie heksagonalnej, zaś w przypadku $NpGa_2$ moment leży wzdłuż osi heksagonalnej. Wynika to tylko z różnego znaku momentów kwadrupolowych trójwartościowych jonów uranu i neptunu. W tym też okresie wykazano, że anomalnie duże ciepło właściwe Nd_2CuO_4 w temperaturach poniżej 3 K jest głównie spowodowane małym, energia $5 K = 0.5 meV$, rozszczepieniem dubletowego stanu Kramersa jonu Nd^{3+} (poz. 17), umożliwiającym nisko-energetyczne spinowo-podobne neutralne wzbudzenia. Ten punkt widzenia został eksperymentalnie potwierdzony przez późniejsze eksperymenty nieelastycznego rozpraszania neutronów prowadzone w grupie Prof. Furrera ze Szwajcarii (Phys. Rev. Lett. 80 (1998) 1300), gdzie zaobserwowano zlokalizowane wzbudzenie o energii 0.5 meV w temperaturach poniżej 2 K. O kontrowersji związanej z tym zagadnieniem może świadczyć wymiana Comments w Phys. Rev. Lett. 82 (1999) 2217 i 2218 podjęta przez grupę niemiecką, co równocześnie świadczy o ważności naukowej prowadzonych badań.

3. Po roku 1997 - podjęto badania związków zawierających atomy z grupy żelaza takich jak $LaMnO_3$, $LaCoO_3$, $FeBr_2$ czy NiO . Do opisu tych związków zastosowano podobny opis jak do związków ziem rzadkich odtwarzając zarówno własności stanu podstawowego, jak i

termodynamikę. Zastosowane podejście podkreśla istnienie dyskretnych atomo-podobnych stanów energetycznych elektronów niezapełnionej powłoki $3d$ (m. in. poz. 9, 6). Dla opisu tych stanów ważna jest lokalna symetria oraz wewnątrz-atomowe oddziaływanie spin-orbita. Uzyskano spójny opis właściwości LaCoO_3 i FeBr_2 (obroniona praca doktorska pani dr Z. Ropki, poz. 9, 4, 1). Wykazano, że to lokalna symetria (znak trygonalnej dystorsji otoczenia oktaedrycznego) prowadzi do stanu niemagnetycznego jonu Co^{3+} w LaCoO_3 i stanu magnetycznego jonu Fe^{2+} w FeBr_2 . [Pełna struktura elektronowa LaCoO_3 została przez nas wyjaśniona w 2003 roku w pracy opublikowanej w *Phys. Rev. B* **67** (2003) 172401]. Badania te wskazują na fundamentalnie ważną rolę oddziaływania spin-orbita przy opisie właściwości związków zawierających atomy $3d$. Żadna inna teoria nie jest obecnie w stanie opisywać zarówno stanu podstawowego jak i termodynamiki związków $3d$. Ponadto, stosowana teoria pozwala opisać nie tylko poszczególne związki, ale całe grupy związków jak to wykazano dla LaCoO_3 i FeBr_2 , a wcześniej dla UGa_2 i NpGa_2 oraz ErNi_5 , DyNi_5 , NdNi_5 i PrNi_5 , $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ i $\text{Pr}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, czy $\text{Ho}_2\text{Co}_{17}$ i $\text{Dy}_2\text{Co}_{17}$.

Obliczono moment całkowity, spinowy i orbitalny Ni w NiO (poz. 6). Jest on w bardzo dobrej zgodności z obecnie dostępnymi wynikami eksperymentalnymi z pomiarów na synchrotronie. Należy dodać, że teoretyczne wyniki dla NiO uzyskano wcześniej (w 1997) niż pojawiła się pierwsza praca eksperymentalna na temat momentu orbitalnego (1998).

Jak widać, konsekwentne stosowanie podejścia teoretycznego bazującego na teorii pola krystalicznego dostarcza spójnego opisu właściwości elektronowych, magnetycznych i spektroskopowych bardzo szerokiej klasy związków zawierających atomy z niezapełnioną powłoką $3d$, $4f$ czy $5f$. Użyto tu sformułowania bazującego na teorii pola krystalicznego, bowiem w literaturze są używane różne jej wersje. W naszej pracy podkreśla się, że istotą używanej teorii jest hipoteza zachowywania atomo-podobnej dyskretnej struktury energetycznej przez atom nawet wtedy, gdy staje się on pełnoprawną częścią ciała stałego. Stąd używana nazwa kwantowa atomistyczna teoria ciała stałego. Stosowane podejście z podkreślaniem istotnej ważności oddziaływania spin-orbita, dyskretnej struktury energetycznej, dwu reguł Hunda i orbitalnego magnetyzmu ciągle budzi pewne kontrowersje (ze względu na teorie pasmowe, które dostarczają ciągłą strukturę stanów elektronów $3d$, często także elektronów $4f$ i $5f$), ale coraz subtelniejsze eksperymenty, na coraz lepszych jakościowo monokryształach, odsłaniają istotną rolę np. magnetyzmu orbitalnego.

Trzeba tu podkreślić, że wagę efektów pola krystalicznego doceniła w 2000 roku Polska Akademia Nauk przyznając godność członka zagranicznego PAN Panu Prof. J. J. M. Franse, z którym miałem przyjemność pracować przez kilka lat w latach 1983-1992. Wspólnie rozpoczynaliśmy badania efektów pola krystalicznego w związkach międzymetalicznych ($\text{Ho}_2\text{Co}_{17}$ poz. 116, 115) w sytuacji panującego wówczas przeświadczenia, że pole krystaliczne nie może istnieć w związkach międzymetalicznych. Warto tu wspomnieć, że Prof. J. J. M. Franse, obecnie Rektor Uniwersytetu w Amsterdamie, ma 92 wspólne publikacje z polskimi naukowcami, z czego 66 są to publikacje wspólne ze mną. Dzisiaj już wiemy, że w związkach międzymetalicznych współistnieją zlokalizowane elektrony $4f$, opisywane dobrze teorią pola krystalicznego, i elektrony wędrowne opisywane teorią pasmową. Nasze badania wskazują, że teoria pasmowa musi zostać rozszerzona o możliwość uwzględniania stanów pola krystalicznego.

Obecnie teoria pola krystalicznego zostaje postrzegana jako teoria opisująca elektrony niezapełnionej powłoki $3d$ czy $4f$, przy czym jej punktem wyjścia jest model elektronów silnie skorelowanych niezapełnionej powłoki. Coraz bardziej zdajemy sobie sprawę, że oddziaływanie pola krystalicznego, pomimo jego jedno-jonowego zapisu, w istocie jest oddziaływaniem międzywęzłowym. Bazuje na podstawowych zasadach symetrii w przestrzeni rzeczywistej (np. magnetyzm związany jest z łamaniem symetrii odwracalności czasu w skali atomowej). Może być używane do opisu systemów, w których brak jest symetrii translacyjnej (co jest niezmiernie ważne w badaniach nowych materiałów, bardzo często z obniżoną symetrią i defektami). Stosowane podejście umożliwia: i) powiązanie fizyki atomowej z fizyką ciała stałego, i ii) powiązanie makroskopowych właściwości związku z jego własnościami w skali atomowej.

Podsumowując, za najważniejsze swoje osiągnięcia uważam:

1. postawienie hipotezy badawczej o istnieniu dyskretnej atomopodobnej nisko-energetycznej struktury elektronowej w związkach zawierających atomy z niezapełnioną powłoką $3d$, $4f$ lub $5f$,
2. spójny opis właściwości elektronowych i magnetycznych ErNi_5 , DyNi_5 , PrNi_5 i NdNi_5 ,
3. spójny opis właściwości elektronowych i magnetycznych UPd_2Al_3 , UGa_2 i NpGa_2 , w analogii do NdNi_5 ,
4. teoretyczne wykazanie istnienia nisko-energetycznych ładunkowo-neutralnych spinowo-podobnych wzbudzeń w niskich temperaturach i

5. spójny opis LaCo_3 i FeBr_2 (wspólnie z doktorantką dr Z. Ropką) podkreślający istotną rolę lokalnej symetrii i słabego oddziaływania spin-orbita w opisie związków $3d$,
6. podkreślenie roli orbitalnego magnetyzmu w opisie związków $3d$ i potrzebę odmrożenia momentu orbitalnego w fizyce magnetyzmu $3d$,
7. spójny opis własności PrRu_2Si_2 i całej serii izostrukuralnych związków RRu_2Si_2 (wspólnie z doktorantem dr R. Michalskim), podkreślający istotną rolę lokalnej symetrii i multipolowych oddziaływań pola krystalicznego wyższych rzędów,
8. powiązanie makroskopowych właściwości związku z własnościami w skali atomowej.

9. ostatnie, ale ważne, to możliwość spójnego opisu stanu paramagnetycznego i uporządkowanego magnetycznie łącznie z opisem przejścia magnetycznego i piku λ w temperaturowej zależności ciepła właściwego.

Prowadzone przeze mnie badania są badaniami teoretycznymi, ale zorientowanymi na opis właściwości rzeczywistych materiałów. Obecne badania wydają się być ważne dla współczesnego zrozumienia fizyko-chemii ciała stałego.

Należy dodać, że wcale nie uważam, że wszystko da się wyjaśnić za pomocą teorii atomowej i pola krystalicznego. Uważam natomiast, że rozpatrywanie właściwości związku należy zaczynać od przeanalizowania atomo-podobnej subtelnej struktury elektronowej i wynikających z niej właściwości. Stosowane podejście zgodne jest z filozofią brzytwy Ockhama i wynikającą z niej metodologią nauki. Zamierzam kontynuować obecne badania, widząc bardzo dużą możliwość ich zastosowania do obecnie ważnych problemów fizyki ciała stałego, takich jak: systemy nisko-wymiarowe, formowanie momentu magnetycznego, dystorsje sieci, oddziaływanie elektron-fonon i spin-fonon.

II. DZIAŁALNOŚĆ DYDAKTYCZNA I KSZTAŁCENIE KADR NAUKOWYCH

W ramach obowiązków na Uczelni prowadzę wykłady zarówno z fizyki ogólnej jak i wykłady monograficzne, głównie z fizyko-chemii ciała stałego.

Byłem opiekunem 18 zakończonych prac magisterskich.

Byłem opiekunem 10 zakończonych prac licencjackich.

W czasie pracy naukowej za granicą na Uniwersytecie w Amsterdamie miałem bezpośredni kontakt i nadzór nad wykonywaniem pracy

doktorskiej dr S. Sinnema (1983-1987), dr R. Verhoef (1987-1990) i dr F. E. Kayzel (1990 - 1992) - Promotor Prof. J. J. M. Franse.

Byłem recenzentem jednej rozprawy habilitacyjnej (Dr Luong WFiTJ AGH, 1998)

Byłem promotorem 2 rozpraw doktorskich, zakończonych pozytywnie w 2001 roku. Jedna z tych rozpraw została wyróżniona (dr Z. Ropka)

Jestem obecnie opiekunem naukowym słuchaczki Studium Doktoranckiego WFiTJ AGH.

III. UDZIAŁ W PROJEKTACH NAUKOWO-BADAWCZYCH (EUROPEJSKICH):

1. Concerted European Action on Magnets CEAM-2 (1988-1990) i CEAM-3 (1991-1993) Kordynator Prof. J. M. D. Coey, project M11 (Prof. J. J. M. Franse) finansowany przez Wspólnotę Europejską,

2. BRITE/EURAM Project on Coercivity in Rare-Earth Compounds 1989-1991 Prof. H. Kronmuller (Niemcy), Dr J. Laforest (Francja) i Prof. J. J. M. Franse, Uniwersytet w Amsterdamie, Holandia,

3. BASIC INTERACTIONS IN RARE EARTH MAGNETS (BIREM) 1990-1993) finansowany przez Wspólnotę Europejską. W projekcie brały udział 4 laboratoria europejskie Lab. Laue-Langevina (D. Gignoux), MASPEC-Parma (L. Pareti, O. Moze), Uniw. Zaragozza (R. Ibarra) i Uniw. w Amsterdamie (J. J. M. Franse, R. J. Radwanski). Projekt był koordynowany przez Prof. J. J. M. Franse. W projekcie tym brałem bardzo aktywny udział m. in. poprzez sformułowanie głównych celów naukowych prowadzących do zainicjowania projektu i wygrania konkursu na wsparcie finansowe. W czasie bieżącej realizacji projektu byłem prawą ręką koordynatora Prof. J. J. M. Franse.

IV. PRACA ORGANIZACYJNA I INNE

W 1992 założyłem Centrum Fizyki Ciała Stałego działające do dnia dzisiejszego. Jest to niebudżetowa jednostka naukowo-badawcza prowadząca badania naukowe w dziedzinie fizyki.

Działam w Fundacji SIGN na rzecz Szpitala im. G. Narutowicza w Krakowie, od 1996 do 2000 roku byłem wiceprzewodniczącym. Jest to działalność czysto charytatywna celem polepszenia bazy i wyposażenia Szpitala.

V. UCZESTNICTWO W KONFERENCJACH NAUKOWYCH

Niektóre konferencje międzynarodowe i seminaria z ostatnich 3 lat.

1. Czy teoria Kopernika była tak oczywista jak dzisiaj sądzimy w 525 rocznicę urodzin, Seminarium Wydz. Fizyki i Techniki Jądrowej AGH, 13.03.1998

2. Magnetism and Fine Electronic Structure of Mott Insulators: La_2CuO_4 and Other $3d$ Systems, R. J. Radwański, Z. Ropka, R. Michalski, 2nd Polish-USA Conf. on High Temperature Superconductivity, WROCŁAW 17-21. 08.1998.

3. Magnetism of UPd_2Al_3 , UGa_2 and NpGa_2 R. J. Radwański, Z. Ropka, R. Michalski, 10th Czech and Slovak Conference on Magnetism, KOSZYCE 24-27.08.1998.

4. Quasi-atomic states in d and f electron systems- R. J. Radwański, Z. Ropka, R. Michalski, Wrocław-Duszniki 26-28.05.1999

5. Crystal-field origin of the magneto-crystalline anisotropy of PrRu_2Si_2 , R. Michalski, Z. Ropka, R. J. Radwański, The European Conference: Physics of Magnetism 99, Poznań 21-25.06.1999.

6. Atomic-like description for strongly-correlated electron systems: NiO , LaCoO_3 and UPd_2Al_3 , - Non-Fermi Liquid Effects in Metallic Systems with Strong Electron Correlation, Cambridge (Anglia) 4-10.01.2000 Referat zaproszony, cały pobyt na koszt organizatorów.

7. From atomic physics to solid-state physics - New Theoretical approaches to strongly correlated systems - Isaac Newton Institute, Cambridge (Anglia) 13.-24.04.2000 Referat zaproszony, cały pobyt na koszt organizatorów.

8. Fine electronic structure and magnetism of LaMnO_3 and LaCoO_3 Conf. Open Problems in Strongly Correlated Electron Systems, Bled (Slovenia) NATO Advanced Research Workshop, 26-30.04.2000.

9. Magnetism and fine electronic structure of UPd_2Al_3 and NpPd_2Al_3 compounds, R. J. Radwanski, Z. Ropka, R. Michalski, Int. School on Physics and Chemistry of the Actinides, Max-Planck-Institute, Drezno (Niemcy) 2-3.05.2000

10. Fine Electronic Structure and Magnetism of UGa_2 and $NpGa_2$ compounds, Z. Ropka, R. J. Radwanski, R. Michalski, 30-iemes Journées des Actinides, Drezno (Niemcy) 4-6.05.2000.

11. From atomic physics to solid-state physics - magnetism and electronic structure of $PrNi_5$, $ErNi_5$, $LaCoO_3$ and UPd_2Al_3 , R. J. Radwański, R. Michalski, Z. Ropka, XL Cracow School of Theor. Physics, Zakopane 3-11.06.2000

12. Magnetic Probes of Local Lattice Distortions in Perovskites, XXV International School and IV Polish-Ukrainian Meeting on Ferroelectrics Physics, R. J. Radwanski, Z.Ropka, R. Michalski, Kraków 17-22. 09. 2000.

13. Magnetyzm i struktura elektronowa związków ziem rzadkich - Kwantowa atomistyczna teoria ciała stałego, R. J. Radwanski, Z. Ropka, R. Michalski, Seminarium Własności Fizyczne Związków Międzymetalicznych, Zakopane 11-14.10.2000.

14. Magnetism and fine electronic structure of transition-metal compounds- Zaproszony referat w Paul Scherrer Institute, Villingen (Szwajcaria) 17.11.2000 Referat zaproszony, cały pobyt na koszt organizatorów

15. Unifikacja opisu jonów $3d$ i $4f$ oraz własności ich związków - R. J. Radwański, Sem. Fizyki Ciała Stałego (IF UJ), 17.01.2001.

Kraków, dnia 7 maja 2001