

**Ocena dorobku naukowego i dydaktycznego
dra hab. R. J. Radwańskiego
dokonaną 26.11.2001 dla Rady Wydziału
przez Pana Prof. dr hab. H. Szymczaka
wraz z krótką odpowiedzią z dnia 20.06.2002**

*Odpowiedzi 20.06.2002 R. J. Radwański umieścił pod odpowiednimi
akapitami recenzji p. prof. H. Szymczaka,
dla przejrzystości odróżniając je inną czcionką.*

(Kraków, czerwiec 2002, oddane 22.06.2002 p. Dziekanowi Wydz. Fizyki AGH;
published 31 December 2007; online: www.actaphysica.eu)

**Ocena dorobku naukowego i dydaktycznego
dra hab. Ryszarda Jana Radwańskiego
w związku z wnioskiem o nadanie tytułu naukowego
profesora nauk fizycznych**

*Prof. dr hab. H. Szymczak
Instytut Fizyki PAN, al. Lotników 32/46
Warszawa, dnia 26.11.2001 r*

Na całość dorobku naukowego dra hab. Ryszarda J. Radwańskiego, mierzonego publikacjami angielskojęzycznymi wymienionymi w bazie INSPEC, składa się 126 publikacji, w tym 76 powstałych w okresie po habilitacji. W rzeczywistości dorobek ten jest większy, gdyż w bazie INSPEC nie uwzględniono wszystkich prac konferencyjnych Kandydata. Całość dorobku naukowego dra hab. Ryszarda J. Radwańskiego dotyczy fizyki materiałów magnetycznych. Jako recenzent rozprawy habilitacyjnej Kandydata przeprowadziłem szczegółową analizę zarówno jego dorobku przed habilitacją jak i jego rozprawy habilitacyjnej. Pozytywnie oceniłem wyniki zawarte w rozprawie habilitacyjnej oraz publikacje powstałe w okresie przed habilitacją. Dlatego ograniczę się w tej części recenzji do podkreślenia tylko najważniejszych wyników uzyskanych przez Kandydata w okresie przed habilitacją. Kariera naukowa

drą hab. Ryszarda J. Radwańskiego związana jest ściśle z Akademią Górniczo- Hutniczą, gdzie pracował on w okresie 1974-1992. W okresie przed doktoratem dr hab. Ryszard J. Radwański zajmował się wykorzystaniem metod rentgenostrukturalnych do badania rozszerzalności cieplnej związków międzymetalicznych ziemia rzadka- metal przejściowy. Za najważniejszą pracę wykonaną przez Kandydata w tym okresie uważam publikację w Solid State Comm. (1982) poświęconą magnetostrykcji samoistnej związku międzymetalicznego $Dy_2(Fe_{1-x}Co_x)_{17}$. W pracy tej magnetostrykcję oceniono wykorzystując prawo Vegarda i pokazano, że jest ona kwadratową funkcją namagnesowania. Tej właśnie problematyki dotyczyła również rozprawa doktorska dra hab. Ryszarda J. Radwańskiego pt. „Rozszerzalność termiczna związków międzymetalicznych $Dy_2(Fe-M)_{17}(M=Co \text{ i } Al)$ ”, której obrona odbyła się w 1982 roku.

Istotny wpływ na dalszy rozwój naukowy dra hab. Ryszarda J. Radwańskiego miały wieloletnie pobyty na stażu naukowym w grupie prof. J. J. M. Franse w Amsterdamie. Grupa prof. J. J. M. Franse zajmowała się w tym okresie badaniem właściwości magnetycznych związków międzymetalicznych ziemia rzadka-metal przejściowy wykorzystując do pomiarów kwaziimpulsowe pola magnetyczne (do 40 T). Zasadniczym celem pobytu dra hab. Ryszarda J. Radwańskiego w Amsterdamie było wykorzystanie modelu pola krystalicznego do interpretacji danych doświadczalnych uzyskiwanych przez grupę prof. J. J. M. Franse. Wartość tych danych doświadczalnych polegała przede wszystkim na tym, że grupa prof J. J. M. Franse prowadziła badania na unikatowych monokryształach związków międzymetalicznych, ważnych zarówno z poznawczego jak i aplikacyjnego punktów widzenia. Dr hab. Ryszard J. Radwański wykorzystał do interpretacji wyników pomiarów właściwości magnetycznych tych materiałów najprostszy z możliwych modeli pola krystalicznego, w którym parametry pola krystalicznego traktuje się jak parametry dopasowania, dobierane tak aby najlepiej opisać zmierzone doświadczalnie zależności namagnesowania od pola magnetycznego lub/i temperatury. Ten parametryczny model pola krystalicznego w zastosowaniu do magnetyzmu związków międzymetalicznych ziemia rzadka- metal grupy żelaza wykorzystany został do opisu danych doświadczalnych w rozprawie habilitacyjnej dra hab. Ryszarda J. Radwańskiego pt. „Oddziaływania wymienne i anizotropia magnetokrystaliczna w związkach ziemia rzadka z metalem przejściowym”. Kolokwium habilitacyjne odbyło się 1990 r. w Instytucie Fizyki PAN. Wykorzystywany w rozprawie model pola krystalicznego pozwala na zaobserwowanie określonych trendów w grupie materiałów o identycznej symetrii sieci. Wadą tego podejścia jest całkowite pomijanie

mechanizmów odpowiedzialnych za pole krystaliczne działające na jon magnetyczny. Tak więc sens fizyczny stosowanego modelu jest bardzo ograniczony.

Odp. Efekty pola krystalicznego to po prostu efekty multipolowego oddziaływania elektrostatycznego, co jasno piszę zawsze podkreślając „crystal-electric field (CEF) interactions”. Multipolowe oddziaływanie wynika z oddziaływania asferycznego rozkładu ładunku jonu paramagnetycznego z asferycznym rozkładem ładunku w sieci krystalicznej. Efektem tego oddziaływania jest zniesienie olbrzymiej degeneracji i pojawienie się struktury subtelnej jonu paramagnetycznego. Struktura subtelna daje efekty fizyczne. Jeśli opiszę zjawiska obserwowane w danym związku w spójny sposób jako spowodowane polem krystalicznym, tj. jako będące wynikiem tej subtelnej struktury jonu paramagnetycznego, to po prostu będzie to oznaczać, że inne mechanizmy są nieistotne.

Sz.H. Do najważniejszych prac dra hab. Ryszarda J. Radwańskiego w omawianym okresie zaliczam publikacje wykonane wspólnie z dr S. Sinnema - doktorantem profesora J. J. M. Fransego.

Odp. Grupa Prof. J. J. M. Franse w latach 1983-87 w dziedzinie twardych materiałów magn. związków ziem rzadkich to Prof. J. J. M. Franse, mgr S. Sinnema i ja. W okresie luty-maj 1984 powstała m.in. praca opublikowana w J. Magn. Mater. 44 (1984) 333 (poz. 119), która ma obecnie ponad 170 cytowań. Jej pierwszym współautorem został S. Sinnema, a praca dotyczyła podstawowych właściwości nowej serii $R_2Fe_{14}B$. Należy nadmienić, że mgr S. Sinnema został przyjęty na studia doktoranckie tego samego dnia, którego ja przyjechałem do Amsterdamu, tj. 1 listopada 1983. Mgr S. Sinnema napisał pracę magisterską nt. tarcia w cieczech i w chwili podjęcia studiów doktoranckich jego wiedza nt. magnetyzmu była bardzo ograniczona.

Sz.H. Myślę tu o pracach dotyczących anizotropii magnetokrystalicznej związków $R_2Fe_{14}B$, gdzie $R = Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm$ i Lu . Dla tych związków zbadano właściwości magnetyczne, w tym anizotropię magnetokrystaliczną, w szerokim zakresie temperatur. Pokazano, że w ramach parametryzacji jednojonowej pola krystalicznego można opisać właściwości anizotropowe całej rodziny omawianych związków. Jest to ważny wynik wskazujący pośrednio na stosowalność modelu jednojonowego do opisu właściwości magnetycznych związków 2-14-1. Podobne badania przeprowadzono dla związków $R_2Co_{17}B$.

Odp. Sądze, że chodzi tu o $R_2Co_{14}B$ i pracę w J. Magn. Magn. Mater. 51 (1985) 211 (poz. 111).

Sz.H. W przypadku obu rodzin związków międzymetalicznych wskazano na istotną rolę wyrazów drugiego rzędu w potencjale pola krystalicznego. Przeprowadzona analiza danych doświadczalnych pozwala również na wyznaczenie wartości oddziaływań wymiennych $3d-4f$.

Po habilitacji dr hab. Ryszard J. Radwański kontynuuje badania pola krystalicznego w różnych związkach zawierających zarówno jony $4f$ jak i $5f$. Najważniejszy wynik w tej grupie problemów dotyczy badania właściwości magnetycznych związków o strukturze romboedrycznej $R_2Fe_{17}C$ oraz związków o strukturze heksagonalnej $R_2Fe_{17}C$. Pokazano, że wprowadzenie węgla do związków 2-17 podnosi ich temperaturę Curie i ma istotny wpływ na ich anizotropię magnetokrystaliczną. Anizotropia ta jest znacznie silniejsza w przypadku związków z węglem niż bez węgla. Przyczyna tego stanu rzeczy nie została wyjaśniona. W omawianym okresie dr hab. Ryszard J. Radwański rozszerza swój warsztat badawczy o pomiary ciepła właściwego. Na uwagę zasługują wyniki pomiarów ciepła właściwego związków RNi_5 ($R = La, Nd, Dy, Er$) w zakresie temperatur od 1,5 do 250 K. Z pomiarów $LaNi_5$ wyznaczano wkład sieciowy do ciepła właściwego badanej grupy związków. Wkład magnetyczny interpretowano w ramach omawianego parametrycznego modelu pola krystalicznego działającego na jon R^{3+} z uwzględnieniem pola molekularnego, odpowiedzialnego za porządek magnetyczny w tych materiałach.

Znaczna część prac dra hab. Ryszarda J. Radwańskiego wykonanych w okresie po habilitacji poświęcona jest zastosowaniu parametrycznego modelu pola krystalicznego do opisu wyników pomiarów opublikowanych w literaturze. Dotyczy to w szczególności takich związków jak: UGa_2 , $(Nd, Ce)_2CuO_4$, UPd_2Al_3 , $YbCu_2Si_2$, $NpGa_2$ i innych. W pracach tych oprócz wyników pomiarów magnetycznych w niektórych przypadkach interpretowano również magnetyczny wkład do ciepła właściwego. Nie omawiam tych prac, gdyż, jak już wspominałem, zwykła parametryzacja pola krystalicznego dostarcza niewiele informacji fizycznej. Nie oznacza to, że tego rodzaju prace są całkowicie bezużyteczne. Wyniki uzyskane w ten sposób mogą być wykorzystane w przyszłości, jeśli będą prowadzone obliczenia ab initio struktury elektronowej wspomnianych związków. W podobny sposób oceniam prace dotyczące interpretacji właściwości magnetycznych związków zawierających jony $3d$ zwłaszcza, że jak stwierdzono to już kilkadziesiąt lat temu, ograniczanie się w obliczeniach subtelnej struktury stanu podstawowego jonów grupy żelaza do bazy LSL_zS_z , (w duchu formal-

zmu Abrahama i Pryce'a) jak czyni to dr hab. Ryszard J. Radwański w omawianych pracach, prowadzi do błędnych wyników już dla jonów d^2 (d^8) czy d^3 (d^7) (patrz Macfarlane, Phys. Rev. 1970 i inne prace tego autora).

Odp. Jony d^2 są w dalszym ciągu przedmiotem badań - związku V_2O_3 czy $LaVO_3$ są badane przez m.in. bardzo dobrą grupę teoretyczną Prof. G. Sawatzky'ego z Groningen (obecnie Kanada). W czasie zaproszonego referatu w Poznaniu w czerwcu 1999 roku Prof. Sawatzky zaprezentował bardzo uproszczoną strukturę elektronową, jedno-elektronową, praktycznie bez korelacji elektronowych i oddziaływania spin-orbita. Przytaczane stwierdzenie z 1970 roku nie funkcjonuje już we współczesnej fizyce. Z moich badań wynika, że jest ono błędne. Podobnie uważam, że funkcjonujący w fizyce od 1935 roku teorem Van Vleck'a o wygaszaniu momentu orbitalnego jest prawdziwy tylko w bardzo ograniczonym zakresie, i że w większości przypadków magnetyzm orbitalny musi być uwzględniany. Potwierdzają to również wyniki coraz bardziej zaawansowanych eksperymentów np. z wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego.

Sz.H. Właściwym rozwiązaniem (oprócz rachunku zaburzeń, ale przeprowadzonego dla pełnej konfiguracji d^n) jest diagonalizacja macierzy energii na funkcjach falowych pełnej konfiguracji d^n (dla jonów d^3 (d^7) prowadzi to do macierzy 120x120 a dla jonów d^4 (d^6)-do macierzy 210x210).

*Odp. Zgadzam się, że oczywiście lepiej byłoby rozważać większą bazę, ale uważam, że wyższe termy są wysoko w skali energii i nie będą wносиły znaczących poprawek. Co ważne, na pewno nie będą zmieniały natury stanów jak i ogólnej liczby stanów struktury elektronowej. Rezygnacja z diagonalizacji wysokowymiarowych macierzy jest procedurą bardzo często stosowaną w fizyce ciała stałego – dobrym przykładem jest Hamiltonian spinowy. Np. w pracy Phys. Rev. B **62** (2000) 5834 (M. T. Borowiec, V. Dyakonov, A. Prokhorov i H. Szymczak) do opisu wyników EPR na jonach Dy^{3+} w $KY(WO_4)_2$ używany jest Hamiltonian efektywny z $S=1/2$, tj. zastosowano macierz 2 na 2, chociaż wiadomo, że jon Dy^{3+} jest opisywany dobrą liczbą kwantową $J=15/2$. Oznacza to, że fizycznie adekwatną analizę należałoby prowadzić w przestrzeni 16-wymiarowej, nie mówiąc już o wszystkich 3003 stanach atomowych.*

Sz.H. Jak wynika z autoreferatu dr hab. Ryszard J. Radwański dużą wagę przywiązuje do pracy 45 : „ f^3 -Electronic states under

hexagonal crystalline - electric-field interactions" (*Physica B*, 1992). W pracy tej pokazano, że dla odpowiednio dobranych parametrów pola krystalicznego o symetrii heksagonalnej można dla kramersowskiego jonu o konfiguracji f^3 otrzymać niemagnetyczny stan podstawowy. W pracy 32 : "Charge (electrostatic) formation of the non-magnetic ground state" (*Solid State Communications*, 1994) dr hab. Ryszard J. Radwański sugeruje uniwersalny charakter tej obserwacji, sugerując podobieństwo do zjawiska Kondo. Recenzent absolutnie nie może zgodzić się z taką sugestią.

Odp. Podtrzymuję moją tezę, że obniżanie momentu magnetycznego jonu paramagnetycznego przez multipolowe pole elektrostatyczne, tworzone w kryształach przez anizotropowy rozkład ładunku elektrycznego, jest bardziej efektywne niż oryginalny spinowy mechanizm Kondo. W oryginalnym spinowym mechanizmie Kondo rozważa się kompensację momentu magnetycznego przez polaryzację elektronów przewodnictwa przy czym rozkład ładunku jest izotropowy, ja natomiast mówię o ważności anizotropowego rozkładu ładunku elektrycznego. Istnienie anizotropowego rozkładu ładunku elektrycznego jest oczywiste w kryształach, który ze swej istoty jest zawsze anizotropowy.

Sz.H. Niemagnetyczny stan podstawowy dla konfiguracji f^3 powstał w wyniku odpowiedniego dobrania parametrów pola krystalicznego. Mamy więc tu do czynienia ze zjawiskiem o charakterze przypadkowym a nie uniwersalnym (niewielka zmiana parametrów pola krystalicznego zmienia stan podstawowy z niemagnetycznego na magnetyczny).

Odp. Rzeczywiście potwierdzam, że niewielka zmiana parametrów pola krystalicznego potrafi zmienić stan podstawowy jonu paramagnetycznego z magnetycznego w niemagnetyczny. Ten efekt pola krystalicznego jest dobrze znany np. dla $PrNi_5$, mającego system $4f^2$ związany z jonom Pr^{3+} . Moim zdaniem nie ma jednak powodów, dla których ten mechanizm miałby być zupełnie nieaktywny dla systemu $4f^3$ czy dla $3d^6$ jaki występuje w Co^{3+} w $LaCoO_3$. [Dodane 15.12.2007: Istnienie stanów pola krystalicznego zostało potwierdzone w 2003 roku w grupie Prof. Steglicha w $YbRh_2Si_2$ (obserwacja zlokalizowanego sygnału EPR w temperaturze 1.5 K, tj. 15 razy niższej niż wcześniej dyskutowana temperatura Kondo, wobec czego żadnego stanu zlokalizowanego nie powinno się obserwować) i w UPd_2Al_3 . Obecnie nadal uważam, że moje podejście teoretyczne do związków ciężko-fermionowych jest fizycznie adekwatne tzn. że pole krystaliczne także jest istotne w tej klasie związków jak mówię to od 1992 roku. Uważam więc, że to ja

rozwiązałem problem ciężkich fermionów w fizyce ciała stałego w swoich pracach poczynając od 1992 roku. Spadek zainteresowania naukowego w obecnej literaturze tym zagadnieniem jak i porzucenie tego zagadnienia przez teoretyków zajmujących się dotychczas tym problemem przyjmuję jako potwierdzenie tego faktu.]

Sz.H. Podobny problem występuje w pracach kandydata dotyczących magnetyzmu związku LaCoO_3 . Związek ten, ze względu na niskospinowy stan jonu Co^{3+} charakteryzuje się niemagnetycznym stanem podstawowym. Nie ma w tym niczego dziwnego (jak to sugeruje dr hab. Ryszard J. Radwański w swoich publikacjach i w autoreferacie). Stan ten istnieje dla otoczenia oktaedrycznego (w układach z silnym polem krystalicznym), bez konieczności uwzględniania dystorsji tego pola i oddziaływań spin-orbita. Przykłady tego typu diamagnetycznych związków kobaltu znane są od kilkudziesięciu lat (patrz podręcznik C. J. Ballhausen, *Introduction to Ligand Field Theory*, 1962).

Odp. Jednak współcześni teoretycy magnetyzmu mają z tym problemem pewne kłopoty m. in. dziesiątki prac w Phys. Rev. B np. 49 (94) 7210; 53 (96) R2926; 54 (96) 1622; 55 (97) R8666; 57 (98) 15211; 60 (1999) 16423; 57 (98) 10710; i PRL np. 83 (99) 1387. Uznając, że Co^{3+} z systemem $3d^6$ jest niemagnetyczny, trudno jest wyjaśnić, że jednak istnieją związki Co^{3+} i Fe^{2+} magnetyczne, np. CoF_3 z $T_N=460$ K czy FeO z $T_N=198$ K, czy też uzgodnić silne pole krystaliczne w LaCoO_3 (prowadzące do stanu niemagnetycznego) i słabe pole krystaliczne w CoO , jak wskazywałby duży moment magnetyczny $3.90 \mu_B$, $T_N=290$ K. Obydwa te związki mają bardzo podobny oktaedr atomów/jonów tlenu i odległości Co-O są bardzo podobne, chociaż oczywiście w jednym jest Co^{3+} a w innym Co^{2+} . [15.12.2007: Szkoda, że Pan Profesor Szymczak nie wziął udziału w tej dużej dyskusji naukowej o LaCoO_3 ani w latach 1990-2000 ani ostatnio. Problem LaCoO_3 został przeze mnie i panią dr Z. Ropkę rozwiązany końcem 2002 roku w naszej pracy opublikowanej w Phys. Rev. B 67 (2003) 172401. Obliczona przez nas struktura elektronowa została potwierdzona przez innych autorów, a mianowicie w pracy Phys. Rev. B 71 (2005) 024418.]

Sz.H. Błąd, który popełnia dr hab. Ryszard J. Radwański (i jego doktorantka) polega na tym, że rozpatruje on jon Co^{3+} w przybliżeniu słabego pola krystalicznego (w bazie funkcji LSL_zS_z). W tej sytuacji aby otrzymać niemagnetyczny stan podstawowy zmuszony był wprowadzić wyraz $B_2^0O_2^0$ do Hamiltonianu pola krystalicznego i uwzględnić oddziaływania spin-orbita.

*Odp. Ja nie byłem zmuszony wprowadzić dystorsji (wyraz $B_2^0 O_2^0$ w Hamiltonianie pola krystalicznego) i uwzględnić oddziaływanie spin-orbita. Uwzględniłem dystorsję, jak i oddziaływanie spin-orbita, jako mechanizmy istniejące (i poprawne fizycznie), które muszą być brane pod uwagę w pełnym opisie oddziaływań elektronowych. Uważam, że teorie, które nie uwzględniają, lub nie są w stanie uwzględnić dystorsji i oddziaływania spin-orbita, nie dają pełnego opisu rzeczywistych właściwości. [15.12.2007: Opisując w latach 1997-2000 $LaCoO_3$ brałem siłę pola krystalicznego $10Dq$ jako 2.06 eV ($B_4 = +200$ K). Nasze najbardziej aktualne obliczenia z pracy w *Phys. Rev. B* z 2003 wskazują na większą wartość, 2.8-3.0 eV, więc Prof. Szymczak ma tutaj rację. Na usprawiedliwienie dodam, że np. w 2003 w pracy w *Nature* 422 s. 53 autorzy biorą wartość siły pola krystalicznego jako 0.5 eV tylko, tj. 4 razy mniej niż ja w 2000 roku. Pokazuje to, że sprawa nie jest tak oczywista jak twierdzi Pan Prof. Szymczak.]*

Sz.H. Nawiasem mówiąc dla Hamiltonianu pola krystalicznego o symetrii oktaedrycznej zapisanego w postaci $B_4 (O_4^0 + 5 O_4^4)$ wyraz $B_2^0 O_2^0$ opisuje deformację tetragonalną a nie trygonalną jak twierdzi dr hab. Ryszard J. Radwański w swoich publikacjach.

*Odp. Przy szczegółowej analizie moich prac można zauważyć, że używam takiej postaci Hamiltonianu (jest to standard), ale Hamiltonian ten przy opisie dystorsji trygonalnej transformuję najpierw do kierunku osi z wzdłuż diagonali oktaedru. Można to sprawdzić np. w mojej publikacji *Phys. Rev. B* **63** (2001) 172404 na stronie 1, ostatnia linia prawej kolumny. [15.12.2007: Więc jest to zarzut zupełnie nieprawdziwy. W istocie ten jedyny jasno sformułowany zarzut, na podstawie którego Pan Prof. Szymczak wyciąga za chwilę wnioski, że niektóre moje prace są błędne, jest nieprawdziwy. Te "istotne błędy" znalazły się później w uzasadnieniu negatywnej decyzji CK, patrz strona 50.]*

Sz.H. Podsumowując dorobek naukowy dra hab. Ryszarda J. Radwańskiego po habilitacji nie mogę stwierdzić, że dorobek ten został znacząco rozwinięty i wzbogacony. Niewątpliwie pozytywnie należy ocenić ten nurt w badaniach prowadzonych przez Kandydata, który jest kontynuacją badań prowadzonych przed habilitacją. Prace te zostały wzbogacone pomiarami ciepła właściwego oraz obliczeniami składowej magnetycznej ciepła właściwego. Część pomiarowa tych prac wykonana została we współpracy z grupą prof. J. J. M. Franse. Inne prace, wykonane po habilitacji i nie będące wynikiem współpracy międzynarodowej są wyraźnie gorsze, a niektóre z nich (jak pokazałem

powyżej) nawet błędne. [15.12.2007: Nie zgadzam się.] Ocena wielu prac, którą tu przedstawiam, wyraźnie odbiega od samooceny zawartej w autoreferacie Kandydata. Wydaje mi się, że wspomniana samoocena nie została przeprowadzona rzetelnie. I tak np. dr hab. Ryszard J. Radwański pisze o „uruchomieniu unikatowego w skali światowej programu komputerowego umożliwiającego obliczenia subtelnej struktury elektronowej związków $3d^n$ ”. Trudno się zgodzić z takim sformułowaniem w sytuacji, gdy od kilkudziesięciu lat dla tego rodzaju problemów diagonalizuje się macierz energii dla pełnej konfiguracji d^n (oznacza to diagonalizację macierzy rzędu 210 dla konfiguracji z $n=4$ lub 6- patrz E.Konig, S.Kremer, Ligand field energy diagrams, Plenum Press, 1977 i analogiczne tablice dla podatności magnetycznej) a nie jak robi to dr hab. Ryszard J. Radwański - dla zadanego termu LS (macierz rzędu 25 dla konfiguracji d^6).

Odp. Problemem, który staram się rozwiązać w fizyce ciała stałego jest nie tyle diagonalizowanie dużych macierzy, ile wytłumaczenie w spójny sposób konkretnych właściwości czy konkretnego zjawiska fizycznego. Ważne są więc mechanizmy fizyczne, które uwzględniam w prowadzonych przez siebie obliczeniach.

Sz.H. Podobny zarzut można postawić stwierdzeniu Kandydata o „uruchomieniu unikatowego w skali światowej programu komputerowego umożliwiającego obliczenia subtelnej struktury elektronowej związków $4f$ ($5f$)”. Fizycy zajmujący się spektroskopią optyczną związków $4f^n$ są w stanie diagonalizować pełne macierze energii a nie tylko macierze utworzone w przestrzeni funkcji LSJ_j .

Odp. Możliwość opisu np. temperaturowej zależności ciepła właściwego w szerokim zakresie wraz z opisem magnetycznego przejścia fazowego, w ramach jednego spójnego programu teoretycznego, wydaje się rzeczą dość istotną. Podobnie wyodrębnienie spinowego i orbitalnego wkładu do momentu magnetycznego w ramach jednej spójnej teorii i programu komputerowego jest jakimś osiągnięciem. Szczególnie teraz, gdy eksperymentalnie mierzy się moment orbitalny.

Sz.H. Autoreferat zawiera sformułowania, które muszą wywołać zdecydowany sprzeciw, każdego kto zetknął się z modelem pola krystalicznego. Sformułowanie „hipoteza o istnieniu w związkach międzymetalicznych pola krystalicznego... była w tamtym czasie nieco kontrowersyjna i budziła szeroką dyskusję..” jest nieprawdziwe. Wystarczy sięgnąć do dowolnej monografii z zakresu magnetyzmu metali

(np prace przeglądowe Elliotta, Coopera czy Freemana w *Magnetic Properties of Rare Earth* ed. R. J. Elliott, 1972; patrz również J. Mulak i Z. Gajek, *Efektywny potencjał pola krystalicznego*, 1992) aby się o tym przekonać. Nie mogę więc zgodzić się z sugestiami zawartymi w Autoreferacie mówiącymi, że kandydat poszukiwał (po habilitacji) „potwierdzenia istnienia dyskretnej atomo-podobnej struktury elektronowej w związkach zawierających atomy ziem rzadkich.” Sprawa istnienia tego rodzaju struktur została wyjaśniona znacznie wcześniej.

*Odp. Pole krystaliczne z dyskretną strukturą elektronową zostało wprowadzone w 1929 roku przez H. A. Bethe i rozwijane później przez Kramersa, Van Vleck'a i innych, ale zostało w jakiś sposób zapomniane (czy też ignorowane) w opisie właściwości elektronowych i magnetycznych w literaturze z ostatnich 10 lat. Chociaż istnienie dyskretnej struktury w związkach 4f jest dużo łatwiej akceptowane, to nawet tutaj twierdzenie, że jest to problem rozwiązany wydaje się ciągle dalekie od prawdy. Np. problem ciężkich fermionów, obserwowany głównie w związkach ceru, iterbu i uranu, ciągle nie jest rozwiązany (łącznie z potwierdzeniem istnienia dyskretnej struktury elektronowej). Fizyk amerykański B.R. Cooper napisał szereg prac nt. rozmywania poziomów pola krystalicznego – określenie „wash out” pojawiało się nawet w tytułach prac (JMMM **108** (1992) 10). Nigdy nie negowałem prac J. Mulak i Z. Gajek. Wykonali oni ogromną pracę teoretyczną w kierunku obliczania wkładów różnych efektów do pola krystalicznego. Jednak, jak sami autorzy przyznają, „otrzymany model jest (w roku 1992) wciąż jeszcze zbyt skomplikowany, aby mógł spełniać rolę modelu praktycznego w szerszej skali” (strona 47 książki J. Mulaka i Z. Gajka z 1992). Pomimo szerokich rozważań teoretycznych nie zastosowali oni swojej teorii do opisu konkretnego związku. Ja, w swoich pracach, zwracam uwagę na konieczność „odmrożenia” momentu orbitalnego w opisie związków zawierających atomy metali przejściowych, co pozwala opisać w spójny sposób właściwości szeregu związków zawierających zarówno atomy 4f, jak i 3d. Można też zauważyć, że jeszcze dzisiaj działają grupy, które liczą elektrony f jako pasmowe, nawet w konwencjonalnych atomach ziem rzadkich (np. Prof. Jeziński z IFM PAN w Poznaniu, który rozważa stany atomu prazeodymu jako pasmowe). Także znana grupa fizyków amerykańskich i niemieckich (Shick, Liechtenstein i Pickett, *Phys. Rev. B* **60** (1999) 10763) liczy elektrony f nawet gadolinu w sposób pasmowy, pomimo, że Gd uchodzi za standardowy jon ze zlokalizowanymi elektronami 4f. Badacze ci twierdzą, że „Gd 4f electrons have to be considered as „band” instead of „core” to obtain at least a qualitative agreement ...”. [15.12.2007: Ze sformułowania*

Pana Prof. Micnasa (str. 28 w tym numerze), że "Koncepcja autora tzw. "dyskretnej atomo-podobnej struktury elektronowej" jest nadal dyskutowana i nie jest akceptowana bez zastrzeżeń." wynika, że jest to jednak oryginalna i nowatorska moja koncepcja w przeciwieństwie do twierdzenia (i zarzutu) Pana Prof. Szymczaka, że "Sprawa istnienia tego rodzaju struktur została wyjaśniona znacznie wcześniej." **Znamienna jest ta różnica zdań pomiędzy wybitnymi polskimi fizykami, teoretykami fizyki ciała stałego.**]

Sz.H. Do istotnych swoich osiągnięć Kandydat zalicza również wyjaśnienie „własności stanu podstawowego LaCoO_3 ”. Podjęcie obliczeń pola krystalicznego w tym związku w przybliżeniu słabego pola krystalicznego wynikało po prostu z niezrozumienia przez dr hab. Ryszarda Radwańskiego podstawowych pojęć teorii pola ligandów oraz współczesnych prac poświęconych właściwościom magnetycznym i strukturze elektronowej LaCoO_3 .

Odp. Podjęcie obliczeń pola krystalicznego dla LaCoO_3 wynikało z faktu, że niemagnetyczny stan podstawowy i anomalne zachowanie temp. zależności podatności magnetycznej było przedmiotem kilkunastu prac teoretycznych w *Phys. Rev. B* i *Phys. Rev. Lett.* w ostatnich latach (duży spis prac z lat 1996-2000 zawarty jest w pracy doktorskiej Z. Ropki, oraz na stronie 6 niniejszej odpowiedzi). Zastosowany przeze mnie opis jonu Co^{3+} i właściwości całego związku LaCoO_3 uważam nadal za fizycznie poprawny, a uzyskane wyniki w satysfakcjonujący sposób opisują wspomniane wyżej makroskopowe właściwości fizyczne tego związku. W szczególności zastosowany przeze mnie opis pozwala zrozumieć w skali atomowej genezę stanu niemagnetycznego i rolę dys-torsji Jahn-Tellera w związkach zawierających atomy 3d. [15.12.2007: Aktualny opis LaCoO_3 zawarty jest w mojej pracy w *Phys. Rev. B* 67 (2003) 172401 - podjęcie przeze mnie obliczeń nastąpiło po opublikowaniu popularnej pracy Korotina w *Phys. Rev. B* 54 (1996) 5309 (prawie 200 cytowań) z teoretycznie "ab initio" obliczonym spinowym stanem pośrednim jako 1-szym stanem wzbudzonym - był to wynik niezgodny z diagramem Tanabe-Sugano bazującym na teorii pola krystalicznego. Dziś wiadomo, że obliczenia Korotina były błędne i stan wzbudzony to nie jest stan spinowo-pośredni. Więc sprawa LaCoO_3 nie była (i nie jest) tak oczywista jak twierdzi Pan Prof. Szymczak. I dlatego zamiast deprecjonować czyjąś pracę lepiej było podjąć normalną dyskusję naukową albo lepiej w prywatnej rozmowie wskazać na niby czynione przeze mnie błędy, tym bardziej, że przez 20 lat Pan Profesor zwracał się do mnie przez "Panie Rysiu". Dodam, że kilkakrotnie zwracałem się z wielką prośbą do Pana Profesora o korektę czy wycofanie swojej recenzji - ostatnio w listopadzie 2007 roku.]

Sz.H. Autoreferat dr hab. Ryszarda Radwańskiego zawiera wiele podobnych nieprecyzyjnych lub błędnych sformułowań mających, jak sądzę, na celu podniesienie rangi tej części swojego dorobku naukowego, która nie zasługuje na wysoką rangę. Do tej grupy sformułowań zaliczam sformułowanie, które przeczytałem z prawdziwą przykrością. Dr hab. Ryszard Radwański pisze: „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...” Jako osoba, która przygotowywała część merytoryczną wniosku o przyznanie prof J. J. M. Franse członkostwa zagranicznego PAN nie mogę zrozumieć na jakiej podstawie Kandydat napisał powyższe zdanie.

Odp. Zdanie to napisałem na podstawie informacji zamieszczonej w Postępkach Fizyki (tom 51 (2000) zeszyt 4, s.217). W informacji „Nowi członkowie zagraniczni PAN” napisano: „PAN dokonała wyboru nowych członków zagranicznych. Spośród fizyków zostali wybrani: ..., Jasp J. M. Franse (Holandia). ” ... „Jasp Franse (ur. 1937 r.) jest profesorem i rektorem Uniwersytetu Amsterdamskiego, autorem ponad 500 publikacji z różnych dziedzin fizyki ciała stałego. Do jego największych osiągnięć należy odkrycie zjawiska tłumienia fluktuacji spinowych UA_2 w silnych polach magnetycznych, odkrycie niekonwencjonalnego nadprzewodnictwa w ciężkofermionowym związku UPT_3 , zbadanie efektów pola krystalicznego w międzymetalicznych związkach ziem rzadkich oraz w nadprzewodnikach wysokotemperaturowych zawierających jony ziem rzadkich. Kieruje dużymi programami europejskimi badań magnetyków oraz projektem budowy w Europie stanowiska do wytwarzania kwazistacjonarnych pól magnetycznych o natężeniu do 100 T (w programach tych uczestniczą także uczeni polscy). Współpracuje z fizykami polskimi (Kraków, Wrocław, Warszawa, Poznań), czego wynikiem są 92 wspólne publikacje. Jest honorowym profesorem Instytutu Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN”. Można tylko dodać, że z tych 92 wspólnych publikacji z naukowcami polskimi, 69 zostało napisanych wspólnie ze mną – lista na stronie www.css-physics.pl.

Sz.H. Dr hab. Ryszard Radwański posiada znaczący dorobek dydaktyczny dobrze udokumentowany w materiałach, które otrzymałem od Rady Wydziału. Prowadzi prace dyplomowe i doktorskie. Wypromował już 2 doktorów i opiekuje się następnymi doktorantami. Nie wydaje mi się jednak aby dorobek dydaktyczny dr hab. Ryszarda Radwańskiego równoważył niedostatki jego dorobku naukowego w okresie po habilitacji. Jak pokazałem powyżej, znaczna część wyników uzyskanych przez

Kandydata po habilitacji budzi kontrowersje. Z tego powodu wnioski o nadanie tytułu naukowego dr hab. Ryszardowi Radwańskiemu uważam za przedwczesny. Dorobek naukowy który dr hab. Ryszard Radwański uzyskał w okresie przed habilitacją jest znaczący i pokazuje, że Kandydat jest w stanie osiągać interesujące wyniki. Mam więc nadzieję, że dorobek dr hab. Ryszarda Radwańskiego zostanie w najbliższym czasie na tyle wzbogacony że część dorobku, którą zakwestionowałem, stanowiła będzie niewielki fragment całości.

Reasumując, stwierdzam, że biorąc pod uwagę całość dorobku naukowego Kandydata, ze szczególnym uwzględnieniem dorobku po habilitacji, nie mogę poprzeć wniosku Rady Wydziału o nadanie dr hab. Ryszardowi Radwańskiemu tytułu naukowego profesora nauk fizycznych.

Warszawa, 26.11.2001,

Prof. dr hab. H. Szymczak
/Podpis nieczytelny/

Na zakończenie pragnę podkreślić: rzeczywiście uważam, że dystorsje sieci krystalicznej i wewnątrz-atomowe oddziaływanie spin-orbita są rzeczą fizyczną, istnieją w ciele stałym i po prostu muszą być brane pod uwagę w fizycznie adekwatnym opisie właściwości związków metali przejściowych. Stosowane przeze mnie podejście uwzględnia zarówno spinowe, jak i orbitalne stopnie swobody, jak i silne korelacje d-d elektronowe (poprzez uwzględnianie dwu reguł Hunda). Pozwala obliczać nisko-energetyczną strukturę elektronową i moment orbitalny. Dowodem wysokiej fizycznej adekwatności mojego quasi-atomowego podejścia teoretycznego, rozwijanego od 1983 roku dla związków ziem rzadkich i od 1995 roku dla związków metali 3d, są prawie lawinowo pojawiające się ostatnio prace uwzględniające orbitalne stopnie swobody i magnetyzm orbitalny. Można tu wymieni:

1. „Is Hund’s second rule responsible for the Orbital Magnetism in Solids?” I. V. Solovyev, A. I. Liechtenstein, K. Terakura, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 5758,

2. „Unquenched large orbital magnetic moment in NiO” S. K. Kwon, B. I. Min, Phys. Rev. B **62** (2000) 73,

3. „Orbital Physics in Transition Metal Oxides” Y. Tokura, N. Nagasawa, Science **288** (2000) 462,

4. „Photoemission spectra of LaMnO₃ controlled by orbital excitations” J. Van den Brink, P. Horsch, A. M. Oleś, Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 5174,

5. „Observation of orbital waves as excitations in a solid” Saitoh et al., *Nature* **410** (2001) 180,
6. „First glimpse of the orbiton” P. B. Allen, V. Perebeinos, *Nature* **410** (2001) 157,
7. „Orbital excitations in LaMnO_3 ”, J. Van den Brink, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001) 217202,
8. „Orbital moment determination of simple transition metal oxides using magnetic X-ray diffraction” Neubeck et al., *J. Phys. Chem. Solids* **62** (2001) 2173,
9. „Electron density distribution and the orbital moment in CoO ” W. Jauch, M. Reehuis, *Phys. Rev. B* **65** (2002) 125111,
10. „Large orbital magnetic moment and Coulomb correlation effects in FeBr_2 ”, S. J. Youn, B. R. Sahu, Kwang S. Kim, *Phys. Rev. B* **65** (2002) 052415 (ta ostatnia praca potwierdza nasze obliczenia odnośnie znaczącego momentu orbitalnego w FeBr_2).

Kraków, 20.06.2002

R. J. Radwanski

[15.12.2007. Na koniec należy dodać, że zawartych tutaj zarzutów z 2001 roku Pan Prof. Szymczak nigdy nie sformułował w sposób jasny i naukowy - nigdy nie opublikował żadnych zarzutów czy komentarzy do moich prac w czasopiśmie naukowym. Uniemożliwiło to, i nadal uniemożliwia, normalną dyskusję naukową. Jednocześnie zarzuty Pana Profesora wciągnęły Centralną Komisję w dyskryminację naukową i karanie za poglądy naukowe. Centralna Komisja została wciągnięta rozstrzyganie poprawności teorii naukowej i poglądów naukowych. Na pewno poprawności teorii naukowej nie osiąga się na drodze decyzji administracyjnej nawet wydanej przez centralny organ administracji państwowej. Na bazie tej recenzji pojawiły się potem sformułowania w decyzji CK, patrz strona 50, że mój dorobek naukowy zawiera istotne błędy. Chciałbym jeszcze raz zwrócić uwagę na bezzasadny zarzut Prof. Szymczaka o złym opisie dystorsji trygonalnej i zasadniczą różnicę zdań pomiędzy Prof. Micnasem (str. 28 w tym numerze) a Prof. Szymczakiem, wybitnymi polskimi fizykami, teoretykami fizyki ciała stałego, odnośnie istnienia czy nie istnienia ”dyskretnej atomo-podobnej struktury elektronowej” w związkach metali przejściowych pomimo, twierdzenia Pana Pana Prof. Szymczaka, że ”Sprawa istnienia tego rodzaju struktur została wyjaśniona już znacznie wcześniej.” Sądzę, że niepotrzebnie napisał Pan tę negatywną recenzję. Więc, ... nie dziękuję.]

Z poważaniem

R. J. Radwanski