

POSTĘPY FIZYKI

Dwumiesięcznik Polskiego Towarzystwa Fizycznego

XXXIX ZJAZD FIZYKÓW POLSKICH
Szczecin, 9-14 września 2007



Wykłady zjazdowe

ISSN 0032-5430



9 770032 543004 >



Przed otwarciem Zjazdu; w pierwszym rzędzie od prawej: rektorzy Waldemar Tarczyński i Katarzyna Chałasińska-Macukow, ks. abp Zygmunt Kamiński i rektor Wiesław Kamiński (fot. Maciej Kolwas)



W kularach: Ludwik Dobrzyński i Małgorzata Nowina Konopka (fot. Maciej Kolwas)



Zdjęcie grupowe uczestników Zjazdu (fot. Jerzy Stelmach)

RADA REDAKCYJNA

Andrzej Kajetan Wróblewski (przewodniczący), Mieczysław Budzyński, Andrzej Dobek, Witold Dobrowolski, Zofia Gołąb-Meyer, Adam Kiejna, Józef Szudy

REDAKTOR HONOROWY

Adam Sobiczewski

KOMITET REDAKCYJNY

Jerzy Gronkowski (redaktor naczelny), Ewa Lipka (sekretarz redakcji), Mirosław Łukaszewski, Magdalena Staszal, Marek Więckowski, Barbara Wojtowicz

Adres Redakcji:

ul. Hoża 69, 00-681 Warszawa, e-mail: postepy@fuw.edu.pl, Internet: postepy.fuw.edu.pl

KORESPONDENCI ODDZIAŁÓW PTF

Maciej Piętka (Białystok), Aleksandra Wronkowska (Bydgoszcz), Marian Głowacki (Częstochowa), Ryszard Drozdowski (Gdańsk), Roman Bukowski (Gliwice), Jerzy Warczewski (Katowice), Małgorzata Wysocka-Kunisz (Kielce), Małgorzata Nowina Konopka (Kraków), Elżbieta Jartych (Lublin), Michał Szanecki (Łódź), Halina Pięta (Opole), Maria Połomska (Poznań), Małgorzata Pociask (Rzeszów), Małgorzata Kuzio (Stupsk), Janusz Typek (Szczecin), Wini-cjusz Drozdowski (Toruń), Aleksandra Miłośz (Warszawa), Bernard Jancewicz (Wrocław), Joanna Borgensztajn (Zielona Góra)

POLSKIE TOWARZYSTWO FIZYCZNE

ZARZĄD GŁÓWNY

Reinhard Kulesa (prezes), Krystyna Ławniczak-Jabłońska (sekretarz generalny), Roman Puźniak (skarbnik), Jacek M. Baranowski, Przemysław Dereń, Mirosław Trociuk i Jerzy Warczewski (członkowie wykonawczy), Bolesław Augustyniak, Maria Dobkowska, Stanisław Dubiel, Henryk Figiel, Jacek Przemysław Goc, Zofia Gołąb-Meyer, Bernard Jancewicz i Ewa Kurek (członkowie)

Adres Zarządu:

ul. Hoża 69, 00-681 Warszawa, tel./fax: 022-6212668, e-mail: ptf@fuw.edu.pl, Internet: ptf.fuw.edu.pl

PRZEWODNICZĄCY ODDZIAŁÓW PTF

Eugeniusz Żukowski (Białystok), Stefan Kruszewski (Bydgoszcz), Józef Zbrozczyk (Częstochowa), Bolesław Augustyniak (Gdańsk), Bogustawa Adamowicz (Gliwice), Maciej Maśka (Katowice), Aldona Kubala-Kukuś (Kielce), Stanisław Wróbel (Kraków), Jerzy Żuk (Lublin), Bogustaw Broda (Łódź), Stanisław Waga (Opole), Roman Świetlik (Poznań), Małgorzata Kłisowska (Rzeszów), Włodimir Tomin (Stupsk), Adam Bechler (Szczecin), Grzegorz Karwasz (Toruń), Mirosław Karpierz (Warszawa), Bernard Jancewicz (Wrocław), Marian Olszowy (Zielona Góra)

REDAKTORZY NACZELNI INNYCH CZASOPISM

WYDAWANYCH POD EGIDĄ PTF

Witold D. Dobrowolski – *Acta Physica Polonica A*, Kacper Zalewski – *Acta Physica Polonica B*, Andrzej Jamiołkowski – *Reports on Mathematical Physics*, Marek Kordos – *Delta*, Zofia Gołąb-Meyer – *Foton*, Zbigniew Wiśniewski (redaktor prowadzący) – *Fizyka w Szkole*

Czasopismo ukazuje się od 1949 r.

Wydawca: Polskie Towarzystwo Fizyczne

Dofinansowanie: Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego

Patronat: Wydział Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego

Skład komputerowy w redakcji

Opracowanie okładki: Studio Graficzne etNova Piotr Zenda i Wspólnicy sp.j., tel.: 022-8735520, e-mail: etnova@etnova.pl

Druk i oprawa: „UNI-DRUK”, Warszawa, ul. Buńczuk 7b

ISSN 0032-5430

SPIS TREŚCI

A. Bechler – XXXIX Zjazd Fizyków Polskich	98
A. Gałkowski – Od JET-a do ITER-a	102
A. Kiejna – Fizyka materiałów i powierzchni z pierwszych zasad	110
K. Szymański – Pół wieku spektroskopii mössbauerowskiej	118
PTF	131
WSPOMNIENIA: Wojciech Ratyński (1932–2007)	134
RECENZJE	135
NOWI PROFESOROWIE	137
KRONIKA	141

Drodzy Czytelnicy!

Ci z Was, którzy uczestniczyli w XXXIX Zjeździe Fizyków Polskich, na pewno chętnie powrócą wspomnieniami do września ubiegłego roku, gdy tak jak ja mieli przyjemność przebywania w tym pięknym, choć wtedy nieco zimnym i deszczowym Szczecinie. Biorąc udział w tym kolejnym spotkaniu naszej fizycznej braci, doskonale zorganizowanym pod kierunkiem Adama Bechlera, mieliśmy między innymi okazję wysłuchania wielu ciekawych wykładów. Artykuły oparte na trzech spośród nich przedstawiamy dziś w „pozjazdowym” zeszycie Postępów, dziękując Autorom za trud włożony w ich przygotowanie.

Z przystępnego, a zarazem szczegółowego artykułu kompetentnie napisanego przez Andrzeja Gałkowskiego można się dowiedzieć, jaki jest aktualny stan rozwoju projektu ITER, wielkiej nadziei energetyki przyszłości. Artykuł Adama Kiejny przynosi wyczerpujący opis aktualnego stanu możliwości jednej z metod ab initio, do których coraz skuteczniej ucieka się współczesna fizyka (zwłaszcza fazy skondensowanej), gdy ma się uporać z problemami bardzo wielu ciał. Wreszcie obszerny artykuł przeglądowy Krzysztofa Szymańskiego, o dużych walorach dydaktycznych, opisuje od podstaw do najnowszych zastosowań połączenie głębokiej fizyki z pomysłowością, które pół wieku temu doprowadziło Rudolfa Mössbauera do opracowania metody odnoszącej tak wiele sukcesów badawczych.

Życzę Państwu miłej i pouczającej lektury!

Jerzy Gronkowski



Na okładce:

Adam Bechler, przewodniczący Komitetu Organizacyjnego, podczas uroczystości zamknięcia szczecińskiego Zjazdu (fot. Jerzy Giedrys)



XXXIX ZJAZD FIZYKÓW POLSKICH

Szczecin, 9–14 września 2007 r.



XXXIX Zjazd Fizyków Polskich, który odbył się w Szczecinie w dniach 9–14 września 2007 r., został zorganizowany przez Oddział Szczeciński Polskiego Towarzystwa Fizycznego, a jego współorganizatorami były trzy zachodniopomorskie uczelnie: Uniwersytet Szczeciński, Akademia Morska i Politechnika Szczecińska. Miejscem sesji plenarnych była Aula Konferencyjna w gmachu Wydziału Humanistycznego Uniwersytetu, gdzie odbywały się także sesje specjalistyczne i plakatowe. Ze względu na konieczność korzystania z odpowiedniego zaplecza technicznego poza głównym miejscem Zjazdu, prezentacja popularno-naukowa „Żyjemy na Ziemi, wirującej planecie” została zorganizowana w Auli Wydziału Mechanicznego Politechniki.

Motywnym przewodnim Zjazdu, zaproponowanym przez przewodniczącego Naukowego Komitetu Doradczego, Jerzego Warczewskiego (Uniwersytet Śląski), była idea „popularyzacji fizyki na poziomie uniwersyteckim z ukłonem w stronę zdolniejszych uczniów szkół średnich”. W Zjeździe wzięło udział 346 uczestników oraz 17 zaproszonych gości, w tym 13 zagranicznych (głównie przedstawicieli towarzystw fizycznych).

W pierwszym dniu Zjazdu odbyła się ceremonia wręczenia doktoratu honoris causa Uniwersytetu Szczecińskiego prof. Johnowi Barrowowi, światowej sławy kosmologowi i popularyzatorowi nauki (pisaliśmy o tym w Kronice zesz. 2/2008 – red.). Ideę wplecenia w program Zjazdu Fizyków tego typu uroczystości rzucił niespełna rok wcześniej Mariusz Dąbrowski, bliski współpracownik prof. Barrowa. Pomimo pewnych obaw związanych z trudnościami organizacyjnymi, które mogłyby towarzyszyć włączeniu takiego przedsięwzięcia w napięty program Zjazdu, zdecydowaliśmy się na realizację tego pomysłu, wspólnie z Wydziałem Nauk Przyrodniczych. Uroczystość wręczenia doktoratu honorowego prof. Barrowowi odbyła się po wykładach laureatów nagród. Ceremonia ta była najświetniejszą imprezą towarzyszącą Zjazdowi, a jej umieszczenie w programie okazało się bardzo udanym pomysłem, który uczestnikom spoza wyższych uczelni dał wyjątkową możliwość wzięcia udziału w uroczystości nadania najwyższego odznaczenia akademickiego. Wcześniej, w niedzielę 9 września wieczorem, tradycyjnie na dzień przed oficjalnym otwarciem Zjazdu, uczestnicy spotkali się na kolacji powitalnej w szczecińskim Klubie Naukowca.

Uroczystość otwarcia Zjazdu odbyła się w poniedziałek 10 września. Przewodniczący Komitetu Organizacyjnego (i zarazem autor tego sprawozdania) powitał uczest-

ników i zaproszonych gości, a wśród nich: rektora Uniwersytetu Szczecińskiego, Waldemara Tarczyńskiego, prezesa Zarządu Głównego PTF, Reinharda Kuleszę, metropolitę szczecińsko-kamieńskiego, ks. abpa Zygmunta Kamińskiego, jak również rektorów: Uniwersytetu Warszawskiego, Katarzynę Chałasińską-Macukow, i Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej, Wiesława Kamińskiego. Przewodniczący powitał także prezesów PTF z poprzednich kadencji: Henryka Szymczaka i Zdzisława Wilhelmięgo, oraz prezesa Europejskiego Towarzystwa Fizycznego, Friedricha Wagnera. Wojewoda zachodniopomorski przystał list z życzeniami dla uczestników Zjazdu, odczytany przez przewodniczącego. Na zakończenie uroczystości otwarcia Zjazdu głos zabrał JM Rektor USz.

Następnym punktem uroczystości otwarcia było wręczenie przez prezesa Kuleszę nagród PTF. Laureatem Nagrody Mariana Smoluchowskiego – Emila Warburga został Andrzej Buras z Politechniki w Monachium, laureatem Medalu im. Mariana Smoluchowskiego – Robert Gałązka z Instytutu Fizyki PAN, a Nagrodę Naukową im. Wojciecha Rubinowicza przyznano Wojciechowi Gawlikowi z Uniwersytetu Jagiellońskiego. Wręczone zostały także nagrody za popularyzację fizyki, dla wyróżniających się nauczycieli i za wyróżniające się prace magisterskie. Pełne informacje o nagrodach PTF są dostępne na stronie internetowej Towarzystwa (patrz także *PF* 58, 227 (2007)).



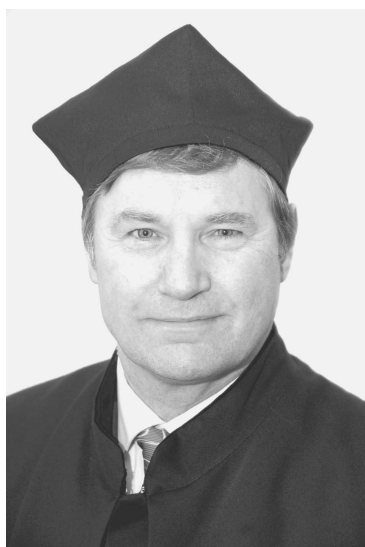
Andrzej Buras, laureat Nagrody Smoluchowskiego–Warburga, z medalem otrzymanym z rąk prezesa PTF, Reinharda Kuleszę (fot. Maciej Kolwas)



Robert Gałązka otrzymuje Medal Smoluchowskiego z rąk prezesa PTF, Reinharda Kulesy (fot. Maciej Kolwas)

Po wręczeniu nagród, na sesji plenarnej, której przewodniczył Reinhard Kulesa, Laureaci wygłosili wykłady: Andrzej Buras – „Probing new physics at very short distance scales through rare processes”, i Robert Gałązka – „Fizyka półprzewodników – historia i perspektywy”. Pierwszą sesję plenarną Zjazdu zakończył wykład prezesa EPS Friedricha Wagnera zatytułowany „Physics in electricity production”.

Po przerwie rozpoczęła się uroczystość nadania doktoratu honorowego prof. Barrowowi. Wzięli w niej udział: Senat USz, liczni zaproszeni goście i uczestnicy Zjazdu. Ceremonię zakończył wykład Johna Barrowa „Our place in the Universe” (polski przekład wykładu prof. Barrowa zamieścimy w następnym zeszycie *PF* – red.).



John Barrow, doktor honoris causa Uniwersytetu Szczecińskiego (fot. Jerzy Giedrys)

Po południu odbyła się sesja specjalistyczna „Dydaktyka fizyki”. W tym samym czasie w Sali Senatu USz zorga-

nizowane zostało spotkanie przedstawicieli zagranicznych towarzystw fizycznych.

Wieczorem tego dnia uczestnicy Zjazdu i zaproszeni goście wysłuchali w sali Opery i Operetki Zamku Książąt Pomorskich koncertu, na którym Orkiestra Kameralna „ACADEMIA” pod dykcją prof. Bohdana Boguszewskiego wykonała „Suite Carmen” – trawestację fragmentu opery Georges’a Bizeta napisaną przez Rodiona Szchedrina. Słowo wstępne wygłosił Mikołaj Szczęsny.

Przedpołudniowe sesje plenarne w następnych dniach składały się z trzech części, oddzielonych od siebie przerwami na kawę. We wtorek 11 września pierwszej części przedpołudniowej sesji plenarnej przewodniczył Włodzimierz Nakwaski (Politechnika Łódzka). Sesję rozpoczął Tomasz Dietl (IF PAN), laureat Nagrody Fundacji na rzecz Nauki Polskiej za rok 2006, który wygłosił wykład „Poszukiwanie wysokotemperaturowych półprzewodników ferromagnetycznych”. Następnie Franco Ferrari (USz) w wykładzie „Wszechobecne polimery”, ilustrowanym ciekawym pokazem wykonanym przez Jarosława Patureja, zapoznał słuchaczy z zagadnieniami fizyki tych substancji. Tę część sesji plenarnej zakończył wykład Andrzeja Udalskiego (UW) „Poszukiwanie planet poza Układem Słonecznym”.

Po przerwie na kawę rozpoczęła się druga część sesji plenarnej, której przewodniczył Bogusław Broda (UŁ). Sesję rozpoczął Stanisław Bajtlik (CAMK), który w wykładzie „Najstarsze światło we Wszechświecie” przedstawił zagadnienia mikrofalowego promieniowania tła. Następnie Andrzej K. Wróblewski (UW) poprowadził słuchaczy po niezupełnie symetrycznym świecie, wygłaszając wykład „50 lat świata łamanych symetrii”. Sesję zakończył wykład Mariusza Gajdy (IF PAN) „Atomy – od Daltona do kondensatu Bosego–Einsteina”.

Po kolejnej przerwie na kawę trzecią część wtorkowej sesji plenarnej poprowadził Mieczysław Budzyński (UMCS). Ta część sesji zawierała dwa wykłady: Marka Zrałka (UŚI) „Fizyka neutrin” i Józefa Spałka (UJ) „Fizyka układów cząstek z masą zależną od spinu: czy złamanie spinowej zasady nierozróżnialności cząstek?”. Odbyła się także krótka popołudniowa sesja plenarna, której przewodniczył Edward Malec (UJ), a wykład „O kwantowej grawitacji” wygłosił Jerzy Kowalski-Glikman (UWr). Po wykładzie zainteresowani uczestnicy Zjazdu mogli wysłuchać odczytu przedstawiciela firmy PHYWE zatytułowanego „Analiza materiałów z użyciem detektora energii promieniowania X” i połączonego z pokazem.

Po południu odbyło się zebranie delegatów PTF, a dla pozostałych uczestników przygotowane zostały imprezy towarzyszące. W zależności od zainteresowań można było zwiedzić laboratoria naukowe lub statek szkolny Akademii Morskiej oraz symulatory nawigacji i maszynowni okrętowych.

Pierwszej części sesji plenarnej w środę 12 września przewodniczył Ryszard Horodecki (UG). Wykłady, które nawiązywały do podstaw mechaniki kwantowej i komputerów kwantowych, wygłosili: Marek Żukowski (UG) – „Korelacje Einsteina–Podolsky’ego–Rosena: paradoksy, implikacje, eksperymenty i zastosowania”, Czesław Radzewicz

(UW) – „Niektóre konsekwencje niedoskonałego klonowania fotonów” i Robert Alicki (UG) – „Komputery kwantowe”. Drugiej części śródownej sesji przewodniczył Jacek Baranowski (UW). Sesja poświęcona była zagadnieniom fizyki materii skondensowanej i zawierała trzy wykłady: Arkadiusza Wójśa (PWr) „Elektronowe cieczy kwantowe”, Jacka Szczytki (UW) „Nanotechnologie: od DNA do półprzewodników” i Józefa Koreckiego (AGH) „Małe jest inne: nano-cząstki złota i ich niezwykle właściwości”. Trzeciej części śródownej sesji plenarnej przewodniczył Józef Sienkiewicz (PG), a w jej trakcie wygłoszone zostały dwa wykłady: Krzysztofa Szota (UŚI) „Od defektów w kryształach o strukturze perowskitu do superpamięci” i Krzysztofa Szymańskiego (UwB) „Spektroskopia mössbauerowska po latach”.

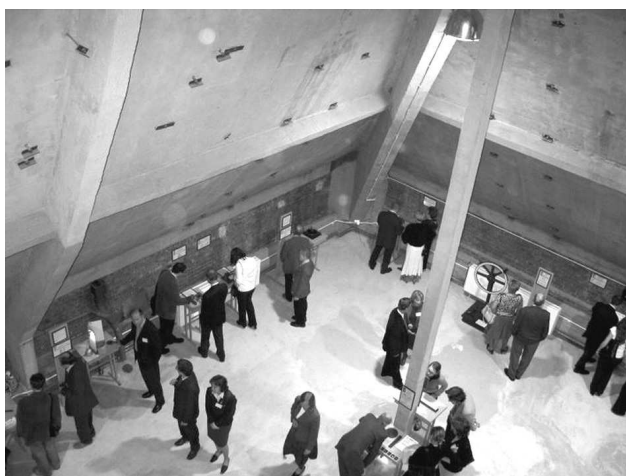
Przed południem w Auli Wydziału Mechanicznego PSz odbyła się prezentacja popularnonaukowa Jerzego Jarosza (UŚI) „Żyjemy na Ziemi, wirującej planecie”. Organizatorzy zaplanowali początkowo jedną godzinną prezentację, lecz ze względu na duże zainteresowanie uczestników Zjazdu i uczniów liceów została ona powtórzona.

Po południu odbywały się równoległe sesje specjalistyczne i sesja plakatowa. Wieczorem uczestnicy Zjazdu spotkali się na uroczystej kolacji w Muzeum Narodowym przy reprezentacyjnej ulicy Szczecina, Wałach Chrobrego. Kulminacyjnym punktem programu spotkania było otwarcie przez dziekana Wydziału Matematyczno-Fizycznego USz wystawy interaktywnej „Nauki dawne i niedawne”, którą uczestnicy Zjazdu mogli obejrzeć dzięki życzliwości Muzeum UJ. Wystawę zorganizowali Maciej Kluz, pracownik Muzeum wraz z dziekanem WMF USz.

Pierwszej części czwartkowej sesji plenarnej przewodniczył Maciej Kolwas (IF PAN), a pierwszy wykład zatytułowany „Fizyka i informatyka w opisie struktury i dynamiki złożonych układów biomolekularnych” wygłosił Bogdan Lesyng (UW). Następnie Anna Szemberg, redaktor naczelny Redakcji Matematyczno-Przyrodniczej Wydawnictwa Naukowego PWN, przedstawiła ofertę Wydawnictwa. Pierwszą część sesji zakończył wykład Michała Zawady (UMK)

„Pierwszy polski kondensat Bosego–Einsteina”. Przewodniczącym drugiej części sesji plenarnej był Roman Świątlik (IFM PAN). Wykłady nawiązujące ponownie do zagadnień fizyki materii skondensowanej wygłoszili: Tomasz Szoplik (UW) „Kryształy fotoniczne i metamateriały”, Adam Kiejna (UWr) „Fizyka materiałów i powierzchni z pierwszych zasad” i Sylwester Rzoska (UŚI) – „Nieliniowy efekt dielektryczny: od Arkadiusza Piekary po wyzwania fizyki cieczy złożonych”. Trzeciej części tej sesji plenarnej przewodniczył Mariusz Dąbrowski (USz). W czasie jej trwania wygłoszone zostały trzy wykłady: Jana Mostowskiego (IF PAN) „Spójność fotonów”, Marty Ciepłak (IF PAN) „Dwudziestolecie nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego” i Kazimierza Różańskiego (AGH) „Szybkie zmiany klimatu: mit czy rzeczywistość?”. Po południu kontynuowane były sesje specjalistyczne i sesja plakatowa, a wieczorem uczestnicy Zjazdu zgromadzili się w sali Multikina w Centrum Handlowym „Galaxy”, by obejrzeć film popularnonaukowy „Solarmax”.

Sesja plenarna ostatniego dnia Zjazdu w piątek 14 września składała się z dwóch części. Pierwszej przewodniczył Stanisław Hałas (UMCS), a rozpoczął ją Ludwik Dobrzyński (IPJ i UwB) wykładem „Czy funkcje falowe elektronów można otrzymać z eksperymentu? Badania rozkładów gęstości ładunków, spinów i pędów elektronów”. Następnie Krystyna Jabłońska-Ławniczak (IF PAN) wygłosiła wykład „Nowe światło dla nauki – synchrotrony i lasery na swobodnych elektronach”, a zakończył tę część sesji wykład Andrzeja Gałkowskiego (IFPiLM) „Międzynarodowy projekt reaktora termojądrowego ITER w Cadarache”. Drugą część sesji, której przewodniczył Jan Mostowski, rozpoczął wykład Konrada Czerskiego (USz) „Jak efekty atomowe kontrolują procesy jądrowe – od białych karłów do zimnej fuzji”. Drugi wykład w tej części sesji, a zarazem wykład kończący Zjazd był zatytułowany „Przeszłość, teraźniejszość oraz przyszłość fizyki”, a wygłosił go Jerzy Stelmach (USz). Wykład ten miał charakter popularnonaukowy i był ilustrowany interesującą prezentacją trójwymiarową.



Uczestnicy Zjazdu zwiedzają wystawę „Nauki dawne i niedawne”...



... oraz podziwiają wahadło Foucault zainstalowane w Zamku Książąt Pomorskich (fot. Joanna Trociuk)

Krótką ceremonia zakończenia Zjazdu odbyła się w Auli Konferencyjnej. Prezes Kulesza poinformował, że miejscem następnego Zjazdu Fizyków Polskich w 2009 r. będzie Kraków.

Oprócz sesji plenarnych w czasie Zjazdu odbywały się także sesje specjalistyczne i plakatowe (szczegółowe informacje można znaleźć na stronie zjazdptf.ps.pl/?strona=program). Sesja specjalistyczna, „Dydaktyka fizyki”, którą prowadzili Zofia Gołąb-Meyer (UJ) i Tadeusz Molenda (USz), nosiła tytuł „Czy fizycy w szkołach wyginą?”. Jej celem było omówienie kształcenia w zakresie od gimnazjum do studiów nauczycielskich fizyki i wskazanie słabych ogniw w tym łańcuchu. Krótkie referaty wprowadzające do zagadnienia wygłosili: Edward Kapuścik (UŁ), Leszek Ryk (UWr), Aneta Mika (VI LO w Szczecinie), Henryk Figiel (AGH), Andrzej Majhofer (UW) oraz Barbara Sagnowska (Wydawnictwo Zamkor). Po referatach odbył się panel dyskusyjny. Uczestnicy sesji wystosowali list do Ministra Edukacji Narodowej w sprawie nauczania fizyki w szkołach gimnazjalnych i ponadgimnazjalnych, przekazany adresatowi za pośrednictwem Zarządu Głównego.

Sesji specjalistycznej „Symposium biofizyczne” przewodniczył Marek Cieplak (IF PAN). Symposium było poświęcone najnowszym polskim dokonaniom w dziedzinie biofizyki, w tym metodom doświadczalnym badania białek i modelowaniu procesów dynamicznych zachodzących w biomolekułach. Wykłady wygłosili: Wiesław Nowak (UMK), Piotr Szymczak (UW), Adam Gadomski (UTP w Bydgoszczy) i Agnieszka Bzowska (UW).

Sesja „Fizyka i społeczeństwo”, której przewodniczył Ludwik Dobrzyński, dotyczyła funkcjonowania fizyki w odbiorze społecznym, znaczeniu fizyki we współczesnym świecie, a także problemowi odpowiedzialności fizyków za prowadzone badania. Tej problematyce poświęcone były cztery wykłady: Zbigniewa Jaworowskiego (CLOR), Ryszarda Naskręckiego (UAM), Jerzego Warczewskiego i Jacka Majewskiego (UW).

Sesja „Fizyka materii skondensowanej” prowadzona przez Jana Gaję (UW) poświęcona była wpływowi fizyki materii skondensowanej na technikę, w szczególności roli fizyki w praktycznych zastosowaniach zamiany energii elektrycznej na świetlną i na odwrót. Zagadnienia te zostały poruszone w czterech wykładach: Małgorzaty Igalson (PW), Krzysztofa Korony (UW), Jacka Majewskiego i Piotra Perlina (IWC PAN UNIPRESS).

Sesja „Symposium geofizyczne” prowadzona przez Marka Cieplaka dotyczyła aktualnych zagadnień fizyki atmosfery i zmian klimatu, jak również numerycznego modelowania procesów pogodowych. W programie sesji było także omówienie procesów fizycznych i fizykochemicznych, na których opiera się współczesna fizyka atmosfery. Problematyka ta była ilustrowana trzema wykładami: Krzysztofa Markowicza (UW), Bogumiła Jakubiaka (Interdyscyplinarne Centrum Modelowania UW) i Szymona Malinowskiego (UW).

Sesji specjalistycznej „Popularyzacja fizyki” przewodniczył Wojciech Nawrocik (UAM). Celem sesji było podkreślenie potrzeby popularyzowania fizyki i omówienie sposo-

bów jej realizacji. Sesja została pomyślana także jako forum dyskusyjne na temat doświadczeń uczestników w popularyzacji fizyki, z krótkimi wystąpieniami poprzedzającymi dyskusję. Głos przed dyskusją zabrali: Wojciech Nawrocik, Aneta Mika i Ewa Pater (I LO w Świnoujściu), Maciej Kluza i Jerzy Stelmach, Ludwik Dobrzyński, Jerzy Jarosz oraz Stefan Habryło (UAM). Na zakończenie sesji wystąpiła Grupa Twórcza Quark z Pałacu Młodzieży w Katowicach prowadzona przez Urszulę Woźnikowską-Bezak. Tematem wystąpienia były medale zdobyte przez Grupę na Międzynarodowej Konferencji Młodych Naukowców ICYS w Sankt Petersburgu oraz Międzynarodowy Turniej Młodych Fizyków.

W czasie Zjazdu odbyły się także sesje plakatowe, na których uczestnicy mogli przedstawić swoje osiągnięcia naukowe. Zgłoszono 40 prezentacji.

Zjazd miał dziewięciu sponsorów, w tym Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego, które było największym sponsorem, a także Gminę-Miasto Szczecin i Urząd Marszałkowski Województwa Zachodniopomorskiego. Sponsorami Zjazdu były także następujące firmy: Zespół Elektryczni Dolna Odra, PHYWE, Zakład Usług Elektrycznych Hertz, Prevac, Wydawnictwo Naukowe PWN i Multikino. Organizatorzy wyrażają gorące podziękowania sponsorom, bez pomocy których przeprowadzenie Zjazdu nie byłoby możliwe. Zjazd był objęty także patronatem Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego i Ministra Edukacji Narodowej. Patronat medialny objęły Polskie Radio Szczecin i TVP3 Szczecin. Oba te media zamieszczały w swoich programach informacje o Zjeździe, migawka z niego ukazała się także w ogólnopolskim Teleexpresie.

W imieniu Komitetu Organizacyjnego pragnę gorąco podziękować prezesowi PTF, Reinhardowi Kulesie, za pomoc i wsparcie, przewodniczącemu Naukowego Komitetu Doradczego, Jerzemu Warczewskiemu, za pracę nad propozycjami wykładów, i przewodniczącemu Komitetu Programowego, Maciejowi Kolwasowi, za pracę i pomoc przy ułożeniu programu Zjazdu. Pragnę również wyrazić gorące podziękowania wszystkim Koleżankom i Kolegom, którzy poświęcili swój czas i pracę na zorganizowanie Zjazdu. Uczestnikom pragnę podziękować za przybycie, a zarazem wyrazić przekonanie, że oprócz wrażeń z wystąpienia ciekawych wykładów i dyskusji zachowali także miłe wspomnienia z pobytu w Szczecinie.

Adam Bechler

Przewodniczący Komitetu Organizacyjnego
Instytut Fizyki USz



Od JET-a do ITER-a*

Ważny krok na drodze do energii taniej, bezpiecznej i przyjaznej środowisku

Andrzej Gałkowski

Instytut Fizyki Plazmy i Laserowej Mikrosyntezy, Warszawa

From JET to ITER: an important step in the process of achieving cheap, safe, and environmentally-friendly energy

Abstract: In our world where energy demand increases each year and with an urgent need to decrease emission of greenhouse gases into the atmosphere, fusion seems to be a significant option of future energy sources. The article gives a short historical overview of studies from early 1950s until now in the matter of harnessing energy from fusion for the use on earth. The greatest emphasis is put on the latest, highly specialized, detailed researches, which are carried out simultaneously in two ways. The first one is to broadly examine the fusion process: problems with obtaining and maintaining plasma, its instabilities, and confinement as well as to analyse final fusion products, dealing with particle exhaust. It is mostly based on the results from JET. The second one is to test materials to be used in tokamaks as they must fulfill high demands of temperature and pressure, show a low level of chemical and nuclear reactivity and an ability to withstand high neutron fluxes. Finally, the article presents plans for the future fusion power research.

Wprowadzenie

21 listopada 2006 r. zostało w Paryżu podpisane porozumienie dotyczące przedsięwzięcia ITER – budowy i eksploatacji eksperymentalnego reaktora termojądrowego kolejnej generacji. Udziałowcami tego projektu są: Unia Europejska, Japonia, Stany Zjednoczone, Rosja, Chiny, Indie i Korea Płd. Tych siedmiu partnerów zdecydowało, że ITER będzie budowany w Cadarache, małej miejscowości na południu Francji, w pobliżu Aix-en-Provence. Urządzenie będzie kolejnym krokiem na drodze do opanowania nowego źródła energii – fuzji (syntezy) lekkich jąder.

Przewiduje się, że do roku 2050 zapotrzebowanie na energię wzrośnie dwukrotnie w porównaniu z poziomem obecnym. Tego zwiększonego zapotrzebowania na energię nie są w stanie zaspokoić źródła alternatywne. W Unii Europejskiej 50% energii pochodzi z dostaw spoza terytorium krajów członkowskich; w roku 2030 będzie to już 70%. Ale to nie jest tylko kwestia zwiększonego zapotrzebowania na energię i niezależności energetycznej – to jest także kwestia takiego sposobu wytwarzania energii, aby emisja do atmosfery gazów cieplarnianych była jak najmniejsza. Protokół z Kioto [1] nakłada ograniczenia w tym względzie; obecnie 80% energii dostarczają elektrownie spalające paliwa kopalne, dające emisję gazów cieplarnianych

do atmosfery. Do roku 2050 należy obniżyć emisję CO₂ do poziomu 550 ppm, tylko dwa razy większego od poziomu przed początkiem ery przemysłowej. Oznacza to, że do tego czasu trzeba zbudować elektrownie (nieemitujące CO₂) o łącznej mocy 20 TW (moc osiągnięta obecnie to 13 TW). Według amerykańskiego Departamentu Energii nie istnieje jeszcze technologia, która może spełnić takie wymagania.

Sytuację tę ilustruje arabskie powiedzenie: „Mój ojciec jeździł na wielbłądzie, ja jeżdżę samochodem, mój syn lata samolotem, a jego syn będzie jeździł na wielbłądzie”. Czy tak się stanie? Niewykluczone, lecz ratunkiem może okazać się synteza jądrowa, która jest w stanie zapewnić dostatecznie duże ilości energii (praktycznie nieskończone), będąc przy tym źródłem bezpiecznym, dostępnym w każdym punkcie kuli ziemskiej i niepowodującym emisji groźnych gazów do atmosfery [2].

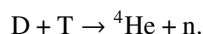
Tokamaki JET i TFTR pokazały, że uzyskiwanie energii na drodze syntezy lekkich jąder jest możliwe (osiągnięto moc 16 MW w JET oraz 11 MW w TFTR). Pytanie jest tylko takie: czy i kiedy jesteśmy w stanie opracować technologię, która pozwoli uzyskać z syntezy energię elektryczną na skalę przemysłową, a energetyka termojądrowa będzie ekonomicznie opłacalna.

*Na podstawie wykładu wygłoszonego podczas XXXIX Zjazdu Fizyków Polskich w Szczecinie (wrzesień 2007) w sesji plenarnej.

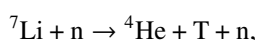
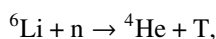
Sebastian Pease (były, już nieżyjący dyrektor ośrodka badań termojądrowych w Culham k. Oksfordu) ujął to tak: „Mamy taką wizję, że na brzegu morza postawimy elektrownię, która będzie zasilana wodą morską, kominem będzie ulatywał hel, a do sieci będzie płynął w ogromnych ilościach prąd elektryczny. Nie wiemy tylko, co ma być w środku tej elektrowni”. Pease powiedział to w roku 1956; od tego czasu na drodze do realizacji jego wizji nastąpił ogromny postęp.

Kontrolowana synteza termojądrowa jako nowe źródło energii

Stosunkowo niedawno, na początku XX w., odkryto, że źródłem energii Słońca i wszystkich innych gwiazd na niebie nie może być ani spalanie węgla, ani grawitacja, lecz tylko synteza termojądrowa wodoru. Odkrycie to zawdzięczamy takim wybitnym uczonym, jak Eddington, Jeans, Houtermans, Atkinson, Gamow, Bethe i inni. W jądrze Słońca, w temperaturze 14 milionów stopni i pod ciśnieniem setek miliardów atmosfer, cztery jądra wodoru łączą się ze sobą, a energia jest uwalniana dlatego, że jądro helu (produktu reakcji) jest nieco lżejsze niż 4 jądra wodoru. W Słońcu reakcje te zachodzą niezwykle wolno ze względu na to, że na pewnym etapie konieczna jest przemiana protonu w neutron. Spośród wielu możliwych reakcji syntezy (DT, DD, D³He, T³He, p⁶Li, p¹¹B) najbardziej przydatna do wykorzystania na Ziemi (mająca największy przekrój czynny) jest synteza ciężkich izotopów wodoru, czyli deuteru i trytu:



W wyniku tej reakcji powstaje cząstka α o energii 3,5 MeV oraz neutron o energii 14,1 MeV. Neutron może być wykorzystany do produkcji trytu w reakcjach z litem:

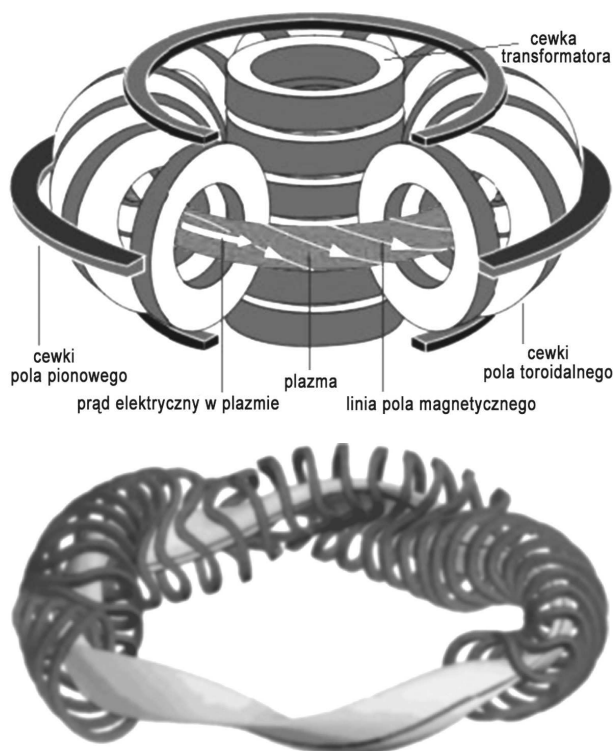


tak więc paliwem w elektrowni termojądrowej będą w ostatecznym rachunku deuter i lit.

Temperatura, która jest optymalna dla reakcji DT, to 100–200 mln kelwinów. W takiej temperaturze materia jest w stanie plazmy (zjonizowanego gazu) i powinna być uwięziona w niematerialnej pułapce, np. polu magnetycznym o specjalnej konfiguracji, czyli zamkniętej pułapce magnetycznej. Z bardzo zasadniczych rozważań wynika, że taka pułapka musi mieć kształt torusa i dlatego urządzenia termojądrowe (ich komory z plazmą) mają kształt obwarzanka czy też amerykańskiego „pączka z dziurką”.

Rysunek 1 pokazuje schematy tokamaka i stellaratora – dwóch podstawowych typów zamkniętej pułapki magnetycznej. W obu linie pola magnetycznego układają się na powierzchniach mających topologię torusa i włożonych koncentrycznie jedna w drugą. W tokamaku toroidalne pole magnetyczne (w kierunku dużego obwodu torusa) wytwarzają zewnętrzne cewki, natomiast pole poloidalne (w kierunku małego obwodu torusa) wytwarzane jest przez prąd elektryczny płynący w plazmie, wzbudzany

akcją transformatora (jego uzwojenie pierwotne nawinięte jest na trzpień widoczny w części centralnej urządzenia, uzwojeniem wtórnym jest plazma). Wypadkowa linii pola toroidalnego i poloidalnego jest linią śrubową owijającą się wokół powierzchni magnetycznej i ergodycznie ją pokrywającą. W stellaratorach obie składowe pola magnetycznego wytwarzane są przez cewki zewnętrzne, co powoduje, że mają one skomplikowany kształt widoczny na rys. 1. W dalszej części zajmować się będziemy wyłącznie tokamakami, które są urządzeniami budzącymi większą nadzieję na opanowanie syntezy jądrowej.



Rys. 1. Schemat tokamaka (u góry) i stellaratora (u dołu) (www.ipp.mpg.de/ippcms/eng/pr/fusion21)

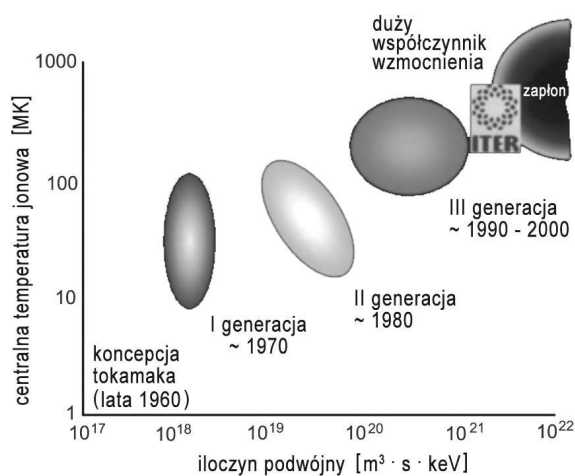
Bilans energetyczny reakcji powinien być dodatni, a to oznacza, że spełnione muszą być pewne warunki, które w 1957 r. sformułował brytyjski naukowiec John Lawson [3]. Kryterium Lawsona wykorzystuje wielkości, które teraz wprowadzimy, przede wszystkim uśredniony przekrój czynny $\langle\sigma v\rangle$ na reakcję, zależny od temperatury plazmy. Sam przekrój σ zależy od energii reagujących cząstek i jest największy dla reakcji DT (w porównaniu z reakcją DD oraz D³He) z maksimum w okolicach energii deuteronu równej 100 keV. Moc P_f uwalniana w wyniku reakcji fuzji jest proporcjonalna do iloczynu $n^2\langle\sigma v\rangle$, gdzie n oznacza koncentrację cząstek. Plazma traci energię, przede wszystkim w wyniku promieniowania, tak więc do utrzymania plazmy w optymalnej temperaturze konieczne jest jej nagrzewanie z mocą P_h . Stosunek $Q = P_f/P_h$ nazywa się współczynnikiem wzmocnienia; aby zapewnić zysk energetyczny, powinien on być równy co najmniej 1 (stan $Q = 1$

nazywany jest w języku angielskim break even, czyli stanem zrównoważonym). Wyróżnia się także stan zapłonu (ang. ignition), w którym $Q = \infty$. Jest to stan, w którym nie jest potrzebne nagrzewanie plazmy ($P_h = 0$), a temperatura utrzymywana jest na stałym poziomie dzięki temu, że swoją energię przekazują do plazmy cząstki α – produkty reakcji syntezy.

Lawson sformułował kryterium osiągnięcia stanu zapłonu. W kryterium tym występuje tzw. czas utrzymania energii τ_E , definiowany wzorem $\tau_E = 3nkT/P_h$, gdzie T oznacza temperaturę plazmy, k – stałą Boltzmanna, a wielkość $3nkT$ określa energię plazmy. Czas utrzymania energii charakteryzuje więc jakość pułapki magnetycznej – im jest dłuższy, tym lepiej uwięziona jest energia plazmy. Kryterium Lawsona ma postać następującej nierówności:

$$nT\tau_E > 3 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3} \cdot \text{keV} \cdot \text{s},$$

którą musi spełnić iloczyn podwójny po lewej stronie, aby nastąpił zapłon. Rysunek 2 pokazuje postęp, jaki dokonał się w ciągu ostatniego półwiecza na drodze do spełnienia tego kryterium. Rekordową wartość iloczynu podwójnego osiągnięto w japońskim tokamaku JT-60U [4,5]; wynosiła ona $1,5 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3} \cdot \text{keV} \cdot \text{s}$, co odpowiada współczynnikowi wzmocnienia $Q = 1,25$ (w przeliczeniu na reakcję DT; tokamak JT-60U pracuje na czystym deuterze).



Rys. 2. Postęp na drodze do osiągnięcia stanu zapłonu

Ciśnienie plazmy (iloczyn nT) nie może być zbyt duże, gdyż niestabilności plazmy wywołane jego gradientem ograniczają wielkość β równą ilorazowi ciśnienia plazmy i ciśnienia pola magnetycznego, a to ostatnie jest proporcjonalne do kwadratu indukcji, która we współczesnych urządzeniach nie przekracza 10 tesli. W efekcie z kryterium Lawsona wynika, że do osiągnięcia stanu zapłonu potrzebny jest czas utrzymania energii równy co najmniej 5 sekund.

Cząstki naładowane (jony i elektrony), z których składa się plazma, wirują wokół linii pola magnetycznego z częstością cyklotronową i swobodnie poruszają się wzdłuż tych linii. Powoduje to, że takie wielkości fizyczne,

jak koncentracja cząstek, temperatura czy ciśnienie są jednorodnie na powierzchniach magnetycznych i zmieniają się od powierzchni do powierzchni. Jest oczywiste, że wysoka temperatura, która jest potrzebna do tego, aby zachodziły reakcje syntezy, może występować tylko w centralnej części pierścienia plazmowego (w pobliżu jego osi) i musi maleć w kierunku ścian reaktora, które mają ograniczoną odporność na wysokie temperatury. W związku z tym typowe profile ciśnienia, koncentracji i temperatury w funkcji odległości od osi są rozkładami monotonicznymi z maksimum na osi. Dotyczy to także gęstości prądu w plazmie. Odwrotną zależność wykazuje tzw. współczynnik bezpieczeństwa q równy stosunkowi liczby obrotów w kierunku toroidalnym do liczby obrotów w kierunku poloidalnym przy obiegu wzdłuż śrubowej linii pola magnetycznego. Jest to jednocześnie miara skrzywienia linii pola magnetycznego. Współczynnik bezpieczeństwa jest ważnym parametrem – z rozważań stabilności pierścienia plazmowego wynika, że powinien on być większy od 1 (kryterium Kruskala–Szafranowa). Profil współczynnika bezpieczeństwa jest też monotoniczny, ale z minimum na osi. To minimum jest w pewnych konfiguracjach mniejsze od jedynki, co powoduje występowanie niestabilności magnetohydrodynamicznych nazywanych piłokszałtnymi (ang. sawtooth instabilities). Niestabilności te prowadzą do chwilowego spłaszczenia profili temperatury i ciśnienia na osi plazmy.

Metody nagrzewania plazmy

Pierwotnym mechanizmem nagrzewania plazmy jest wydzielanie energii przy przepływie przez nią prądu elektrycznego (ciepło Joule'a–Lenza). Mechanizm ten staje się coraz mniej wydajny w miarę wzrostu temperatury plazmy, a to dlatego, że przewodność elektryczna plazmy maleje zgodnie z zależnością $\eta \propto T^{-3/2}$. Tą metodą można więc osiągnąć temperaturę nie większą od 50 mln K. Postęp na drodze do opanowania fuzji jako źródła energii dokonał się w dużej mierze dzięki nowoczesnym technikom nagrzewania plazmy – nagrzewaniu falami elektromagnetycznymi w zakresie radiowym i mikrofalowym oraz nagrzewaniu wiązkami cząstek neutralnych. Pierwsza metoda wykorzystuje rezonans częstości fali i częstości cyklotronowych – elektronowej, jonowej i hybrydowej – w polu magnetycznym tokamaka. Największa częstość, w zakresie takim, jaki jest wykorzystywany w radarach, występuje w warunkach elektronowego rezonansu cyklotronowego (ECRH, electron cyclotron resonance heating). Częstość rezonansowa jest wówczas równa $(28 \text{ GHz/T})B$, gdzie B oznacza indukcję pola magnetycznego. Odpowiada to częstości $f_r = 60\text{--}120 \text{ GHz}$ dla typowych wartości B (2–4 T; w elektrowni indukcja B będzie bliska 7 T, co oznacza, że potrzebne będą źródła fal o częstości 200 GHz). Częstości f_r odpowiadają długości fali rzędu milimetrów, co umożliwia zastosowanie metalowych falowodów i umieszczenie anteny z dala od brzegu plazmy.

Z racji zależności od indukcji pola magnetycznego metoda ECRH może być wykorzystana do zlokalizowanego w przestrzeni nagrzewania plazmy (indukcja jest odwrotnie proporcjonalna do dużego promienia R tokamaka).

Nagrzewane są elektrony, które w procesach zderzeń przekazują swoją energię jonom. Znacznie mniejsze częstotliwości występują w wypadku wykorzystania jonowego rezonansu cyklotronowego (metoda ICRH, ion cyclotron resonance heating). Częstotliwość rezonansowa zależy wówczas od stosunku liczby atomowej do liczby masowej jonu i jest równa $15,2(Z/A)B$ MHz/T, co dla typowej plazmy odpowiada 40–70 MHz, czyli falom radiowym. Wykorzystanie tej metody jest technicznie znacznie bardziej skomplikowane (antena musi być blisko plazmy) w porównaniu z metodą ECRH, ale nagrzewanie jest bardziej wydajne. W pośrednim przedziale częstotliwości, 1–8 GHz, stosowana jest dolna hybrydowa częstotliwość rezonansowa, mniej skuteczna jeśli chodzi o nagrzewanie, wykorzystywana natomiast do nieindukcyjnego wzbudzenia prądu elektrycznego w plazmie (metoda LHCD, lower hybrid current drive). Rekordowy czas podtrzymywania prądu metodą LHCD osiągnięto w małym tokamaku TRIAM-1M; wynosił on 5 godzin i 16 minut [6]. Na dużym tokamaku Tore-Supra (Cadarache, Francja), wyposażonym w cewki nadprzewodnikowe, czas podtrzymania prądu wyniósł 6 minut [7].

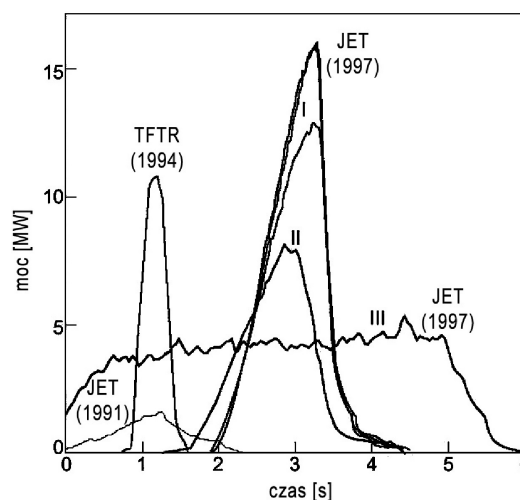
Metoda NBI (neutral beam injection) wykorzystuje jony dodatnie rozpędzone w akceleratorze do typowej energii 120 keV, następnie neutralizowane i wprowadzane do komory reaktora. W plazmie tokamaka atomy są jonizowane i przekazują swoją energię cząstkom plazmy w wyniku zderzeń kulombowskich. Problemem jest neutralizacja wiązki, zachodząca z wydajnością ok. 30%. Wydajność ta maleje wraz ze zwiększeniem energii jonów (w elektronie będzie potrzebna energia cząstek rzędu 1 MeV). Z tego powodu rozważa się przyspieszanie jonów ujemnych i następnie zdzieranie elektronu. Po raz pierwszy zastosowano tę metodę w tokamaku JT-60U w Japonii [8].

Tokamak JET – największe działające urządzenie termojądrowe

Tokamak JET (Joint European Torus) to obecnie największe na świecie urządzenie termojądrowe i jedyne, które może pracować na mieszaninie deuteru i trytu (pozostałe wykorzystują czysty deuter). Decyzję o budowie JET-a podjęła Rada Wspólnoty Europejskiej (obecnie Rada UE) wkrótce po opublikowaniu i przedstawieniu przez Rosjan na konferencji w Nowosybirsku (1968 r.) wyników z tokamaka T3. Wyniki te były tak obiecujące, że Wspólnota EURATOM podjęła decyzję o ograniczeniu prac nad stellaratorami. Tokamak to skrót od rosyjskiego określenia „toroidalna kamiera i magnitnyje katuszki”, czyli toroidalna komora, w której plazma jest utrzymywana i stabilizowana za pomocą silnego pola magnetycznego (w kierunku toroidalnym) w kombinacji ze znacznie słabszym polem poloidalnym wytwarzanym przez prąd płynący w plazmie, indukowany działaniem transformatora, którym w istocie jest tokamak.

Eksperymenty z trytem przeprowadzono w tokamaku JET trzykrotnie, a najważniejszy z nich – w 1997 r. W roku 1991 po raz pierwszy w świecie przeprowadzono kontrolowaną fuzję w mieszaninie obu ciężkich izotopów wodoru.

Zastosowano paliwo „słabe” – mieszaninę deuteru i trytu w proporcji objętościowej 90:10 (optymalna jest mieszanina 50:50). Taka mieszanina uwalniała energię jądrową o mocy 2 MW [9]. W roku 1997 zastosowano optymalną mieszaninę deuteru i trytu i uzyskano rekordowe wartości mocy reakcji syntezy (16 MW), energii wydzielonej (22 MJ) oraz stosunku Q energii otrzymanej do włożonej (0,7). Temperatura (jonowa) wynosiła ok. 400 mln stopni [10]. W roku 2004 przeprowadzono ostatni (do tej pory) eksperyment ze śladową (< 5%) ilością trytu w mieszaninie [11]. Na rysunku 3 pokazano wyniki eksperymentów w tokamaku JET w latach 1991 i 1997. W roku 1994 eksperyment z trytem przeprowadzono w niedziałającym już dziś tokamaku TFTR w USA [12].



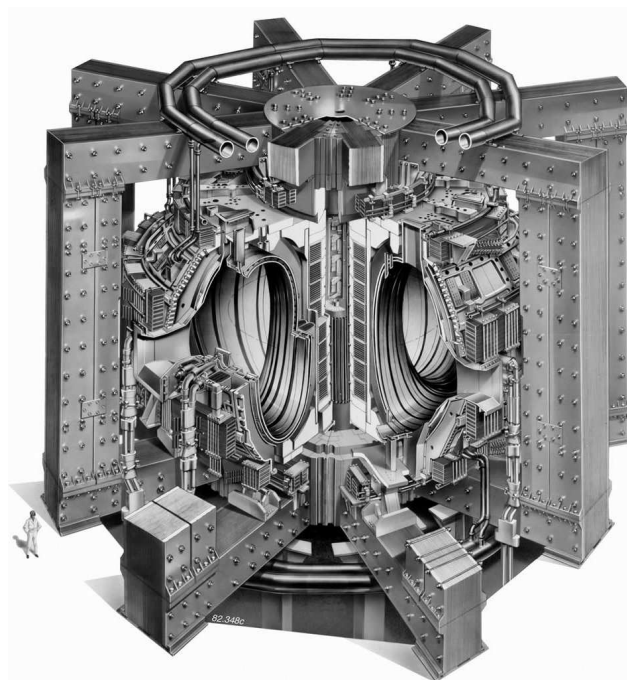
Rys. 3. Wyniki eksperymentów z plazmą deuterowo-trytową w JET i TFTR (www.jet.efda.org)

Komorą tokamaka JET jest torus mający symetrię cylindryczną i przekrój w kształcie litery D. Odległość od osi symetrii do osi torusa nazywana jest dużym promieniem tokamaka, a odległość od osi torusa do ściany komory – małym promieniem tokamaka. W wypadku JET-a duży promień jest równy 3 m, mały – średnio 1,6 m. Cały tokamak jest oczywiście dużo większy, gdyż trzeba jeszcze uwzględnić konstrukcję rdzenia transformatora (2800 ton) oraz wiele urządzeń dodatkowych, takich jak radiowe źródła nagrzewające plazmę oraz źródła do jej nagrzewania wykorzystujące atomy rozpędzone do dużych prędkości. W sumie układy nagrzewania plazmy mają moc kilkudziesięciu megawatów (NBI – 22 MW, ICRH – 22 MW, LHCD – 7,3 MW). Pole toroidalne (wytwarzane przez 32 cewki utrzymujące i stabilizujące plazmę) ma indukcję równą 3,5 tesli, w plazmie płynie prąd (wywołany akcją transformatora) o natężeniu 7 MA. Rysunek 4 pokazuje schemat tokamaka JET.

Wydajne tryby pracy tokamaka

Aby zachodziły intensywne reakcje fuzji jądrowej, konieczna jest wysoka temperatura we wnętrzu pierścienia

nia plazmowego (kilkaset milionów kelwinów), ale z drugiej strony temperatura plazmy na brzegu, gdzie styka się ona z materialną ścianą, powinna być niska (kilkaset kelwinów), aby erozja ścian była jak najmniejsza. Z tego powodu niezbędne jest wytworzenie barier termicznych, które podtrzymują duży gradient temperatury i ciśnienia. Bariery takie wytwarza sama plazma dzięki zjawiskom samoorganizacji w stanach dalekich od równowagi termodynamicznej. Po raz pierwszy zaobserwował je Wagner w tokamaku ASDEX w Garching k. Monachium [13]. Bariera termiczna powstała na brzegu plazmy (stąd jej nazwa ETB, edge transport barrier), a ten tryb pracy został nazwany modem H (high) w odróżnieniu od modu L (low). W eksperymencie zastosowano metodę NBI nagrzewania plazmy z mocą ok. 2 MW.



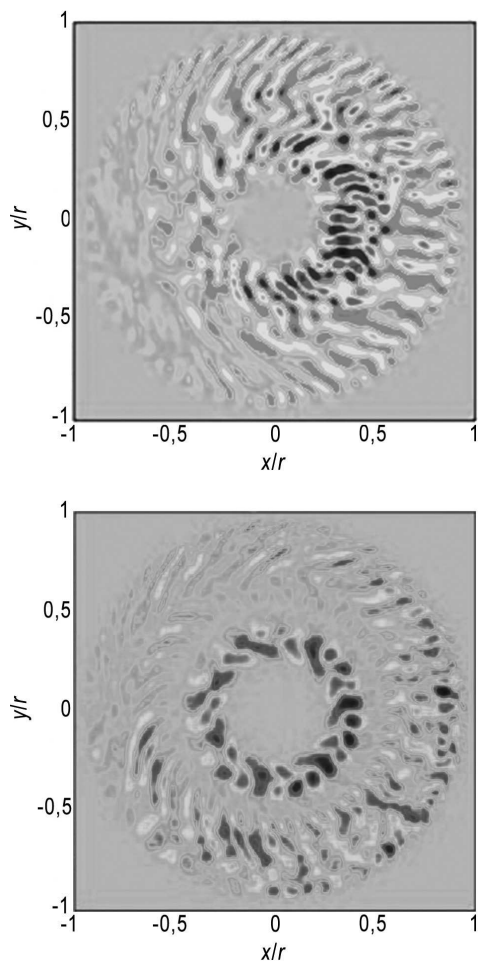
Rys. 4. Schemat tokamaka JET (www.jet.efda.org)

Mechanizm powstawania modu H, który nie występuje, jeśli plazma jest nagrzewana tylko ciepłem Joule'a–Lenza, wyjaśnił Burrell [14]. Układ ma tendencję do samoorganizacji i zmniejszania turbulencji (a zatem i ograniczenia transportu energii) wówczas, gdy dostępne jest źródło dodatkowej energii swobodnej. Źródłem takim jest energia cząstek z generatora NBI, wytwarzająca radialne pole elektryczne E_r i przepływ w plazmie brzegowej spowodowany dryfem wzdłuż wektora $E_r \times B$. Wskutek tego na brzegu plazmy wzrasta gradient temperatury i ciśnienia, co ułatwia osiągnięcie wysokiej temperatury w centrum plazmy. Efektem ubocznym dużego gradientu ciśnienia jest lokalna niestabilność plazmy znana jako ELM (edge localized mode). Niestabilności ELM z jednej strony pozwalają gromadzącym się cząstkom helu opuścić plazmę, z drugiej jednak stanowią zagrożenie dla powierzchni ma-

terialnych, które mają ograniczoną wytrzymałość na obciążenia termiczne. Niemniej dla ITER-a przewidziany jest scenariusz z modem H i niestabilnościami ELM. W elektronie niestabilności ELM będą musiały być opanowane, a do tego potrzebne są bardziej wyrafinowane mody, z barierami termicznymi wewnątrz plazmy. W tokamaku JET udało się uzyskać zmniejszenie aktywności ELM dzięki iniekcji azotu w obszary brzegowe plazmy. Podobny skutek daje też iniekcja zamrożonych kulek deuteru, testowana w tokamaku ASDEX. Inna metoda kontroli niestabilności ELM, opracowana w San Diego, została wypróbowana w tokamaku DIII-D zbudowanym przez firmę General Atomics [15]. Polega ona na rezonansowym zaburzeniu pola magnetycznego w warstwie przyściennej tokamaka. W wyniku takiego zabiegu ulega zniszczeniu struktura powierzchni magnetycznych, a linie pola magnetycznego zaczynają przebiegać chaotycznie. Wskutek tego zmniejsza się gradient ciśnienia, a niestabilności ELM zostają stłumione.

Jeszcze inny tryb pracy odkryto w tokamakach JET [16], TFTR [17], DIII-D [18] oraz JT-60U [5]. Mod ten charakteryzuje się występowaniem bariery termicznej noszącej nazwę ITB (internal thermal barrier). Bariera taka pojawia się we wnętrzu plazmy w wyniku nagrzewania zlokalizowanego przestrzennie. Teoretyczne wyjaśnienie tego zjawiska podał Garbet, który analizował rozkład potencjału elektrycznego będącego miarą turbulencji plazmy [19]. W swoich symulacjach zaobserwował stłumienie turbulencji (a co za tym idzie, zmniejszenie transportu masy i energii) w obszarach nagrzewanych lokalnie metodą LHCD (rys. 5 i 6). Za stłumienie turbulencji odpowiedzialne jest nieliniowe sprzężenie między profilami ciśnienia i prądu elektrycznego. Dużą rolę w tym sprzężeniu odgrywają tzw. przepływy strefowe, obserwowane także w atmosferze Jowisza, oraz prąd samoistny (ang. bootstrap) – prąd elektryczny powstający w wyniku procesów transportu w plazmie, którego gęstość jest proporcjonalna do gradientu ciśnienia. Prąd samoistny w reaktorze pracującym w sposób ciągły zastąpi prąd indukowany akcją transformatora, z natury rzeczy impulsowy. W tokamaku TCV w Szwajcarii udało się osiągnąć stan, w którym niemal 100% prądu elektrycznego w plazmie stanowił prąd samoistny [20]. Przepływy strefowe to zjawisko nieliniowe polegające na spontanicznym, samouzgodnionym wzbudzeniu przepływów w wyniku turbulencji wywołanej gradientem temperatury jonowej. Zjawisko przepływów strefowych prowadzi do zmniejszenia turbulencji i, co za tym idzie, ograniczenia transportu masy i energii [21].

Przedstawiony powyżej obraz pokazuje, że plazma w tokamaku jest układem dalekim od równowagi termodynamicznej, silnie nieliniowym i wykazującym zdolność do samoorganizacji prowadzącej do wytworzenia barier termicznych i prądu samoistnego. Warunkiem takiej samoorganizacji jest aktywne kształtowanie profili ciśnienia i prądu elektrycznego za pomocą metod nagrzewania plazmy (NBI, ICRH, ECRH, LHCD).

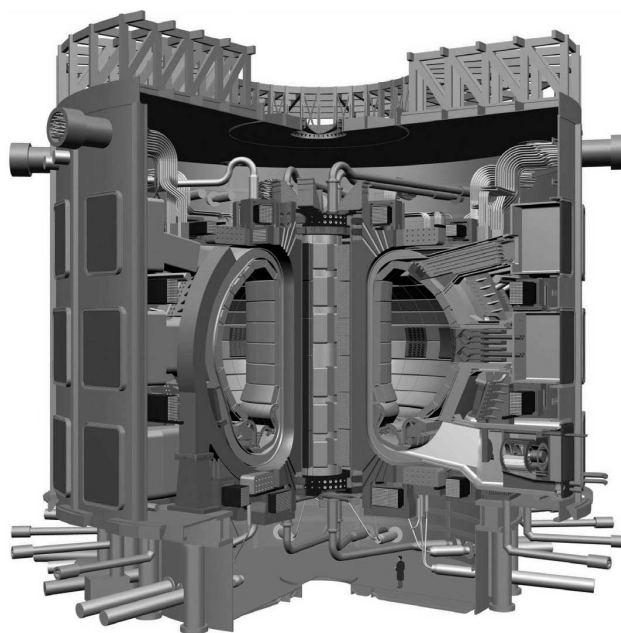


Rys. 5. Zmniejszenie turbulencji plazmy w wyniku nagrzewania zlokalizowanego objawia się zanikiem potencjału elektrycznego w pierścieniowym obszarze plazmy. Rozkład potencjału w przekroju wnętrza torusa pokazany jest we współrzędnych (x, y) podzielonych przez promień wewnętrzny torusa r . U góry: potencjał w warunkach rozwiniętej turbulencji, u dołu: potencjał w sytuacji, gdy turbulencja w obszarze pierścieniowym uległa stłumieniu wskutek nagrzewania plazmy [19].

ITER – reaktor termojądrowy następnej generacji

ITER będzie tokamakiem dwa razy większym niż JET, jeśli brać pod uwagę wymiary liniowe (kubatura będzie 10 razy większa). Podstawowe parametry ITER-a są następujące:

- duży promień – 6,2 m;
- mały promień – 2 m;
- objętość komory – 840 m³;
- natężenie prądu w plazmie – 15 MA;
- indukcja magnetyczna – 5,3 T;
- koncentracja plazmy – 10²⁰ m⁻³;
- czas trwania wyładowania – 500 s w trybie impulsowym i 1000 s w trybie quasi-ciągłym;
- moc urządzeń nagrzewających plazmę (falami elektromagnetycznymi o częstotliwości 50 MHz i 170 GHz oraz wiązkami cząstek) – 75 MW;



Rys. 6. Schemat tokamaka ITER (www.iter.org)

- temperatura plazmy – 120 MK;
- moc wytwarzana (w reakcji syntezy) – 500–700 MW;
- współczynnik wzmocnienia (moc syntezy/moc nagrzewania) – 10 w trybie impulsowym i 5 w trybie quasi-ciągłym;
- średnie obciążenie powierzchni tokamaka wskutek promieniowania neutronowego – 0,5 MW/m².

Celem projektu ITER jest zademonstrowanie naukowej i technicznej realności fuzji jądrowej jako źródła energii do celów pokojowych. Urządzenie powinno osiągnąć stan intensywnego spalania paliwa deuterowo-trytowego ze współczynnikiem wzmocnienia równym co najmniej 10 w warunkach pracy impulsowej (indukcyjne wzbudzenie prądu w plazmie) oraz stan quasi-stacjonarny z nieindukcyjnym wzbudzeniem prądu i współczynnikiem wzmocnienia równym 5. Nie wyklucza się osiągnięcia stanu zapłonu. Z technicznego punktu widzenia przetestowane zostaną elementy reaktora, w tym cewki nadprzewodnikowe, układy zdalnej obsługi oraz odprowadzania energii i masy („popiołu” helowego) z przestrzeni reaktora. Ze względu na dużą moc ogromną rolę odegrają te elementy, które będą odpowiedzialne za przenoszenie dużych strumieni ciepła. Obecność trytu (i radiacyjnie aktywowanych elementów konstrukcyjnych reaktora) wymusza zastosowanie – po raz pierwszy na taką skalę – zautomatyzowanych systemów obsługi urządzenia. W Europie uruchomiony jest jeden tokamak z cewkami nadprzewodnikowymi (Tore Supra w Cadarache, Francja). Trzy inne tokamaki badające stany quasi-stacjonarne w urządzeniach z cewkami nadprzewodnikowymi są budowane bądź już zbudowane w krajach azjatyckich (JT-60SA w Japonii, SST-1 w Indiach, EAST w Chinach i KSTAR w Korei Płd.).

Najbardziej istotne jest to, że ITER będzie miał moduł płaszcz (ang. blanket; żaden inny tokamak nie ma

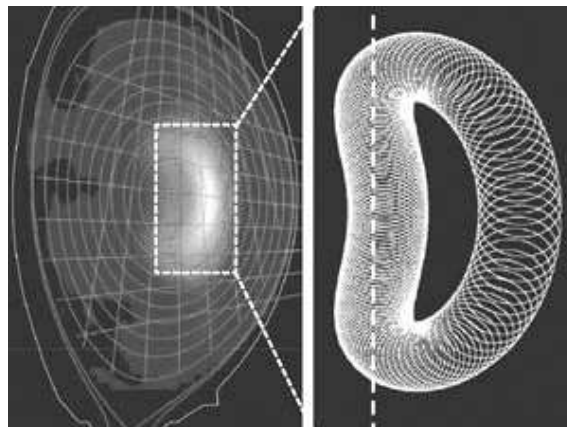
tego elementu konstrukcyjnego). W płaszczu (warstwie otaczającej plazmę) neutrony są termalizowane oraz reagują z litem i wytwarzają tryt. Rozważane są dwie koncepcje płaszczu; w obu jest on chłodzony helem. Pierwsza koncepcja zakłada zastosowanie ciekłego litu i ołowiu do powielania neutronów i wytwarzania trytu, w drugiej wykorzystany będzie lit w postaci materiałów ceramicznych (do wytwarzania trytu) oraz beryl (do powielania neutronów). W bardziej zaawansowanych projektach rozważa się zastosowanie wody do chłodzenia płaszczu (jeśli jego temperatura będzie dostatecznie niska, ok. 300 °C).

Innym ważnym elementem ITER-a będzie bardzo skomplikowana (i droga) część zwana diwertorem. Diwertytor służy do odprowadzania „popiołu”, czyli helu, oraz kontroluje poziom domieszek w plazmie, pochodzących ze ścian komory. W ITER-ze po raz pierwszy zbadana zostanie wydajność usuwania popiołu helowego z komory reaktora.

ITER będzie pierwszym tokamakiem, który osiągnie stan plazmy płonącej, tj. stan, w którym będą zachodzić intensywne reakcje syntezy jąder. W wyniku tego plazma będzie podgrzewana dzięki energii przekazywanej do niej przez drugi produkt reakcji – cząstki α , które są naładowane i nie opuszczają plazmy tak łatwo jak neutrony. Obecność cząstek α o energii 3,5 MeV będzie też źródłem dodatkowej niestabilności. Szybkie cząstki naładowane poruszające się wzdłuż linii pola magnetycznego powodują, że linie te zaczynają drgać tak jak struny gitary. Są to tzw. fale Alfvéna, które rozchodzą się z prędkością osiągnącą 5% prędkości światła. Cząstki α poruszają się jeszcze szybciej i w związku z tym mogą rezonansowo oddziaływać z falami Alfvéna [22]. Zjawisko to może wpływać na utrzymanie cząstek α w plazmie, które powinno być wystarczająco długie, aby cząstki te mogły przekazać jej swoją energię. Cząstki α mogą też wpływać na inne niestabilności, np. piłokształtne (w tym wypadku stabilizująco) [23]. Cząstki α badane są w tokamaku JET, gdzie dodaje się niewielkie ilości berylu, który z nimi reaguje, a produktami reakcji są jądro węgla i neutron. Reakcji towarzyszy promieniowanie charakterystyczne γ , które jest źródłem informacji o rozkładzie przestrzennym cząstek α w plazmie (rys. 7).

W ITER-ze będą też przetestowane, w warunkach plazmy płonącej, materiały pierwszej ściany reaktora, które będą musiały wytrzymać przez wiele lat temperaturę sięgającą nawet 1000 °C. W obecnie działających tokamakach materiałem tym jest głównie węgiel (w postaci kompozytów z włókien węglowych CFC, carbon fibre composites), ale także molibden [25] i wolfram [26]. Węgiel ma tę zaletę, że jest odporny na wysokie temperatury (nie topi się), ma jednak tę wadę, że reaguje chemicznie z izotopami wodoru, co prowadzi do erozji ściany i – co jest bardziej niebezpieczne – zatrzymywania trytu w materiale ściany. Z tego powodu dla ITER-a jako materiał na pokrycie pierwszej ściany przewidziany jest beryl. Beryl ma małą liczbę porządkową, nie wiąże się z trytem i skutecznie usuwa tlen z komory tokamaka. W celu wstępnego przetestowania tej koncepcji planuje się zainstalo-

wanie ściany berylowej w tokamaku JET [27]. W najbardziej narażonych obszarach ściany reaktora, przede wszystkim w obszarze diwertora, wykorzystany będzie wolfram i kompozyty CFC.



Rys. 7. Tomografia promieniowania γ wykorzystana w tokamaku JET do lokalizacji cząstek α [24]

ITER będzie instalacją jądrową (ok. 10^{20} neutronów/sekundę), co wynika z obecności promieniotwórczego trytu i aktywacji materiałów konstrukcyjnych reaktora przez neutrony o energii 14,1 MeV, będące produktami syntezy jąder. Neutrony unoszą energię uwolnioną w reakcji syntezy i oddają tę energię w płaszczu otaczającym komorę reaktora, a ponadto zapewniają (w reakcji z litem) produkcję trytu. Niekorzystne jest to, że jednocześnie powodują wtórną aktywność promieniotwórczą elementów reaktora. To ostatnie zagrożenie będzie zminimalizowane przez zastosowanie w elektrowni specjalnych materiałów o małej aktywności wtórnej. Materiały te to stale RAFM (reduced activation ferritic martensitic), np. stal EUROFER obecnie intensywnie badana pod kątem wytrzymałości na obciążenia termiczne, mechaniczne i radiacyjne, jakie mogą wystąpić w reaktorze. W dalszej perspektywie przewiduje się wykorzystanie stali ODS (oxide dispersion strengthened) oraz kompozytów SiC_f/SiC z włóknami węglowymi (C_f). W węzłach najbardziej narażonych wykorzystywane będą stopy wolframu. Z punktu widzenia ochrony radiologicznej optymalne byłyby materiały z wanadu, chromu i tytanu, ale są one bardzo drogie, a ich technologia nie jest jeszcze opanowana. Na badania w tym kierunku przeznaczane są duże fundusze, ok. 7 mln euro rocznie, a wszystko po to, aby stworzyć nowe materiały, które z jednej strony będą odporne na ekstremalne warunki panujące w reaktorze, a z drugiej strony ich wtórna aktywność promieniotwórcza wywołana strumieniem neutronów będzie na niskim poziomie. Warto podkreślić, że dotyczy to tylko elementów konstrukcyjnych reaktora, które będą musiały być przechowywane po zakończeniu jego pracy i demontażu. „Popiół” ze spalania termojądrowego, czyli hel, jest całkowicie bezpieczny dla środowiska.

Podsumowanie, czyli co po ITER-ze

Na pytanie, kiedy zostanie zbudowana pierwsza elektrownia termojądrowa, Lew Arcymowicz, jeden z pionierów badań nad fuzją jądrową, odpowiedział: – Dokładnie wtedy, kiedy ludzkość będzie jej potrzebowała. – Ten czas się zbliża. Rozpatrywane są dwa scenariusze: pierwszy z nich zakłada, że po pomyślnym zakończeniu prac nad ITER-em zostanie zbudowany DEMO – demonstracyjny reaktor termojądrowy, a następnie PROTO – prototypowa elektrownia termojądrowa. Ostatnio promowany jest jednak scenariusz nazywany ścieżką szybką, opracowany w Wlk. Brytanii, ale z udziałem naukowców z innych krajów Wspólnoty EURATOM. Punktem wyjścia jest konstatacja, że nakłady na badania termojądrowe (ze źródeł publicznych) zmalały od 1980 r. o 50%. W UE na te badania wydaje się 0,04% PKB (w USA 0,05%, w Japonii 0,24%). Także źródła prywatne (głównie w USA, firma General Atomics) są mniej skore do wydawania pieniędzy na ten cel (spadek o prawie 70% w latach 1985–98). Trzeba więc nadrobić zaległości i nadać tym pracom odpowiedni impet, o ile synteza termojądrowa ma dostarczyć energię elektryczną do sieci jeszcze w tym wieku.

Scenariusz szybkiej ścieżki zakłada, że DEMO i PROTO zostaną połączone w jeden etap, a budowa prototypowej elektrowni zaczęłaby się jeszcze przed zakończeniem prac misji ITER-a. Wedle tej koncepcji ma być inaczey zaplanowany także etap ITER. Równoległe z ITER-em zbudowane byłoby urządzenie IFMIF (International Fusion Materials Irradiation Facility) na potrzeby badań materiałów konstrukcyjnych i materiałów pierwszej ściany reaktora. Badania w IFMIF doprowadziłyby do wyboru materiału konstrukcyjnego dla krytycznych elementów reaktora DEMO. Źródłem neutronów o energii 14 MeV (czyli takich, jakie są produktem syntezy DT) będzie reakcja deuteronów, rozprędzonych w akceleratorze liniowym do energii kilkudziesięciu MeV, z litem w postaci ciekłej tarczy (informacje na temat projektu IFMIF można znaleźć na stronie www.frascati.enea.it/ifmif).

Koncentracja działań na tych kierunkach stworzy szybką ścieżkę prowadzącą do syntezy termojądrowej jako

bezpiecznego, nieograniczonego i przyjaznego środowisku naturalnemu źródła energii dla potrzeb ludzkości.

Literatura

- [1] *The Convention and the Kyoto Protocol United Nations framework convention on climate change* (unfccc.int/resource/convkp.html).
- [2] S. Barabaschi i in., *Fusion Programme Evaluation UR 17521* (Office for Official Publications of the EU, Luxembourg 1996).
- [3] J.D. Lawson, *Proc. Phys. Soc. B* **70**, 6 (1957).
- [4] S. Ishida i in., *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3917 (1997).
- [5] T. Fujita i in., *Nucl. Fusion* **38**, 207 (1998).
- [6] H. Zushi i in., *20th IAEA Fusion Energy Conf.* (Vilamoura, Portugal, 1–6 November 2004).
- [7] J. Jacquinot i Tore Supra Team, *20th IAEA Fusion Energy Conf.* (Vilamoura, Portugal, 1–6 November 2004).
- [8] T. Oikawa, *17th IAEA Conf. on Fusion Energy* (Yokohama, Japan, 1998), IAEA-F1-CN-69/CD1/1.
- [9] P.H. Rebut i in., *Nucl. Fusion* **32**, 187 (1992).
- [10] J. Jacquinot i JET Team, *Nucl. Fusion* **39**, 235 (1999).
- [11] D. Stork, American Physical Society, 46th Annual Meeting of the Division of Plasma Physics, 15–19 November 2004, Savannah, GA.
- [12] J.D. Strachan i in., *Plasma Phys. Control. Fusion* **36**, B3 (1994).
- [13] F. Wagner i in., *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1408 (1982).
- [14] K.H. Burrell, *Phys. Plasmas* **4**, 1499 (1997).
- [15] T.E. Evans i in., *Nature Physics* **2**, 419 (2006).
- [16] C. Gormezano, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5544 (1998).
- [17] E. Mazzucato i in., *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3145 (1996).
- [18] E. Strait i in., *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4421 (1995).
- [19] X. Garbet i in., *Nucl. Fusion* **43**, 975 (2003).
- [20] O. Sauter i in., *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3322 (2000).
- [21] A. Fujisawa i in., *Nucl. Fusion* **47**, S718 (2007).
- [22] B.N. Breizman i in., *Phys. Plasmas* **10**, 3649 (2003).
- [23] F. Porcelli i in., *Nucl. Fusion* **44**, 362 (2004).
- [24] V.G. Kiptily i in., *Phys. Rev. Lett.* **93**, 115001 (2004).
- [25] I.H. Hutchinson i in., *Nucl. Fusion* **41**, 1391 (2001).
- [26] R. Neu i in., *J. Nucl. Mater.* **241–243**, 678 (1997).
- [27] H. Maier i in., *Nucl. Fusion* **47**, 222 (2007).



Dr hab. ANDRZEJ GAŁKOWSKI jest absolwentem Wydziału Chemii i Fizyki Technicznej WAT. W latach 1982–85 studiował zastosowania matematyki na Wydziale Matematyki Uniwersytetu Warszawskiego. Od roku 1976 pracuje w Instytucie Fizyki Plazmy i Laserowej Mikrosyntezy. Zajmuje się teorią i modelowaniem utrzymywania plazmy w zamkniętych pułapkach magnetycznych oraz procesami transportu w plazmie namagnetyzowanej. W roku 1996 habilitował się na podstawie rozprawy, w której wyprowadził uogólnione równanie Taylora opisujące stany zrelaksowane plazmy gorącej (bezsilowe pola Beltramiego) z makroskopowymi przepływami. Odbył staże naukowe w JET Joint Undertaking (laboratorium Wspólnoty EURATOM, 1993) oraz na Jackson State University w Stanach Zjednoczonych (2003). Od 2005 r. koordynuje prace Asocjacji Euratom–IFPILM – konsorcjum grupującego 11 instytucji naukowych w Polsce prowadzących prace badawczo-rozwojowe na rzecz europejskiego programu syntezy jądrowej oraz międzynarodowego programu ITER. Jest członkiem Komitetu Doradczego Komisji Europejskiej (CCE-FU) ds. programu syntezy jądrowej EURATOM-u oraz Komitetu Koordynującego porozumienia EFDA (European Fusion Development Agreement).

Fizyka materiałów i powierzchni z pierwszych zasad*

Adam Kiejna

Instytut Fizyki Doświadczalnej Uniwersytetu Wrocławskiego
oraz Interdyscyplinarne Centrum Modelowania Materiałów, Wrocław

Materials and surface physics from first principles

Abstract: A brief review of a basic methodology of contemporary, atomic-scale computational physics of materials is presented. The discussion is focused on one of the most successful and widely applied approaches that exploits density functional theory, plane waves basis, and *ab initio* molecular dynamics to optimize ground state atomic configuration. In the second part, two illustrative examples of results are presented, which were obtained with this approach for energetic and structural properties of grain boundaries in iron, and for gold atom nanostructures formed at titanium dioxide (rutile) surface.

1. Wstęp

W ostatnich 20 latach zanotowano ogromny postęp w zaawansowanych, kwantowych metodach obliczeniowych fizyki ciała stałego. Powszechnym i wygodnym narzędziem stosowanym w fizyce, chemii i inżynierii materiałów stały się w szczególności symulacje komputerowe z pierwszych zasad (*ab initio*), pozwalające obliczać parametry fizyczne rzeczywistych materiałów. Pod tym pojęciem rozumiemy metody, którymi można dokładnie rozwiązać równania mechaniki kwantowej (Schrödingera lub Diraca) dla elektronów w układach złożonych z wielu atomów, bez wprowadzania parametrów empirycznych. Przewodzenie obliczeń (symulacji) z pierwszych zasad stało się możliwe dzięki olbrzymiemu postępowi w szybkości procesorów i zwiększeniu rozmiaru pamięci komputerowych. Atrakcyjność symulacji wzrosła dzięki rozwojowi dynamiki molekularnej *ab initio*, w której hamiltonian używany do symulacji pochodzi z dokładnych obliczeń struktury elektronowej wykonywanych w czasie prowadzenia symulacji [1].

Symulacje z pierwszych zasad wywarły ogromny wpływ na nasz sposób myślenia o problemach fizyki ciała stałego i ogólniej materiałów. Stwarzają one możliwość wirtualnych badań materiałowych, tzn. poznawania właściwości materiałów wyłącznie na podstawie obliczeń, przed dokonaniem doświadczalnej weryfikacji i syntezy. Pozwalają badać realne materiały, w których występują różnego rodzaju defekty (np. powierzchnia, granice ziaren) powodujące, że są one zbyt skomplikowane, by można było do nich stosować metody czysto teoretyczne (dobrze działa-

jące dla kryształów idealnych). Chociaż symulacje z pierwszych zasad są wciąż w pierwszej kolejności stosowane do pogłębiania wiedzy i zrozumienia właściwości znanych materiałów, stanowiąc w ten sposób pomost między teorią i doświadczeniem, to – wykorzystywane do wirtualnego modelowania nowych materiałów o pożądanych właściwościach – w coraz większym stopniu są postrzegane jako trzecia droga prowadzenia badań. Pozwalają także badać układy występujące w warunkach niedostępnych dla eksperymentu. Obliczenia z pierwszych zasad mogą być stosowane do rozmaitych układów w fazie skondensowanej, począwszy od metali i stopów, nanostruktur półprzewodnikowych, powierzchni i katalizy, spintroniki, aż do układów biologicznych i minerałów tworzących jądro Ziemi.

2. Opis układu wieloatomowego

Z atomowego punktu widzenia ciało stałe jest skomplikowanym układem ogromnej liczby cząstek dwóch rodzajów: elektronów i jąder atomowych. Punktem wyjścia kwantowej teorii materiałów jest określenie dla takiego układu wielu cząstek hamiltonianu uwzględniającego energię kinetyczną N elektronów i N jąder, energię potencjalną oddziaływań odpychających pomiędzy cząstkami o ładunku tego samego znaku oraz oddziaływania przyciągające pomiędzy elektronami i jądrami:

$$\mathcal{H} = T_{el} + T_j + V_{el-el} + V_{el-j} + V_{j-j}. \quad (1)$$

Problem wielu ciał oznacza tu jednak praktycznie nieskończoną liczbę elektronów i jąder atomowych (rzędu 10^{23} na cm^3). Znajomość hamiltonianu i postaci równa-

*Na podstawie wykładu wygłoszonego podczas XXXIX Zjazdu Fizyków Polskich w Szczecinie (wrzesień 2007) w sesji plenarnej.

nia Schrödingera z funkcją falową, która zależy od współrzędnych wszystkich elektronów i jąder, nie pozwala nam na opis zachowania się układu, ponieważ nie potrafimy takiego równania rozwiązać ściśle.

Pierwszym krokiem na drodze poszukiwania jego przybliżonego rozwiązania jest uproszczenie zagadnienia poprzez rozpatrzenie osobno układu elektronów i układu jąder i potraktowanie wzajemnego oddziaływania tych układów jako małego zaburzenia. Pozwala na to dobrze uzasadnione przybliżenie Borna–Oppenheimera, wykorzystujące fakt, iż masa elektronu stanowi niewielki ułamek masy jądra (rzędu 10^{-4}). Oznacza to, że ruch elektronu jest szybki w stosunku do ruchu jąder, które bardzo wolno reagują na zmianę konfiguracji elektronów. Dzięki temu w większości przypadków można przyjąć, że osiągając swój stan podstawowy, podukład elektronowy adiabaticznie dostosowuje się do chwilowych położeń jąder. Wobec tego potencjał jąder można traktować jako ustalony potencjał zewnętrzny dla układu elektronowego.

Separacja stopni swobody jąder i elektronów w ramach przybliżenia Borna–Oppenheimera pozwala zapisać hamiltonian układu jąder w postaci

$$\mathcal{H}_j = \sum_{\alpha} \left(-\frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \nabla_{\mathbf{R}_{\alpha}}^2 \right) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} V_{j-j}(|\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{R}_{\beta}|) + E_{el}(\{\mathbf{R}_{\alpha}\}), \quad (2)$$

gdzie drugi wyraz opisuje oddziaływania kulombowskie jąder, a $\{\mathbf{R}_{\alpha}\}$ oznacza zbiór ich położeń. Hamiltonian ten pozwala opisać adiabaticzny ruch podukładu jąder w polu potencjału efektywnego złożonego z potencjału V_{j-j} oraz energii całkowitej $E_{el}(\{\mathbf{R}_{\alpha}\})$ układu elektronowego jako funkcji położeń jonów. Potencjał efektywny określa powierzchnię energii potencjalnej Borna–Oppenheimera, czyli energię stanu podstawowego układu elektronowego w polu ustalonych położeń jąder. Oznacza to, że dla każdej konfiguracji jąder $\{\mathbf{R}\}$ elektrony są w stanie własnym hamiltonianu elektronowego \mathcal{H}_{el} , tzn. drgania sieci jąder nie powodują przejść pomiędzy stanami elektronowymi. Inaczej mówiąc, wzór (2) pomija sprzężenie chwilowych położeń elektronów i jąder (sprzężenie elektron–fonon), powodowane przez dynamikę atomów sieci. Sprzężenie to można obliczyć, ale w większości interesujących nas przypadków można je pominąć. Z wyjątkiem przypadku najbliższych atomów zagadnienie ruchu jąder jest rozwiązywane klasycznie.

Wyznaczenie energii całkowitej układu N oddziałujących elektronów wymaga rozwiązania stacjonarnego równania Schrödingera dla N -elektronowej funkcji falowej zależnej od współrzędnych elektronów i przy ustalonych położeniach, z hamiltonianem postaci

$$\mathcal{H}_{el} = \sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 + \sum_{\alpha} V_{el-j}(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_{\alpha}) \right] + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (3)$$

Stanowi to istotne ułatwienie, ponieważ pozwala zajmować się układem elektronowym, ale wciąż mamy do czynienia z 10^{23} elektronów. Znalezienie wieloelektronowej funkcji falowej spełniającej równanie na wartości własne z hamil-

tonianem (3) jest więc dalej niemożliwe ze względu na ogromną liczbę $N(N-1)/2$ oddziaływań pomiędzy elektronami w drugim wyrazie. Gdyby nie on, mielibyśmy do czynienia z hamiltonianem w postaci sumy hamiltonianów jednocząstkowych, złożonych z energii kinetycznej elektronu i energii potencjalnej oddziaływania z ładunkiem nieruchomego układu jąder, które można byłoby łatwo rozseparować. Sugeruje to sposób wyjścia z tej trudnej sytuacji. Poszukując rozwiązań zagadnienia wieloelektronowego, staramy się sprowadzić do zagadnienia cząstek niezależnych, w którym oddziaływanie pomiędzy parami elektronów jest uwzględnione w postaci średniego pola potencjału [2] działającego na elektron. Dodając go do potencjału wytwarzanego przez jądra atomowe, otrzymujemy potencjał efektywny działający na elektron. Ceną, jaką się płaci za to uproszczenie, jest skomplikowana postać potencjału efektywnego.

Przybliżenie pola średniego stanowi podstawę obliczeń energii całkowitej układu stosowanych w fizyce materiałowej: teorii Hartree’ego–Focka i teorii funkcjonału gęstości. W pierwszej z nich zasadniczą zmienną wykorzystywaną do konstrukcji stanu podstawowego jest wieloelektronowa funkcja falowa, a w drugiej – gęstość elektronowa $n(\mathbf{r})$.

2.1. Metoda Hartree’ego–Focka

W przybliżeniu Hartree’ego–Focka wieloelektronową funkcję falową konstruujemy w postaci iloczynu jednoelektronowych funkcji falowych (orbitali). Ze względu na nierozróżnialność fermionów powinna ona być antysymetryczna przy zamianie współrzędnych dwóch elektronów. Zastosowanie zasady wariacyjnej do wyrażenia na energię oczekiwaną układu elektronowego pozwala wyznaczyć zbiór jednoelektronowych funkcji falowych. Są one określone przez układ N równań jednoelektronowych Hartree’ego–Focka postaci

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{el-j} + e^2 \sum_j \int \frac{|\psi_j(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \right] \psi_i(\mathbf{r}) - e^2 \sum_{j \neq i} \left[\int \frac{\psi_j^*(\mathbf{r}') \psi_i(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \right] \psi_j(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}). \quad (4)$$

W skład hamiltonianu efektywnego, działającego na każdą z jednoelektronowych funkcji falowych, wchodzi operatory energii kinetycznej i energii potencjalnej elektronu w polu jąder V_{el-j} oraz oddziaływanie kulombowskie pomiędzy elektronami. W tym ostatnim, zwanym energią Hartree’ego, oddziaływanie pomiędzy parami elektronów zostało zastąpione przez oddziaływanie elektronu z uśrednionym rozkładem ładunku elektronów. Ostatni wyraz po lewej stronie równania (4), niemający odpowiednika klasycznego, nosi nazwę operatora energii wymiany. Reprezentuje on efekt korelacji wymiennych dotyczących elektronów o tym samym zwrocie spinu. Jego ujemny znak oznacza obniżanie uśrednionej energii oddziaływań kulombowskich pomiędzy elektronami.

Skomplikowana postać potencjału wymiennego powoduje, że równanie (4) stanowi w istocie układ N sprzę-

zonych równań nieliniowych o identycznej postaci dla każdej z funkcji jednoelektronowych. Trudności w jego rozwiązaniu są związane z tym, że wyraz opisujący potencjał oddziaływania zależy od ψ_i – rozwiązania, które staramy się znaleźć. Równania te rozwiązuje się metodą iteracyjną (samouzgodnioną). Na wejściu zakładamy postać próbną funkcji ψ_i , z których konstruujemy potencjał oddziaływań wchodzący do równania (4), a następnie, rozwiązując równanie, uzyskujemy nowe, lepsze oszacowanie ψ_i . Cykl ten powtarzamy aż do uzyskania zbieżności rozwiązań, czyli do samouzgodnienia.

Pełne równania Hartree’ego–Focka są użyteczne (dają się rozwiązać metodą iteracyjną) tylko w układach kilkuelektronowych, takich jak atomy lub proste cząsteczki, a w przypadku ciał stałych jedynie dla jednorodnego gazu elektronowego. W układach wieloelektronowych metoda ta staje się tak skomplikowana, że konieczne są przybliżenia dla potencjału wymiany. Wprowadza się uśredniony potencjał wymiany zaproponowany przez Slatera (1951) [2], w którym nielokalny potencjał wymiany zastąpiono przybliżonym, prostym wyrażeniem, zależnym jedynie od lokalnej gęstości elektronowej. Otrzymuje się w ten sposób lokalną postać potencjału efektywnego działającego jednokowo na wszystkie elektrony. Stanowi to znaczne ułatwienie zagadnienia, ponieważ eliminuje konieczność bezpośredniego opisu $N(N - 1)/2$ par oddziaływań i sprowadza je do rozwiązania jednego równania z jednym polem potencjału uśrednionego.

Przybliżenie Hartree’ego–Focka daje fizyczny opis właściwości ciał stałych, ale obliczone wartości energii wiązania atomów w kryształach metali alkalicznych znacznie się różnią od wartości mierzonych. Ponadto daje ono zerową gęstość stanów na powierzchni Fermiego. Powodem tych trudności jest nieuwzględnienie korelacji wynikających z odpychania kulombowskiego elektronów. Nie pozwalają one zbliżyć się do rozpatrywanego elektronu również elektronom o spinach antyrównoległych. Energia korelacji będąca wynikiem tego oddziaływania jest znacznie mniejsza od energii wymiany (zwykle stanowi ok. 10% jej wartości). Mimo że energia wymiany i korelacji stanowi stosunkowo niewielki ułamek energii całkowitej układu, wnosi ona bardzo istotny wkład do energii wiązania układu (np. cząsteczek i metali).

2.2. Teoria funkcjonału gęstości

Zbudowanie zależnej od $3N$ zmiennych przestrzennych, wieloelektronowej funkcji falowej z funkcji jednoelektronowych komplikuje się gwałtownie wraz ze wzrostem liczby elektronów. Istotnym uproszczeniem byłaby możliwość wyznaczenia stanu podstawowego na podstawie znajomości gęstości elektronowej $n(\mathbf{r})$, która jest funkcją jedynie trzech zmiennych (współrzędnej przestrzennej \mathbf{r}), bez konieczności obliczania jednoelektronowych funkcji falowych. Możliwość taką daje teoria funkcjonału gęstości, za której sformułowanie Walter Kohn został uhonorowany Nagrodą Nobla w dziedzinie chemii (1998).

Jak dowiedli Hohenberg i Kohn [3], energia stanu podstawowego układu wielu elektronów znajdujących się

w potencjale zewnętrznym (pochodzącym od układu jąder) jest jednoznacznie funkcjonałem gęstości elektronowej $n(\mathbf{r})$. Funkcjonał energii osiąga minimum dla dokładnej gęstości elektronowej stanu podstawowego. Pozwala to sformułować problem wyznaczenia stanu podstawowego jako zagadnienie wariacyjne Eulera–Lagrange’a, którego rozwiązanie określa $n(\mathbf{r})$. Cała trudność polega na określeniu postaci funkcjonału energii dla niejednorodnego układu oddziałujących elektronów, która pozostaje nieznana. Kohn i Sham [4] wykazali, że dokładna gęstość elektronowa może być reprezentowana przez gęstość elektronową stanu podstawowego pomocniczego układu nieoddziałujących elektronów, w polu potencjału efektywnego nieco innego, ale wytwarzającego taką samą gęstość elektronową jak gęstość elektronów oddziałujących. Stosując twierdzenie Hohenberga–Kohna do tego nowego zagadnienia, otrzymujemy równanie falowe z potencjałem efektywnym i pomocniczymi funkcjami falowymi wytwarzającymi gęstość elektronową minimalizującą funkcjonał energii, które ma formalnie taką samą postać jak równanie dla elektronów nieoddziałujących.

Problem obliczenia gęstości elektronowej stanu podstawowego sprowadza się zatem do rozwiązania układu równań Kohna–Shama postaci

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{el-j}} + e^2 \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + V_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})] \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}), \quad (5)$$

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\mathbf{r})|^2, \quad (6)$$

gdzie $V_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})] = \delta E_{\text{xc}} / \delta n(\mathbf{r})$ oznacza potencjał wymiany i korelacji. Gęstość elektronowa otrzymana z tych rozwiązań jest dokładną gęstością elektronową stanu podstawowego.

Równanie (6) jest podobne do równania Hartree’ego–Focka z wyjątkiem ostatniego wyrazu w potencjale efektywnym, który uwzględnia nie tylko energię wymiany, ale również energię korelacji. Ponadto w tym przypadku hamiltonian cząstek niezależnych zależy jedynie od gęstości elektronowej, a nie od poszczególnych orbitali. Równania te mogą być rozwiązane w sposób samouzgodniony, tak aby zajęte stany elektronowe generowały gęstość elektronową wytwarzającą potencjał użyty do konstrukcji równań.

Przybliżenie Hartree’ego–Focka całkowicie pomijało energię korelacji, ale energia wymiany była obliczana dokładnie. Teoria funkcjonału gęstości jest formalnie dokładna, ale ponieważ nieznana jest dokładna postać funkcjonału E_{xc} , to w praktyce zarówno energia wymiany jak i korelacji są obliczane w sposób przybliżony. Na szczęście znamy dobre przybliżenia funkcjonału $E_{\text{xc}}[n]$. Jego formalne rozwinięcie w szereg gradientów gęstości pozwala uzyskać całą hierarchię przybliżeń. Ograniczając się do pierwszego wyrazu rozwinięcia, otrzymujemy energię wymiany i korelacji w przybliżeniu lokalnej gęstości (LDA). Oznacza ono, że w niewielkiej objętości przestrzeni fazowej wokół położenia \mathbf{r} , gęstość elektronowa $n(\mathbf{r})$ i potencjał praktycznie się nie zmieniają i niejednorodny gaz

elektronowy można lokalnie traktować jak gaz jednorodny. Część związana z korelacją wymienną dla jednorodnego gazu elektronowego można obliczyć dokładnie w przybliżeniu Hartree’ego–Focka. Obliczenie części korelacyjnej jest znacznie trudniejsze, ale dla jednorodnego gazu elektronowego została ona obliczona kwantową metodą Monte Carlo [5] i parametryzowana prostym wyrażeniem jako funkcja gęstości elektronowej.

Przybliżenie LDA dla wielu układów daje bardzo dobre wyniki, szczególnie w przypadku obliczeń strukturalnych, lecz w wielu przypadkach zdecydowanie zawodzi. Zmusza to do uwzględnienia zmian w rozkładzie przestrzennym gęstości elektronowej poprzez włączenie gradientów gęstości. Lepszy opis energii wymiany i korelacji zapewnia tzw. uogólnione przybliżenie gradientowe (GGA) [6], dla którego zaproponowano kilka różnych postaci funkcjonalnych. Pomimo sukcesów teorii funkcjonału gęstości podstawowym wyzwaniem przed nią stojącym pozostaje określenie postaci funkcjonału energii wymiany i korelacji.

2.3. Baza fal płaskich i pseudopotencjały

Liczba rozwiązań równania Kohna–Shama (KS), które musimy znaleźć, jest proporcjonalna do liczby atomów w układzie. W praktyce nie możemy badać własności ogromnej liczby atomów (rzędu 10^{23} cm^{-3}), lecz jedynie liczby znacznie mniejszej ($< 10^3$). W układach okresowych, takich jak idealne kryształy, z pomocą przychodzi słynne twierdzenie Blocha. Ponieważ potencjał w którym poruszają się elektrony, a co za tym idzie, również hamiltonian ma okresowość sieci, to – zgodnie z twierdzeniem Blocha – wektora falowego \mathbf{k} można używać do indeksowania rozwiązań równania (5), które można wyrazić jako iloczyn czynnika fazowego fali płaskiej i pewnej funkcji $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ o okresowości sieci: $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Dzięki temu zamiast obliczać funkcję falową każdego z nieskończonej liczby elektronów, która rozciąga się w nieskończonym kryształ, wystarczy obliczyć funkcję falową dla skończonej liczby (od kilku do kilku tysięcy) elektronów w jednej komórce sieci prymitywnej.

Uwzględniając rozwinięcie funkcji $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ w szereg Fouriera, funkcję falową elektronu dla każdego wektora \mathbf{k} i pasma j możemy zapisać w postaci

$$\psi_{j\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} c_{j\mathbf{k}}(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}, \quad (7)$$

gdzie \mathbf{G} jest wektorem sieci odwrotnej. Takie przedstawienie efektywnej funkcji falowej elektronu nosi nazwę rozwinięcia na fale płaskie. Pokazuje ono, że fale płaskie stanowią naturalny układ funkcji bazowych dla elektronów. Ma to istotne znaczenie, ponieważ zastosowanie kombinacji liniowej funkcji bazowych pozwala na bardziej efektywne rozwiązanie równania (5).

Wybór funkcji bazowych zastosowanych do reprezentowania orbitali KS nie tylko określa dokładność i wydajność obliczeń, ale także pozwala klasyfikować metody obliczania struktury elektronowej. W zastosowaniach do złożonych układów na ogół stosuje się jeden z trzech podsta-

wowych rodzajów funkcji bazowych: kombinację liniową orbitali atomowych (LCAO), linearyzowane uzupełnione fale płaskie (LAPW) lub fale płaskie w połączeniu z metodą pseudopotencjału [2].

Baza LCAO wykorzystuje wyłącznie zlokalizowane orbitale atomowe wyrażone w postaci bądź numerycznej, bądź analitycznej (np. funkcje Gaussa). Pozostałe dwie kategorie funkcji bazowych można scharakteryzować, dokonując podziału elektronów należących do atomów tworzących ciało stałe na dwie grupy: elektrony walencyjne i elektrony rdzenia. Pierwsze są bardzo czułe na zmianę otoczenia i decydują o właściwościach elektronowych, naturze wiązania oraz strukturze materiałów. Natomiast elektrony rdzenia są mocno związane z jądrem i nie biorąc udziału w przewodnictwie, w niewielkim stopniu wpływają na właściwości fizyczne układu. Ich funkcje falowe bardzo słabo się nakładają i mają kształt zbliżony do funkcji falowych elektronów w atomach izolowanych (choć odpowiadające im wartości własne energii są na ogół różne). Dlatego jądro i elektrony rdzenia możemy traktować jako jedną całość, tzw. rdzeń jonowy, wytwarzający potencjał, z którym oddziałują elektrony walencyjne. Ciało stałe możemy uważać za zbudowane z dodatnich rdzeni jonowych i elektronów walencyjnych.

Poza rdzeniem funkcje falowe elektronów walencyjnych są gładkie. W obszarze rdzenia wykazują silne oscylacje, ponieważ muszą być ortogonalne do funkcji falowych elektronów rdzenia. Dlatego użycie fal płaskich do ich reprezentowania jest niewystarczające, bo w takim przypadku rozmiar bazy powinien być nieskończenie duży. Wyjściem z tej sytuacji jest podział całej przestrzeni na obszary w pobliżu jąder (wewnątrz rdzenia) oraz pozostałe obszary międzywęzłowe i zastosowanie funkcji bazowych różnego typu do opisu elektronów w tych obszarach. W podejściu uwzględniającym wszystkie elektrony, fale płaskie tworzące bazę rozwiązań KS w obszarze międzywęzłowym są uzupełniane w obszarze rdzenia funkcjami atomowymi, spełniającymi warunki zszycia na granicy obszarów. Idea ta stanowi podstawę metody uzupełnionych fal płaskich [2] i jej wersji linearyzowanej (LAPW) [7].

W metodzie zamrożonego rdzenia interesują nas jedynie elektrony walencyjne i ich oddziaływanie z rdzeniem, czyli potencjałem jądra ekranowanym przez elektrony rdzenia. W praktyce potencjał ten można zastąpić słabym pseudopotencjałem, ponieważ silny potencjał przyciągający w obszarze rdzenia jest, częściowo lub całkowicie, kompensowany przez potencjał odpychający wynikający z ortogonalności stanów walencyjnych i stanów rdzenia. Funkcje falowe rdzenia są silnie zlokalizowane, więc potencjał odpychający ma charakter krótkozasięgowy i znika poza pewnym promieniem rdzenia, a pseudopotencjał przechodzi w rzeczywisty potencjał. W ten sposób wartości własne energii stanów walencyjnych można wyznaczyć przy użyciu gładkich funkcji tworzących bazę fal płaskich oraz słabych pseudopotencjałów. Zauważmy, że pozwala to uprościć opis teoretyczny, a jednocześnie ogranicza liczbę elektronów, którymi musimy się zajmować, bez istotnego poświęcenia dokładności obliczeń.

Baza fal płaskich ma wiele zalet, ponieważ m.in. stanowi zupełny układ ortogonalny, nie zależy od położeń atomów, pozwala na łatwe przejście od reprezentacji w przestrzeni położeń do przestrzeni pędów i umożliwia łatwe obliczanie elementów macierzowych operatora energii kinetycznej. Jej podstawowa wada – wymóg dużej liczby fal płaskich dla przedstawienia oscylacji funkcji falowych w obszarze rdzenia – staje się mało istotna, jeśli fale płaskie stosowane są wraz z metodą pseudopotencjału.

Ze względu na to, że najbardziej istotny wkład do rozwinięcia wnoszą fale płaskie odpowiadające małej energii kinetycznej, w praktycznych zastosowaniach uwzględniamy wyrazy rozwinięcia leżące poniżej pewnej energii odcięcia, której wybór zależy od możliwości obliczeniowych i pożądanej dokładności obliczeń. Z jednej strony powinna ona być jak najmniejsza, z drugiej zaś wiele pierwiastków (np. metale przejściowe, pierwiastki ziem rzadkich) wymaga dużej energii odcięcia (dużej bazy) fal płaskich. Dlatego wiele wysiłku włożono w konstrukcje pseudopotencjałów spełniających wzajemnie sprzeczne warunki dokładności i wydajności numerycznej. Pozwoliło to skonstruować ultramiękkie pseudopotencjały [8], które umożliwiają obniżenie wymaganej energii odcięcia, a co za tym idzie, redukcję liczby funkcji bazowych, przy dokładności obliczeń porównywalnej z metodą LAPW [9]. Ultramiękkie pseudopotencjały mogą także służyć za punkt wyjścia dla metody potencjałów wykorzystujących fale uzupełnione „rzutnikami” (PAW) [10], którą można uważać za etap pośredni na drodze do konwergencji metod pseudopotencjału i LAPW [11].

2.3.1. Rozwiązywanie równań Kohna–Shama

Użycie fal płaskich jako funkcji bazowych dla funkcji elektronowych pozwala zapisać równanie KS w szczególnie prostej formie. Podstawiając do (5) potencjał efektywny w postaci rozwinięcia w szereg Fouriera oraz funkcję falową w postaci funkcji Blocha (7), otrzymujemy układ równań liniowych na współczynniki $c_{j,k}$, który możemy zapisać w postaci równania macierzowego

$$H_{k+G,k+G'} c_{j,k}(G') = \varepsilon_{j,k} c_{j,k}(G). \quad (8)$$

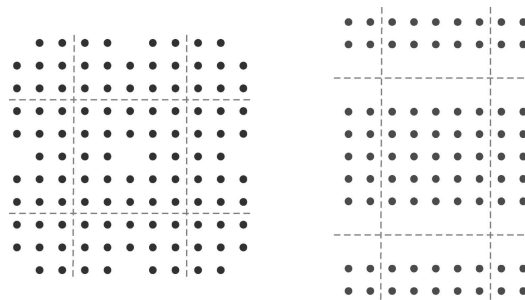
Jego rozwiązywanie, które wymaga diagonalizacji macierzy hamiltonianu metodami algebry liniowej, nazywamy obliczaniem struktury elektronowej (pasmowej). Rząd macierzy $H_{k+G,k+G'}$ jest równy liczbie funkcji bazowych stanowiących składowe wektora c_i . Każda wartość własna $\varepsilon_{j,k}$ jest związana z konkretnym pasmem energetycznym j . Odpowiadające im wektory własne $c_{j,k}(G)$ określają funkcję falową Blocha (7), czyli pozwalają skonstruować orbitale KS i obliczyć gęstość elektronową.

Jeśli weźmiemy dostatecznie dużą macierz, to możemy przypuszczać, że wartości własne $\varepsilon_{j,k}$ odpowiadające małym j (nisko leżącym pasmom) dobrze przybliżają szukaną wartość własną. Rozwiązania takie musimy znaleźć dla wszystkich wartości k z pierwszej strefy Brillouina. Rozmiar bazy jest określony przez zadanie energii odcięcia, E_{cut} , czyli przez wektory o długości G_{max} spełniające warunek $\hbar^2(\mathbf{k} + \mathbf{G}_{\text{max}})^2/2m < E_{\text{cut}}$. Zastosowanie pseudo-

potencjałów wymaga użycia ok. 100 fal płaskich na atom. Dla typowej liczby atomów w superkomórce mamy więc liczbę fal płaskich równą ok. 5000. Dla tak wielkiej liczby fal macierz $H_{k+G,k+G'}$ jest zbyt duża, by mogła być diagonalizowana bezpośrednio, potrzebna jest więc alternatywna metoda wyznaczania stanu podstawowego.

2.4. Superkomórki

Dzięki twierdzeniu Blocha wiemy, jak znajdować funkcje falowe elektronów i gęstość elektronową w kryształach doskonałych. Co jednak zrobić, gdy kryształ ma obniżoną symetrię, np. na skutek defektów czy też obecności powierzchni? Zastosowanie fal płaskich jako funkcji bazowych do opisu defektów wymagałoby użycia nieskończonego, ciągłego zbioru fal płaskich, co nawet przy niedużej energii odcięcia uniemożliwiłoby wykonanie obliczeń. W takich przypadkach zastosowanie periodycznych superkomórek, w których defekt jest otoczony przez regularną strukturę wnętrza (rys. 1), umożliwia obliczenia dla skończonej bazy fal płaskich. Podobnie, powierzchnię kryształu, która jest okresowa w kierunkach równoległych do powierzchni, lecz nie w kierunku prostopadłym do niej, można przedstawić za pomocą płytki złożonej z kilku (kilkunastu) warstw atomowych przedzielonych próżnią i powtarzanych okresowo w całej przestrzeni. Należy tylko zadbać o to, by rozmiar komórki był wystarczająco duży, żeby uniemożliwić oddziaływanie między sąsiednimi defektami, lub – w przypadku superkomórki reprezentującej powierzchnię – wyeliminować oddziaływanie przeciwnych powierzchni zarówno poprzez warstwy atomowe jak i poprzez próżnię.



Rys. 1. Przykłady dwuwymiarowych superkomórek stosowanych do obliczeń defektów punktowych (po lewej) i powierzchni kryształu (po prawej)

2.5. Siła działająca na atom

Obliczona energia elektronowego stanu podstawowego pozwala określić równowagową strukturę atomową układu oraz jego dynamikę. Pochodna cząstkowa energii układu względem współrzędnej położenia jonu α daje rzeczywistą siłę działającą na jon. W przypadku układu elektronowego w polu jąder hamiltonian zależy jawnie od położeń jąder \mathbf{R}_α , stanowiących ustalone parametry. Na podstawie twierdzenia Hellmanna–Feynmana [12] równanie

ruchu jądra możemy zapisać w postaci

$$\mathbf{F}_\alpha(t) = - \left\langle \Psi \left| \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}_\alpha} \right| \Psi \right\rangle = M_\alpha \ddot{\mathbf{R}}_\alpha(t). \quad (9)$$

Otrzymujemy w ten sposób zbiór sił kwantowych działających na atomy, który może być wykorzystany do optymalizacji geometrii. Całkowanie niutonowskich równań ruchu pozwala badać dynamikę układu atomów i nosi nazwę dynamiki molekularnej z pierwszych zasad (*ab initio*) lub dynamiki molekularnej Borna–Oppenheimera. Najbardziej wymagającym krokiem tej procedury jest bardzo dokładne obliczenie elektronowego stanu podstawowego po każdym ruchu atomów.

Ponieważ tylko dwa ostatnie wyrazy po prawej stronie (1) podlegają działaniu gradientu względem położenia jąder, siła działająca na jądro jest dana przez całkowite klasyczne wyrażenie – gradient potencjału będącego superpozycją pól jąder atomowych oraz potencjału elektrostatycznego wytwarzanego przez gęstość elektronową $n(\mathbf{r})$. Oznacza to, że siła w ogóle nie zależy od energii kinetycznej i energii wymiennie-korelacyjnej układu, chociaż zmieniają się one w czasie ruchu jąder. A więc wszystkie subtelne efekty kwantowe wpływają na obliczone siły jedynie poprzez gęstość elektronową stanu podstawowego.

2.6. Dynamika Cara–Parrinella

Stosując język dynamiki molekularnej, Car i Parrinello [13] potraktowali funkcje falowe elektronów jako zmienne dynamiczne, które tak ewoluują, by $\psi_i^{\text{próba}}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi_i(\mathbf{r})$. Inaczej mówiąc układ, którego jeden ze składników (elektrony) podlega opisowi kwantowemu, odwzorowali na układ, w którym zarówno jony jak i elektrony są traktowane klasycznie i opisane przez klasyczne równania dynamiki molekularnej, wynikające z funkcji Lagrange’a

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_i \mu \langle \dot{\psi}_i | \dot{\psi}_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N M_\alpha \dot{\mathbf{R}}_\alpha^2 - E[\{\psi_i\}, \{\mathbf{R}_\alpha\}], \quad (10)$$

gdzie μ oznacza całkowite fikcyjną masę przypisaną funkcjom falowym elektronów, kropka – pochodną czasową, E – funkcjonal energii KS. Energia kinetyczna w funkcji (10) pochodzi od fikcyjnej dynamiki elektronowych stopni swobody, natomiast funkcjonal energii KS odgrywa rolę klasycznej energii potencjalnej w sformułowaniu Lagrange’a. Z równań Lagrange’a wynika, że zagadnienie znalezienia stanów własnych KS sprowadza się do rozwiązania układu klasycznych równań ruchu dynamiki molekularnej dla elektronowych funkcji falowych i jąder:

$$\mu \ddot{\psi}_i(\mathbf{r}, t) = - \frac{\partial E[\{\psi_i\}, \{\mathbf{R}_\alpha\}]}{\partial \psi_i^*(t)} + \sum_j \Lambda_{ij} \psi_j(\mathbf{r}, t), \quad (11)$$

$$M_\alpha \ddot{\mathbf{R}}_\alpha = - \frac{\partial E[\{\psi_i\}, \{\mathbf{R}_\alpha\}]}{\partial \mathbf{R}_\alpha}, \quad (12)$$

gdzie Λ_{ij} są mnożnikami Lagrange’a zapewniającymi ortogonalność funkcji falowych w czasie propagacji wzdłuż trajektorii dynamiki molekularnej. W granicy $\mu \rightarrow 0$ równanie (11) sprowadza się do równania Kohna–Shama. Wybór masy μ ma duże znaczenie dla uzyskania zbieżności rozwiązań w rozsądnej liczbie kroków czasowych.

W schemacie Cara–Parrinella funkcjonal energii KS jest funkcją zbioru współczynników $E[\{c_i\}]$ bazy fal płaskich. Każdy ze współczynników c_i można uważać za współzrędną klasycznej „cząstki”. Po obliczeniu przyspieszeń współczynników rozwinięcia funkcji falowych, równania ruchu muszą być scałkowane w celu obliczenia współczynników rozwinięcia na funkcje bazowe. Stosuje się do tego algorytmy klasycznej dynamiki molekularnej.

Fikcyjna dynamika niutonowska funkcji falowych o masach $\mu \ll M_\alpha$ wymaga, by: 1) krok czasowy był stosunkowo mały w porównaniu ze standardową dynamiką molekularną, 2) przekaz energii kinetycznej pomiędzy klasycznymi stopniami swobody $\{\mathbf{R}_\alpha\}$ i kwantowymi $\{\psi(\mathbf{r}_i)\}$ był bardzo mały. Oznacza to, że w dynamice Cara–Parrinella w czasie ruchu rdzeni jonowych wzdłuż ich trajektorii elektrony podążają za nimi adiabaticznie, pozostając w pobliżu powierzchni Borna–Oppenheimera.

3. Przykłady zastosowań

W tej części przedstawię dwa przykłady zastosowań omówionej metodyki badań do opisu zjawisk zachodzących na powierzchni materiałów (tlenków metali) oraz śródpowierzchniach metali (granice ziaren), które reprezentują tematykę intensywnie badaną na świecie. Wyniki uzyskano przy zastosowaniu pakietu programowego VASP [14].

3.1. Kohezja na granicach ziaren w metalach

Natura i właściwości granic ziaren (GZ) w metalach stanowią klasyczny problem w fizyce materiałowej. Granice ziaren mogą wywierać silny wpływ na właściwości metali. Wzmoczona dyfuzja i ruch dyslokacji wzdłuż GZ wpływają na wytrzymałość materiału i powodują odkształcenia dyfuzyjne. Segregacja chemiczna zachodząca na GZ przyspiesza korozję ziaren i zwiększa ich kruchość. Z kolei wprowadzenie odpowiednich domieszek może istotnie zwiększyć kohezję na GZ, a co za tym idzie, wytrzymałość materiałów. Dlatego znajomość natury sił wiążących powierzchnie materiałów ma podstawowe znaczenie dla zrozumienia tak ważnych procesów, jak mechanika kruszenia, trybologia, przyleganie cienkich warstw, energia GZ itp.

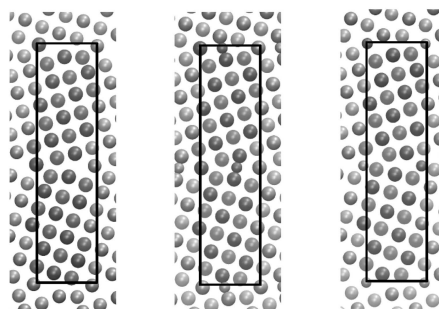
Określenie istotnych parametrów oddziaływań oraz charakteru tych sił jest skomplikowane zarówno od strony teoretycznej jak i doświadczalnej. Obliczenia kwantowe struktury i energetyki GZ stanowią wciąż duże wyzwanie dla współczesnej fizyki materiałowej, gdyż rzeczywiste granice ziaren zawierają 10^2 – 10^6 atomów w superkomórce elementarnej. Z drugiej strony zrozumienie mechanizmów kohezji oraz kruszenia na GZ wywołanego domieszkami wymaga szczegółowego rozpatrzenia struktury elektronowej GZ. Dotychczas podejmowano tylko nieliczne próby obliczeń z pierwszych zasad dla GZ, zwłaszcza w metalach, gdzie takie obliczenia są znacznie trudniejsze. Nawet dla elementarnych jednostek strukturalnych powierzchnia graniczna stwarza dodatkowe komplikacje, ze względu na odstępstwa od idealnej symetrii związane z relaksacją położenia atomów przy powierzchni, naprężeniami i niedopasowaniem (niewspółmiernością) struktury na granicy, na

skutek przesunięcia ziaren, skrócenia lub nachylenia granic. Z tych powodów, biorąc pod uwagę liczbę możliwych struktur, obliczenia z pierwszych zasad muszą się ograniczać do stosunkowo prostych granic.

Dotychczasowe badania wpływu domieszkowania nie dają jednoznacznej odpowiedzi na pytanie o przyczyny kruszenia metali na GZ, nawet dla jednego z najbardziej badanych układów, jakim są GZ miedzi domieszkowane bizmutem. Według jednych autorów odpowiedzialne za nie są zmiany w strukturze elektronowej ziaren, wywołane przez domieszkę [15], według innych kruszenie jest związane głównie z rozmiarem domieszki [16].

Rodzaje struktur tworzonych na granicy ziaren metali przez domieszki oraz ich stabilność zależą od struktury atomowej granicy oraz stopnia domieszkowania. Przeprowadzone badania [17] pozwoliły uzyskać informacje o zmianach energii kohezji GZ żelaza w obecności różnych domieszek. Rozważano jednorodne granice typu $\Sigma 5(210)$, tworzone przez symetrycznie nachylone powierzchnie Fe o orientacji (210) domieszkowane atomami tlenu, azotu i boru (rys. 2). Atomy domieszek umieszczano zarówno w położeniach podstawieniowych (zamieniając atom żelaza atomem domieszki) jak i w położeniach międzywęzłowych. Tlen na ogół osłabia kohezję, azot wzmacnia, natomiast bor może ją albo wzmacniać, albo osłabiać, w zależności od położenia w strukturze żelaza. Ponieważ żelazo wykazuje ferromagnetyzm, bardzo istotne było również zbadanie wpływu domieszek na właściwości magnetyczne układu. Symulacja konfiguracji atomowej na granicy ziaren wymaga stosowania superkomórek złożonych z dużej liczby (40–80) atomów. Przeprowadzona szczegółowa analiza wkładów do energii kohezji pochodzących od mechanicznych i chemicznych efektów, związanych z domieszkami podstawieniowymi i międzywęzłowymi, pozwoliła określić struktury ziaren żelaza najbardziej podatne na kruszenie. Wykazano, że tlen we wszystkich położeniach, a bor – w położeniach międzywęzłowych osłabiają kohezję (przyczyniają się do kruszenia żelaza). Z kolei bor i azot w położeniach podstawieniowych wzmacniają kohezję na granicach ziaren żelaza. Zaobserwowano interesujące, oscylacyjne zmiany wielkości momentu magnetycznego atomów żelaza na GZ, skorelowane ze zmianami koordynacji atomów żelaza na granicy oraz zależne od rodzaju domieszek [17].

Jak widać na tym przykładzie, obliczenia z pierwszych zasad są bardzo przydatne do analizy mechanizmów i określenia charakteru wiązania, ale w przypadku realnych materiałów dość szybko napotykają barierę związaną z wielkością układu (liczbą atomów w komórce). Ze względu na liczbę wszystkich możliwych wariantów strukturalnych wykonanie symulacji dla każdego układu mija się z celem. Dlatego inna ważna rola obliczeń z pierwszych zasad polega na dostarczaniu parametrów niezbędnych do konstrukcji półempirycznych potencjałów oddziaływań międzyatomowych (np. metodą zanurzonego atomu [18]), które następnie mogą być użyte do prowadzenia symulacji w skali atomowej dla dużych układów (10^4 – 10^6 atomów) metodami dynamiki molekularnej.



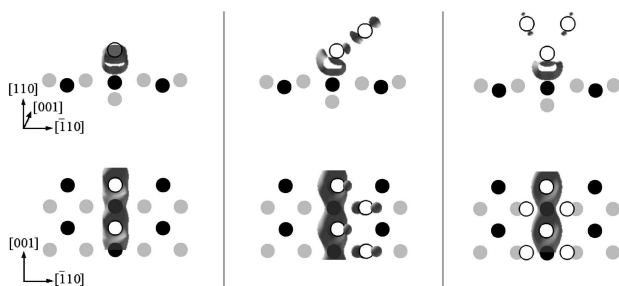
Rys. 2. Widok z boku na zrelaksowane superkomórki, reprezentujące czystą (po lewej) granicę ziaren typu $\Sigma 5(210)$ oraz granice z domieszką międzywęzłową i podstawieniową [17]

3.2. Nanostruktury Au na powierzchni rutylu

Tworzenie nanostruktur metalicznych na powierzchni tlenków metali ma szczególne znaczenie z uwagi na wyjątkowe właściwości elektronowe tych układów. Złoto, które w strukturach makroskopowych nie wykazuje aktywności chemicznej, napyłone na powierzchni niektórych tlenków, w klastrach o rozmiarach nanometrów, wykazuje dużą aktywność i wybiórczość katalityczną [19], np. w reakcji utleniania CO. Monowarstwa Au na powierzchni $\text{TiO}_2(110)$ zmienia zasadniczo swój kształt w pobliżu luki tlenowej na powierzchni [20]. Aktywność katalityczna nanocząstek złota jest związana z dużą gęstością słabo koordynowanych atomów w niskowymiarowych strukturach i ich specyficzną konfiguracją elektronową. Jednowymiarowe struktury Au powinny wykazywać szczególnie dużą aktywność katalityczną ze względu na dużą wartość stosunku obwodu do pola powierzchni i dużą liczbę miejsc adsorpcyjnych o obniżonej koordynacji. Aktywność chemiczna nanostruktur złota i ich okolic na powierzchni tlenku powoduje, że są one bardzo trudne do scharakteryzowania. Jednakże atrakcyjność tego układu i obiecujące zastosowania (szczególnie w katalizie) stymulują intensywne badania teoretyczne i doświadczalne struktur Au na dobrze zdefiniowanych powierzchniach TiO_2 .

Atomy złota wiążą się słabo na idealnej, stechiometrycznej powierzchni $\text{TiO}_2(110)$. Wiązanie to zostaje istotnie wzmocnione, gdy atomy Au są adsorbowane na defektach struktury. Przeprowadzone obliczenia [21] adsorpcji złota na ścianie (110) dwutlenku tytanu TiO_2 (rutylu) pozwoliły na określenie najbardziej uprzywilejowanych miejsc adsorpcyjnych atomów Au i właściwości energetycznych tworzonych niskowymiarowych struktur. Badania potwierdziły obserwacje współpracującej z nami grupy doświadczalnej [21], wskazujące na tworzenie się na powierzchni (110) rutylu mocnego wiązania Au z Ti i powstawanie bardzo stabilnych, liniowych konfiguracji złota o strukturze typu (1×2) względem atomów podłoża (rys. 3). Obliczenia dostarczyły szczegółowego opisu geometrii i energetyki zaadsorbowanych, stabilnych rzędów Au o jedno-, dwu- oraz trójatomowej szerokości i pozwoliły zaproponować model tworzenia się jednowymiarowych struktur złota [21]. Rzędy atomów Au, odległe o ok.

13 Å, mają właściwości metaliczne. Wykazano, że adsorpcja rzędów Au jest bardziej korzystna na powierzchni rutylu o rekonstrukcji (1×2) typu brakującego rzędu niż na dotychczas preferowanym modelu powierzchni zrekonstruowanej z dodanym rzędem Ti_2O_3 . W efekcie pozwoliło to zaproponować model tworzenia się jednowymiarowych, stabilnych struktur złota, dostarczający podbudowę teoretyczną dla metody doświadczalnej wytwarzania zdefektowanej powierzchni rutylu i nanoszenia nanocząstek złota w miejsce luk powstałych po usunięciu atomów tlenu.



Rys. 3. Widok z boku (górny rząd) i z góry na pojedyncze, podwójne i potrójne rzędy Au (puste kółka) w kierunku $[001]$ na zdefektowanej powierzchni $\text{TiO}_2(110)$. Szare obszary pokazują izopowierzchnie przyrostu gęstości ładunku elektronowego wywołane adsorpcją rzędu atomów Au [21]. Atomy Ti i O oznaczono odpowiednio kolorem czarnym i jasnoszarym.

4. Podsumowanie

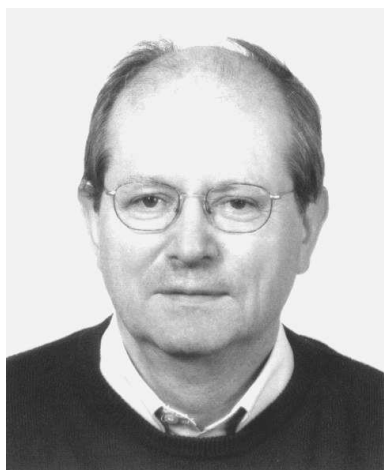
Obliczenia struktury materiałów z pierwszych zasad oparte na teorii funkcjonału gęstości stanowią kwitnącą i wciąż rozwijającą się dziedzinę badań. Pozwalają one na dokładne i wydajne symulacje w skali atomowej, we wszystkich obszarach fizyki powierzchni i fizyce (inżynierii) materiałów. Ze względu na ograniczoną objętość artykułu starałem się przedstawić jedynie zarys metodologii obliczeń oraz podać przykłady jej zastosowań dotyczące badań prowadzonych w moim zespole. Chociaż

teorii funkcjonału gęstości nie można traktować jako panaceum na wszystkie problemy, to należy stwierdzić, że metoda ta jak żadna inna przyczyniła się do ogromnego postępu w zrozumieniu struktury elektronowej i właściwości skomplikowanych materiałów i ich powierzchni.

Omawiane badania były wspierane finansowo w latach 2005–07 przez MNiSzW, w ramach projektów badawczych nr 3 T08A 030 29 i N202 005 32/0469. Duża część obliczeń była wykonana w Interdyscyplinarnym Centrum Modelowania Matematycznego i Komputerowego (ICM) Uniwersytetu Warszawskiego, w ramach grantu G28-25.

Literatura

- [1] M.C. Payne i in., *Rev. Mod. Phys.* **64**, 1045 (1992).
- [2] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Fizyka ciała stałego* (PWN, Warszawa 1986).
- [3] P. Hohenberg, W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964).
- [4] W. Kohn, L.J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965).
- [5] D.M. Ceperley, B.J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 566 (1980).
- [6] J.P. Perdew i in., *Phys. Rev. B* **46**, 6671 (1992).
- [7] O. Krogh Andersen, *Phys. Rev. B* **12**, 3060 (1975).
- [8] D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **41**, 7892 (1990).
- [9] A. Kiejna i in., *Phys. Rev. B* **73**, 035404 (2006).
- [10] P.E. Blöchl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994); G. Kresse, D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
- [11] D.J. Singh, *Planewaves, Pseudopotentials and the LAPW Method* (Kluwer Academic Publ., Boston 1994).
- [12] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics* (Wiley-Interscience, Paris 1977).
- [13] R. Car, M. Parrinello, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2471 (1985).
- [14] G. Kresse, J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996); *Comput. Mater. Sci.* **6**, 15 (1996).
- [15] G. Duscher i in., *Nature Mat.* **3**, 621 (2004).
- [16] R. Schweinfest, A.T. Paxton, M.W. Finnis, *Nature* **432**, 1008 (2004).
- [17] E. Wachowicz, A. Kiejna, *Comput. Mater. Sci.*, w druku (2008).
- [18] M.S. Daw, M.I. Baskes, *Phys. Rev. B* **29**, 6443 (1984).
- [19] M. Haruta i in., *J. Catalysis* **115**, 301 (1989).
- [20] N. Lopez i in., *J. Catalysis* **225**, 86 (2004).
- [21] T.O. Mentęs i in., *Phys. Rev. B* **76**, 155413 (2007).



Prof. ADAM KIEJNA (ur. w 1950 r.) ukończył fizykę teoretyczną na Uniwersytecie Wrocławskim. W roku 2002 uzyskał tytuł profesora, a od 2004 r. jest profesorem zwyczajnym w UW, gdzie kieruje Zakładem Adsorpcji w Instytucie Fizyki Doświadczalnej. Był stypendystą Europejskiego Towarzystwa Fizycznego na Uniwersytecie Genewskim, Fundacji Humboldta na Uniwersytecie w Monachium i w Instytucie Fritza Habera w Berlinie. Prowadził badania jako profesor wizytujący na Politechnice Chalmersa w Göteborgu, oraz Politechnice w Helsinkach. Współpracuje z kilkoma ośrodkami naukowymi w Europie i Stanach Zjednoczonych. Jego zainteresowania naukowe koncentrują się na badaniach teoretycznych zjawisk zachodzących na powierzchni ciał stałych, struktury elektronowej i atomowej powierzchni metali oraz tlenków metali czystych i pokrytych adsorbentem, oddziaływań atomów na powierzchni, oraz wczesnych etapów utleniania powierzchni metali. Wypromował czterech doktorów. Jest autorem lub współautorem ponad 80 prac naukowych, w tym monografii *Metal Surface Electron Physics* (Pergamon, Oxford 1996). E-mail: kiejna@ifd.uni.wroc.pl; strona internetowa: www.za.ifd.uni.wroc.pl/html/kiejna.html.

Pół wieku spektroskopii mössbauerowskiej*

Krzysztof Szymański

Wydział Fizyki, Uniwersytet w Białymstoku

Half a century of the Mössbauer spectroscopy

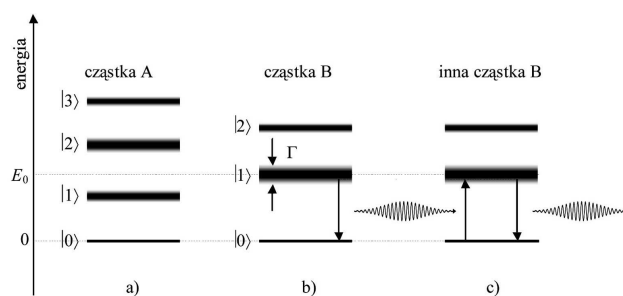
Abstract: The discovery of recoilless nuclear resonance scattering, principles of the Mössbauer effect, and hyperfine interactions are briefly discussed. Miniaturisation of spectrometers based on radioactive sources, extraterrestrial experiments, the use of synchrotron sources in Mössbauer experiments and development of polarimetric techniques are presented on selected examples. Some ideas connected with recoilless scattering, not realised so far, are discussed.

1. Efekt Mössbauera – bezdrzutowe rozpraszanie rezonansowe

1.1. Rozpraszanie rezonansowe w układach kwantowych

Układ kwantowy – może być nim kryształ, cząsteczka, atom, jądro... – istnieje w tzw. stanach. Stan o najmniejszej energii jest zwany stanem podstawowym i oznaczany $|0\rangle$; jego energię przyjmujemy za równą zero, bo istotne będą dla nas tylko zmiany energii. Układ kwantowy może występować również w stanach wzbudzonych, które są nietrwałe i przechodzą do stanu podstawowego (średnio po czasie τ). W wyniku przejścia zwykle emitowany jest foton, unoszący energię równą różnicy E_0 energii obu stanów. W stanie wzbudzonym (np. $|1\rangle$ na rys. 1) energię układu charakteryzuje pewne rozmycie Γ zwane szerokością naturalną. Wartość Γ wynika z zasady nieoznaczoności Heisenberga: $\Gamma = \hbar/\tau$. Wielokrotnie powtarzany pomiar energii fotonów emitowanych w procesie przejścia od $|1\rangle$ do $|0\rangle$ (np. w wyniku rozpadu promieniotwórczego) wskazuje, że nie jest ona dokładnie równa E_0 , lecz podlega rozkładowi o szerokości Γ , przy czym $\Gamma \ll E_0$ ¹.

W świecie mikroskopowym pojedyncze procesy są odwracalne. W szczególności foton wyemitowany przez cząstkę B (rys. 1b) może spowodować przejście innej cząstki B do stanu wzbudzonego (rys. 1c), który następnie rozpadnie się do stanu podstawowego. Mówi się wtedy o rozpraszaniu rezonansowym promieniowania przez cząstki B. Choć zasada nieoznaczoności przewiduje rozkład energii fotonów, w pojedynczych procesach rozpraszania zasada zachowania energii jest ściśle spełniona:



Rys. 1. Stany kwantowe: a) cząstki A, b) cząstki B, oraz przejście ze stanu wzbudzonego $|1\rangle$ do stanu podstawowego $|0\rangle$ z emisją fotonu, c) rozpraszanie fotonu na cząstce B początkowo znajdującej się w stanie $|0\rangle$

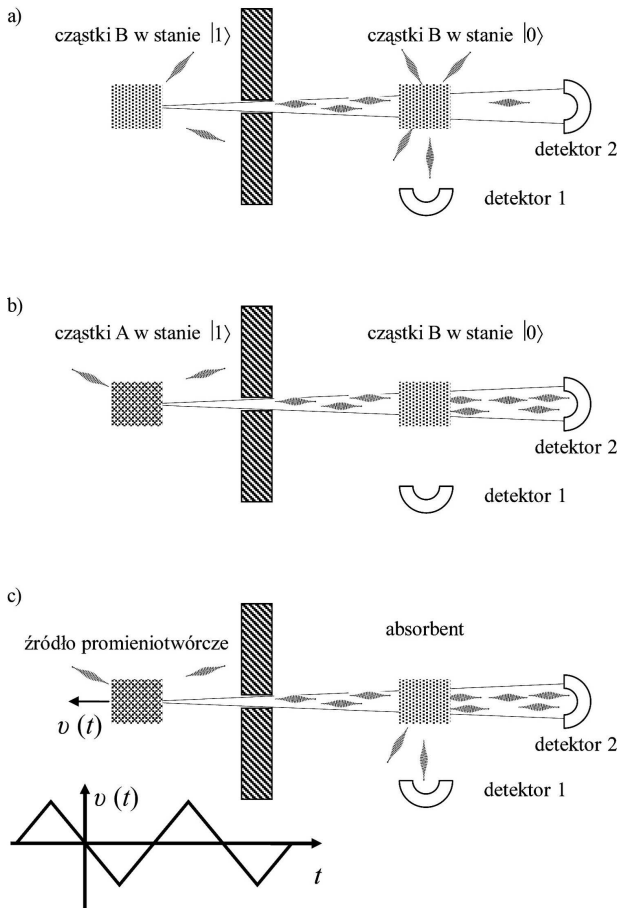
foton przed rozproszeniem ma taką samą energię jak po rozproszeniu. Schemat eksperymentu z rozpraszaniem rezonansowym przedstawiony jest na rys. 2a. Detektor 2 rejestruje niewiele zliczeń fotonów (cząstki B w stanie podstawowym wykazują absorpcję rezonansową), za to liczba zarejestrowanych w detektorze 1 fotonów rozproszonych jest duża. Na rysunku 2b przedstawiono sytuację, gdy nie ma rozpraszania rezonansowego.

1.2. Rozpraszanie rezonansowe w atomach swobodnych

Rozpraszanie rezonansowe w układach atomowych zaobserwował na początku XX w. Robert Wood [4] jako pochłanianie żółtego światła sodu (lewa część rys. 2a; łatwo odtworzyć to doświadczenie, posypując solą kuchenną płomień palnika gazowego). Absorpcja zachodziła

*Na podstawie wykładu wygłoszonego podczas XXXIX Zjazdu Fizyków Polskich w Szczecinie (wrzesień 2007) w sesji plenarnej.

¹Na przykład, dla stanu wzbudzonego atomu ^{23}Na (żółta linia D₁, przejście optyczne $3^2\text{P}_{1/2} \rightarrow 3^2\text{S}_{1/2}$) $\Gamma = 4,0385(54) \cdot 10^{-8}$ eV [1], $E_0 = 2,102\,293\,941(76)$ eV [2], podczas gdy dla stanu wzbudzonego o spinie $I = 5/2$ w jądrze ^{191}Ir (w stanie podstawowym ^{191}Ir spin jądra $I = 3/2$) $\Gamma = 5,13(12) \cdot 10^{-6}$ eV, $E_0 = 1,294(7) \cdot 10^5$ eV [3].



Rys. 2. a) Rozpraszanie rezonansowe, b) brak rozpraszania rezonansowego, c) idea typowego spektrometru mössbauerowskiego z poruszającym się cyklicznie źródłem. Rejestrowana liczba zliczeń w funkcji czasu t dla jednego okresu jest dodawana do rejestrowanego sygnału w kolejnym okresie itd. Prędkość $v(t)$ w połowie okresu zależy liniowo od czasu, zatem rejestrowana jest liczba zliczeń w funkcji prędkości (lub energii fotonów).

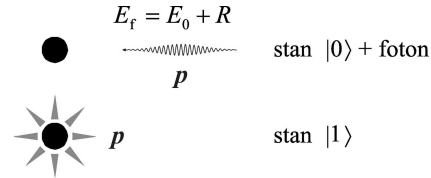
na odparowanych atomach sodu (prawa część rys. 2a). Z rozpraszaniem rezonansowym na cząstkach tworzących gaz związane jest zjawisko odrzutu, konsekwencja zasad zachowania pędu i energii. Swobodna, spoczywająca cząstka B w stanie $|0\rangle$ (rys. 1c) może zostać wzbudzona do stanu $|1\rangle$ przez foton, uzyskując jednocześnie jego pęd (rys. 3). Cząstka ta uzyska również energię kinetyczną zwaną energią odrzutu. Energia fotonu musi być o tę wartość większa od energii E_0 . Zjawisko odrzutu zachodzi również przy emisji ze stanu wzbudzonego (rys. 1b). Energia fotonu jest wtedy mniejsza od E_0 . Energia odrzutu jest proporcjonalna do kwadratu energii stanu wzbudzonego:

$$R = \frac{E_0^2}{2Mc^2}, \quad (1)$$

²W przejściach optycznych z powodu małej wartości energii E_0 (p. 1.1) energia odrzutu R jest znacznie mniejsza od Γ i nie ma wpływu na procesy rozpraszania rezonansowego.

³Izotop ^{198}Au rozpada się m.in. do stanu wzbudzonego ^{198}Hg o energii $4,118 \cdot 10^5$ eV [7] i szerokości naturalnej wynoszącej $2,0 \cdot 10^{-6}$ eV [8].

gdzie M oznacza masę cząstki, a c – prędkość światła. W przypadku przejść ze stanów wzbudzonych jąder atomowych energia odrzutu jest tak duża, że uniemożliwia obserwację rozpraszania rezonansowego przez jądra swobodnych atomów [5]².



Rys. 3. Zjawisko odrzutu. Aby mogło nastąpić wzbudzenie, energia fotonu E_f musi być większa od różnicy energii stanów $|1\rangle$ oraz $|0\rangle$ o wartość $R = E_0^2/2Mc^2$.

Rozpraszanie rezonansowe na jądrach swobodnych atomów można jednakże zrealizować, wprawiając cząstki B w ruch względem siebie (rys. 1b,c). Ruch odbiornika w kierunku źródła fotonów z prędkością v sprawi, że zarejestruje on energię fotonów (efekt Dopplera)

$$E_v = E \left(1 + \frac{v}{c} \right), \quad (2)$$

gdzie E oznacza energię rejestrowaną przy braku ruchu względem źródła. Wykorzystując zjawisko Dopplera, można więc skompensować ubytek energii fotonu spowodowany odrzutem. Fluorescencję rezonansową obserwowano dzięki temu w ciekłej rtęci zawierającej ^{198}Hg , gdy źródło ^{198}Au rozpędzono przy użyciu wirówki do prędkości prawie 700 m/s [6]³.

Innym sposobem uzyskania rozpraszania rezonansowego jest wykorzystanie temperaturowego poszerzenia dopplerowskiego. Załóżmy, że atomy cząstek B w stanie $|1\rangle$ tworzą klasyczny gaz doskonały. Uwzględnienie zjawiska odrzutu (1) oraz zjawiska Dopplera (2), przy założeniu, że $R \gg \Gamma$ i że rozkład prędkości cząstek w gazie jest maxwellowski, prowadzi do wniosku, że znormalizowany rozkład energii fotonów $n(E)$ emitowanych przez rozważany układ zależy od temperatury T i ma postać

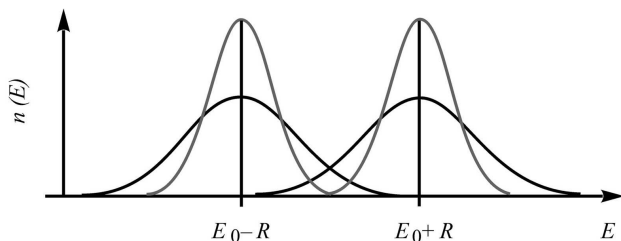
$$n(E) = \frac{1}{2\sqrt{\pi R k_B T}} \exp \left[-\frac{(E - E_1 + R)^2}{4R k_B T} \right], \quad (3)$$

gdzie k_B oznacza stałą Boltzmana. Podobnie, jeśli gaz cząstek B w stanie $|0\rangle$ rozprasza rezonansowo fotony o bardzo szerokim, prawie stałym rozkładzie energii, to rozkład energii rozproszonych fotonów ma postać

$$n(E) = \frac{1}{2\sqrt{\pi R k_B T}} \exp \left[-\frac{(E - E_0 + R)^2}{4R k_B T} \right]. \quad (4)$$

Jeśli cząstki B z rys. 1b,c tworzą gaz, to w niskiej temperaturze $T \ll R/k_B$ nie obserwujemy fluorescencji

rezonansowej, gdyż rozkłady (3) i (4) się nie pokrywają (rys. 4). Wzrost temperatury spowoduje poszerzenie rozkładów i możliwość obserwacji rozpraszania rezonansowego. Efekt taki obserwowano dla absorbenta w postaci ciekłej rtęci i źródła ^{198}Au . Stopnienie złota spowodowało wzrost absorpcji rezonansowej [9].



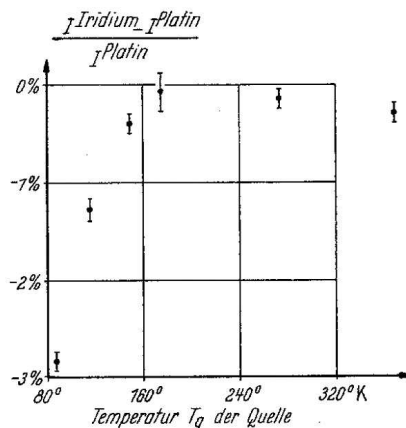
Rys. 4. Po lewej: rozkład energii fotonów emitowanych przez gaz cząstek B w stanie $|1\rangle$ (3); po prawej: rozkład energii fotonów rozpraszanych rezonansowo przez gaz cząstek B w stanie $|0\rangle$ (4). Szerokość naturalna Γ jest tu znacznie mniejsza od energii odrzutu R . Górne i dolne krzywe są wykreślone dla odpowiednio niskiej i wysokiej temperatury.

1.3. Rozpraszanie rezonansowe promieniowania jądrowego. Mechanizm rozpraszania bezodrzutowego – pierwsze odkrycie Mössbauera

Na początku lat pięćdziesiątych XX w. panowało przekonanie, że z powodu drgań termicznych w ciałach stałych rozpraszanie rezonansowe zachodzi w sytuacji przedstawionej schematycznie na rys. 4. Rudolf Mössbauer w swojej pracy magisterskiej, a później w doktorskiej zajmował się sprawdzeniem możliwości obserwacji jądrowego rozpraszania rezonansowego metodą poszerzenia dopplerowskiego w izotopie ^{191}Ir . Schemat układu pomiarowego był taki jak na rys. 2: po lewej stronie znajdowało się źródło promieniotwórcze ^{191}Os , który – rozpadając się – przechodził do stanu $|1\rangle$ izotopu ^{191}Ir . W prawej części układu (rys. 2a) znajdowała się folia ^{191}Ir lub, dla porównania, folia platynowa (co jest równoważne sytuacji z rys. 2b). Należało teraz, zgodnie z rys. 4, podnieść temperaturę układu z rys. 1a i spodziewać się wzrostu rozpraszania rezonansowego, czyli spadku liczby zliczeń w detektorze 2. Jak wspomina sam autor [10], z powodów technicznych łatwiej było temperaturę całego układu obniżyć niż podnieść. Okazało się, że po zalaniu układu ciekłym azotem natężenie promieniowania w detektorze 2 zmalało, wbrew oczekiwaniom zgodnym z rys. 4. Na rysunku 5 przedstawiony jest wynik tego eksperymentu wzięty z oryginalnej pracy [11] i będący początkiem wielkiego odkrycia.

Rudolf Mössbauer prawidłowo zinterpretował otrzymany wynik doświadczalny, wykorzystując pracę Willisa Lamba [12] dotyczącą wychwyty neutronu przez jądro. W ciele stałym, w przeciwieństwie do rozważanego już gazu, atomy drgają wokół ustalonych położenia równowagi i dlatego wyrażenia (3) oraz (4), jak również rys. 4, nie mają tu zastosowania, a w ich miejsce pojawia się zjawisko bezodrzutowej absorpcji (lub emisji) re-

zonansowej, nazwane później na cześć odkrywcy efektem Mössbauera.



Rys. 5. Unormowane natężenie w funkcji temperatury dla fotonów rozpraszanych rezonansowo w ^{191}Ir (rysunek z oryginalnej pracy Mössbauera [11])

W celu zrozumienia mechanizmu rozpraszania bezodrzutowego rozważmy jeszcze raz swobodną cząstkę B w stanie $|0\rangle$ (rys. 3) i o pędzie \mathbf{p} . Jej funkcja falowa ma postać

$$\Psi(\mathbf{r}) = C \exp\left[i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right], \quad (5)$$

gdzie C jest czynnikiem normalizacyjnym. Zgodnie z mechaniką kwantową emisja bądź absorpcja fotonu jest aktem natychmiastowym. Po absorpcji fotonu cząstka przejdzie do stanu wzbudzonego, jej pęd zwiększy się o pęd fotonu, a funkcja falowa przyjmie postać

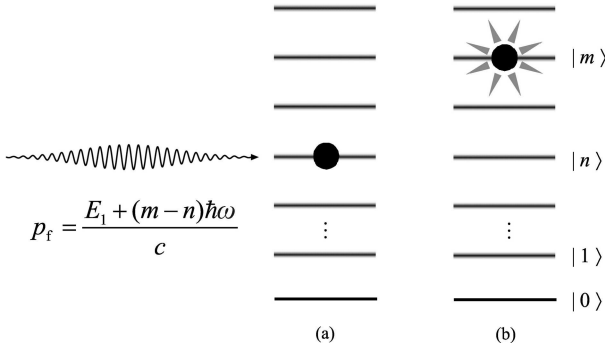
$$\tilde{\Psi}(\mathbf{r}) = C \exp\left[i\frac{(\mathbf{p} + \mathbf{p}_f) \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right] = \exp\left[i\frac{\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right] \Psi(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Wynik (6) odczytujemy w taki sposób, że absorpcja fotonu powoduje zmianę funkcji falowej z $\Psi(\mathbf{r})$ na $\tilde{\Psi}(\mathbf{r})$, równoważną pomnożeniu przez czynnik zależny od zmiany pędu. Ten przepis otrzymywania funkcji falowej po emisji przenosimy na przypadek cząstki B związanej w sieci krystalicznej.

Przyjmijmy dla uproszczenia, że nasza cząstka B w stanie $|0\rangle$ (rys. 1c) znajduje się w potencjale harmonicznym odpowiadającym za drgania atomowe (odpowiednikiem klasycznym jest przyczepiony do sprężynki ciężarek, który może wykonywać drgania z pewną częstością ω). Opis drgań cząstki sprowadza się do podania stanów kwantowego oscylatora harmonicznego, analogicznych do stanów na rys. 1. Energię n -tego stanu oscylatora opisuje wzór

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega. \quad (7)$$

Nasz układ jest teraz charakteryzowany przez stan wewnętrzny cząstki (tu – stan jądrowy) oraz stan oscylatorowy $|n\rangle$ (rys. 6a). Funkcję falową n -tego stanu oscylatora harmonicznego, $\Psi_n(\mathbf{r})$, można przedstawić w postaci



Rys. 6. a) Foton oraz związane jądro w stanie oscylatorowym $|n\rangle$ i w stanie jądrowym $|0\rangle$, b) związane jądro w stanie oscylatorowym $|m\rangle$ i w stanie jądrowym $|1\rangle$

superpozycji fal płaskich o różnych wektorach falowych $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$:

$$\Psi_n(\mathbf{r}) = \int A(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d\mathbf{k}, \quad (8)$$

gdzie $A(\mathbf{k})$ oznacza pseudoamplitudę fali o wektorze falowym \mathbf{k} . Przyjmujemy dalej, i taki jest sens tzw. przybliżenia impulsowego, że każda z fal w funkcji (8) doznaje zmiany takiej jak we wzorze (6). Po dokonaniu tej operacji widać, że funkcja falowa stanu oscylatora po absorpcji fotonu $\Psi_n(\mathbf{r})$ zmienia się na

$$\tilde{\Psi}_n(\mathbf{r}) = \exp\left[i\frac{\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right] \Psi_n(\mathbf{r}). \quad (9)$$

Można teraz zadać pytanie, jakie jest prawdopodobieństwo p_{nm} tego, że w wyniku rozpraszania fotonu (absorpcji) nasz oscylator znajdzie się w stanie $|m\rangle$ (rys. 6b), którego funkcją falową jest $\Psi_m(\mathbf{r})$. Odpowiedzi dostarcza mechanika kwantowa:

$$p_{nm} = \left| \int \Psi_m^*(\mathbf{r}) \exp\left[i\frac{\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right] \Psi_n(\mathbf{r})d\mathbf{r} \right|^2. \quad (10)$$

Zwróćmy uwagę, że pęd fotonu w wyrażeniu (10) jest proporcjonalny do jego energii, która zgodnie z zasadą zachowania różni się od E_0 o różnicę energii stanów oscylatorowych $(m - n)\hbar\omega$. W szczególności, dla $m = n$ energia rozpraszającego fotonu będzie równa E_0 . Proces rozpraszania (absorpcji lub emisji), w którym stan oscylatorowy nie ulega zmianie, nazywa się bezodrztowym rozpraszaniem rezonansowym. Zasada zachowania pędu jest spełniona, bo pęd odrzutu zostaje przejęty przez makroskopowe ciało stałe, w którym znajduje się rozważany oscylator, czyli przez kryształ. Zgodnie z (1), jeśli za M podstawimy masę ciała makroskopowego, to energia odrzutu staje się znikomo mała. Zauważmy ponadto, że dla $m = n$ wyrażenie (10) jest kwadratem modułu z transformaty Fouriera gęstości ładunku jądrowego i odpowiednikiem wyrażenia na natężenie rozpraszania braggowskiego [13].

1.4. Model oscylatorowy rozpraszania rezonansowego

Wyrażenie (10) dotyczy tylko pojedynczego oscylatora (tak, jakby cząstka B w stanie wzbudzonym była przyczepiona do jednej sprężynki i mogła drgać z jedną tylko

częstotliwością). W ciele stałym, złożonym z dużej liczby atomów, na jeden atom przypadają 3 niezależne oscylatory (np. niezależne drgania atomu w trzech kierunkach: x, y, z). Częstotliwości drgań tych oscylatorów zawierają się w przedziale (szacunkowo, z dokładnością do rzędu wielkości)

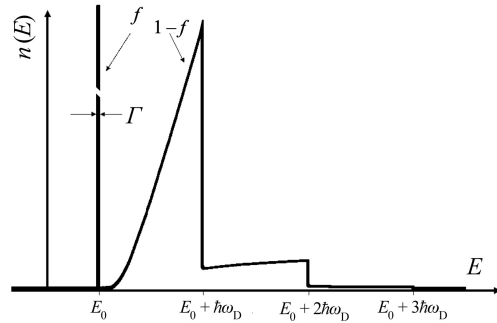
$$\frac{v_d}{L} < \omega < \frac{v_d}{a}, \quad (11)$$

gdzie a oznacza odległość między najbliższymi atomami, v_d – prędkość dźwięku w ciele stałym, a L rozmiar liniowy tego ciała. Można sobie wyobrazić, że w ciele stałym jest wiele cząstek w stanie wzbudzonym, a każda znajduje się w innym potencjale harmonicznym (przyczepiona jest do sprężynki o innej stałej sprężystości). Bardzo dobrym przybliżeniem pewnych własności ciała stałego jest model Debye'a, w którym przyjmuje się, że rozkład częstotliwości oscylatorów harmonicznymi jest ciągły i ma postać

$$D(\omega) = \begin{cases} \frac{9N}{\omega_D^3} \omega^2 & \text{dla } \omega \leq \omega_D, \\ 0 & \text{dla } \omega > \omega_D. \end{cases} \quad (12)$$

Symbol ω_D oznacza częstość Debye'a i ma sens maksymalnej częstości drgań w kryształach, zapewniającej istnienie $3N$ stanów oscylatorowych w kryształach złożonych z N atomów.

Uwzględnienie obecności oscylatorów o różnych częstościach (12) oraz zastosowanie wyrażenia (10) prowadzi do rozkładu energii fotonów rozpraszanych rezonansowo przez cząstki tworzące kryształ (a więc drgające wokół ustalonych położenia równowagi), który dla temperatury zera bezwzględnej przedstawiony jest na rys. 7.



Rys. 7. Rozkład energii fotonów rozpraszanych przez cząstki B (rys. 1c), tworzące kryształ w temperaturze $T = 0$. Pewien ułamek f liczby fotonów, odpowiadający bardzo wąskiemu maksimum w E_0 , rozpraszany jest bezodrztowo.

Mamy tu do czynienia z procesami rozpraszania fotonu oraz przejściami ze stanu podstawowego do pierwszego stanu wzbudzonego oscylatora (maksimum w przedziale energii do $E_0 + \hbar\omega_D$), ze stanu podstawowego do drugiego stanu wzbudzonego oscylatora (maksimum kończące się na energii $E_0 + 2\hbar\omega_D$) itd. Procesy odpowiadające przejściom do wyższych stanów oscylatora to procesy kreacji fononów. Przejścia ze stanu oscylatorowego m do stanu n ($n < m$) odpowiadają kreacji $m - n$ fononów, a przejście z n do m – anihilacji $n - m$ fononów. Zgodnie z (10),

przejściom z $n = m = 0$ odpowiada wąskie i wysokie maksimum wokół energii E_0 (rys. 7). Mechanika kwantowa przewiduje więc, że cząstki B w stanie wzbudzonym, drgające wokół ustalonych położenia równowagi, mogą rozpraszać fotony o energii równej różnicy energii stanów $|1\rangle$ oraz $|0\rangle$.

W temperaturach kryształu większych od zera bezwzględnego rozpraszane są również fotony o energiach większych od E_0 o $n\hbar\omega_D$ (procesy anihilacji n fononów), nie zmienia się szerokość maksimum odpowiadającego procesom rozpraszania bezdrzutowego, maleje natomiast jego wysokość. Prawdopodobieństwo rezonansowego rozpraszania bezdrzutowego f nazywane jest czynnikiem Lamba-Mössbauera (f oznacza ułamek liczby fotonów odpowiadający maksimum przy E_0 na rys. 7). Z bardzo dobrym przybliżeniem [14]

$$f = \exp(q^2 \langle x^2 \rangle), \quad (13)$$

gdzie \mathbf{q} oznacza wektor falowy fotonu: $\mathbf{q} = \mathbf{p}_f/\hbar$, a $\langle x^2 \rangle$ – uśredniony po czasie kwadrat rzutu amplitudy drgań jądra na kierunek wektora \mathbf{q} . W modelu Debye'a ciała stałego

$$\langle x^2 \rangle = \langle x_0^2 \rangle \frac{8T^2}{\theta^2} \int_0^{\theta/2T} s \operatorname{ctgh} s ds, \quad \langle x_0^2 \rangle = \frac{3\hbar^2}{4Mk_B\theta}. \quad (14)$$

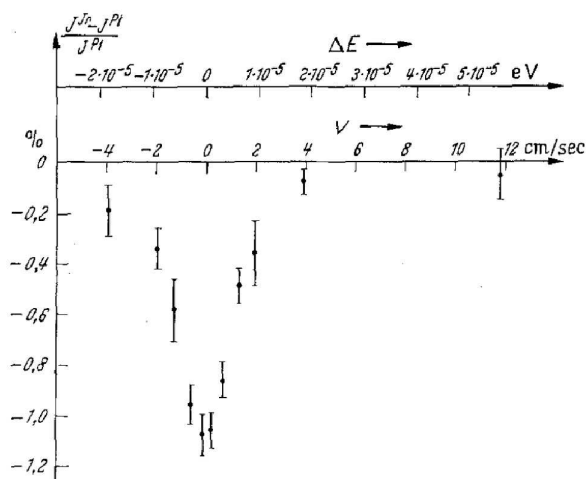
We wzorach (14) θ oznacza temperaturę Debye'a, proporcjonalną do wprowadzonej we wzorze (12) częstości Debye'a ($\hbar\omega_D = k_B\theta$), a M – masę atomu; ponadto wydzielony został czynnik $\langle x_0^2 \rangle$ – średni kwadrat amplitudy drgań zerowych atomów kryształu. Czynnik ten wynika z zasady nieoznaczoności i m.in. sprawia, że także w temperaturze zera bezwzględnego $f < 1$.

Konkludując możemy stwierdzić, że w rozpraszaniu rezonansowym przez układ związany istotną rolę odgrywają procesy bezdrzutowe, co wyjaśnia wynik eksperymentu z rys. 5. Wyrażenia na rozkłady energii w skończonych temperaturach w modelu Debye'a można znaleźć w pracach [15,16].

1.5. Bezpośrednia obserwacja rezonansu – drugie odkrycie Mössbauera

Warto sobie uświadomić, że rozdzielczość detektorów promieniowania γ , którymi dysponowali fizycy w latach pięćdziesiątych, była znacznie mniejsza od szczegółów rozkładu przedstawionego na rys. 7 (np. dla Ir $\hbar\omega_D$ wynosi 46 meV, dla Fe 25 meV). Obserwacje wzbudzeń fononowych, wymagające rozdzielczości lepszej od 1 meV, a tym bardziej wąskiego maksimum o szerokości rzędu μeV (przypadek ^{198}Ir) wydawały się niemożliwe. Jednakże pewnego dnia, tuż po opublikowaniu pracy [11], Mössbauer wpadł na genialny pomysł zastosowania efektu Dopplera w zakresie prędkości v rzędu $\Gamma c/E_0$, a więc cm/s dla ^{191}Ir (a nie $v = \Gamma c/E_0$, czyli setek m/s, jak to czyniono za pracą [9]), w celu zaobserwowania wąskiego maksimum odpowiadającego rozpraszaniu bezdrzutowemu na rys. 7. Przywołajmy powtórnie wspomnienia samego odkrywcy, który pisze [10], iż był tak podekscytowany, że wpadł

do pokoju swego promotora (prof. Heinza Meiera-Leibniza) bez pukania, by podzielić się swoim pomysłem [10]. Jeszcze tego dnia Mössbauer podjął wyścig z czasem, bo obawiał się, że konkurenci – Philip Moon w Birmingham i Franz Metzger w Filadelfii – mogą przeprowadzić taki eksperyment przed nim. Zestaw doświadczalny był taki sam jak na rys. 2a, z tą różnicą, że źródło mogło się przesuwac w stronę absorbenta lub przeciwną z kontrolowaną prędkością. Na rysunku 8 przedstawiona jest zależność sygnału rejestrowanego przez detektor 2 z rys. 2a w funkcji prędkości [17] (na tej zasadzie budowane są urządzenia nazywane spektrometrami mössbauerowskimi, rys. 2c). Było to, według dzisiejszego nazewnictwa, pierwsze widmo mössbauerowskie. Szokujące wówczas było to, że można było wyznaczyć szerokość rozkładu fotonów o energii 120 keV wysyłanych przez jądra ^{191}Ir , wynoszącą ok. 20 μeV , z rozdzielczością względną⁴ Γ/E_0 rzędu 10^{-10} .



Rys. 8. Zależność unormowanej częstości zliczeń (jądrowej absorpcji rezonansowej) od względnej prędkości źródła i absorbenta dla ^{191}Ir [16]

Po opublikowaniu prac [11,17] badania nad bezdrzutowym jądrowym rozpraszaniem rezonansowym przyczyniły się do tak znacznego postępu w fizyce, że już w roku 1961 Rudolfowi Mössbauerowi przyznano Nagrodę Nobla.

2. Oddziaływania nadsztywne w efekcie Mössbauera

Zakres badań z wykorzystaniem zjawiska Mössbauera jest ogromny, więc z konieczności ograniczymy się do przedstawienia bardzo subiektywnego wyboru najprostszych zastosowań oraz rozwoju metod pomiarowych.

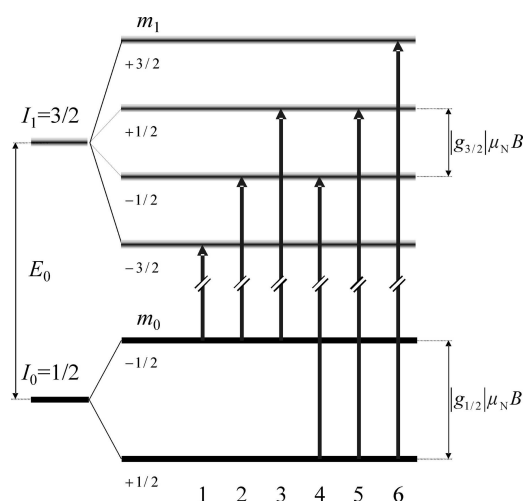
Przyczyny ogromnego zainteresowania spektroskopią mössbauerowską należy upatrywać przede wszystkim w jej rozdzielczości. Okazało się, że oddziaływania spinu jądrowego z otoczeniem elektronowym, czyli oddziaływa-

⁴Rozdzielczość zależy od izotopu – rekordzistą jest ^{67}Zn , dla którego wynosi ona zaledwie $5,34(9) \cdot 10^{-15}$ [3].

nia nadsubtelne, prowadzą do mierzalnych rozszczepień i przesunięć poziomów jądrowych.

2.1. Oddziaływanie momentu magnetycznego jądra z polem magnetycznym

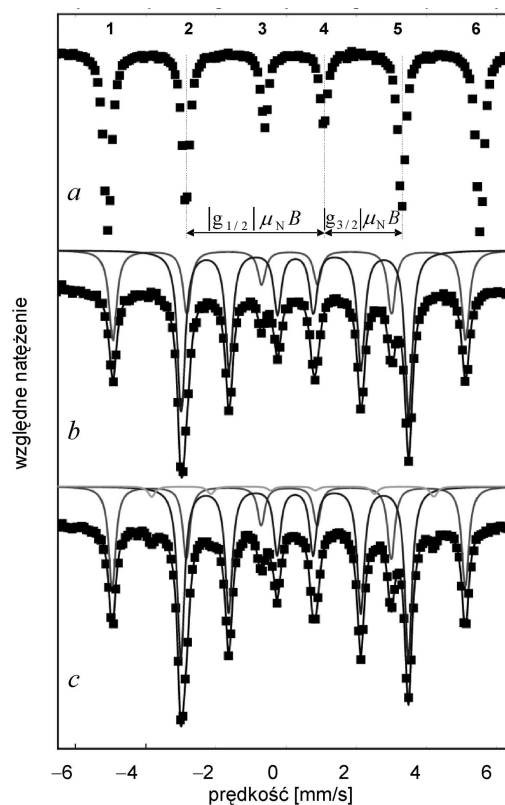
Przykładem oddziaływań nadsubtelnych jest jądrowy efekt Zeemana w ferromagnetyku α -Fe (czystym, krystalicznym żelazie). Stan podstawowy jądra $^{57}\text{Fe}^5$ o spinie $I_0 = 1/2$ i stan wzbudzony o spinie $I_1 = 3/2$, oddziałując ze spinami elektronów i polem magnetycznym wytwarzanym przez elektrony w miejscu jądra, ulegają rozszczepieniu (rys. 9). Między podpoziomami możliwe są



Rys. 9. Rozszczepienie stanów jądra ^{57}Fe w wyniku oddziaływania z polem magnetycznym; μ_N – magneton jądrowy, $g_{1/2}$, $g_{3/2}$ – bezwymiarowe, stałe czynniki

przejścia o różnych energiach, o ile różnica magnetycznych liczb kwantowych spełnia warunek $\Delta m = 0, \pm 1$, w zgodzie z regułami wyboru, które orzekają, jaki moment pędu jest unoszony przez foton. Do tych wartości energii można dostroić energię fotonów emitowanych przez źródło (nadając mu odpowiednią prędkość), co daje widmo mössbauerowskie przedstawione na rys. 10a. Rejestracja odbywa się według schematu przedstawionego na rys. 2c. Znając wartości momentów magnetycznych jądra, można wyznaczyć indukcję B działającego na nie pola magnetycznego. W omawianym przypadku jest ono zorientowane antyrównoległe do makroskopowego namagnesowania [19], a więc i do elektronowego momentu magnetycznego Fe, a B wynosi ok. 33 T. Warto tu przypomnieć, że moment magnetyczny Fe ma wartość 2,2 magnetonu Bohra. Gdyby wziąć kołową pętlę z prądem o takim momencie magnetycznym i o średnicy równej rozmiarowi orbitali 3d (rzędu 0,1 nm), to w środku pętli indukcja pola magnetycznego wynosiłaby ok. 4 T. Wielokrotnie większa wartość wyznaczana ze struktury nadsubtelnej poziomów jądrowych bierze się stąd, że w pasmie 3d żelaza mamy różną liczbę

elektronów $3d^\uparrow$ oraz $3d^\downarrow$. Elektrony te poprzez oddziaływanie wymienne wywołują niejednakowe obsadzenie powłok spinowych $1s^\uparrow$ oraz $1s^\downarrow$ ($2s^\uparrow$ oraz $2s^\downarrow$ itd.). Polaryzacja spinowa powłok s powoduje z kolei pojawienie się w miejscu jądra spinów o niezerowej gęstości, które oddziałują z jądrem tak, jak pole magnetyczne, wywołując odpowiednio duże rozszczepienie [20].



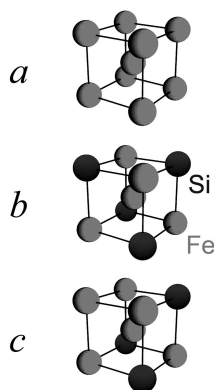
Rys. 10. Widmo mössbauerowskie a) α -Fe, b) krystalicznego Fe_3Si , c) nieuporządkowanego Fe_3Si . Numery linii absorpcyjnych i rozszczepienia w części a) odpowiadają numeracji na rys. 9.

Najbliższe otoczenie atomu żelaza w α -Fe przedstawione jest na rys. 11a. W związku Fe_3Si atomy tworzą strukturę krystaliczną w taki sposób, że 1/3 wszystkich atomów żelaza ma najbliższe otoczenie takie jak w α -Fe, a pozostałe 2/3 atomów ma za najbliższych sąsiadów po 4 atomy Fe i Si (rys. 11b). Podstawienie czterech atomów Fe przez Si w najbliższym otoczeniu żelaza wpływa na wartość momentu magnetycznego Fe ze środka rys. 11b oraz na rozszczepienie poziomów. W widmie mössbauerowskim Fe_3Si obserwujemy więc dwa podwidma, na podstawie których można łatwo określić prawdopodobieństwa występowania otoczeń atomów Fe takich jak na rys. 11a lub b.

W idealnie uporządkowanym Fe_3Si występują jedynie takie otoczenia atomów żelaza jak na rys. 11a,b. Od-

⁵Jest to najczęściej używany izotop w spektroskopii mössbauerowskiej, $E_0 = 14,412\,497(3)$ keV [18], $\Gamma = 4,66(7) \cdot 10^{-9}$ eV [3]; w żelazie naturalnym jest go ok. 2%).

stępowo od stechiometrii lub wprowadzenie nieporządku strukturalnego w Fe₃Si powoduje zajmowanie położeń atomów Si przez atomy Fe. Prowadzi to z kolei do pojawienia się np. takich otoczeń atomów Fe, jak na rys. 11c, co widać w widmie mössbauerowskim z rys. 10c. Można stąd np. oszacować, jaki procent atomów żelaza ma otoczenia 5Fe + 3Si.



Rys. 11. Najbliższe otoczenia atomów Fe w α-Fe (a), krystalicznym Fe₃Si (b) oraz nieuporządkowanym Fe₃Si (c)

2.2. Oddziaływanie rozciągniętego ładunku jądra z ładunkiem elektronów

Jądro atomowe oddziałuje elektrostatycznie z elektronami, które znajdują się wokół jądra. (Amplituda funkcji falowych typu s w zerze jest niezerowa, stąd niezerowe jest też prawdopodobieństwo występowania elektronów s w jądrze. Zjawisko to wiąże się z mechanizmem konwersji wewnętrznej – zob. p. 3). Poprawka do energii stanu jądrowego ΔE oszacowana na podstawie klasycznej elektrostatyki dana jest wzorami

$$\Delta E = \frac{Ze^2}{6\epsilon_0} |\Psi(0)| \langle r^2 \rangle, \quad \langle r^2 \rangle = \frac{\int \rho(r) r^2 d^3r}{\int \rho(r) d^3r}, \quad (15)$$

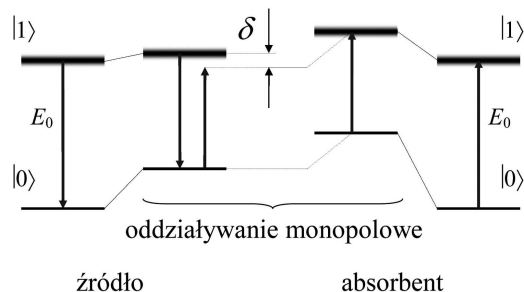
gdzie ρ(r) oznacza gęstość ładunku jądrowego, Z – liczbę atomową, e – ładunek elementarny, ε₀ – stałą elektryczną, a Ψ(0) – elektronową funkcję falową w miejscu jądra. Rozmiary jądra w różnych stanach (|0⟩, |1⟩, ..., rys. 1a,b) są różne. Dla każdego stanu mamy więc inną poprawkę (15).

W jądrowym rozpraszaniu rezonansowym mamy do czynienia z atomami źródła, w których gęstość ładunku elektronów w obszarze jąder w stanie |1⟩ wynosi |Ψ_z(0)|² (lewa strona rys. 2a). Rozpraszające rezonansowo jądro absorbenta w stanie |0⟩ (prawa strona rys. 2a) oddziałuje z ładunkiem elektronowym o gęstości |Ψ_a(0)|². W przełomowym eksperymencie [11,17] spełniona była równość |Ψ_z(0)|² = |Ψ_a(0)|², lecz zazwyczaj |Ψ_z(0)|² ≠ |Ψ_a(0)|². Z tego powodu wystąpi pewne niedopasowanie energii δ (rys. 12) zwane przesunięciem izomerycznym:

$$\delta = \frac{Ze^2}{6\epsilon_0} (\langle r_1^2 \rangle - \langle r_0^2 \rangle) (|\Psi_a(0)|^2 - |\Psi_z(0)|^2). \quad (16)$$

W omawianym już Fe₃Si gęstość elektronowa w jądrach ⁵⁷Fe z otoczeniami 4Fe + 4Si (rys. 11b) jest mniejsza niż

gęstość w jądrach z otoczeniami 8Fe (rys. 11a). Z tego powodu dwa podwidma mössbauerowskie są przesunięte względem siebie na skali prędkości (rys. 10b). Pomiar przesunięcia izomerycznego daje informację o gęstości elektronowej w miejscu jądra.



Rys. 12. Zmiany energii stanów jądrowych spowodowane oddziaływaniem monopolowym rozciągniętego ładunku jądra i ładunku elektronów

2.3. Oddziaływanie momentu kwadrupolowego jądra z gradientem pola elektrycznego

Rozkład ładunku elektrycznego w jądrze może wykazywać odstępstwa od symetrii sferycznej, których miarą jest moment kwadrupolowy jądra Q:

$$Q = \frac{1}{e} \int (3z^2 - r^2) \rho(r) d^3r. \quad (17)$$

W przypadku np. jądra ⁵⁷Fe w stanie I = 3/2 mamy Q > 0, co wskazuje na deformację – wydłużenie w kierunku osi symetrii (kształt cygara).

Gęstość ładunku elektronów w atomie może mieć niesymetryczny rozkład przestrzenny i wytwarzać niejednorodne pole elektryczne o natężeniu \mathcal{E} w miejscu jądra. Dla pola \mathcal{E} w danym punkcie przestrzeni (tu – jądra) zawsze można tak wybrać układ współrzędnych, by macierz 3 × 3 gradientu \mathcal{E} była diagonalna, oraz by $|\partial \mathcal{E}_z / \partial z| \geq |\partial \mathcal{E}_y / \partial y| \geq |\partial \mathcal{E}_x / \partial x|$. Niezerowe składowe gradientu pola elektrycznego wskazują na to, że symetria lokalnego otoczenia jest odpowiednio niska. Można wprowadzić parametr asymetrii

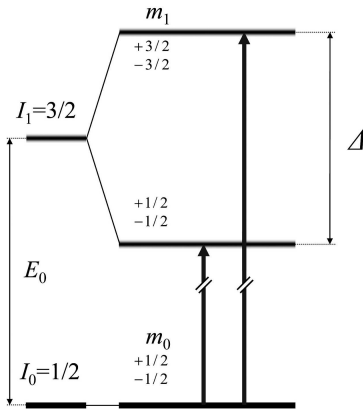
$$\eta = \frac{\partial \mathcal{E}_x / \partial x - \partial \mathcal{E}_y / \partial y}{\partial \mathcal{E}_z / \partial z}, \quad (18)$$

który przyjmuje wartości od 0 do 1 i wskazuje na odstępstwo od symetrii osiowej. Jeśli pole \mathcal{E} lokalnie ma symetrię osiową (dwie spośród trzech składowych diagonalnych są sobie równe), to parametr asymetrii η = 0. Dla skrajnie asymetrycznego rozkładu pola η = 1 i wtedy gradient pola wzdłuż jednej osi głównej znika, a wzdłuż dwóch pozostałych ma taką samą wartość bezwzględną, lecz różni się znakiem.

Moment kwadrupolowy Q jądra oddziałuje z niejednorodnym polem elektrycznym, co prowadzi do rozszczepienia Δ stanów jądrowych na stany o różnych warto-

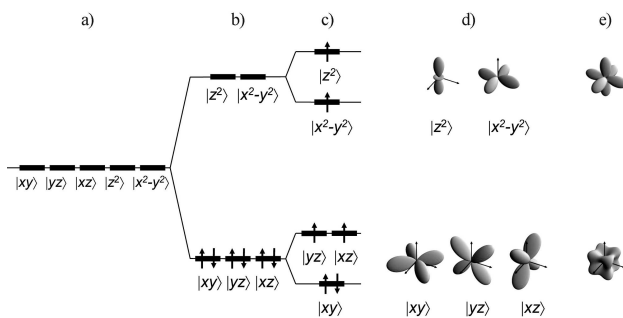
ściach $|m\rangle$. W przypadku stanów o spinie $I = 3/2$ (rys. 13)

$$\Delta = \frac{Qec}{2E_0} \frac{\partial \mathcal{E}_z}{\partial z} \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \quad (19)$$



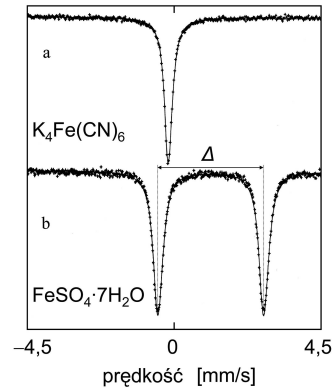
Rys. 13. Rozszczepienie stanu wzbudzonego ($I = 3/2$) oddziaływaniem gradientu pola elektrycznego i momentu kwadrupolowego jądra ^{57}Fe

Pomiary rozszczepień dostarczają informacji o rozkładzie pola elektrycznego, a pośrednio o strukturze elektronowej. Zobaczmy to na przykładzie dwuwartościowych związków żelaza. Pięciokrotnie zdegenerowany stan atomowy 3d (rys. 14a) w polu krystalicznym o symetrii sześcienu rozszczepia się na dwa stany (rys. 14b), z których jeden jest dwu-, a drugi trzykrotnie zdegenerowany. Gdyby trzy stany $|xy\rangle$, $|xz\rangle$, $|yz\rangle$ zostały jednakowo obsadzone (rys. 14d), rozkład ładunku nie miałby wyróżnionej jednej osi symetrii (rys. 14e) i wszystkie składowe gradientu pola elektrycznego byłyby równe zero. To samo dotyczy dwóch stanów $|z^2\rangle$ oraz $|x^2-y^2\rangle$. Sześć elektronów w Fe(II) może obsadzić stany 3d zgodnie z rys. 14b, czyli tak jak w $\text{K}_4\text{Fe}(\text{CN})_6$ [21]. Równomierne obsadzenie stanów $|xy\rangle$,



Rys. 14. Stany elektronowe 3d: a) w swobodnym atomie, b) w polu krystalicznym o symetrii sześcienu, c) w polu krystalicznym o symetrii sześcienu z niewielką dystorsją tetragonalną, oraz gęstości elektronowe odpowiadające: d) orbitalom 3d o odpowiednich symetriach, e) orbitalom (z lewej strony na rys. d) przy ich jednakowym obsadzeniu. Strzałkami pokazano obsadzenie stanów elektronowych żelaza(II): tzw. stanu niskospinowego (b) i wysokospinowego (c).

$|xz\rangle$, $|yz\rangle$ nie wprowadza rozszczepienia kwadrupolowego (rys. 15a). W uwodnionym siarczanie żelaza(II) obserwujemy niewielkie odstępstwo od symetrii sześcienu i poziomy elektrony są obsadzone zgodnie ze schematem przedstawionym na rys. 14c. W wyniku niejednakowego obsadzenia stanów $|xy\rangle$, $|xz\rangle$, $|yz\rangle$ w $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ pojawia się niezerowy gradient pola elektrycznego [21], powodujący rozszczepienie widoczne na rys. 15b.



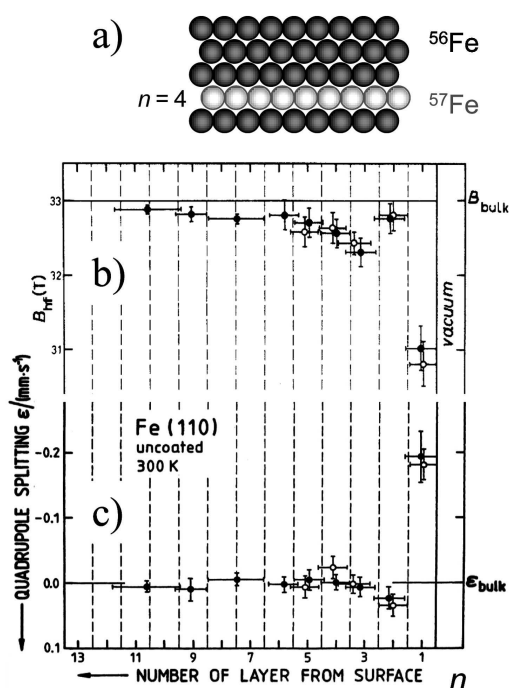
Rys. 15. Widma mössbauerowskie: a) $\text{K}_4\text{Fe}(\text{CN})_6$ z niskospinowym Fe(II), b) $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ z wysokospinowym Fe(II) (na podstawie [21])

3. Rejestracja elektronów konwersji wewnętrznej

Atomowe funkcje falowe typu s mają niezerową amplitudę w miejscu, gdzie znajduje się jądro, zatem elektrony je penetrują, co prowadzi do reakcji wychwytu elektronu. Jądro w stanie wzbudzone może przejść do stanu podstawowego, przekazując energię elektronowi, który jest wybijany i uzyskuje energię kinetyczną równą E_0 minus energia wiązania. Takie elektrony można zarejestrować. (Schemat eksperymentu jest podobny do przedstawionego na rys. 2c, z tą różnicą, że detektor 1 jest przystosowany do rejestracji elektronów, a absorbent musi znajdować się w próżni lub takim gazie, by elektrony mogły zostać zarejestrowane). Ich liczba jest proporcjonalna do liczby rozpraszanych rezonansowo fotonów [22].

Rejestracja elektronów konwersji wewnętrznej wiąże się z dodatkowymi możliwościami pomiarowymi. Po pierwsze, elektron może się wydostać jedynie z warstw przypowierzchniowych próbki i mierzony sygnał efektu Mössbauera pochodzi jedynie z tych warstw. Po drugie, prawdopodobieństwo wytworzenia elektronu konwersji wewnętrznej jest kilkakrotnie większe niż prawdopodobieństwo emisji bezdrzewowej fotonu γ . Tym samym metoda jest bardziej czuła na zawartość izotopu ^{57}Fe w próbce, a minimalna objętość próbki, dla której udaje się już zarejestrować efekt Mössbauera, jest mniejsza. Przywołajmy tu jeden z polskich akcentów – eksperyment, w którym zmierzono, jak oddziaływania nadsubtelne zależą od położenia atomu w monokryształ

α -Fe [23]. W eksperymencie przygotowywano monokryształ izotopu ^{56}Fe , nakładano nań pojedynczą warstwę atomów ^{57}Fe , a następnie określoną liczbę warstw atomów ^{56}Fe (rys. 16a). W pomiarze mössbauerowskim uczestniczą jedynie atomy ^{57}Fe , więc informacja o oddziaływaniach nadsztylnych uzyskiwana jest z warstwy leżącej na ściśle określonej głębokości. Obserwowana zależność magnetycznego pola nadsztylnego (rys. 16b) jest wynikiem oscylacji gęstości spinowej, pojawiających się wskutek oddziaływania elektronów przewodnictwa z powierzchnią kryształu. Widać również, że w dwu pierwszych warstwach przypowierzchniowych pojawia się niezerowy gradient pola elektrycznego (rys. 16c). Innym wielkim sukcesem krakowskiej grupy było opracowanie metody badań umożliwiającej wyznaczenie rozkładu gęstości elektronicznej w otoczeniu atomu mössbauerowskiego, tzw. obrazowania holograficznego, o którym można przeczytać m.in. w *Postęпах Fizyki* [24].

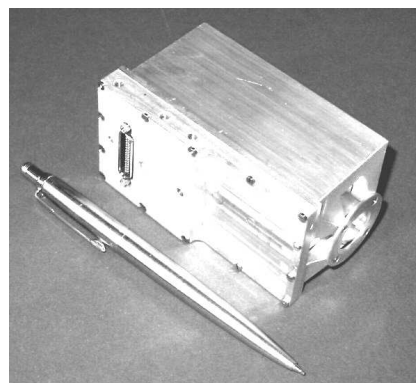


Rys. 16. Monokryształ α - ^{56}Fe z czwartą warstwą podstawioną izotopem ^{57}Fe (a), w której mierzono efekt Mössbauera poprzez rejestrację elektronów konwersji wewnętrznej oraz zależności magnetycznego pola nadsztylnego (b) i rozszczepienia kwadrupolowego (c) od numeru warstwy n (na podstawie [23])

4. Spektroskopia mössbauerowska w kosmosie

Rozwój badań z wykorzystaniem zjawiska jądrowego bezdrutowego rozpraszania rezonansowego zaowocował powstaniem komercyjnych firm wytwarzających spektrometry mössbauerowskie. Typowe laboratoryjne urządzenia miały rozmiary paru metrów, lecz postępująca miniaturyzacja i zastosowanie procesorów umożliwiły zbudowanie kompletnych spektrometrów o masie 400 g, mocy 1 W

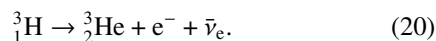
i rozmiarach $5 \times 5 \times 9$ cm (rys. 17) [25]. W roku 2003 sonda kosmiczna z pojazdem marsjańskim wyposażonym m.in. w spektrometr tego typu opuściła Ziemię i po wylądowaniu na czerwonej planecie w 2004 r. zostało zarejestrowane pierwsze widmo mössbauerowskie marsjańskiego gruntu. Badania doprowadziły do zidentyfikowania minerału o wzorze chemicznym $(\text{K},\text{Na})\text{Fe}_3(\text{OH})_6(\text{SO}_4)_2$ zwanego jarosytem. Minerał ten zawiera grupy wodorotlenowe, co oznacza, że powstawał w obecności wody [25,26].



Rys. 17. Miniaturyzacja spektrometrów mössbauerowskich [25] umożliwiła wykorzystanie tych urządzeń do badań powierzchni Marsa

5. Spektroskopia mössbauerowska neutrin?

Wkrótce po odkryciu efektu Mössbauera pojawiła się sugestia wykorzystania procesów bezdrutowego rozpraszania rezonansowego do rejestracji neutrin [27]. Neutrino produkowane jest np. w reakcji rozpadu trytu:

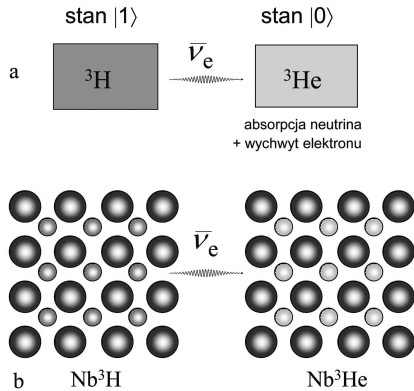


W reakcji (20) powstaje elektron, który z jodem ${}^3\text{He}^+$ może utworzyć stan podstawowy atomu ${}^3\text{He}$. Energia neutrina jest wtedy ściśle określona. (Reakcja może przebiegać również tak, że utworzony zostanie stan zjonizowany ${}^3\text{He}$; wówczas w różnych rozpadach energia kinetyczna może zostać różnie rozdzielona pomiędzy neutrino, elektron i jon helu. Energia neutrin będzie miała wtedy szeroki rozkład). Reakcja (20) jest odwracalna i możliwe jest pochłonięcie neutrina przez ${}^3\text{He}$. Przeprowadzając eksperyment, którego schemat przedstawiony jest na rys. 18a, moglibyśmy obserwować rezonansowe pochłanianie neutrina poprzez detekcję trytu, który tworzyłby się w prawym kanale rys. 18a.

Zauważmy, że reakcja (20) oraz układ z rys. 18a przypominają próby obserwacji jądrowej fluorescencji rezonansowej (rys. 2a). Okazuje się, że prawdopodobieństwo zajścia reakcji (20) silnie zmniejszają procesy odrzutu. Stąd też idea [27–30] wbudowania atomów trytu oraz helu w sieć krystaliczną i wykorzystania zjawiska bezdrutowego rozpraszania rezonansowego (rys. 18b).

Eksperymenty z neutrinami w skali laboratoryjnej nie zostały jeszcze przeprowadzone. Jednym z problemów jest

to, że oddziaływania nadsubtelne w jądrze trytu wbudowanym w sieć krystaliczną nie są takie same jak oddziaływania nadsubtelne w jądrze ${}^3\text{He}$ wbudowanym w taką samą sieć, co powoduje przesunięcia energii stanów jądrowych i wyprowadza układ ${}^3\text{H}-{}^3\text{He}$ z rezonansu.



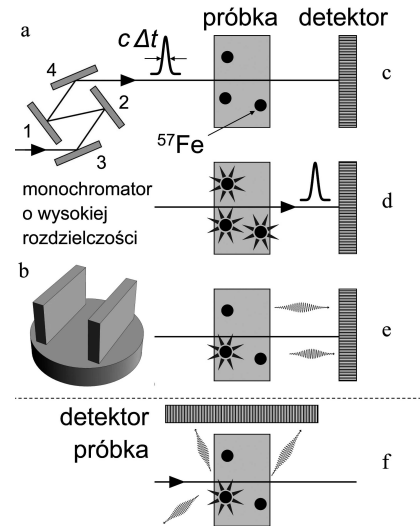
Rys. 18. Idea eksperymentu w skali laboratoryjnej z rezonansowym (a) oraz rezonansowym i bezdrzutowym (b) rozpraszaniem neutrina. Atomy ${}^3\text{H}$ oraz ${}^3\text{He}$ są wbudowane w sieć krystaliczną niobu.

6. Synchrotronowe źródła promieniowania

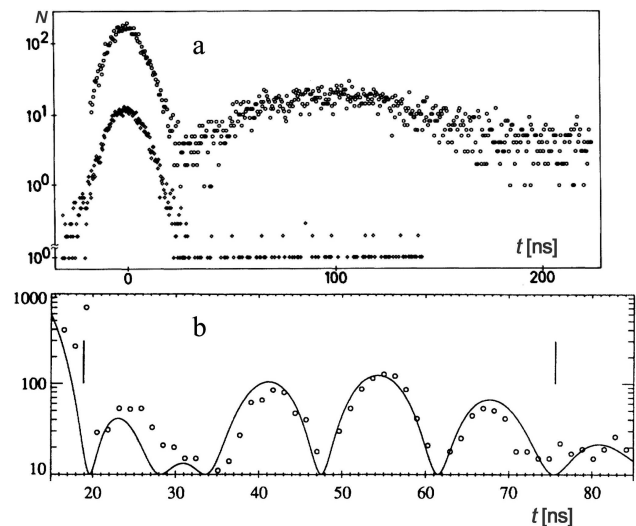
6.1. Układ pomiarowy

Niedogodnością w spektroskopii mössbauerowskiej jest konieczność stosowania źródeł promieniotwórczych. Wynikają stąd naturalne ograniczenia natężenia wiązki oraz możliwości jej kolimacji. Dlatego też w latach siedemdziesiątych XX w. podjęto próby wykorzystania promieniowania synchrotronowego do obserwacji jądrowego rozpraszania rezonansowego. Wiązka promieniowania o energii odpowiadającej E_0 otrzymywana jest przy użyciu wielokrotnych odbić braggowskich w monokryształach (rys. 19a,b). Pomimo znacznej monochromatyzacji fotony w tej wiązce mają rozkład energii ΔE znacznie szerszy od Γ (wysokorozdzielcze monochromatory pozwalają na uzyskiwanie $\Delta E \approx 0,5$ meV dla fotonów o energii E_0 odpowiadającej ${}^{57}\text{Fe}$ [31]). Ułamek liczby fotonów $\Gamma/\Delta E$, które mogą brać udział w rozpraszaniu rezonansowym, jest zatem rzędu 10^{-5} .

Skuteczną metodą wyłowienia z tła tak małego efektu okazała się analiza czasowa rozpraszania rezonansowego. Krótki impuls promieniowania, trwający około $\Delta t = 0,1$ ns, powoduje przejście jąder do stanów wzbudzonych (rys. 19d). Impuls ten powoduje jednocześnie „oślepienie” detektora, którego konstrukcja pozwala jednak na szybki powrót do prawidłowej rejestracji fotonów (rys. 19e). Wzbudzone stany jądrowe rozpadają się w czasie rzędu $\tau = \hbar/\Gamma$, dostatecznie długim, by można było rejestrować zależność natężenia rozproszonych fotonów od czasu, czyli fluorescencję rezonansową. Pierwsze eksperymenty przeprowadzono w sposób podobny do opisanego w ośrodkach synchrotronowych DESY w Hamburgu i Advanced Photon Source w Argonne [32–34] (rys. 20).

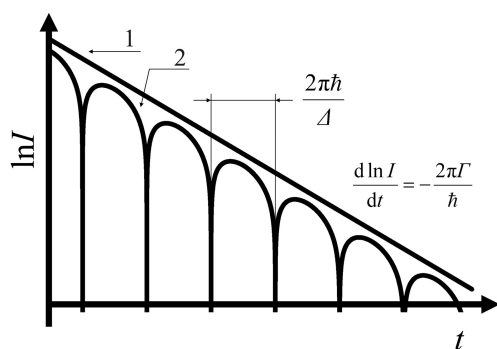


Rys. 19. Idea działania monochromatora o wysokiej rozdzielczości (a). Części 1 i 2 stanowią jeden monokryształyczny blok (b), podobnie części 3 i 4. Krótko trwający impuls promieniowania opuszcza monochromator (c) i wzbudza stany jądrowe próbki (d). Po natychmiastowym rozproszeniu i ucieczce impulsu detektor zaczyna rejestrować fotony rozpraszane rezonansowo przez jądra ${}^{57}\text{Fe}$ (e). Pomiar niesprężystego rozpraszania rezonansowego z udziałem procesów fononowych (f).



Rys. 20. a) Jedna z pierwszych obserwacji zależności czasowej rozpraszania promieniowania synchrotronowego w granicie itrowym wzbogacanym ${}^{57}\text{Fe}$, gdy średnia energia fotonów monochromatyzowanej wiązki spełniała warunek rezonansu (widmo górne) i gdy była poza nim (widmo dolne). Widać sygnał rozpraszania natychmiastowego (w chwili $t = 0$) i maksimum wokół $t = 100$ ns odpowiadające fluorescencji rezonansowej [32]. b) Widmo czasowe jądrowego rozpraszania do przodu obserwowane w folii ${}^{57}\text{Fe}$. Pionowe kreski wskazują chwile zaburzeń pracy synchrotronu (dodatkowe, niepożądane paczki fotonów) [34].

Gdyby próbka z rys. 19c–e zawierała jądra ^{57}Fe , w których nie byłoby rozszczepień stanów podstawowego i wzbudzonego, spodziewalibyśmy się wykładniczego rozkładu czasów rejestrowanych przez detektor, podobnie jak od próbki promieniotwórczej ze średnim czasem życia τ (rys. 21, krzywa 1). Cechą charakterystyczną eksperymentów, których idea przedstawiona jest na rys. 19, jest to, że promieniowanie synchrotronowe jest spójne, zatem stany wzbudzone z rys. 19d mają dobrze określone fazy. Rozpraszaniu fotonów towarzyszy zjawisko interferencji. W przypadku rozszczepień stanów jądrowych spowodowanych oddziaływaniami nadsztylnymi mamy do czynienia z różnymi wartościami energii przejść (por. np. rys. 13) i w wyniku interferencji pojawią się oscylacje (dudnienia kwantowe) liczby zliczeń w funkcji czasu (rys. 21, krzywa 2).



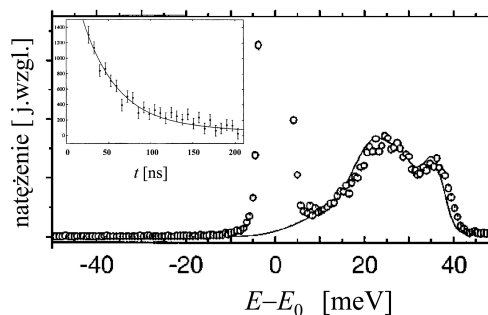
Rys. 21. Zależność względnego natężenia fluorescencji rezonansowej od czasu w przypadku, gdy w rozpraszającej próbce nie występują rozszczepienia poziomów spowodowane przez oddziaływania nadsztylna (krzywa 1, por. rys. 12 i 15a) oraz gdy w próbce pojawiają się dwie linie absorpcyjne o jednakowych amplitudach (krzywa 2, por. rys. 13 i 15b). Widać dudnienia kwantowe o okresie odwrotnie proporcjonalnym do odległości Δ między liniami absorpcyjnymi.

Wspomniana już spójność promieniowania oraz dobrze określone fazy stanów wzbudzonych ujawniają się dodatkowo w zjawisku silnego wzmocnienia rozpraszania do przodu. Oznacza to, że stany wzbudzone przedstawione na rys. 19d rozpadają się poprzez bezodrzućową emisję fotonów głównie w kierunku wiązki pierwotnej (a nie we wszystkich kierunkach, jak byłoby w przypadku próbki promieniotwórczej). Stąd bierze się nazwa metody przedstawionej na rys. 19c–e: jądrowe rozpraszanie do przodu.

6.2. Pomiary fononowe

Ogromne świetlności wiązek fotonów uzyskiwanych ze źródeł synchrotronowych oraz zwiększenie zdolności rozdzielczej poprzez konstrukcję wysokorozdzielczych monochromatorów pozwoliły na bezpośrednią weryfikację obrazu jądrowego rozpraszania rezonansowego z udziałem wzbudzeń fononowych [35,36], o którym wspomniano w p. 1 (rys. 7). Rozpraszanie poprzez stany wzbudzone (rys. 19d) może zachodzić przy udziale fononów. Liczba takich procesów jest proporcjonalna do $1 - f$ (por. (13)). W rozpraszaniu fotonów nie obserwuje się wzmocnienia

w kierunku do przodu (rys. 19f). Mamy tu do czynienia z niesprężystym i niespójnym rozpraszaniem rezonansowym, dla którego zależność od czasu jest taka jak dla próbki promieniotwórczej o średnim czasie życia τ (rys. 22, po lewej u góry). Pomiar zależności częstości zliczeń od energii wiązki pierwotnej (rys. 22) umożliwia wyznaczenie gęstości stanów fononowych w kryształach [37].



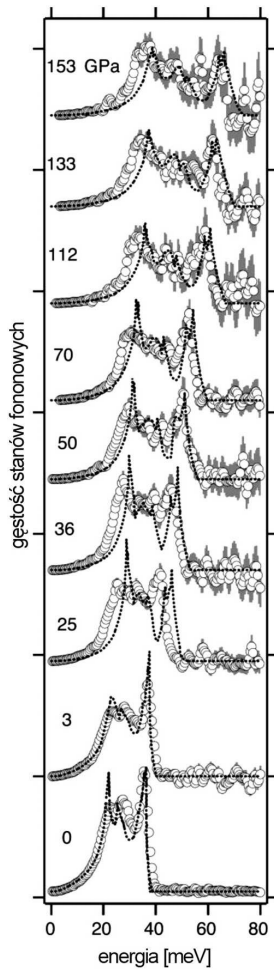
Rys. 22. Natężenie rozpraszania promieniowania synchrotronowego w folii ^{57}Fe w temperaturze 24 K, rejestrowane według schematu przedstawionego na rys. 19f w zależności od energii wiązki padającej [37]. Dla $E = E_0$ widać sygnał (ucięty na rysunku) rozpraszania natychmiastowego. Po lewej u góry: natężenie rozpraszania rezonansowego w zależności od czasu [35] (folia ^{57}Fe w temperaturze pokojowej). Zwróćmy uwagę na liniową skalę obu wykresów.

6.3. Pomiary w warunkach ekstremalnych

Przewidywanie trzęsień ziemi uzależnione jest od wiedzy o budowie naszej planety i jej dynamice. Jednym ze źródeł informacji o budowie naszego globu jest analiza fal akustycznych przechodzących przez warstwy skorupy, płaszcza i jądra Ziemi. Do przeprowadzania symulacji fal akustycznych penetrujących wewnątrz Ziemi konieczna jest znajomość właściwości materii w warunkach ekstremalnych – przy ciśnieniach do 330 GPa i temperaturach sięgających 5300 K. Źródła synchrotronowe dzięki możliwości ograniczenia średnicy wiązki do rozmiarów mikrometrowych oraz dużemu natężeniu promieniowania pozwalają na pomiary w takich warunkach. Przykładem (rys. 23) może być pomiar gęstości stanów fononowych przy dużych ciśnieniach [39]. Pomiary takie wykonuje się z użyciem kowadeł diamentowych. Jak widać, uzyskiwane ciśnienia są tylko o połowę mniejsze od ciśnienia panującego we wnętrzu Ziemi. Z gęstości stanów fononowych można wyznaczyć ważne parametry termodynamiczne materiału – temperaturę Debye'a, prędkość dźwięku, moduły sztywności, ciepło właściwe itp.

7. Efekty polaryzacyjne w rozpraszaniu rezonansowym

Rozpraszanie rezonansowe można interpretować fizycznie w następujący sposób. Stanom kwantowym jądra odpowiadają prądy spinowe i ładunkowe. Stan wzbudzony i podstawowy są sprzężane polem elektromagnetycznym fotonu – tworzy się oscylator. Sprzężenie to jest zależne od orientacji prądów względem pól elektromagnetycznych



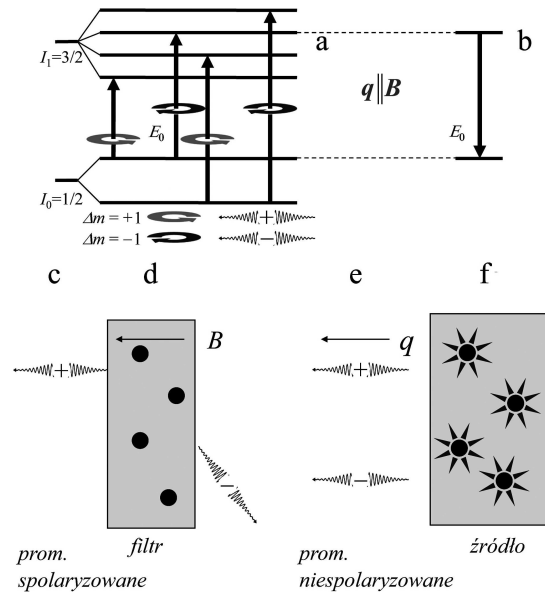
Rys. 23. Zależność gęstości stanów fononowych w żelazie od ciśnienia wyznaczona metodą niesprężystego rozpraszania rezonansowego promieniowania synchrotronowego [38]

fotonu, stąd pojawia się zależność rozpraszania rezonansowego od polaryzacji fotonu [39,40].

Promieniowanie spolaryzowane można wykorzystywać do wyznaczania orientacji oddziałujących układów, np. kierunków diagonalnych gradientu pola elektrycznego lub kierunku pola magnetycznego, z którym oddziałuje jądro. Jako przykład przedstawimy sposób otrzymywania monochromatycznego promieniowania spolaryzowanego kołowo i zastosowania go do wyznaczania orientacji momentu magnetycznego atomu (rys. 24).

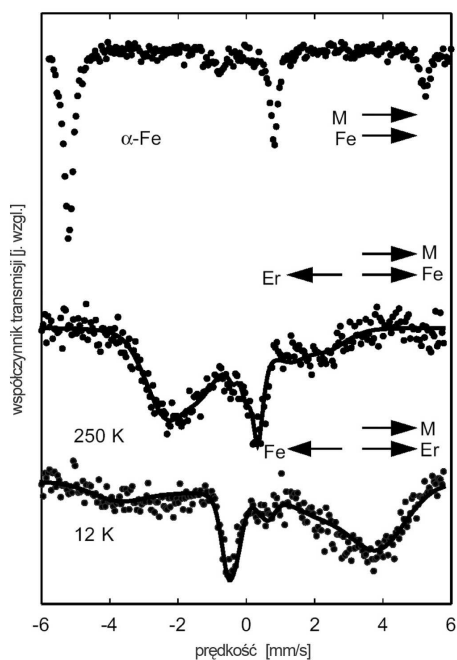
Fotony z wektorem falowym q równoległym do pola magnetycznego, rozpraszane w układzie przedstawionym na rys. 9, niosą moment pędu \hbar lub $-\hbar$ (zależnie od różnicy liczb kwantowych m dla stanu wzbudzonego i podstawowego), a więc mają prawo- lub lewoskrętną polaryzację kołową, zależną również od energii (prawdopodobieństwo przejść z $\Delta m = 0$ jest w tych warunkach równe zero, dlatego na rys. 24a nie zaznaczono przejść odpowiadających liniom absorpcyjnym 2 oraz 5 z rys. 9). Monochromatyczne źródło promieniotwórcze w normalnych warunkach (rys. 24f) wysyła promieniowanie niespolaryzowane (promieniowanie spolaryzowane o polaryzacji zależnej od

energii można uzyskać, wprowadzając atomy promieniotwórcze do kryształu ferromagnetyka). Możemy uważać, że składa się ono z fotonów o przeciwnych polaryzacjach, np. prawo- i lewoskrętnej (rys. 24e). Przez dobór prędkości dopplerowskiej można doprowadzić do rezonansu jednego wybranego przejścia z wysyłanymi fotonami (linie przerywane na rys. 24a,b). Wtedy rozpraszane będą fotony o jednej polaryzacji (rys. 24d) i z wiązki początkowo niespolaryzowanej (rys. 24e) otrzymamy wiązkę spolaryzowaną (rys. 24c). Zatem układ przedstawiony na rys. 24d,f jest źródłem promieniowania monochromatycznego i spolaryzowanego kołowo [41], za pomocą którego można badać polaryzację przejść w rozpraszaniu rezonansowym.



Rys. 24. Polaryzowanie promieniowania z użyciem filtra rezonansowego; a) struktura nadsubtelna poziomów w filtrze, jedno przejście jest w rezonansie z przejściem w monochromatycznym źródle promieniowania niespolaryzowanego (b); c) promieniowanie spolaryzowane po odfiltrowaniu przez filtr jednej składowej (d) promieniowania niespolaryzowanego (e) wysyłanego przez źródło (f). Pole magnetyczne B działające na filtr jest równoległe do wektora falowego q rozprazanego promieniowania. Symbolami (+) oraz (-) oznaczono fotony o przeciwnych polaryzacjach kołowych.

Widmo mössbauerowskie zmierzone przy użyciu wiązki spolaryzowanej kołowo niesie informację o kierunku momentu magnetycznego, co widać na przykładzie pomiaru widma proszku żelaza umieszczonego w zewnętrznym polu magnetycznym równoległym do kierunku wiązki (rys. 25). Pole magnetyczne orientuje momenty magnetyczne, wskutek czego zmieniają się natężenia linii absorpcyjnych (por. górne widmo z rys. 25 i rys. 10a). Zbadana w podobnych warunkach próbka amorficznego stopu $Fe_{0,66}Er_{0,19}B_{0,15}$ [42] w temperaturze 250 K wykazuje sekwencję natężeń podobną do tej w żelazie: przy ujemnych prędkościach mamy dużą absorpcję. (Na linii absorpcyjne $Fe_{0,66}Er_{0,19}B_{0,15}$ nakłada się wiele składowych o różnych



Rys. 25. Widma mössbauerowskie zmierzone przy użyciu promieniowania spolaryzowanego kołowo: proszku żelaza w temperaturze pokojowej (u góry) oraz amorficznego $\text{Fe}_{0,66}\text{Er}_{0,19}\text{B}_{0,15}$ w temperaturze 250 K lub 12 K (u dołu) [41]. Próbkę znajdowały się w polu magnetycznym o indukcji 1 T (strzałka M) równoległym do kierunku wiązki fotonów. Strzałki Fe i Er oznaczają uśrednione kierunki atomowych momentów magnetycznych.

natężeniach pola rozszczepiającego poziomy jądro; por. rys. 10c, gdzie mamy tylko trzy składowe. Stąd inny ich kształt w porównaniu z liniami w widmie $\alpha\text{-Fe}$). Obniżenie temperatury do 12 K powoduje radykalną zmianę kształtu widma – mamy teraz dużą absorpcję dla dodatnich prędkości. Oznacza to, że nastąpiło odwrócenie kierunków momentów atomowych Fe.

Wyznaczenie orientacji momentów magnetycznych jest zwykle utrudniane przez występowanie wspomnianych rozkładów oddziaływań nadształtnych. Spektroskopia mössbauerowska dostarcza w tym przypadku informacji o dwóch rodzajach średnich (po atomach żelaza w próbce) z pół rozszczepiających poziomy jądro: średniej \overline{B}_q składowej pola \mathbf{B} w kierunku wektora \mathbf{q} oraz średniej kwadratu tej składowej \overline{B}_q^2 [44]. Wartości \overline{B}_q są miarą różnicy amplitud linii 1 i 6 oraz 3 i 4, a wartości \overline{B}_q^2 decydują o względnej amplitudzie linii 2 i 5 (według oznaczeń z rys. 9). Ponieważ wartości średnie są mierzone dla określonego izotopu pierwiastka, wartość \overline{B}_q jest proporcjonalna do udziału tego pierwiastka w makroskopowym namagnesowaniu. Jest to ważny parametr układów, w których występuje tylko częściowe uporządkowanie momentów magnetycznych.

8. Podsumowanie

Przedstawiliśmy odkrycie, jakiego dokonał Rudolf Mössbauer, omówiliśmy zjawisko rezonansowego rozpra-

szania oraz – w bardzo wybiórczy sposób – najważniejsze etapy rozwoju na przestrzeni 50 lat. Spektroskopia mössbauerowska jest popularnym narzędziem badawczym stosowanym w laboratoriach wspólnie z innymi technikami. W pewnych przypadkach dostarcza jednoznacznych informacji o właściwościach badanego materiału, w innych daje wyniki trudne do interpretacji. Jej zaletą jest istnienie ścisłego teoretycznego opisu zjawiska oraz możliwość uzyskiwania informacji selektywnej izotopowo i pochodzącej tylko z miejsca, w którym zlokalizowany jest dany izotop. Postęp miniaturyzacji umożliwił przeprowadzenie eksperymentów pozaziemskich. Wadą spektroskopii wykorzystującej źródła promieniotwórcze są naturalne ograniczenia intensywności i czasu życia źródła oraz możliwości kolimacji wiązki. Ograniczenia tego nie ma przy źródłach synchrotronowych i dlatego należy się spodziewać rozwoju nowych technik badań. Na realizację czekają m.in. eksperymenty z bezdrutowym rozpraszaniem rezonansowym neutron.

Autor dziękuje prof. Ludwikowi Dobrzyńskiemu za uwagi dotyczące manuskryptu.

Literatura

- [1] U. Volz i in., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2862 (1996).
- [2] P. Juncar i in., *Metrologia* **17**, 77 (1981).
- [3] *Handbook of Spectroscopy*, red. J.W. Robinson, t. III (CRC Press, Boca Raton, Florida 1981).
- [4] R.W. Wood, *Proc. Amer. Acad. Arts Sci.* **40**, 365 (1904).
- [5] W. Kuhn, *Philos. Mag.* **8**, 625 (1929).
- [6] P.B. Moon, *Proc. Phys. Soc. (London)* **A64**, 76 (1951).
- [7] J.M. Palms i in., *Phys. Rev. C* **2**, 592 (1970).
- [8] N.J. Stone, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **90**, 75 (2005).
- [9] K.G. Malmfors, *Arkiv Fysik* **6**, 49 (1952).
- [10] R.L. Mössbauer, *Hyperfine Interact.* **126**, 1 (2000).
- [11] R.L. Mössbauer, *Z. Physik* **151**, 124 (1958).
- [12] W.E. Lamb, Jr., *Phys. Rev.* **55**, 190 (1939).
- [13] H. Ibach, H. Lüth, *Fizyka ciała stałego* (Wyd. Nauk. PWN, Warszawa 1996), s. 54.
- [14] H.J. Lipkin, *Quantum mechanics: new approaches to selected topics* (North-Holland Publishing Company, 1973).
- [15] W.M. Visscher, *Ann. Phys.* **9**, 194 (1960).
- [16] K.S. Singwi, A. Sjölander, *Phys. Rev.* **120**, 1093 (1960).
- [17] R.L. Mössbauer, *Naturwissenschaften* **45**, 538 (1958).
- [18] Yu.V. Shvyd'ko i in., *Phys. Rev. Lett.* **85**, 495 (2000).
- [19] S.S. Hanna i in., *Phys. Rev. Lett.* **4**, 513 (1960).
- [20] R.E. Watson, A.J. Freeman, *Phys. Rev.* **123**, 2027 (1961).
- [21] P. Gütllich, R. Link, A. Trautwein, *Mössbauer Spectroscopy and Transition Metal Chemistry* (Springer-Verlag, Berlin 1978); http://ak-guetlich.chemie.uni-mainz.de/Moessbauer_Lectures_web.pdf.
- [22] K.R. Swanson, J.J. Spijkerman, *J. Appl. Phys.* **41**, 3155 (1970).
- [23] J. Korecki, U. Gradmann, *Europhys. Lett.* **2**, 651 (1986); J. Korecki, *Surface, interface and thin film magnetism of iron seen by Mössbauer spectroscopy* (Zeszyty Naukowe AGH, 1990).
- [24] P. Korecki, J. Korecki, W. Karaś, *Phys. Rev. B* **59**, 6139 (1999); P. Korecki, J. Korecki, *Postępy Fizyki* **52**, 225 (2001); <http://users.uj.edu.pl/~korecki/hyperfine.htm>.

- [25] G. Klingelhöfer, *Hyperfine Interact.* **158**, 117 (2004).
 [26] R.V. Morris i in., *Science* **305**, 833 (2004).
 [27] W.M. Visscher, *Phys. Rev.* **116**, 1581 (1959).
 [28] R.S. Raghavan, arXiv:hep-ph/0511191 (2005);
 arXiv:hep-ph/0601079 (2006).
 [29] W. Potzel, *Phys. Scripta* **T127**, 85 (2006).
 [30] S.M. Bilenyk, F. von Feilitzsch, W. Potzel, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **34**, 987 (2007).
 [31] T. Mitsui i in., *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A* **467**, 1105 (2001).
 [32] E. Gerdau i in., *Phys. Rev. Lett.* **54**, 835 (1985).
 [33] J.B. Hastings i in., *Phys. Rev. Lett.* **66**, 770 (1991).
 [34] U. van Bürck i in., *Phys. Rev. B* **46**, 6207 (1992).
 [35] U. Bergmann, J.B. Hastings, D.P. Siddons, *Phys. Rev. B* **49**, 1513 (1994).
 [36] M. Seto i in., *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3828 (1995).
 [37] A.I. Chumakov i in., *Phys. Rev. B* **54**, R9596 (1996).
 [38] H.K. Mao i in., *Science* **292**, 914 (2001).
 [39] H. Frauenfelder i in., *Phys. Rev.* **126**, 1065 (1962).
 [40] U. Gonser, H. Fischer, w: *Mössbauer Spectroscopy II*, red. U. Gonser (Springer, Berlin 1981).
 [41] K. Szymański i in., *Nucl. Instrum. Meth. B* **119**, 438 (1996).
 [42] K. Szymański i in., *J. Magn. Magn. Mater.* **251**, 271 (2002).
 [43] K. Szymański, *Physics Reports* **423**, 295 (2006).



Dr hab. KRZYSZTOF RAFAŁ SZYMAŃSKI, ur. w 1961 r., absolwent LO w Kętrzynie, ukończył studia na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. Na Uniwersytecie w Białymstoku (dawniej: Filia Uniwersytetu Warszawskiego) zorganizował Laboratorium Spektroskopii Mössbauerowskiej. Rozwinął metody polarymetrii rezonansowej, skonstruował spektrometr mössbauerowski ze źródłem monochromatycznego promieniowania γ spolaryzowanego kołowo. Staże naukowe odbył m.in. w Paryżu, Groningen, Le Mans i Budapeszcie. Obecnie kieruje Zakładem Fizyki Ciała Stałego na Wydziale Fizyki UwB. Autor wielu prac naukowych, od 2004 r. przedstawiciel Polski w Międzynarodowej Radzie Zastosowań Efektu Mössbauera (IBAME), opiekun Koła Naukowego Fizyków UwB, wykładowca, popularyzator fizyki.

PTF



Oddział Zielonogórski

29 stycznia 2008 r. odbyło się Walne Zebranie Zielonogórskiego Oddziału PTF. Wyłoniono nowy Zarząd w składzie: przewodniczący Marian Olszowy (UZ), wiceprzewodnicząca Mirosława Koprowska (Gimnazjum nr 6 w Zielonej Górze), sekretarz Sebastian Żurek (UZ), skarbnik Van Cao Long (UZ), członkowie Beata Jakubaszek (UZ) i Ewa Królczyk (Gimnazjum nr 1 w Zielonej Górze). Wybrana została również Komisja Rewizyjna w składzie: przewodnicząca Joanna Borgensztajn (UZ), członkowie Jadwiga Fojt-Jasińska (I LO w Zielonej Górze) i Sławomir Pawłowicz (Gimnazjum nr 2 w Żarach). Ustępujący Zarząd przedstawił szczegółowe sprawozdanie ze swojej kadencji, nowo wybrany Zarząd nakreślił z kolei plan działania na najbliższe dwa lata.

Z dotychczasowych osiągnięć Oddziału na szczególną uwagę zasługują:

- organizowany corocznie przez Koło Nauczycieli konkurs fizyczny dla uczniów gimnazjalnych, któremu patronuje Instytut Fizyki Uniwersytetu Zielonogórskiego

- aktywny udział członków Oddziału w Festiwalu Nauki organizowanym (również corocznie) przez UZ, a w szczególności w przygotowaniu pokazów doświadczalnych adresowanych do szerokiego grona odbiorców.

Nowo wybrany Zarząd, oprócz rozwijania dotychczasowej działalności popularyzatorskiej i wspierania obu tych imprez, postawił sobie za jeden z celów zorganizowanie cyklu wykładów poświęconych fizyce, do wygłoszenia których pragniemy zachęcić zarówno pracowników UZ jak i osoby związane z innymi ośrodkami w kraju.

Joanna Borgensztajn

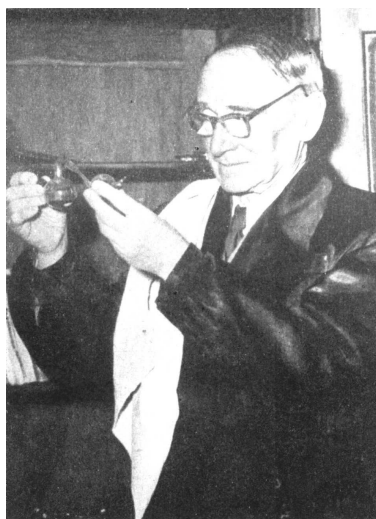


60-lecie Oddziału Lubelskiego

13 grudnia 2007 r. Oddział Lubelski Polskiego Towarzystwa Fizycznego świętował 60. rocznicę swojego powstania. Uroczyste 649. posiedzenie odbyło się w Instytucie Fizyki UMCS w Auli im. Stanisława Ziemeckiego, pierwszego przewodniczącego Oddziału. Zebranych licznie gości przywitał obecny przewodniczący, Jerzy Żuk. Minutą ciszy uczczono pamięć zmarłych lubelskich fizyków. Sesję rozpoczął referat Stanisława Hałasa na temat historii PTF. Profesor przedstawił sylwetki wybitnych fizyków związanych z Towarzystwem, m.in. Władysława Natansona, pierwszego prezesa, Stefana Pieńkowskiego, prezesa w okresie przedwojennym i powojennym, oraz Stanisława Ziemeckiego, przewodniczącego Oddziału Lubelskiego w latach 1947–56. Zebrani mogli obejrzeć notatki z pierwszego, założycielskiego posiedzenia Oddziału, które odbyło się 21 listopada 1947 r.

Posiedzenie Oddz. Sub. Pol. Tow. Fizycznego. 21.11.47.
Obecni: 11 członków i 10 gości.
 I. Wybory zarządu: przewodniczącym został wybrany prof. Dr. Stanisław Ziemecki, członkami zarządu zast. prof. Dr. Urbanowski, prof. Dr. Staszewski i Mg. Stachórska.
 II. Referat p. Mg. Armina Teske p.t. „Filozoficzne aspekty teorii kwantów wg książki Reichenbacha.”
 III. Dyskusja: zabierali głos prof. Ziemecki oraz prof. Lubnicki.
 Na tym zebraniu zakończono.

Notatka z zebrania założycielskiego Oddziału



Stanisław Ziemecki (1881–1956) – pierwszy przewodniczący Oddziału

Początkowo Oddział zrzeszał kilkunastu członków i organizował spotkania, na których wygłaszano referaty i prowadzono dyskusje naukowe. Już w roku 1953 z inicjatywy Wacława Staszewskiego zorganizowano pierwsze pokazy z fizyki, w których uczestniczyło ponad 1260 osób. Odbyły się one w budynku gimnazjum im. Stanisława Staszica w Alejach Racławickich, gdzie wówczas mieściła się Katedra Fizyki Doświadczalnej. Profesor Staszewski był także inicjatorem utworzenia Muzeum Fizyki, które od ponad 50 lat jest dostępne dla rzesz młodzieży szkolnej i studenckiej w formie gablot i witryn na korytarzach IF UMCS. Pokazy fizyczne organizowane systematycznie do chwili obecnej cieszą się niesłabnącym zainteresowaniem wśród uczniów i nauczycieli, co roku uczestniczy w nich ok. 20 tys. osób.



Wacław Staszewski (1892–1970) wraz z uczestnikami pokazów fizycznych w połowie lat pięćdziesiątych



Siła dośrodkowa – pokaz Maksymiliana Piłata i Edwarda Chomicza

Do rozwoju lubelskiego ośrodka fizyki szczególnie przyczynił się Włodzimierz Żuk (1916–1981), przewodniczący Oddziału w latach 1959–60 oraz 1966–68. Będąc prorektorem UMCS do spraw nauki w latach 1962–68, doprowadził m.in. do budowy dwóch budynków dobrze wyposażonych w fizyczną aparaturę naukową. Podczas jego kadencji OL PTF zorganizował XX Zjazd Fizyków Polskich, w dniach 12–17 września 1967 r., w którym uczestniczyło 650 osób. Jedną z sesji poświęconą była pamięci Mariana Smoluchowskiego w 50. rocznicę jego śmierci, a Zjazdowi towarzyszyła wystawa upamiętniająca setną rocznicę urodzin Marii Skłodowskiej-Curie. W Lublinie odbył się także XXVII Zjazd Fizyków Polskich. W dniach 21–25 września 1981 r. zorganizowano sesje plenarne, dyskusyjne i plakatowe. W Zjeździe tym uczestniczyło 421 osób.

Na zakończenie referatu prof. Hałas podał aktualne informacje o Oddziale, który liczy obecnie 131 członków i jest piątym co do wielkości w kraju. Członkowie Oddziału Lubelskiego, oprócz pokazów z fizyki, organizują liczne wykłady – naukowe na uczelni i popularyzatorskie w szkołach Lublina oraz województwa lubelskiego. Ponadto przeprowadzany jest coroczny konkurs „Rok przed maturą”.



Stanisław Hałas przedstawia historię PTF

W dalszej części uroczystej sesji jubileuszowej przewodniczący Oddziału, Jerzy Żuk, odczytał listy gratulacyjne i życzenia dla Oddziału, m.in. od prezesa ZG PTF Reinharda Kulesy. W przerwie członkowie Oddziału i goście mogli obejrzeć wystawę historycznych już fotografii przedstawiających działalność Oddziału oraz postacie wykładowców uczestniczących w pokazach z fizyki w latach pięćdziesiątych i sześćdziesiątych.

Na zakończenie spotkania wspomnieniami o początkach Oddziału podzielili się prof. Stanisław Szpikowski, który został członkiem PTF już jako student pierwszego roku, będąc jednocześnie zastępcą asystenta w Katedrze Fizyki Doświadczalnej, kierowanej przez profesora Stanisława Ziemeckiego. W czasie pierwszych pokazów z fizyki studentem był również Tomasz Goworek, który w swoim



Doktor Halina Krzyżanowska – współorganizatorka wystawy

wystąpieniu przedstawił archiwalne zdjęcia oraz własnoręcznie wykonane humorystyczne rysunki. Bohaterami tych historyjek obrazkowych byli ówcześni pracownicy wykonujący pokazy.



Stanisław Szpikowski



Tomasz Goworek

Obrady zakończono w atmosferze refleksji i wspomnień o fizykach, którzy swoją pracą i działalnością społeczną przyczynili się do rozwoju Oddziału.

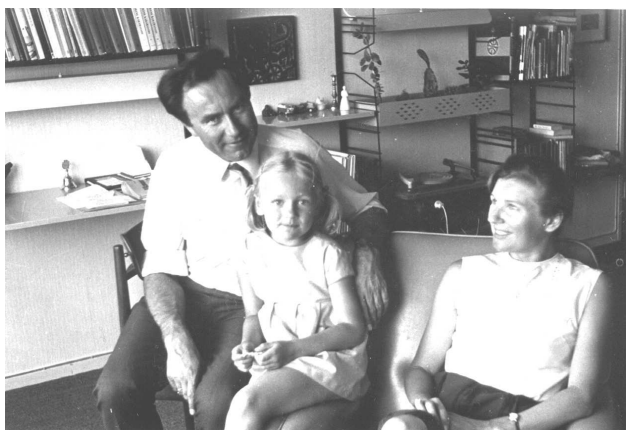
Zainteresowanych fotografiami archiwalnymi i aktualnymi z obchodów 60-lecia zapraszamy na stronę internetową www.ptf.umcs.lublin.pl.

Elżbieta Jartych

Wojciech Ratyński (1932–2007)

Wojciech Ratyński był fizykiem jądrowym, wieloletnim dyrektorem Instytutu Problemów Jądrowych im. Andrzeja Sołtana w Świerku. Odegrał ważną rolę w rozwoju tego Instytutu.

Urodził się 9 kwietnia 1932 r. w Ratyńcu Starym, na Podlasiu, w rodzinie szlacheckiej herbu Paparona. Do gimnazjum i liceum uczęszczał w Siedlcach w latach 1945–50. Było to Gimnazjum i Liceum im. Hetmana Żółkiewskiego, o długiej tradycji, w którym kształcił się Bolesław Prus. Na jednej ze ścian wewnątrz budynku była duża tablica upamiętniająca to wydarzenie. Robiła ona duże wrażenie na uczniach Liceum, którzy znali już, choćby z obowiązkowej lektury, niektóre utwory tego wielkiego pisarza. Sam budynek zresztą też miał duże tradycje – projektował go Antonio Corazzi, znany architekt włoski, projektant wielu budynków w Warszawie oraz w innych miastach Polski i Europy pierwszej połowy XIX w. Liceum miało profil matematyczno-fizyczny. Wojtek był dobrym, bardzo skupionym, pracowitym uczniem, lubianym przez kolegów i nauczycieli (jeden z autorów tej notatki, A.S., uczęszczał z nim do tej samej klasy). Studia wyższe w zakresie fizyki odbył na Wydziale Matematyki, Fizyki i Chemii Uniwersytetu Warszawskiego w latach 1950–55. Stopień doktora nauk matematyczno-fizycznych uzyskał w Instytucie Badań Jądrowych (IBJ) w roku 1964. Przedmiotem rozprawy były badania promieniowania γ z radiacyjnego wychwytu neutronów rezonansowych. Habilitował się w roku 1972, także w IBJ. Tematem rozprawy była polaryzacja kołowa promieniowania γ . W roku 1989 uzyskał tytuł profesora nadzwyczajnego, a bezpośrednio po tym – stanowisko profesora zwyczajnego w IBJ.



Wojciech Ratyński z żoną Danutą i córką Katarzyną (1968)

W pracy naukowej koncentrował się na badaniach prowadzonych z użyciem neutronów. Dotyczyły one zagadnienia pochłaniania neutronów powolnych i rezonanso-

wych, problemu ewentualnego niezachowania parzystości w oddziaływaniach silnych (badanego przy zastosowaniu wiązek neutronów spolaryzowanych), badania widm izotopów wapnia za pomocą reakcji (n,γ) oraz pomiaru przekrojów czynnych niektórych reakcji ważnych dla astrofizyki. Badania te prowadził w różnych ośrodkach reaktorowych: przy reaktorze EWA w Świerku, w Zjednoczonym Instytucie Badań Jądrowych w Dubnej, w Risø (Dania), w Petten (Holandia), Karlsruhe, Grenoble oraz Oak Ridge. W ośrodkach zagranicznych spędził łącznie około siedmiu lat.

Badania te wymagały często bardzo dużego, długotrwałego wysiłku, także przy budowie potrzebnej aparatury. Wykonywał je z charakterystyczną dla siebie cierpliwością, wytrwałością i pogodą ducha. Za to wyniki tych prac były zawsze wartościowe i szeroko cytowane w literaturze.

Charakterystyczna dla prof. Ratyńskiego była tendencja do stosowania osiągnięć naukowych w praktyce, w szczególności w przemyśle. Dobrą tego ilustracją jest zainicjowanie przez niego zastosowania zbudowanego w Zakładzie Budowy Urządzeń Badawczych (ZBUB) IBJ betatronu do analizy i kontroli procesu wzbogacania rud miedzi w kopalniach Polkowice, Rudna i Lubin. Zastosowano tu fotoaktywacyjną metodę analizy zawartości miedzi w rudach, używającą zestawu detektorów promienionowania zbudowanego w IBJ i ZBUB-ie przez zespół kierowany przez Wojciecha Ratyńskiego. Cały zespół, który opracował i wdrożył do produkcji tę metodę, która stała się znana w Europie i na całym świecie, otrzymał Nagrodę I stopnia Państwowej Rady ds. Atomistyki w 1972 r. oraz tytuł Mistrza Techniki Polskiej (1973). Kompletna aparatura zainstalowana w kopalniach miedzi w latach 1971–75 działała tam z powodzeniem przez wiele lat. Dopiero w latach 1999–2003 została zastąpiona przez nowsze urządzenia, wykorzystujące metodę rentgenowskiej analizy fluorescencyjnej.

Innym przykładem działalności wdrożeniowej było zainicjowanie wieloletniego programu „Izotopy i Akceleratory”. Oprócz Instytutu Problemów Jądrowych – jednego z trzech instytutów, na które został podzielony IBJ w 1982 r. – program ten obejmował kilkanaście innych instytutów i ośrodków akademickich w Polsce. Pod kierunkiem prof. Ratyńskiego zrealizowany został cały, bardzo pracochłonny proces przygotowawczy tego programu, w takim stopniu, że Rada Ministrów RP zatwierdziła w roku 1999 program do realizacji. Niestety, nie dane już było prof. Ratyńskiemu rozpoczęcie realizacji tego programu.

W działalności swojej wiele uwagi poświęcał dydaktyce. Już jako student I roku Uniwersytetu był nauczycielem fizyki w liceum w Otwocku. Główną jednak działalność dydaktyczną podjął w Wojskowej Akademii Tech-



Podczas wizyty z córką Katarzyną (druga z lewej) i wnuczką Moniką u przyjaciół w Holandii (1996)

nicznej (WAT), po ukończeniu studiów uniwersyteckich. Znaczenie jego wykładów w WAT, szczególnie z zakresu fizyki jądrowej, było bardzo duże. Znajomość fizyki jądrowej w Polsce w tym okresie była bardzo mała, a jednocześnie bardzo potrzebna ze względu na pojawienie się broni jądrowej i problemu skutków ewentualnego jej użycia.

Wiele też czasu poświęcił działalności przekładowej. Był jednym z tłumaczy książki Resnicka i Hallidaya, która doczekała się kilkunastu wydań i przez lata była podstawowym podręcznikiem fizyki dla studentów politechnik oraz akademii medycznych.

W ostatnim okresie prof. Ratyński przejawiał wiele troski o przyszłość instytutów w Świerku. Po zaprzestaniu przez CYFRONET pełnienia funkcji centrum obliczeniowego dla wielu placówek naukowych w Warszawie, przesunięciu się zainteresowań w fizyce jądrowej ku wysokim energiom i wstrzymaniu budowy elektrowni jądrowej w Żarnowcu całemu ośrodkowi zaczęła zagrażać stopniowa degradacja. Wystąpił wtedy z inicjatywą utworzenia w Świerku ośrodka rozwoju technologicznego pod nazwą Mazowiecki Instytut Technologiczny (MIT) o znacznie poszerzonej i unowocześnionej formule w stosunku do instytutów obecnie istniejących w Świerku. Niestety, nieuchronnie upływający czas nie pozwolił mu już na zabieganie o realizację tego zamierzenia. Sama idea, pod różnymi nazwami, wracała potem i być może za jakiś czas zostanie znowu podjęta.

Ci, którzy znali prof. Ratyńskiego i z nim współpracowali, zapamiętają go jako człowieka dużej kultury, mądrości i życzliwości dla ludzi, także bardzo zaangażowanego, konsekwentnego i wytrwałego w tym, co robił, a przede wszystkim w pracy dla dobra Instytutu, w którym przepracował większość swego zawodowego życia i którym przez dziewięć lat kierował. Był przy tym człowiekiem skromnym, nie potrzebował dla siebie wiele, natomiast zawsze był gotów pomagać innym, czerpiąc ze swej głębokiej wiedzy i rozległego doświadczenia.

Zmarł 17 listopada 2007 r. w Warszawie.

Marian Jaskóła, Zbigniew Moroz, Adam Sobiczewski
Instytut Problemów Jądrowych

RECENZJE

Wstęp do spektroskopii rezonansów magnetycznych

Jan Stankowski, Wojciech Hilczer: *Wstęp do spektroskopii rezonansów magnetycznych*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2005, s. 91.

Pierwowzorem recenzowanej książki Jana Stankowskiego i Wojciecha Hilczera jest wydana przez tych samych autorów w 1994 r. przez Ośrodek Wydawnictw Naukowych PAN, Oddział w Poznaniu, bardzo przydatna broszura pod tytułem *Pierwszy krok ku radiospektroskopii rezonansów magnetycznych*. Obecne wydanie różni się jednak od niej zarówno pod względem zawartości merytorycznej, jak i zakresu omawianych zagadnień. Podobnie jak poprzed-

nio, omawiana książka składa się ze wstępu i trzech kolejnych rozdziałów oraz zakończenia i spisu literatury, zawiera ponadto bardzo potrzebny skorowidz. Wszystkie wymienione części uległy znacznemu rozszerzeniu, a układ książki został wyraźnie zmodyfikowany nie tylko przez fakt, że dodano nowe podrozdziały, uaktualniające poprzednią pozycję, ale także ze względu na wzbogacenie opisu poszczególnych metod doświadczalnych i bogatszą prezentację omawianych zagadnień w postaci nowych rysunków i tabel.

Wstęp do książki jest krótki, ale bardzo rzeczowy. Definiuje się tu na samym początku magnetyczny rezonans spinowy jako związany z absorpcją energii szybkozmiennego pola elektromagnetycznego, która towarzyszy zmia-

nie orientacji spinów elektronu (EPR) i jąder (NMR) w zewnętrznym polu magnetycznym; w istocie te dwa rodzaje rezonansów stanowią główną treść książki. Stąd też niefortunne jest sformułowanie, znajdujące się na tylnej okładce książki, gdzie wśród różnych typów omawianych w niej rezonansów magnetycznych wymienia się dodatkowo spinowy rezonans magnetyczny. We wstępie zasługuje na uwagę sympatycznie i z dużym znanstwem podane tło historyczne związane z odkryciem i rozwojem rezonansu spinowego.

W rozdziale pierwszym zatytułowanym „Spinowy rezonans magnetyczny” w bardzo przystępny sposób wprowadzono podstawowe informacje na temat zjawiska rezonansu magnetycznego. Znaleźć tu można zarówno opis precesji bąka symetrycznego, jak i opis samego rezonansu magnetycznego w ujęciu klasycznym, a następnie równania Blocha oraz ich rozwiązania. Kolejno przedstawiono metody pomiarowe z wykorzystaniem fali ciągłej i echa spinowego, przy podkreśleniu równoważności reprezentacji częstotściowej i czasowej sygnału, a w zakończeniu tego rozdziału nakreślono obraz kwantowy rezonansu spinowego. W moim przekonaniu byłoby lepiej pozostawić tytuł z ww. pierwowzoru w postaci „Czym jest rezonans magnetyczny” lub gdyby tytuł ten brzmiał „Podstawy rezonansu magnetycznego”. Pozwoliłoby to uniknąć sugestii, że w książce omawiane są trzy rodzaje rezonansów magnetycznych stosownie do trzech tytułów jej rozdziałów.

Rozdział drugi, złożony z sześciu podrozdziałów, poświęcony jest elektronowemu rezonansowi paramagnetycznemu (EPR) i w stosunku do broszury z 1994 r. (gdzie EPR opisano w rozdziale trzecim) jest bardziej rozbudowany, właściwie napisany od nowa. Bardzo starannie przedstawiono w nim warunki rezonansu i sposób detekcji sygnału oraz analizę widm EPR. Dalej w jasny sposób omówiono zagadnienie kształtu i szerokości linii rezonansowej, a także strukturę nadsubtelnej widma EPR. Na końcu tego rozdziału znajduje się bardzo cenne omówienie teorii współczynnika g oraz stałej struktury nadsubtelnej A . Na szczególną uwagę zasługuje włączenie doświadczalnego sposobu wyznaczenia współczynnika g dla swobodnego elektronu w oparciu o jeden z najbardziej precyzyjnych eksperymentów potwierdzających w pełni przewidywania elektrodynamiki kwantowej, który został wykonany przez Van Dycka i Dehmelta przy zastosowaniu pułapki jonowej. W tym kontekście należy zauważyć, że we wzorze (II.45) na wielkość a (s. 52) zamiast g powinno być 2, gdyż zgodnie z relacją podaną na końcu s. 51 $g \neq g_0 \neq 2$, a w relacji na wartość teoretyczną a_{QED} występującej przed wzorem (II.48) (s. 53) zamiast g lepiej byłoby wstawić g_0 w zgodzie z tym ostatnim wzorem, natomiast w ostatnich dwóch relacjach na końcu s. 53 zamiast g_0 powinna być wartość doświadczalna $g_{dośw}$.

Rozdział trzeci i ostatni prezentuje drugi z przedstawionych w książce rezonansów magnetycznych – jądrowy rezonans magnetyczny (NMR). Rozdział ten zawiera na 24 stronach aż dziewięć podrozdziałów napisanych w sposób zwięzły, ale precyzyjny. Lektura tego rozdziału pozwala nawet czytelnikowi o słabym przygotowaniu zrozumieć, na czym polega jądrowy rezonans magnetyczny i jakie są metody jego detekcji, dowiedzieć się, co to jest przesunięcie chemiczne i jak doniosłe jest znaczenie tego parametru w analizie chemicznej. Autorzy zapoznają też czytelnika z elementami teoretycznymi związanymi z opisem relaksacji spinowo-sieciowej (T_1) i spinowo-spinowej (T_2), z metodami doświadczalnymi wyznaczania czasów relaksacji T_1 oraz T_2 , wreszcie z zagadnieniem relaksacji w układzie wirującym ($T_{1\rho}$) i w oddziaływaniach dipolowych (T_{1D}). W dalszej kolejności można się dowiedzieć, jak zwiększyć zdolność rozdzielczą widm NMR w badaniach ciał stałych, stosując rotację próbki pod kątem magicznym lub przy użyciu odpowiednich sekwencji impulsów. Następnie książka przybliży metodę spektroskopii dwuwymiarowej (2D NMR). Omawiany rozdział kończą krótkie, choć treściwe informacje na temat zastosowania NMR-u do precyzyjnego wyznaczania wartości indukcji pola magnetycznego (magnetometria NMR) oraz tomografii (obrazowanie magnetyczne).

W części zatytułowanej „Zakończenie” Autorzy podkreślają znaczenie rezonansów magnetycznych dla rozwoju badań fizycznych, przypominając o licznych Nagrodach Nobla związanych z tymi rezonansami.

Godna podziwu jest ilość istotnych i pożytecznych wiadomości, które można znaleźć w tej książce o tak stosunkowo małej objętości. Książka jest doskonale opracowana pod względem dydaktycznym i może stanowić podręcznik zawierający świetne źródło wstępnych informacji na temat radiospektroskopii dla studentów fizyki, chemii, biologii i nauk pokrewnych (na kierunkach matematyczno-przyrodniczych, biofizyki, inżynierii materiałowej – specjalność biomateriały, biotechnologii), medycyny oraz wszystkich zainteresowanych badaniami w tej dziedzinie. Autorzy polecają także osobom zainteresowanym rozszerzeniem podanych w podręczniku wiadomości inne książki, zarówno podstawowe, jak i specjalistyczne. Podręcznik napisany jest bardzo przystępnym i barwnym językiem, co pozwala na łatwe przyswajanie jego treści, a wszystkie używane terminy są pieczołowicie definiowane. Książka jest przyjazna w codziennym użytkowaniu (małe rozmiary, miękkie okładki, podręcznik jest stosunkowo lekki, ładnie opracowany graficznie, bardzo przejrzysty), chociaż w następnych wydaniach mógłby być zastosowany lepszy papier.

Kazimierz Łątka
Instytut Fizyki
Uniwersytet Jagielloński

■ Krzysztof Rusek

Urodził się w 1950 r. w Białymstoku. Zainteresowanie fizyką zawdzięcza znakomitemu nauczycielowi tego przedmiotu w szkole średniej (XXIII LO w Suchowoli), Pawłowi Janoszukowi. W roku 1973 ukończył studia na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego ze specjalnością fizyka jądrowa i rozpoczął pracę w Instytucie Badań Jądrowych w Świerku. Promotorem jego pracy doktorskiej, poświęconej reakcjom jądrowym wywoływanym przez neutrony, obronionej w 1979 r., był prof. Jan Turkiewicz. W latach osiemdziesiątych przeniósł swe zainteresowania naukowe na reakcje z udziałem spolaryzowanych jąder atomowych. Współpracował z ośrodkami naukowymi w Heidelbergu, Birmingham i Tallahassee, w których istniały możliwości wykonywania prac doświadczalnych. Prowadzone tam badania przyczyniły się do wyjaśnienia roli spinu w badanych procesach. Było to tematem rozprawy, na podstawie której uzyskał stopień doktora habilitowanego w 1998 r. Tytuł naukowy otrzymał 21 grudnia 2007 r.



Obecnie zajmuje się badaniami procesów wywoływanych przez nietrwałe, lekkie jądra atomowe sztucznie wytwarzane w laboratorium. Nawiązał współpracę z fizykami z Grand Accélérateur National d'Ions Lourds w Caen, gdzie prowadzi większość badań doświadczalnych, oraz z fizykami z Universidad de Huelva. Niektóre z doświadczeń prowadzi w Środowiskowym Laboratorium Ciężkich Jonów UW, wykorzystując jedyny w Polsce cyklotron ciężkich jonów. Jest współautorem ok. 100 prac naukowych.

Był nauczycielem fizyki w LO im. Hugona Kołłątaja w Warszawie, prowadził zajęcia dydaktyczne ze studentami Politechniki Warszawskiej i Politechniki Białostockiej, a także Szkoły Głównej Gospodarstwa Wiejskiego.

Od ponad dziesięciu lat pełni funkcję kierownika Zakładu Reakcji Jądrowych Instytutu Problemów Jądrowych.

Jest ojcem dwóch córek. Interesuje się historią Prus Wschodnich. Najlepiej wypoczywa, żeglując po mazurskich jeziorach z przyjaciółmi.

■ Wojciech Wiślicki

Urodził się w 1958 r. w Warszawie. Odbił studia na Wydziale Fizyki UW (1977–82), a następnie studia doktoranckie w Instytucie Problemów Jądrowych im. Andrzeja Sołtana (1982–85) w zakresie doświadczalnej fizyki wysokich energii, kończąc je doktoratem z wyróżnieniem (promotor prof. Teodor Siemiarczuk). Habilitował się w roku 1998, a tytuł naukowy otrzymał 31 października 2007 r.



Fizykę cząstek uprawia w IPJ. Z jego wyników z lat dziewięćdziesiątych najwyżej oceniane jest pierwsze wyznaczenie wkładów kwarków walencyjnych i morza do spinu nukleonu. Najtrudniejszy doświadczalnie i technologicznie był pomiar bezpośredniego łamania parzystości przestrzenno-ładunkowej CP. Ten wynik ma duże znaczenie dla zrozumienia symetrii sił na poziomie fundamentalnym. Od 1998 r. pracuje w ICM UW nad zastosowaniami termodynamiki poza fizyką, np. do opisu modeli wyboru i gier, oraz nad modelowaniem takich układów. Jest zaangażowany w budowę gridów obliczeniowych, początkowo dla fizyki cząstek, później stosowanych w wielu innych dziedzinach. W przyszłości planuje badania nad fizyką spinową oraz, być może, nad efektami dekoherencji kwantowej. Aktualne pozostaje też jego zaangażowanie w modelowanie układów złożonych i w grid.

Wielokrotnie pracował za granicą, badając oddziaływanie relatywistycznych jonów (ZIBJ w Dubnej, 1982–89), interferencję pionów z oddziaływaniami jądrowymi (LBL w Berkeley i GSI w Darmstadtzie, 1987–90), strukturę spinową nukleonu (CERN, 1991–97 i od 2004), bezpośrednie łamanie symetrii CP w rozpadach kaonów (CERN, 1996–2004).

Ponadto interesuje się zastosowaniami nauk ścisłych do modelowania procesów społecznych, literaturą i kulturą fizyczną. Ma jednego syna.

■ Igor Kosacki

Urodził się w 1954 r. w Terespolu. Studiował na Uniwersytecie im. Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, specjalizując się w fizyce ciała stałego. Po ukończeniu studiów w 1978 r. rozpoczął pracę w Instytucie Fizyki PAN w Warszawie, gdzie w roku 1983 uzyskał stopień doktora (promotor prof. Jerzy M. Langer), a w 1991 r. doktora habilitowanego. Prezydent RP nadał mu tytuł profesora nauk fizycznych 21 grudnia 2007 r.

Od roku 1983 pracował na Politechnice Radomskiej. W latach 1990–92 odbył staż naukowy na Uniwersytecie Piotra i Marii Curie w Paryżu w laboratorium prof. Minko Balkanskiego, a następnie w Delft University of Technology w grupie prof. Joopa Schoonmana. W 1992 r. został zaproszony przez prof. Harry'ego Tullera do pracy w MIT. W latach 1995–2001 pracował na Uniwersytecie Missouri-Rolla w grupie prof. Harlana Andersona, a w latach 2001–06 w Oak Ridge National Laboratory. Od 2006 r. pracuje w Shell Oil Company.

Otrzymał nagrodę CRNS dla profesora wizytującego (2001), nagrodę Sekretarza Naukowego PAN, siedmiokrotnie nagrodę Rektora Politechniki Radomskiej oraz nagrodę dla najlepszego młodego naukowca, gdy w 1990 r. został najmłodszym profesorem tej uczelni.



Głównym obszarem jego zainteresowań naukowych jest fizyka ciała stałego, a zwłaszcza badania struktury i własności przewodników jonowych oraz ich zastosowań w nowych źródłach energii, takich jak ogniwa paliwowe, membrany jonowe oraz baterie elektryczne. Zajmuje się technologią oraz zjawiskami optycznymi i elektrycznymi w nanokrystalicznych przewodnikach jonów tlenu i wodoru. Jest autorem ponad 100 prac naukowych, 2 patentów i wielu referatów na prestiżowych konferencjach. Jego prace mają ponad 1200 cytowań w literaturze naukowej. Jest ekspertem NATO w programie Science for Peace i członkiem Forum Departamentu Energii USA ds. Paliwa Wodorowego. Utrzymuje intensywne kontakty z fizykami polskimi, m.in. z Warszawy, Gdańska, Lublina i Wrocławia.

Żonaty (z Anną), ma dwoje dzieci – Julian (1993) będzie znanym astrofizykiem, a Marysia (1998) wybitną primabaleriną. Jego pasją to praca i rodzina oraz wycieczki górskie, narciarstwo i muzyka.

■ Jan Dereziński

Urodził się w 1957 r. w Warszawie. W roku 1976 podjął studia na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. Pracę magisterską napisał w Katedrze Metod Matematycznych Fizyki, gdzie w 1980 r. rozpoczął pracę jako asystent.

W roku 1983 wyjechał do Stanów Zjednoczonych, gdzie podczas dwuletnich studiów doktoranckich na Virginia Tech w Blacksburgu napisał pod opieką prof. George'a Hagedorna rozprawę poświęconą teorii rozpraszania wielu ciał. Na początku lat dziewięćdziesiątych podał dowód asymptotycznej zupełności dla dowolnej liczby ciał i potencjałów dalekozasięgowych (do których należą fizycznie realistyczne potencjały kulombowskie), co oznaczało rozwiązanie jednego z najbardziej znanych matematycznych problemów otwartej mechaniki kwantowej. Praca ta była podstawą jego habilitacji na Wydziale Fizyki UW (1994). Różne aspekty teorii rozpraszania dla operatorów Schrödingera zostały zebrane w monografii *Scattering theory of classical and quantum N-particle systems*, napisanej przez niego wspólnie z Christianem Gérardem. Tytuł naukowy otrzymał 22 października 2007 r.



Do tematów jego ostatnich badań należą własności otwartych układów kwantowych, kwantowa teoria pola i fizyka nierównowagowa. We wszystkich tych dziedzinach zaawansowany język matematyczny, zwłaszcza oparty na analizie funkcjonalnej i algebrach operatorów, pozwala rzucić wiele światła na trudne i ważne problemy fizyki kwantowej. Jednocześnie fizyka prowadzi nieraz do odkrycia głębokich i eleganckich twierdzeń matematycznych.

Współpracuje ze wspomnianym C. Gérardem (Université Paris-Sud), V. Jakšićiem (McGill University w Montrealu), W. De Roeckiem (Uniwersytet w Leuven) i E. Skibstedem (Uniwersytet w Aarhus).

Na jego zainteresowania duży wpływ wywarło środowisko stworzonej przez prof. Krzysztofa Maurina Katedry MMF, zwłaszcza prof. Stanisław L. Woronowicz oraz Krzysztof Gawędzki (obecnie ENS Lyon).

Jest żonaty i ma jednego syna.

■ Aleksander Filip Żarnecki

Urodził się w 1964 r. w Warszawie. W roku 1983 podjął studia na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. Jeszcze w trakcie studiów rozpoczął pracę w ramach warszawskiej grupy współpracy ZEUS. Grupa ta podjęła się m.in. zaprojektowania, konstrukcji i instalacji tzw. kalorymetru uzupełniającego (BAC) dla detektora ZEUS przy akceleratorze HERA w Hamburgu. Problemowi pomiaru energii cząstek w układzie kalorymetrów detektora ZEUS poświęcona była zarówno jego praca magisterska (1987), jak i rozprawa doktorska (1992, promotor prof. Halina Abramowicz).

Od 1987 r. do dziś pracuje w Instytucie Fizyki Doświadczalnej WF UW, w Zakładzie Cząstek i Oddziaływań Fundamentalnych. W latach 1995–97 przebywał na stażu naukowym w ośrodku DESY w Hamburgu, gdzie m.in. pełnił funkcję koordynatora jednej z grup prowadzących analizę danych współpracy ZEUS. Analiza tych danych oraz innych dostępnych danych doświadczalnych w ramach modelu sprzężeń punktowych stanowiła podstawę jego rozprawy habilitacyjnej (1999), za którą otrzymał Nagrodę Prezesa Rady Ministrów (2002). Analizę kolejnych danych współpracy ZEUS pod kątem poszukiwania „nowej fizyki” kontynuuje do chwili obecnej.



Od roku 1999 uczestniczy w pracach nad przygotowaniem projektu i programu fizycznego dla przyszłego akceleratora liniowego e^+e^- (ILC). Głównym tematem jego prac była możliwość precyzyjnego pomiaru własności cząstki (lub cząstek) Higgsa w przyszłym zderzaczach fotonowym przy ILC. Badał możliwość pomiaru sprzężeń tej cząstki w ramach różnych modeli, w tym modeli z łamaniem symetrii CP w sektorze Higgsa. Oprócz tego zajmował się problemem tła oraz parametryzacją rozkładu energii zderzających się fotonów.

Od roku 2006 uczestniczy w pracach związanych z projektem tzw. detektora wierzchołka dla ILC w ramach europejskiej współpracy EUNET. Bierze też udział w polskim projekcie astrofizycznym „Pi of the Sky”. Tytuł naukowy otrzymał 21 grudnia 2007 r.

■ Janusz Andrzej Zabierowski

Urodził się w 1944 r. w Gorlicach, a od 1948 r. mieszka na stałe w Łodzi. Ciekawość praw natury łączyła się u niego z chęcią poznania metod, jakimi wydzieramy przyrodzie jej tajemnice. Doświadczenia fizyczne i związane z nimi instrumentarium interesowały go od czasów szkolnych. Ku niezadowoleniu swojego nauczyciela fizyki, wybrał elektronikę. Po pierwszym roku na politechnice wyjechał kontynuować studia w Moskwie jako stypendysta państwowy. Uważa, że miał szczęście. W radzieckiej uczelni oprócz projektowania skomplikowanych urządzeń elektronicznych poznał gruntownie podstawy fizyki. I tak rozpoczął się ów mariaż fizyki i elektroniki, któremu jest wierny do dzisiaj.



Magisterium uzyskał w Dubnej w 1968 r. za pracę dotyczącą elektroniki do poszukiwania kwarków swobodnych, po czym podjął pracę w Łódzkim Ośrodku Promieniowania Kosmicznego, do 1981 r. w ramach Uniwersytetu Łódzkiego, potem Instytutu Badań Jądrowych i jego następcy – Instytutu Problemów Jądrowych, gdzie pracuje do dzisiaj. Zbudowana przez niego aparatura do badania wielkich pęków stała się podstawą uzyskania w 1976 r. w IBJ stopnia doktora nauk technicznych (promotor prof. Józef Kosacki). Fizyką promieniowania kosmicznego zajmuje się do dziś – badał wielkie pęki w Łodzi, a od 1989 r. w eksperymencie KASCADE w Karlsruhe.

Jednocześnie od 1987 r. rozwiązywał problemy aparaturowe przy badaniu produkcji i rozpadów mezonów lekkich przy akceleratorze CELSIUS w Uppsali w ramach Współpracy WASA. Osiągnięte wyniki pozwoliły mu uzyskać stopień doktora habilitowanego nauk fizycznych w zakresie fizyki wysokich energii (1999). Obecnie kieruje polską grupą w międzynarodowych eksperymentach KASCADE-Grande (następca KASCADE) i LOPES (radiowy pomiar wielkich pęków) oraz uczestniczy w projekcie WASA@COSY w Jülich (kontynuacja eksperymentu z Uppsali). 21 grudnia 2007 r. Prezydent RP nadał mu tytuł naukowy profesora nauk fizycznych.

Dorobek pozanaukowy to dwóch synów – inżynierów informatyków (jeden po doktoracie) oraz przekłady kilku książek. Zainteresowania, na które często brak czasu, to turystyka, żeglarsstwo, muzyka, literatura.

■ Marcin Mierzejewski

Urodził się w 1973 r. w Jaworznie. W roku 1993 ukończył studia magisterskie na Wydziale Matematyki, Fizyki i Chemii Uniwersytetu Śląskiego. W latach 1991–93 studiował fizykę teoretyczną pod kierunkiem prof. Janusza Zielińskiego, który kierował jego edukacją przez wiele kolejnych lat. W 1996 r. obronił rozprawę doktorską „Nadprzewodnictwo w silnie skorelowanych układach elektron–fonon” (promotor prof. Janusz Zieliński), za którą rok później otrzymał Nagrodę Prezesa Rady Ministrów.

W 1997 r. został stypendystą Fundacji na rzecz Nauki Polskiej. W roku 1999 zakończył przygotowanie rozprawy habilitacyjnej „Model Hubbarda w zastosowaniu do opisu wysokotemperaturowego nadprzewodnictwa. Korelacje i geometria układu”. Kolokwium habilitacyjne odbyło się w 1999 r. na Uniwersytecie Śląskim. 22 października 2007 r. Prezydent RP nadał mu tytuł naukowy profesora nauk fizycznych.



Od roku 1996 pracuje na Uniwersytecie Śląskim. W ramach współpracy naukowej wielokrotnie przebywał na Uniwersytecie w Duisburgu (w tym dwukrotnie jako stypendysta DAAD), w Zjednoczonym Instytucie Badań Jądrowych w Dubnej, a w 2006 r. w Międzynarodowym Centrum Badawczym Fizyki Ciała Stałego w Brazylii.

Jego dotychczasowe zainteresowania naukowe koncentrowały się w znacznej części wokół zagadnień związanych z teorią nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego. Najważniejsze prace dotyczą oddziaływania elektron–fonon w układach silnie skorelowanych elektronów, nadprzewodników warstwowych w obecności pola magnetycznego (struktura wirów nadprzewodzących, górne pole krytyczne) oraz nadprzewodnictwa w układach niejednorodnych. Od kilku lat prowadzi także badania teoretyczne dotyczące prądów transportowych i prądów trwałych w nanoukładach. Wypromował troje doktorów.

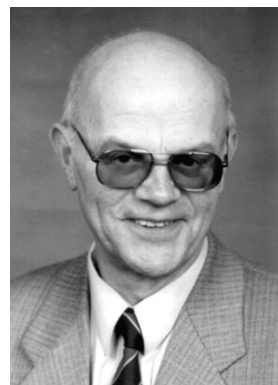
Jego zainteresowanie pozanaukowe to narty, góry, fotografia.

■ Jan Hanasz

Urodził się w 1934 r. w Poznaniu. W roku 1955 uzyskał magisterium z astronomii na Uniwersytecie Mikołaja Kopernika i rozpoczął pracę w Toruńskiej Pracowni Zakładu Astronomii PAN (przekształconego w 1976 r. w Centrum Astronomiczne im. Mikołaja Kopernika PAN), gdzie współtworzył powstającą w Toruniu grupę radioastronomiczną. W roku 1963 uzyskał doktorat nauk matematyczno-fizycznych na podstawie rozprawy „Pomiary i analiza pasma międzygwiazdowego 4430 Å” (promotor prof. Wilhelmina Iwanowska).

W latach 1964–66 odbył podoktorski staż naukowy na Wydziale Radiofizyki CSIRO w Sydney. Jego badania obejmują radioastronomię Słońca i Ziemi oraz fizykę przestrzeni kosmicznej. W latach siedemdziesiątych koordynował pierwszy polski eksperyment kosmiczny na sztucznym satelicie Ziemi (Interkosmos-Kopernik 500). Jego habilitacja (na UMK) w 1980 r. była podsumowaniem wyników badań wybuchów promieniowania słonecznego i szumów jonosferycznych w zakresie od 0,5 do 6 MHz, uzyskanych podczas tego eksperymentu.

W latach 1981–85 był kierownikiem Toruńskiej Pracowni Astrofizyki CAMK. W czasie stanu wojennego współtworzył podziemne radio i telewizję „Solidarność” w Toruniu. W 1985 r. aresztowany i pozbawiony stanowiska docenta na kilka lat. Od 1994 r. pracuje w Centrum Badań Kosmicznych PAN. W latach dziewięćdziesiątych kierował polskim eksperymentem kosmicznym Polrad (na satelicie Interball) polegającym na pomiarach widm i polaryzacji zorzowego promieniowania kilometrowego Ziemi. Tytuł naukowy otrzymał 22 października 2007 r.



Wypromował jednego doktora. Prowadził na UMK wykłady monograficzne z fizyki plazmy kosmicznej. Jest autorem lub współautorem około 90 publikacji naukowych i doniesień konferencyjnych. Jest członkiem Międzynarodowej Unii Astronomicznej (IAU), Amerykańskiej Unii Geofizycznej (AGU), Europejskiej Unii Nauk o Ziemi, Komisji D COSPAR, Polskiego Towarzystwa Astronomicznego oraz Komitetu Badań Kosmicznych i Satelitarnych PAN.

Wyróżniony nagrodą Wydziału III PAN (1973), wspólną nagrodą PAN i AN ZSRR (1982), Medalem M.B. Kiełdysza Federacji Kosmonautyki Rosji (1999) oraz Krzyżem Kawalerskim Orderu Odrodzenia Polski (2000).

■ Tytuły profesorskie

31 stycznia 2008 r. Prezydent Rzeczypospolitej Polskiej nadał tytuł naukowy profesora nauk fizycznych Piotrowi Bogusławskiemu (IF PAN) i Leszkowi Meissnerowi (UMK).

<http://isip.sejm.gov.pl>

■ Maciej Kolwas będzie prezesem EPS

29 marca 2008 r. odbyły się w Miluzie wybory następnego prezesa Europejskiego Towarzystwa Fizycznego. Komitet Wykonawczy EPS nominował na to stanowisko dwóch kandydatów: prof. Giorgia Benedeka (Uniwersytet Milano–Bicocca) i prof. Macieja Kolwasa (Instytut Fizyki PAN). Zarząd EPS, składający się z prezesów towarzystw krajowych oraz kierowników Sekcji, stosunkiem głosów 44:36 wybrał na przyszłego prezesa Towarzystwa Macieja Kolwasa.



Maciej Kolwas

Europejskie Towarzystwo Fizyczne zostało założone w roku 1968. Zrzesza ponad 100 tys. fizyków – członków 40 towarzystw krajowych, w tym ok. 2 tys. członków założonego w 1920 r. Polskiego Towarzystwa Fizycznego. W roku 2005 EPS było organizatorem Światowego Roku Fizyki. Towarzystwo przyznaje wiele ważnych nagród.

Maciej Kolwas przez najbliższy rok będzie prezesem-elektem i wiceprezesem EPS, a po upływie roku obejmie na okres dwóch lat funkcję prezesa Towarzystwa. Zgodnie ze statutem EPS, prezes wybierany jest tylko na jedną kadencję i po jej zakończeniu nie może być powtórnie wybrany na to stanowisko.

■ Philippe Lebrun doktorem h.c. Politechniki Wrocławskiej

2 października 2007 r., podczas inauguracji roku akademickiego 2007/08, Politechnika Wrocławska nadała tytuł

doktora honoris causa francuskiemu fizykowi i inżynierowi Philippe'owi Lebrun.

Philippe Lebrun urodził się w Hautmont (Francja) 28 grudnia 1951 r. W roku 1973 ukończył studia techniczne w Ecole Nationale Supérieure des Mines w Paryżu, a rok później studia magisterskie w California Institute of Technology. W roku 1974 rozpoczął pracę w Europejskim Ośrodku Badań Jądrowych CERN w Genewie, gdzie uczestniczył w projektowaniu, budowie, uruchomieniu i eksploatacji akceleratora LEP. Obecnie jest dyrektorem Departamentu Technologii Akceleratorowych w CERN-ie, odpowiedzialnego za projekt, budowę, uruchomienie i przyszłą eksploatację zderzacza hadronów LHC. Ponadto przewodniczy pracom International Cryogenic Engineering Committee, jest przewodniczącym komisji A1 (Cryophysics and Cryoengineering) Międzynarodowego Instytutu Chłodziarstwa, członkiem komitetu redakcyjnego czasopisma *Cryogenics*. Ma ponad 100 publikacji z dziedziny niskich temperatur i nadprzewodnictwa stosowanego.



Philippe Lebrun przyjmuje gratulacje od rektora Politechniki Wrocławskiej, prof. Tadeusza Lutego; z prawej promotor, prof. Maciej Chorowski

Nowy doktor honorowy PWr uchodzi za najlepszego na świecie specjalistę w dziedzinie kriogeniki helowej, w szczególności stosowanej w laboratoriach fizyki wysokich energii do konstrukcji akceleratorów nadprzewodnikowych. Jest autorem oryginalnej koncepcji systemu kriogenicznego dla zderzacza LHC w CERN-ie. Akcelerator ten o długości ok. 30 km będzie utrzymywany w temperaturze 1,8 K przez zanurzenie prawie 2000 magnesów nadprzewodnikowych w nadciekłym helu znajdującym się pod ciśnieniem atmosferycznym. Hel będzie skraplany w 4 skraplarkach, z których każda ma rozwijać równoważną moc chłodniczą 18 kW przy temperaturze 4,2 K. Wykorzystanie na taką skalę nadciekłego helu wymagało zaprojektowania i wykonania urządzeń zupełnie nowego typu, których parametry techniczne muszą odpowiadać wymaganiom wynikającym z fizycznych własności nadciekłego helu, a jednocześnie – ze względu na skalę akceleratora LHC – wytwarzanych w warunkach przemysłowych. W szczególności

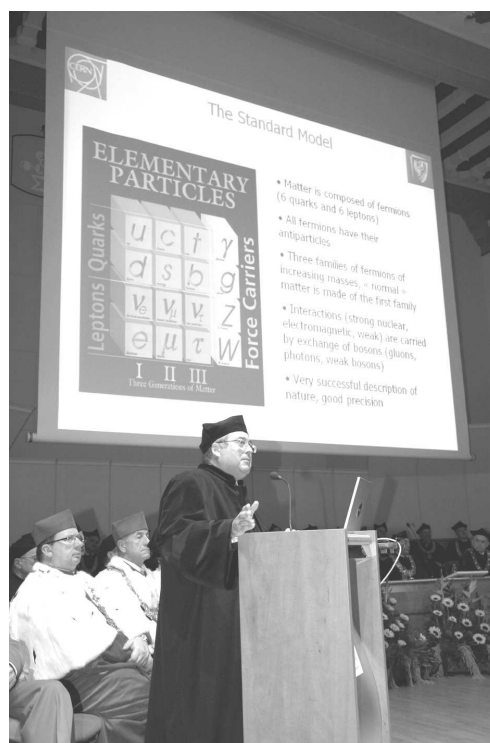
ści dotyczyło to ponad 1200 magnesów dipolowych o długości 15 m każdy, 400 magnesów kwadrupolowych, kilkudziesięciu kilometrów złożonych linii kriogenicznych, doprowadzeń prądowych o dopuszczalnym natężeniu 13 kA wykonanych z nadprzewodników wysokotemperaturowych. O skali akceleratora LHC świadczy fakt, że w trakcie budowy magnesów akceleratora światowa produkcja nadprzewodnika NbTi uległa podwojeniu, a jego utrzymywanie w niskiej temperaturze wymaga ponad stu ton helu.

Lebrun doprowadził do wdrożenia do przemysłowej produkcji prototypowych rozwiązań technicznych i stworzył system współpracy dużego laboratorium badawczego, jakim jest CERN, z europejskim przemysłem. Dzięki temu przemysł uzyskał dostęp do nowych technologii opracowanych na potrzeby laboratoriów fizycznych i rozwinął zdolności wytwarzania na dużą skalę takich urządzeń, jak magnesy nadprzewodnikowe działające w temperaturze nadciekłego helu, turbiny pracujące w tych warunkach, tzw. zimne kompresory, czy wielokilometrowe linie rozpraszania He II wraz z osprzętem. Przykładowym skutkiem doświadczeń wynikających ze współpracy CERN-u z przemysłem europejskim jest decyzja o lokalizacji budowy prototypowego nadprzewodnikowego reaktora syntezy wysokotemperaturowej ITER w Cadarache we Francji (patrz artykuł A. Gałkowskiego w tym zeszycie, s. 102 – red.). Reaktor ten będzie wykorzystywał podobne rozwiązania techniczne układów kriogenicznych jak te opracowane w CERN-ie i wyprodukowane przez przemysł europejski. Budowa ITER-a również dla polskich ośrodków badawczych stanowi szansę włączenia się w działania mogące doprowadzić do określenia przyszłych metod wytwarzania energii elektrycznej.

Philippe Lebrun często uczestniczy z głosem decydującym w pracach zespołów wytyczających zadania i koncepcje nowych międzynarodowych projektów badawczych wykorzystujących kriogeniczność i nadprzewodnictwo. Obecnie przygotowywane są założenia akceleratorów ILC (International Linear Collider) oraz CLIC (Compact Linear Collider) mających zapewnić wyjście fizyki wysokich energii poza zakres przewidywany do uzyskania w LHC. Podobnie, kriogenika i nadprzewodnictwo będą stanowiły niezbędne technologie w rentgenowskim laserze na swobodnych elektronach XFEL (X-ray Free-Electron Laser, FLASH) projektowanym obecnie w DESY w Hamburgu czy akceleratorze ciężkich jonów FAIR (Facility for Antiproton and Ion Research, GSI, Darmstadt). Wszystkie te projekty o wielomiliardowych budżetach stanowią rynek otwarty również dla polskich instytucji badawczych i naszego przemysłu.

Lebrun jest jedną z tych osób w Europie, które mają istotny wpływ na kierunki rozwoju technologii, szczególnie poprzez współpracę międzynarodową oraz europejskie organizacje naukowe. Dąży do rzeczywistego rozszerzenia tej współpracy na nowe kraje Unii Europejskiej. Od czasu przystąpienia Polski do CERN-u w roku 1991 stał się gorącym orędownikiem zaangażowania polskiego przemysłu w budowę akceleratorów oraz doprowadził do rzeczywistego włączenia się do niej w CERN-ie polskich inżynierów, w tym z Politechniki Wrocławskiej. W roku 1998 z jego

inicjatywy została podpisana umowa o współpracy między CERN-em a Wydziałem Mechaniczno-Energetycznym PWr, w której wyniku w tej uczelni prowadzone są badania na rzecz tego ośrodka, a dyplomanci, doktoranci i pracownicy Politechniki wykonują prace na terenie CERN-u. Skutkiem tej współpracy są trzy doktoraty, rozprawa habilitacyjna, kilka prac magisterskich i liczne publikacje. Wyniki prac badawczych są wdrażane przy budowie oraz uruchamianiu akceleratora LHC, często przy bezpośrednim udziale polskich przedsiębiorstw. W ten sposób Philippe Lebrun współtworzy podwaliny polskich technologii niskotemperaturowych, a w przyszłości być może polskiego przemysłu kriogenicznego.



Wykład inauguracyjny podczas rozpoczęcia roku akademickiego 2007/08 na Politechnice Wrocławskiej, „Advanced technology from and for basic science: superconductivity and superfluid helium at the Large Hadron Collider”, był równocześnie wystąpieniem doktora honoris causa Philippe’a Lebrun

Promotorem honorowego doktora Politechniki Wrocławskiej był prof. Maciej Chorowski, dziekan Wydziału Mechaniczno-Energetycznego, a recenzentami – prof. Krzysztof Meissner z Uniwersytetu Warszawskiego oraz prof. Hans Quack z Politechniki w Dreźnie. Uroczystości przewodniczył prof. Tadeusz Luty, rektor PWr.

Maciej Chorowski, Bernard Jancewicz

■ COPERNICUS

Fundacja na rzecz Nauki Polskiej oraz Deutsche Forschungsgemeinschaft razem przyznają co dwa lata nagrodę COPERNICUS w uznaniu wspólnie prowadzonych badań. W roku 2008 Nagrodę otrzymali Andrzej Sobolewski (IF PAN) i Wolfgang Domcke (Politechnika Monachijska).

Zostali oni wyróżnieni za wybitne osiągnięcia naukowe będące owocem trwającej ponad 20 lat współpracy w dziedzinie fotochemii. Uzyskane przez nich wyniki mają fundamentalne znaczenie dla nauki o życiu. Obszerniej o pracach Sobolewskiego pisał Jacek Waluk z okazji Nagrody FNP 2007 (*PF 59*, zeszyt 2 (2008)).



Wolfgang Domcke i Andrzej Sobolewski

Laureatów wyróżniono również za wspólne działanie wspierające rozwój młodych naukowców obu krajów. Nagroda wynosi 50 tys. euro (po 25 tys. dla każdego z wyróżnionych).

www.fnp.org.pl

B. W.

■ Stypendia FNP dla młodych

Fundacja na rzecz Nauki Polskiej w swoim programie START jak co roku przyznała stypendia młodym naukowcom, którzy nie przekroczyli 30. roku życia i są pracownikami lub doktorantami wyższej uczelni albo instytucji prowadzącej badania naukowe oraz mają dorobek naukowy udokumentowany publikacjami w uznanych czasopiśmie. Na podstawie konkursu stypendia roczne w wysokości 24 tys. złotych przyznano 118 osobom, wśród nich 10 fizykom oraz biofizykowi i geofizykowi.

Fizycy to: Ravindra Witold Chhajlany (UAM), Witold Jacak (PWr), Kamil Kamiński (UŚ), Dariusz Kędziera (UMK), Łukasz Machura (UŚ), Krzysztof Miernik (UW), Marcin Motyka (PWr), Katarzyna Oźga (PCz), Sebastian Sapeta (UJ) oraz Anna Szkulmowska (UMK); biofizyk – Łukasz Kniżewski (UW); geofizyk – Adam Piotrowski (Instytut Geofizyki PAN).

Uroczyste rozdanie dyplomów odbyło się 26 kwietnia 2008 r. na Zamku Królewskim w Warszawie. Gratulujemy i życzymy dalszych interesujących wyników.

www.fnp.org.pl

B. W.

■ Kostka Lodu

IceCube (Kostka Lodu) to nazwa obserwatorium neutronów, które jest w budowie koło bieguna południowego. Jest to przedsięwzięcie w zasadzie międzynarodowe – głównie

amerykańskie, ale ze znacznym wkładem (nie tylko finansowym) Belgii, Holandii, Japonii, Niemiec, Nowej Zelandii, Szwajcarii i Szwecji. Miejsce, choć tworzące tak niesprzyjające warunki pracy, zostało tam właśnie wybrane, gdyż lód antarktyczny jest wyjątkowej czystości, bez domieszek promieniotwórczych, a przy tym bardzo zwarty i przezroczysty.

Za pomocą strumienia gorącej wody w lodzie drąży się otwory do głębokości 1500–2500 metrów. W nich opuszcza się sznury składające się z kilkudziesięciu fotopowielaczy. Służą one jako detektory promieniowania Czerenkowa cząstek naładowanych powstających w oddziaływaniu neutronów z lodem. Sygnały z detektorów są przesyłane na powierzchnię do układu zbierania danych. Ze względu na warunki klimatyczne (w czasie antarktycznego „lata” najwyższa temperatura nie przekracza na ogół $-13\text{ }^{\circ}\text{C}$, w okresie zimy spada nieraz do $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$) prace nad budową szybów można prowadzić tylko przez parę miesięcy w roku. Organizatorzy spodziewają się zakończenia robót do roku 2011. Za pomocą urządzenia IceCube będą prowadzone poszukiwania cząstek supersymetrycznych oraz defektów topologicznych powstałych we wczesnym Wszechświecie. Możliwa będzie detekcja neutronów w zakresie energii 10^{11} – 10^{21} eV.

CERN Courier 48, nr 2 (2008)

B. W.



Dlaczego kostki lodu wyjęte z zamrażalnika są wklęsłe, można się dowiedzieć ze strony www.discovery.com/area/skinnyon/skinnyon970509/skinny1.html

■ Grafen w FET-ach?

O nadzwyczajnych własnościach grafenu, czyli pojedynczej warstwy grafitu, można się dziś dowiedzieć z wielu artykułów (patrz np. *PF 58*, 250 (2007)). Ze względu na ogromną ruchliwość nośników w grafenie wydaje się, że jest to świetny kandydat do wytwarzania tranzystorów polowych (FET-ów). Realizację tego pomysłu utrudniają bardzo małe rozmiary grafenów. Grupa fizyków z Uniwersytetu Princeton, kierowana przez Stephena Chou, opracowała przyrząd pozwalający przenosić płatki grafenu i układać je na podłożu płytek krzemowych. Urządzenie jest obecnie w fazie laboratoryjnej, ale może uda się je tak skonstruować, by zapewnić możliwości szerszej produkcji grafenu.

Fizyka J. 7, nr 2 (2008)

B. W.

POSTĘPY FIZYKI W INTERNECIE

Zapraszamy do odwiedzania naszej strony internetowej <http://postepy.fuw.edu.pl>, gdzie można znaleźć:

- ▶ archiwum zawierające spisy treści *PF* z lat 1949–92 oraz szczegółowe spisy treści wszystkich zeszytów wydanych od 1993 r.
- ▶ materiały dodatkowe, uzupełniające treść niektórych artykułów
- ▶ materiały XXXV Zjazdu Fizyków Polskich (Białystok, 1999 r.) i XXXVI Zjazdu Fizyków Polskich (Toruń, 2001 r.)
- ▶ WYBRANE ARTYKUŁY W FORMACIE PDF, w tym:
 - wykłady noblowskie z lat 2001–06
 - zamieszczone w *Postęпах Fizyki* teksty wykładów na XXXVII Zjeździe Fizyków Polskich (Gdańsk, 2003 r.) i XXXVIII Zjeździe Fizyków Polskich (Warszawa, 2005 r.)

WKRÓTCE W POSTĘPACH

- *John Barrow o naszym miejscu we Wszechświecie*



John Barrow i Mariusz P. Dąbrowski (tłumacz wykładu)

- *Jerzy Kijowski o tym, czy czarne dziury są obiektami odkrytymi w przyrodzie, czy wymyślonymi przez człowieka*
- *Lidia Smentek o schematach Jabłońskiego*
- *Wspomnienia o Aleksandrze Łempickim i Jerzym Prochorowie*

PRENUMERATA

Postępy Fizyki można zaprenumerować w jeden z następujących sposobów.

- ▶ PRZEZ ODDZIAŁY PTF (tylko prenumerata krajowa dla członków PTF i studentów):

Cena rocznej prenumeraty krajowej w 2008 r. wynosi 48 zł. Dostawa *Postępów* odbywa się za pośrednictwem Oddziałów.

- ▶ PRZEZ ZARZĄD GŁÓWNY PTF (tylko prenumerata krajowa):

Wpłaty należy dokonać na konto Zarządu Głównego PTF: 19 1020 1097 0000 7802 0001 3128 (PKO BP IX O/Warszawa) lub w Biurze Zarządu Głównego PTF.

Cena rocznej prenumeraty krajowej w 2008 r. wynosi 60 zł. Dostawa *Postępów Fizyki* następuje drogą pocztową pod wskazany adres.

- ▶ PRZEZ PRZEDSIĘBIORSTWA KOLPORTAŻU PRASY:

RUCH (<http://www.prenumerata.ruch.com.pl>)

KOLPORTER (<http://sa.kolporter.com.pl>)

GARMOND PRESS (<http://www.garmond.com.pl>)

Cena rocznej prenumeraty krajowej w 2008 r. wynosi 72 zł.

Prenumerata ze zleceniem dostawy za granicę – patrz <http://www.ruch.pol.pl>.

Dostępne są również zeszyty archiwalne – prosimy o kontakt z redakcją.

INFORMACJE DLA AUTORÓW

Artykuły powinny mieć charakter przeglądowy i być przystępne dla ogółu fizyków. Prace należy nadsyłać pod adresem redakcji. O przyjęciu pracy do druku decyduje komitet redakcyjny. Prac niezamówionych i niezakwalifikowanych do druku redakcja nie zwraca. Bardziej szczegółowe informacje na temat układu i sposobu przygotowania pracy znajdują się na stronie internetowej *Postępów Fizyki*.

REKLAMA W POSTĘPACH FIZYKI

Zapraszamy – szczególnie przedstawicieli producentów aparatury oraz sprzętu i oprogramowania komputerowego, wydawców podręczników i książek naukowych oraz popularnonaukowych – do zamieszczania ogłoszeń reklamowych w *Postęпах Fizyki*. Nasze czasopismo dociera do większości polskich fizyków, z których wielu decyduje o bieżących zakupach uczelni, instytutów i szkół. Zainteresowanych prosimy o kontakt z redakcją pod adresem: postepy@fuw.edu.pl.

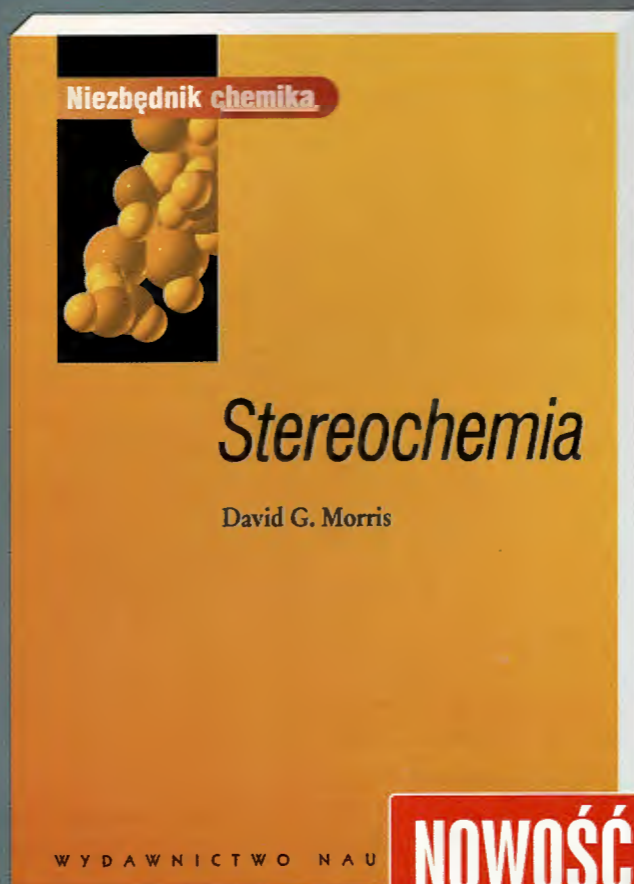
POSTĘPY FIZYKI (ADVANCES IN PHYSICS)

Founded in 1949, published bimonthly in Polish with titles in English by the Polish Physical Society with a support of the Ministry of Science and Higher Education and the Physics Faculty of the Warsaw University.

INFORMATION FOR SUBSCRIBERS

A subscription order can be sent through the local press distributor or directly to „RUCH” S.A. Oddział Krajowej Dystrybucji Prasy, ul. Jana Kazimierza 31/33, skrytka pocztowa 12, 00-958 Warszawa, Poland (for details see <http://www.ruch.pol.pl>).

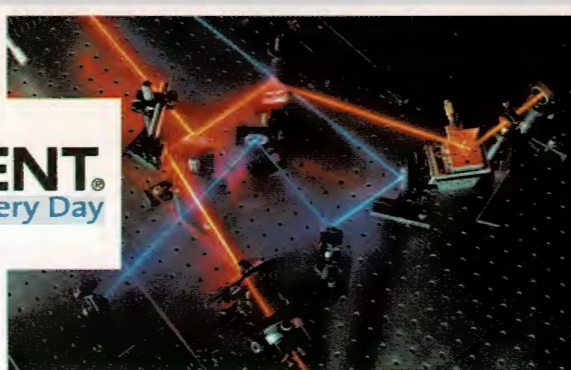
Nowości z *Niezbędnika chemika*



Książki z serii **Niezbędnik chemika** zawierają najważniejsze informacje dotyczące omawianej dziedziny chemii. Prezentują wiadomości w bardzo przyjaznej i ułatwiającej zapamiętanie formie. Liczne przykłady oraz pytania na końcu rozdziałów pomagają utrwalić materiał i szybko go powtórzyć. **Niezbędnik chemika** stanowi świetne uzupełnienie obszernych podręczników.

 WYDAWNICTWO NAUKOWE PWN

Zamów przez telefon: **0 801 33 33 88** (0,35 zł za 3 minuty) • Zamów przez Internet: **www.pwn.pl**

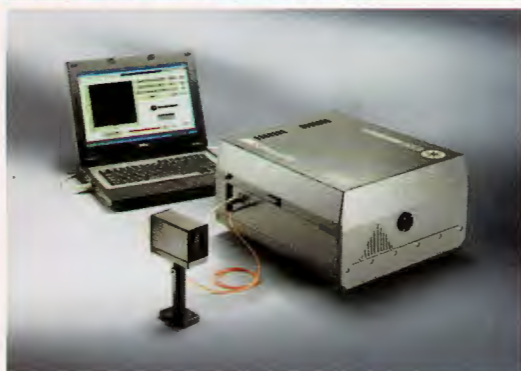
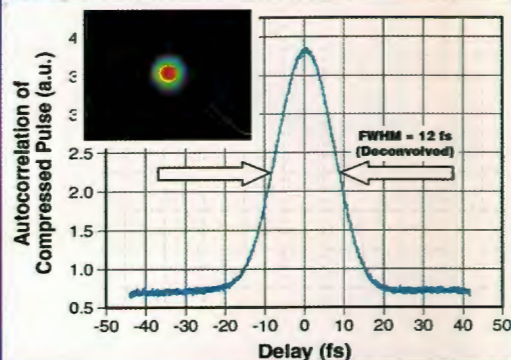


Łatwe w obsłudze
lasery
i akcesoria do badań
zjawisk ultrakrótkich



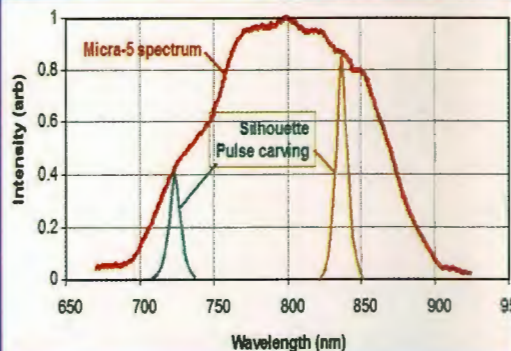
Mantis™ jednobrytowy oscylator femtosekundowy

- szerokie pasmo (>70 nm)
- zintegrowany laser pompujący OPSP¹
- rezonator z lustrami fazowymi



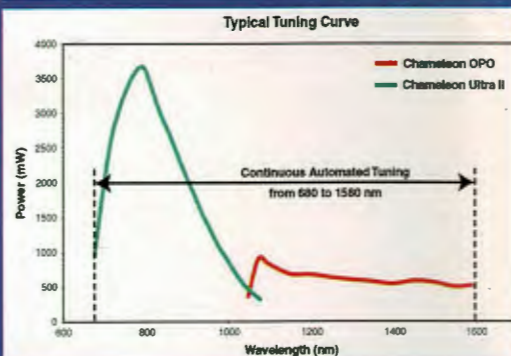
Silhouette™ Modulator amplitudy i fazy

- aktywnie kontroluje kształt i pasmo impulsu
- "wycina" spektralne fragmenty pasma
- umożliwia pracę "wielokolorową"
- zastosowania: m.in. CARS, MPE, mieszanie wiązek



Chameleon™ / OPO jednobrytowy oscylator femtosekundowy i synchronicznie pompowane OPO

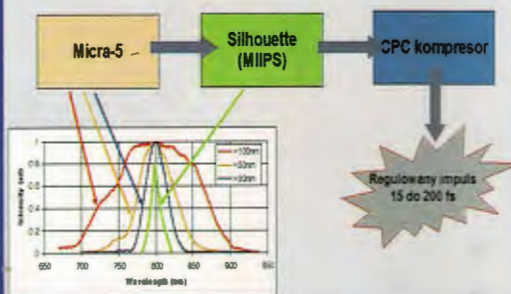
- ciągłe, automatyczne strojenie 680-1580 nm (idler: 1600-3300 nm)
- konfiguracje VIS lub IR
- Duża moc wyjściowa: >3.5 W oscylator, >700 mW OPO



CPC™ Kompresor impulsów

- zwarta konstrukcja na lustrach fazowych
- kontrola GDD od -440 do = 2640 fs²
- w połączeniu z szerokopasmowym oscylatorem i Silhouette zmienia szerokość impulsu od ~10 do 200 fs

Formowanie kształtu ultrakrótkiego impulsu
z wykorzystaniem modulacji amplitudy i fazy oraz kompresji



¹ OPSP - pompowana optycznie dioda laserowa z podwajaniem częstości. Ekonomiczna alternatywa dla pompowanych diodami laserów na ciele stałym.