

2 lutego 2017

dr hab. Jacek Kobus
Instytut Fizyki
Uniwersytet Mikołaja Kopernika
w Toruniu

Ocena pracy doktorskiej mgr Ewy Węder pt.

*Diagnostyka plazmy generowanej różnymi metodami
na podstawie struktur charakterystycznych linii
rentgenowskich metali*

Spektroskopia rentgenowska to źródło cennych informacji o strukturze ciał stałych (krystalicznych i polimorficznych) oraz atomów i molekuł, a także ich otoczenia chemicznego. Promieniowanie rentgenowskie jest emitowane także przez plazmę nisko i wysokotemperaturową, w tym plazmę powstającą w czasie silnych wyładowań elektrycznych w urządzeniach do badania reakcji termojądrowych, czy naświetlania gazu silnymi wiązkami laserowymi. Położenie i kształt linii widmowych mogą dostarczać także informacji o parametrach plazmy, pod warunkiem wszakże, że jesteśmy w stanie te widma prawidłowo zinterpretować. To zaś wymaga dysponowania odpowiednio zaawansowanymi metodami teoretycznego opisu nie tylko struktury energetycznej samych atomów, ale procesów zderzeniowych pomiędzy jonami oraz wysokoenergetycznymi elektronami i ich oddziaływaniem z wysokoenergetycznym promieniowaniem.

W ciągu ostatnich 30 lat nastąpił znaczny postęp w rozumieniu tych procesów dzięki opracowywaniu nowych lub udoskonalaniu istniejących metod teoretycznego opisu zjawisk warunkujących powstawanie promieniowania rentgenowskiego oraz nagromadzeniu obszernego materiału doświadczalnego. Od ponad dwóch dekad prof. Marek Polasik wraz z grupą współpracowników zajmuje się

teoretycznym opisem widm rentgenowskich powstających w procesach zderzeniowych. Badania te są prowadzone w ścisłej współpracy z kilkoma grupami doświadczalników, którzy dostarczają widma rentgenowskie wysokiej rozdzielczości i chcieliby, w oparciu o te widma, poznać warunki panujące w plazmie.

Do wyznaczania struktury elektronowej układów i prawdopodobieństw przejść radiacyjnych wykorzystuje się przede wszystkim wielokonfiguracyjną metodę Diraca-Focka (MCDF). Okazuje się bowiem, że poprawna analiza danych doświadczalnych wymaga wyznaczania stanów atomowych z uwzględnieniem efektów relatywistycznych oraz poprawek promienistych (energii własnej elektronu oraz polaryzacji próżni), a także prawidłowego uwzględnienia efektów związanych z korelacją elektronową. Z kolei opis procesów promienistego i zderzeniowego wzbudzania oraz jonizacji atomów i jonów w plazmie, a także towarzyszących im procesów odwrotnych wymaga tworzenia bardzo złożonych modeli tych procesów i budowy odpowiednich programów komputerowych. Te teoretyczne narzędzia zostały w ostatnich kilku dekadach opracowane i są powszechnie dostępne. Problem polega na ich umiejętnym wykorzystaniu, co nie jest łatwe, gdyż wymaga dogłębnej znajomości szeregu skomplikowanych zjawisk i procesów fizycznych oraz umiejętności posługiwania się skomplikowanymi programami komputerowymi.

Praca doktorska mgr Ewy Węder wpisuje się w tę tematykę i dotyczy przede wszystkim teoretycznych badań nad wpływem zrywania elektronów z zewnętrznych powłok na przesunięcie i kształt poszczególnych linii K, L i M charakterystycznego promieniowania rentgenowskiego ciężkich pierwiastków, w tym metali d- i f-elektronowych, oraz modelowania widm rentgenowskich tych pierwiastków wytwarzanych przez plazmę nisko- i wysokotemperaturową. Badania te pozwalają na uzyskanie dokładnych informacji o parametrach plazmy takich, jak stopień jonizacji, temperatura i gęstość elektronowa, poziom zanieczyszczeń. Dzięki temu te badania w bezpośredni sposób przyczyniają się do opracowywania metod diagnostyki plazmy, a przez to służą rozwojowi metod prowadzenia kontrolowanych reakcji fuzji termojądrowej.

Art. 13. pkt.2 ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki stanowi m.in., że rozprawa doktorska może mieć formę spójnego tematycznie zbioru artykułów opublikowanych lub przyjętych do druku w czasopiśmie naukowych. Z takim spójnym tematycznie zbiorem już opublikowanych artykułów mamy do czynienia w przypadku rozprawy doktorskiej mgr Ewy Węder. Na przedłożoną mi do recenzji pracę doktorską składa się 10 artykułów (R1-10 wg numeracji stosowanej w pracy

doktorskiej) przygotowanych w kilku ostatnich latach w zespole prof. Polasika i opublikowanych w dobrych czasopismach o zasięgu światowym: *High Energy Density Physics* (R2, R5-7), *Physica Scripta* (R4, R8), *Nukleonika* (R3, R10), *Physics of Plasmas* (R1) oraz *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* (R9). Są to wszystko prace wieloautorskie (od 4 do 8 autorów), w których oprócz teoretyków, czyli prof. Marka Polasika, dr hab. Katarzyny Słabkowskiej i ich doktorantów, występują doświadczalnicy, w tym przede wszystkim N. R. Pereira (Ecopulse, Springfield, USA) oraz J. Rzadkiewicz (Narodowe Centrum Badań Jądrowych, Otwock-Świerk). Jedynie prace R3 i R10 powstały bez udziału osób spoza grupy badawczej. Doktorantka, występująca w tych pracach pod nazwiskiem panińskim, jest pierwszym autorem w pracach R3 i R6, drugim – R1-2, R4-5, R10, trzecim – R7-8, czwartym – R9. W większości tych prac pierwszym autorem jest dr hab. K. Słabkowska, promotor pracy (R1-2, R4-5, R7-9).

Oświadczenia współautorów są spójne i wynika z nich, że doktorantka była odpowiedzialna za wykonanie badań od strony teoretycznej. W pracach R1-R6 wykonała większość obliczeń metodą MCDF; pozostałe obliczenia zostały wykonane przez promotora pracy. W pracach R7-10 była odpowiedzialna za przeprowadzenie części obliczeń metodą zderzeniowo-radiacyjną. Obliczenia były wykonywane przy użyciu, odpowiednio, pakietów oprogramowania GRASP/GRASP2K oraz FAC. W przypadku dwóch prac (R3, R6) doktorantka była odpowiedzialna za przygotowanie manuskryptów, a w pozostałych przypadkach brała udział w ich redakcji. Z oświadczeń doktorantki wynika, że we wszystkich przypadkach brała ona udział w analizie i interpretacji wyników. W przypadku pracy R4 brakuje oświadczeń M. Kubkowskiej i A. Czarneckiej, a pracy R8-9 – J. Rzadkiewicza, ale nie zmienia to wyrażonej wyżej opinii o wkładzie doktorantki we wspólne publikacje, gdyż brakujące oświadczenia dotyczą tylko doświadczalników, którzy nie brali udziału w badaniach teoretycznych prowadzonych przez doktorantkę (jedynie w pracy R6 dr J. Rzadkiewicz był odpowiedzialny za wyznaczanie średniego poziomu jonizacji przy pomocy programu FLYCHK).

Dokonania doktorantki wygodnie jest podzielić na dwie części, które są zawarte, odpowiednio, w pracach R1-6 i R7-10.

Pierwsza grupa prac (prace R1-4) obejmuje badania nad zależnością energii linii rentgenowskich K, L i M metali 4d- i 4f-elektronowych (molibdenu, palladu, dysprozu, iterbu, wolframu, irydu) od stopnia jonizacji. Dwie kolejne prace dotyczą analizy tego efektu dla układów 3d-elektronowych (niklu, mie-

dzi, cynku) w połączeniu z modelowaniem kształtów linii $K\alpha_{1,2}$ wraz z towarzyszącymi im liniami satelitarnymi. Obliczenia dla tych układów były wykonywane przy pomocy wielokonfiguracyjnej metody Diraca-Focka z użyciem funkcjonału energii MSAL (*Modified Special Average-Level*, który zaproponował prof. Polasik w pracy opublikowanej w Phys. Rev. A 52, 227 (1995)). W ramach tej metody uwzględniane są bezpośrednio efekty relatywistyczne w oddziaływaniach poszczególnych elektronów z polem kulombowskim jądra atomowego o skończonym rozmiarze, a perturbacyjnie tzw. poprzeczne poprawki Breita do oddziaływań kulombowskich pomiędzy elektronami. Dodatkowo, także perturbacyjnie uwzględniane są poprawki kwantoelektrodynamiczne. Wszystkie te efekty muszą być brane pod uwagę w celu uzyskania dobrego opisu struktury elektronowej badanych układów i – w konsekwencji – prawidłowych prawdopodobieństw przejść radiacyjnych. Z uwagi na zastosowany funkcjonał energii, efekty korelacyjne liczone są metodą oddziaływania konfiguracyjnego w oparciu o optymalny zbiór spin-orbitali uzyskany poprzez odpowiedni dobór postaci funkcjonału energii. Zaproponowany przez Polasika funkcjonał energii zawiera parametr λ , dzięki któremu można zachować równowagę w opisie stanów początkowych i końcowych, co okazuje się kluczowe przy opisie widm rentgenowskich. Oczywiście, ten parametr musi być dostosowany każdorazowo do badanego układu, ale dzięki temu uzyskujemy bardzo dobrą dokładność energii przejść i prawdopodobieństw przejść pomiędzy wyliczonymi stanami badanych układów. Można się o tym przekonać analizując np. dane zawarte w Tabeli 1 z pracy R1, gdzie energie linii $K\alpha_{1,2}$, $K\beta_{1,2,3}$ dla dysprozu, iterbu, wolframu i irydu otrzymane metodą MCDF-MSAL zostały porównane z wartościami *ab initio* uzyskanymi przez Deslattes i. in. (podobne wnioski można wyciągnąć porównując dane zebrane także w Tabeli 1 w pracy R6). Dzięki zastosowaniu tej metody możliwe było przeanalizowanie wpływu zrywania elektronów zewnętrznych powłok na energię linii rentgenowskich K, L i M dla dysprozu, iterbu, wolframu, irydu, molibdenu, a także miedzi, niklu i cynku. Dodatkowo, w pracach R1, R4 i R6 pokazano, że tę zależność można wykorzystać do określenia średniego stopnia jonizacji atomów różnych pierwiastków obecnych w plazmie, przy założeniu, że znana jest temperatura elektronowa plazmy. Użyto do tego ogólnodostępnego programu FLYCHK, który w ramach modelu zderzeniowo-radiacyjnego, przy założeniu braku równowagi termodynamicznej jaka występuje w rzadkiej plazmie, pozwala wyznaczyć zakres poziomów jonizacji, które dają przyczynki do obserwowanych linii rentgenowskich.

Co więcej, w pracach R5-6 pokazano, że wykorzystując metodę MCDF-MSAL można modelować widma rentgenowskie i badać nie tylko zależność położenia linii widmowych, ale także ich kształtu od stopnia jonizacji zewnętrznych powłok. Tego typu badania przeprowadzono dla linii $K_{\alpha_{1,2}}$ miedzi, niklu i cynku. Ma to doniosłe znaczenie praktyczne dla diagnostyki gęstej plazmy, gdyż pozwala na interpretację złożonych widm rentgenowskich wysokiej rozdzielczości.

Druga grupa prac (R7-10) dotyczy wykorzystania wielokonfiguracyjnej metody Diraca-Slatera oraz metody zderzeniowo-radiacyjnej do modelowania linii rentgenowskich K i L jonów molibdenu (R7), linii L i M jonów wolframu (R8), linii L, M, N różnych jonów wolframu oraz linii L jonów molibdenu (R9-10). Obliczenia były prowadzone w oparciu o pakiet programów o nazwie *Flexible Atomic Code* (FAC) opracowany przez M. F. Gu i dostępny od 2008 r. Program ten nadaje się do symulacji widm rentgenowskich powstających w plazmie wysokotemperaturowej (nietermicznej). W ramach pakietu FAC obliczenia struktury elektronowej badanych jonów ciężkich pierwiastków wykonywane są przy pomocy uproszczonej wersji metody MCDF, tj. metody MCDS, w której zamiast nielokalnego potencjału wymiennego występuje lokalny potencjał Slaterowski (perturbacyjnie uwzględnia się poprawki relatywistyczne i poprawki QED). Dzięki tej metodzie można wyznaczyć prawdopodobieństwa dozwolonych przejść promienistych pomiędzy stanami związanymi badanych jonów. Pakiet FAC umożliwia wyznaczanie także prawdopodobieństw przejść do stanów widma ciągłego (jonizacji zderzeniowych i fotojonizacji) oraz procesów odwrotnych. Zamieszczone w omawianych pracach wyniki symulacji widm rentgenowskich pozwalają stwierdzić, że dostępne narzędzia teoretyczne pozwalają na odtworzenie z dużą dokładnością danych eksperymentalnych. Dzięki temu możliwe jest lepsze zrozumienie struktury tych widm i wyznaczanie różnych parametrów badanej plazmy. Trzeba podkreślić, że dobre, wysokiej jakości dane atomowe są niezbędne, aby w ramach modelu zderzeniowo-radiacyjnego otrzymać poprawne obsadzenia poziomów atomowych i – w konsekwencji – poprawne widma rentgenowskie. Zatem dobra zgodność widm teoretycznych i doświadczalnych wskazuje na wysoką jakość przeprowadzonych obliczeń atomowych. Te zaś obliczenia były wykonywane, jak już wyżej zaznaczyłem, przy pomocy uproszczonej wersji metody MCDF. Szkoda, że o jakości obliczeń poziomów energetycznych i prawdopodobieństw przejść radiacyjnych trzeba wnosić z jakości końcowych widm rentgenowskich. W pracach R7-10 nie znajdziemy bowiem żadnych porównań pomiędzy wynikami uzyskiwanymi przy pomocy

obu metod, tj. MCDF i MCDS. Takiego porównania należałoby oczekiwać, jeśli dokładność obliczeń atomowych odgrywa zasadniczą rolę w poprawnej symulacji widm rentgenowskich plazmy wysokotemperaturowej. Pojawia się interesujące pytanie, czy w obliczeniach metodą MCDS wykorzystano dobrze sprawdzony funkcjonal energii MSAL. Wykonanie obliczeń przy pomocy pakietu FAC wymaga nie tylko zastosowania właściwego funkcjonu energii, określenia przestrzeni funkcji konfiguracyjnych, ale także zdefiniowania parametrów odpowiedzialnych za opis stanów wzbudzonych i widma ciągłego. Niestety, w omawianych pracach brak jest tych informacji, co utrudnia, czy wręcz uniemożliwia innym badaczom zastosowanie tego podejścia do analizy innych układów.

Nasuwa się dość oczywiste usprawiedliwienie takiego stanu rzeczy. Omawiane prace były pisane głównie dla doświadczalników i publikowane w czytanych przez nich czasopismach, więc szczegóły procesu modelowania widm były pomijane. Tylko w pracy R1 *explicite* podano, że do obliczeń wykorzystano metodę MCDF w funkcjonale energii MSAL. We wszystkich pozostałych pracach mowa jest jedynie o metodzie MCDF, co czytelnikowi, który nie sięgnie do cytowanych prac, sugeruje użycie do interpretacji widm rentgenowskich metody *ab initio*. Każda z omawianych prac zawiera oczywiście stosowne, zwykle bardzo zwarte, fragmenty poświęcone omówieniu zastosowanej metody obliczeniowej, ale próżno w nich szukać postaci użytego funkcjonu energii, a także informacji o sposobie doboru parametru λ i jego wartości użytych w konkretnych przypadkach. Dodatkowo, w żadnej z prac nie zdefiniowano dla badanych układów użytej przestrzeni konfiguracyjnych funkcji stanu. W moim przekonaniu, wskazane braki poważnie obniżają wartość tych prac, bo nie pozwalają na odtworzenie przeprowadzonych obliczeń.

Rozprawa doktorska oparta jest o opublikowane prace, więc korzystam z okazji, by w odniesieniu do zagadnień dotyczących znaczenia wykonanych symulacji dla diagnostyki plazmy wytwarzanej przez rozmaite źródła, zaufać recenzentom, którzy dopuścili te prace do druku i randze czasopism, w których zostały opublikowane. W tym zakresie nie czuję się bowiem kompetentny, choć nie ukrywam, że jestem pod wielkim wrażeniem jakości wykonanych badań i rysujących się możliwości diagnostycznych, które z nich wynikają. Dodatkowo, z faktu, że współautorami szeregu omawianych prac są doświadczalnicy, wnoszą pośrednio o istotnym znaczeniu wykonanych przez doktorantkę obliczeń dla interpretacji uzyskiwanych przez nich widm.

Biorąc zatem pod uwagę wyżej analizowany wkład doktorantki w przygo-

towanie prac R1-10, mogę z całym przekonaniem stwierdzić, że wykazała się ona dużymi umiejętnościami w wykorzystaniu zaawansowanych metod teoretycznego opisu bogatej i złożonej struktury energetycznej atomów i jonów 3d-, 4d- i 4f-elektronowych. Dzięki tym umiejętnościom oraz niewątpliwie staranności w wykonywaniu skomplikowanych obliczeń, uzyskała ona wysokiej jakości opis struktury energetycznej badanych układów otwartopowłokowych. W konsekwencji, możliwe stało się wykorzystanie tych danych do diagnostyki plazmy wytwarzanej w różnych urządzeniach.

Na recenzowaną pracę doktorską składa się także 8 krótkich rozdziałów: wprowadzenie (2 strony), różnorodne sposoby generowania plazmy (7 stron), motywacja, cele i zakres prowadzonych badań (3 strony), narzędzia teoretyczne zastosowane do badań struktur charakterystycznego promieniowania rentgenowskiego (2 strony), opis artykułów wchodzących w skład rozprawy doktorskiej (9 stron), podsumowanie i wnioski (2 strony) oraz streszczenie (w wersji polskiej i angielskiej, jedna strona). Za tymi rozdziałami zostały umieszczone kopie wszystkich artykułów składających się na rozprawę doktorską, a za nimi kopie oświadczeń współautorów zaświadczające o stopniu ich udziału we wspólnych pracach (w sumie praca liczy nieco ponad 170 stron). Całość jest poprzedzona listą wszystkich publikacji składających się na rozprawę doktorską wraz z określeniem udziału w nich doktorantki.

W krótkim opisie zawartości prac R5-6 (str. 26) doktorantka pisze: *Dla zapewnienia wiarygodności przewidywań teoretycznych, prowadzone przeze mnie badania zostały wykonane z bardzo wysoką precyzją przy użyciu relatywistycznej metody MCDF.* Takie sformułowanie nie jest do końca poprawne, gdyż sugeruje, że badania zostały przeprowadzone w oparciu o metodę *ab initio*, a nie – jak zauważyłem wyżej – półempiryczną. Ta sama nieścisłość pojawia się w rozdziale 5.1 poświęconym omówieniu wielokonfiguracyjnej metody Diraca-Focka, gdzie doktorantka pisze:

Prezentowane w rozprawie badania zostały oparte na wynikach obliczeń prowadzonych relatywistyczną wielokonfiguracyjną metodą Diraca-Focka (MCDF) z uwzględnieniem poprawki Breita do operatora odpychania kulmbowskiego oraz poprawek QED związanych z elektrodynamiką kwantową (tj. energii własnej i polaryzacji próżni). Uwzględnienie wymienionych poprawek wynikało z potrzeby zapewnienia odpowiedniej dokładności użytego modelu teoretycznego, co ma fundamentalne znaczenie dla wiarygodności otrzymanych wyników.

Trudno jest także zgodzić się z proponowanymi przez doktorantkę proporcjami, gdy chodzi o opis zagadnień wchodzących w skład rozprawy doktorskiej. Opis podstawowej metody teoretycznej wykorzystywanej przez doktorantkę do analizy struktury elektronowej badanych układów zajmuje nie całą jedną stronę pracy (str. 21)! Tyle samo zajmuje opis modelu zderzeniowo-radiacyjnego. Równocześnie autorka poświęca 7 stron na omówienie różnorodnych sposobów generowania plazmy, co w żaden sposób nie przyczynia się do lepszego zrozumienia zagadnień związanych z teoretycznym opisem widm rentgenowskich. Dla mnie jako teoretyka jest to materiał ciekawy, ale nieistotny z punktu widzenia oceny dokonań doktorantki. Muszę przyznać, że zamysł umieszczenia tego materiału na samym początku pracy, przed omówieniem sposobów teoretycznego opisu wysokozjonizowanych i ciężkich atomów, nie jest dla mnie zrozumiały; nigdzie też nie został przez autorkę uzasadniony. Co więcej, rozdział 2, *Wprowadzenie*, jest mylący, bo nie stanowi wprowadzenia do całej pracy, ale jest jedynie wstępem do kolejnego rozdziału poświęconego różnorodnym sposobom generowania plazmy. Świadczy o tym również fakt, że spis prac cytowanych we wprowadzeniu znajduje się na końcu tego właśnie rozdziału 3. Zatem rozdział 3. powinien być podrozdziałem rozdziału 2, a wszystkie cytowane prace powinny być umieszczone na końcu rozdziału 5.

Praca doktorska mgr Ewy Węder pod względem redakcyjnym pozostawia wiele do życzenia. Są w niej liczne błędy interpunkcyjne i stylistyczne. Dotyczy to także streszczenia w obu wersjach językowych. W pracach można się także natknąć szereg razy na niepoprawne użycie formy dopełniaczowej, np. *ionization of an atom's outer shells, the plasma's ionization, tungsten's ionization energy shift, code's transition frequency*. Natknąłem się także na kilka usterek o charakterze merytorycznym. Na str. 21 (w. 14 od góry) autorka pisze, że *Metoda MCDF została rozwinięta przez Granta oraz współpracowników . . .* cytując oprócz prac Granta i współpracowników, także prace M. Polasika, który nie brał udziału w tworzeniu i rozwijaniu pakietu GRASP/GRASP2K. Na tej samej stronie (w. 16 od dołu) czytamy: *Funkcja falowa opisująca N-elektronowy stan atomu o liczbach kwantowych J i M (J charakteryzuję (JK: literówka w oryginale) wartość kwadratu całkowitego momentu pędu, a J określa rzut momentu pędu na wybrany kierunek M) . . .* Natomiast na stronie następczej (w. 9 od góry) mamy: *Podobnie jak w metodzie MCDF funkcja falowa dla N-elektronowego układu określana jest przez liczby kwantowe charakteryzujące całkowity moment pędu J, jego rzut M oraz parzystość p.* W pracy R3, pod

wzorem (1), który zawiera wyraz $1/r_{ij}$ mamy zdanie objaśniające znaczenie wyrazu C_{ij} , którego we wzorze próżno szukać. Zwracam uwagę na tego typu błędy z recenzowskiego obowiązku, ale nie umniejszają one mojej pozytywnej oceny całej pracy.

Podsumowując uważam, że mgr Ewa Węder w swojej pracy doktorskiej przedstawiła bardzo interesujące i ważne wyniki badań dotyczących położenia oraz kształtu linii widmowych wysoko zjonizowanych atomów z otwartymi powłokami 3d, 4d i 4f i ich zależności od stopnia jonizacji zewnętrznych powłok. Pokazała także że można je wykorzystać do interpretowania złożonych widm rentgenowskich, a tym samym – do diagnostyki plazmy nisko- i wysokotemperaturowej. Doktorantka uzyskała te wyniki dzięki umiejętnemu wykorzystaniu zaawansowanych metod teoretycznego opisu struktury poziomów atomowych oraz przejść radiacyjnych i nieradiacyjnych. Wykazała się dużą biegłością i starannością w przeprowadzeniu złożonych obliczeń, co świadczy o bardzo dobrym opanowaniu warsztatu badawczego. Uważam zatem, że recenzowana praca spełnia zwyczajowe i ustawowe wymagania stawiane pracom doktorskim i dlatego wnoszę o dopuszczenie mgr Ewy Węder do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



