

**Recenzja rozprawy doktorskiej
Pana mgr Wojciecha Brodzińskiego
zatytułowanej
„Konfiguracje równowagi w najcięższych jądrach atomowych
i analiza procesów ich rozpadu”**

Praca liczy 111 stron druku i składa się ze wstępu oraz sześciu (6) rozdziałów tematycznych. Zawiera streszczenia w językach polskim i angielskim. Spis literatury obejmuje 86 pozycji z dziedziny fizyki jąder atomowych, fizyki kwantowej i metod obliczeniowych, dotyczących głównie rozszczepienia i rozpadów alfa jąder atomowych. Wśród cytowanych prac dwie są współautorstwa Pana mgr Wojciecha Brodzińskiego.

Tematyka dotyczy, na co wskazuje tytuł rozprawy, stabilności i wybranych typów rozpadu (rozszczenie i proces emisji cząstek alfa) jąder atomowych z egzotycznego, lecz bliskiego doświadczeniu, obszaru jąder o liczbie atomowej $Z > 126$. Praca ma charakter całkowicie teoretyczny, uwzględniając jednocześnie i odnosząc się do wyników eksperymentu. Wyprzedza więc doświadczenie ale go nie pomija.

W rozdziale pierwszym rozprawy Autor rozważa stabilność jąder parzysto-parzystych o liczbach atomowych $Z \geq 126$.

Na początku omawia model rozszczepienia oparty na tradycyjnym podejściu, tzw. adiabatycznym. Opisane są dwa podejścia

1. Model mikroskopowo-makroskopowy z potencjałem jednocząstkowym Woods-Saxona. Główne elementy modelu to energia kroplowa i tzw. poprawka powłokowa do energii.
2. Samozgodna metoda Hartree'ego-Focka z modelem Skyrme'a i parametryzacją SLy6. Oba opisy (1 i 2) wraz z tzw. modelem cranking, były przez lata używane do jakościowej analizy zjawiska rozszczepienia.

Oba dyskutowane modele prowadzi do różnych wniosków dotyczących stabilności jąder w wybranym obszarze liczby atomowej Z . Model samozgodny przewiduje, że możliwymi obszarami stabilnymi są $Z=128$, $N\sim 180$ i $Z=128-142$, $N\geq 228$. Model średniego pola Woodsa-Saxona tego nie potwierdza.

Okazuje się, że w przypadku jąder nieparzystych opisany model zawodzi i istnieje potrzeba innego opisu zjawiska rozszczepienia. Autor rozprawy podaje możliwe rozwiązanie problemu w rozdziałach następnych, drugim i trzecim.

W Rozdziale 2 opisana jest metoda instantonowa i formalizm czasu urojonego zastosowane do problemu z oddziaływaniem *pairing*. Otrzymane równania instantonowe (2.49) oraz wyrażenie na działanie (2.45) stanowią podstawę do ewentualnie dalszych obliczeń. Opiera się na nich dalsza część Rozdziału 2. Autor następnie przedstawia zależną od czasu metodę Hartree'ego-Focka-Bogoliubowa (TDHFB), a więc formalizm kwazicząstek, stosując formalizm czasu urojonego (metoda iTDHFB). Formalizm jest dalej upraszczany przez zastąpienie średniego pola HFB przez średnie pole Woodsa-Saxona. W końcowej części Rozdziału 2, (u dołu strony 49) Autor pisze, że *„Z uwagi na komplikacje, na poziomie niniejszej pracy ograniczymy się do badań rozwiązań instantonowych bez pairingu, pokazujemy tu jednak, że sformułowanie naszej metody w sposób uwzględniający korelacje par jest możliwe i może stanowić punkt wyjścia do dalszych studiów.”*

Zwrócę tutaj uwagę, że nie od razu wiadomo skąd pochodzi **ważne**, dla dalszej części rozprawy, wyrażenie dla działania S (równanie (2.45)) – Autor nie pokazuje, że wynika ono bezpośrednio z dyskutowanych wcześniej równań i nie podaje żadnego odnośnika do literatury przedmiotu. Dopiero po głębszej analizie można domyśleć się, że chodzi tutaj o wynik obłożenia równania Schroedingera dla czasu urojonego stanami $\langle \phi |$ oraz o to, że Hamiltonian przy transformacji do czasu urojonego jest Lagranżjanem Euklidesowym, który definiuje działanie. W Rozdziale 2 Autor korzysta głównie z pracy [60].

W Rozdziale 3 dyskutowane są metody rozwiązywania równań instantonowych. Autor podaje dwie metody: Fourierowską (str. 53) i, korzystając z twierdzenia Floqueta, metodę macierzy monodromii (str. 54). Metoda Fourierowska jest mało efektywna z powodu dużej liczby równań i trudności związanych z dokładnością

obliczeń numerycznych (ostre przebiegi rozwiązań w małych odcinkach czasu urojonego). W konsekwencji, w dalszej części pracy stosowana jest druga z przedstawionych metod. Aby obliczyć macierze monodromii $G(t+dt)$ Autor wykorzystuje między innymi rozkład SVD (*singular value decomposition*) macierzy, co pozwala odpowiednio posegregować operacje na liczbach według ich skali wielkości i uniknąć w ten sposób błędów numerycznych. Mieszanie rosnących, początkowo bardzo małych wkładów stanów niskich prowadzi często do silnej niestabilności rozwiązań w tym przypadku (patrz równanie 2.43). Usunięcie tego problemu wymaga dodatkowej ortogonalizacji rozwiązań. Do ortogonalizacji używana jest standardowa metoda Grama-Schmidta. (Warto sprawdzić, czy np. metoda oparta na rozkładzie Choleskiego nie jest tutaj szybsza i dokładniejsza.¹)

Natomiast w Rozdziale czwartym (4) Autor opisuje szczegółowo własności otrzymanych rozwiązań instantonowych. Okazuje się, że największy wpływ na działanie ma obszar deformacji, gdzie dochodzi do „przecięć” poziomów (kwantowo podobnych). Jest to wąski obszar deformacji trudny do obliczeń. Krok obliczeń musi być odpowiednio mały. Autor pracy jest tutaj dokładny w poczynaniach numerycznych i stosuje zmienny krok całkowania instantonowych równań ruchu. W deformacjach typu „beta” (wydłużenie jądra atomu) krok ten jest czasami rzędu 10^{-8} (typowe wartości to 0,1).

Rozszczepienie, według Autora rozprawy, jest procesem nieadiabatycznym. Główny wkład do działania wnoszą te obszary przestrzeni deformacji, gdzie jednocząstkowe poziomy energetyczne, o podobnych charakterystykach kwantowych (np. o jednakowej trzeciej składowej „K” momentu pędu), oddziałując ze sobą, odpychają się, wymieniając między sobą prawdopodobieństwa (amplitudy) obsadzeń. Mechanizm ten zwany efektem Landaua-Zenera) jest znany w fizyce. Nie był on jednak dotąd uwzględniany w opisie procesu rozszczepienia. Powodem jest złożoność widma jednocząstkowego jądra atomu, gdzie liczba tzw. quasi-przecięć poziomów jest bardzo duża i analiza ich własności jest w związku z tym bardzo złożonym i być może, w ogólności niemożliwym do przeprowadzenia procesem (z numerycznego

¹ Macierz $V^T V$ złożona z wektorów V (V^T -transpozycja V) jest symetryczna i dodatnio określona. Można więc za Choleskim zapisać $V^T V = LL^T$ gdzie L jest macierzą dolną trójkątną. Macierz $U = VL^T^{-1}$ jest zbiorem (kolumny) wektorów ortogonalnych ($UU^T = I$, L^T^{-1} jest prosta do obliczeń).

punktu widzenia). Jak zobaczymy w dalszej części pracy, Autor podał powody, dla których można ograniczyć się tylko do wybranej, niewielkiej grupy poziomów jednocząstkowych, skupionych wokół energii Fermiego. Obserwacja ta pozwala na dokładną, acz trudną, wymagającą dużej dokładności numerycznej analizę pseudo-przecięć. To prowadzi do poprawionego wyrażenia na działanie S , i w konsekwencji modyfikuje czas życia względem rozszczepienia. Okazuje się przy tym, że parametry masowe, używane w metodach adiabatycznych, nie są tutaj potrzebne i nie prowadzą do rozbieżnych fizycznie wyników.

W Rozdziale 5 Autor rozprawy dyskutuje głównie efekty wywołane deformacją nieosiową (γ). Obecność γ obniża pierwszą barierę energii potencjalnej. Na ten temat opublikowano wiele prac odnoszących się zarówno do metody Hartree'ego-Focka z modelem Skyrme'a, jak i z modelem średniego pola WS. Jedną z pierwszych jest praca: Girod, Grammaticos: *Triaxial Hartree-Fock-Bogoliubov calculation with $D1$ effective interaction*: PR C 27, 2317 (1983) — praca nie jest cytowana przez Autora rozprawy. γ prowadzi do komplikacji w metodzie instantonowej. Powodem jest złożone widmo jednocząstkowe (duża liczba quasi-przecięć poziomów, stąd utrudniona ich analiza).

Rozdział 6 dotyczy rozszczepienia jąder nieparzystych i tak zwanych współczynników wzbronienia (definicja na stronie 86). Mówią one, jak nieparzysta cząstka wpływa na wzrost czasu życia nieparzystego układu w stosunku do układu parzysto-parzystego o liczbie masowej mniejszej o jeden. Analizowany jest przykład jądra ^{257}Rf . Metoda instantonowa, niezależnie od wyboru ścieżki, prędkości kolektywnej q' daje za duże czynniki wzbronienia. Autor sugeruje, że przyczyna leży w zachowywaniu liczb kwantowych (np. K^π) na ścieżce do rozszczepienia co prowadzi do wzrostu barier potencjału — przyczyny wzrostu działania.

W części 6.3.2 zostały dopasowane energie tzw. drgań zerowych E_{zp} tak, że odtwarzają one czasy życia ze względu na rozszczepienie jąder z wybranego obszaru. Otrzymana wartość tej wielkości wyniosła 2,03 MeV, przekraczając wartość *standardową* (0,5 MeV) czterokrotnie. Nie wiem po co wykonano takie dopasowanie. Przecież zarówno bariera potencjału, jak i parametr masowy są

wielkosciami, które też nie są dobrze zdefiniowane w teorii (różne modele pola średniego prowadzą do różnych barier) i nie są obserwablanymi. Informacja o E_{zp} jest więc od nich (barier i mas) zależna. Lepiej więc, według mnie, obliczyć E_{zp} na podstawie danych teoretycznych o potencjale i parametrze masowym z poprawionej formuły Bohra-Sommerfelda (*vide e.g.*, D. J. W. Geldart, D. Kiang. *Bohr–Sommerfeld, WKB, and modified semiclassical quantization rules*. American Journal of Physics **54**, 131 (1986)). Jej użycie prowadzi do różnych i wyższych niż standardowa wartości E_{zp} (*vide* Baran, Staszczak: Acta Phys. Pol. 45 B No 2 (2014) i prace tam cytowane).

Wyniki rozdziału 6 podsumowane zostały w Tablicach 6.4 i 6.5 (strony 98 i 99) oraz w Tablicach 6.7 i 6.8 (na stronach 103 i 104).

Tabele 6.3 (strona 96) i 6.6 (strona 101) pokazują różnice w czasach życia T_{sf} dla jąder o $Z=102-112$ przy zastosowanych przybliżeniach. Ostatnia Tabela pokazuje, że dopasowane do doświadczenia energie drgań zerowych pozwalają lepiej odtworzyć zmierzone czasy T_{sf} .

Problem zachowania konfiguracji lub jej zaniedbania nie został całkowicie rozstrzygnięty (wnioski 1 i 2 na stronie 101).

Dlaczego do testów i następnie obliczeń wybrano w przestrzeni deformacji ścieżki w postaci linii prostych zamiast używać np. ścieżek minimalizujących energię potencjalną?

Praca nie jest pozbawiona małych błędów edytorskich. I tak, np. w liczbach rzeczywistych, Autor używa kropek zamiast przecinków, np. 2.012 zamiast 2,012, co jest przyjęte w języku polskim. Końcówki wierszy tekstu zawierają pojedyncze litery (spójniki), które powinny znaleźć się w następnej linii tekstu. Znaki diakrytyczne, ogonki w samogłoskach $ę$ i $ą$ są w kilku miejscach odwrócone (*cedilla*), np. dół strony 91 w tekście napisanym czcionką tłustą.

Jeśli idzie o **cytowania**, to najczęściej podawane są ogólne informacje dotyczące zawartości odnośnika. Brak jest szczegółów, które wpłynęły lub mogłyby wpłynąć na treść rozprawy. Nie jest to wielką wadą lecz krótki komentarz mógłby

wiele wyjaśnić czytelnikowi bez potrzeby z jego strony penetrowania i przeglądania cytowanych źródeł.

Terminologia. Ogólnie Autor rozprawy używa terminologii przyjętej dla prac z tej dziedziny. Na stronach 47, 71 (ostatni wiersz) Autor używa pojęcia „podcałkowa” zamiast „funkcja podcałkowa”.

Inne uwagi. Dlaczego w obliczeniach, które potrzebują pochodnej współrzędnej kolektywnej $q(\tau)$ używa się klasycznej zależności dla energii kinetycznej z parametrem masowym *cranking* dla jąder parzystych w Z i N ? Czy nie można $q'(\tau)$ wyznaczyć inaczej? Jest to jedna z ważniejszych wielkości modelu instantonowego. Jak wynika z dyskusji Autora (Tabela 4.5 na stronie 71) jej wpływ na działanie jest znaczący.

Na str. 22 (i we wnioskach na str 24) zastępuje się pole średnie Skyrme'a (w parametryzacji SLy6) średnim potencjałem Woodsa-Saxona (WS). Parametry masowe i bariery potencjału w obu przypadkach powinny być zgodne z modelem. Przyjęcie parametrów masowych WS razem z barierami otrzymanymi z modelu SLy6 nie jest spójne i psuje, wg. mnie wnioski ($V_{Sk} \gg V_{WS}$, $B_{Sk} \ll B_{WS}$). W ogólności model Skyrme'a daje mniejsze parametry masowe lecz jednocześnie większe (wyższe) bariery potencjału. Model WS zachowuje się odwrotnie.

Nie ma potrzeby szczegółowej dyskusji wyników pracy. Praca zawiera bogate treści fizyczne, interesujące rozwiązania matematyczne, numeryczne oraz przewidywania. Praca Pana mgr Wojciecha Brodzińskiego jest bez wątpienia cennym wkładem do opisu zjawiska rozszczepienia jąder atomowych, uwzględniającym rzeczywiste, mikroskopowe, jednocząstkowe własności jąder – quasi-przecięcia oraz ich wpływ na działanie S.

Praca jest ważna z wielu powodów. Najważniejsze z nich to:

1. Dokładna, fizyczna analiza otrzymanych wyników dla wybranych obszarów jąder atomowych (Rozdziały 1 i 6).

2. Próba nowego opisu rozszczepienia jąder atomowych oparta na instantonach; nowe podejście do opisu procesu rozszczepienia (Rozdziały 2, 3, oraz 4).
3. Przewidywania dotyczące stabilności nuklidów w egzotycznym obszarze $Z > 126$, który jest blisko znanych w doświadczeniu nuklidów.
4. Nowatorskie rozwiązania problemów numerycznych: rozwiązania układów równań różniczkowych oparte na metodzie macierzy monodromii Floqueta z dbałością o dokładność rozwiązań (rozkład SVD i analiza skal wielkości).
5. Dokładna analiza zależności rozwiązań instantonowych od liczby stanów jednocząstkowych, prędkości kolektywnego ruchu jądra we współrzędnej kolektywnej.

Według mojej opinii rozprawa spełnia wymogi nakładane ustawą o stopniach naukowych. Wnioskuje więc, do Rady Naukowej Narodowego Centrum Badań Jądrowych, o dopuszczenie rozprawy doktorskiej Pana mgr Wojciecha Brodzińskiego do publicznej obrony.

Lublin, 30 października 2019



prof. Andrzej Baran