



Lublin, 6.09.2019

Recenzja

Rozprawy doktorskiej mgr Pawła Bączyka

„Naruszenie symetrii izospinowej przez oddziaływanie silne w podejściu opartym na teorii funkcjonału gęstości”

Praca doktorska mgr Pawła Bączyka zatytułowana „Naruszenie symetrii izospinowej przez oddziaływanie silne w podejściu opartym na teorii funkcjonału gęstości” została przygotowana w Katedrze Modelowania Układów Złożonych w Instytucie Fizyki Teoretycznej na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego pod kierunkiem prof. dr hab. Wojciecha Satuły. Praca zawiera wyniki badań nad rozszerzeniem teorii funkcjonału gęstości (DFT) o człony zależne od izospinu jądra pozwalające poprawnie opisać własności jąder w pobliżu linii $N=Z$.

Praca zawiera 114 stron i 19 stron wstępu. Została podzielona na 7 rozdziałów, 4 dodatki, spis rysunków, tabel oraz bibliografię liczącą 144 pozycje.

W pierwszym rozdziale autor przedstawił model teoretyczny Hatree'ego-Focka z siłami typu Skyrme'a oraz jego relację z DFT. Drugi rozdział zawiera motywację badań opisanych w rozprawie. Zdefiniowano tu kluczowe wielkości: energii przesunięcia zwierciadlanego (MDE) oraz trypletowego (TDE) w dubletach i trypletach izospinowych. Omówione zostały doświadczalne wartości tych wielkości obliczone na podstawie danych energii wiązania jąder z okolic linii $N=Z$ i problemy z odtworzeniem ich wartości w istniejących modelach jądrowych nierozróżniających oddziaływań silnych między protonami i neutronami. Pokazuje to, iż istnieje łamanie symetrii izospinowej (ISB) sił jądrowych i prawidłowy opis oddziaływań wewnątrz jąder atomowych powinien uwzględniać różnicę oddziaływań pomiędzy nukleonami. W rozdziale tym przedstawiona została również klasyfikacja oddziaływań Henleja i Millera ze względu na zależność od izospinu cząstek (izoskalarne, izotensorowe i izowektorowe) przydatna przy analizie wprowadzonych poprawek do DFT łamiących symetrię izospinową.



W kolejnym rozdziale wyprowadzone zostały człony łamiące symetrię izospinową do używanego w pracy funkcjonu gęstości Skyrme'a z podziałem na wspomniane wcześniej typy oddziaływań. Wyprowadzono człony zależne od gęstości – człony wiodące (LO) i gradientów gęstości – kolejne człony rozwinięcia (NLO). Przedstawiona została też metoda wymuszonego obrotu w izoprzestrzeni zapewniająca prawidłową liczbę kwantową izospinu jądra. Następnie na wybranym przykładzie pokazana została szczegółowa procedura obliczeń MDE i TDE wykonana w zmodyfikowanym przez autora rozprawy kodzie HFODD. W rozdziale tym przedstawiona została również dyskusja wyboru sił Skyrme'a optymalnych do bieżących badań.

Wyniki obliczeń dla jąder z obszaru $N \approx Z$ w których możliwe jest porównanie danymi doświadczalnymi są przedstawione w rozdziale czwartym. Zawarta tu jest wszechstronna analiza otrzymanych wyników zarówno pod kątem fizycznym (analiza wielkości i wzajemnych relacji poszczególnych członów oddziaływań ISB) jak i numerycznym (stabilność rozwiązań na różnych rozmiarów bazy oscylatora harmonicznego). W dalszej części rozdziału przedstawiono metodę dopasowania parametrów nowych członów dodanych do wybranych wcześniej czterech modeli sił Skyrme'a i uzyskane wartości parametrów. Wyniki MDE i TDE pokazane w podrozdziale 4.11 znakomicie poprawiają zgodność z danymi doświadczalnymi co świadczy o skuteczności zastosowanej metody.

Piąty rozdział poświęcony jest analizie znaczenia fizycznego zaproponowanego rozwinięcia funkcjonu DFT i porównania z innymi modelami. Energia wiązania jąder została wyrażona przy użyciu izobarycznej formuły masowej. Jej człony zostały obliczone zarówno przy użyciu zmodyfikowanej w pracy DFT jak i opartej na funkcjach Greena metodzie Monte Carlo z użyciem potencjału Argonne AV18 i trójciałowej siły Illinois IL7. Zauważalna zbieżność wyników obliczeń współczynnika a izobarycznej formuły masowej potwierdza poprawność modelu i pozwala na lepsze zrozumienie sensu fizycznego wprowadzonych poprawek. Pozostałe człony izobarycznej formuły masowej w podejściu DFT są bliższe danym doświadczalnym niż te obliczone przy użyciu realistycznych potencjałów oddziaływania nukleon-nukleon. Wyniki zostały również porównane z modelem sprzężenia kwarków i mezonów.

Rozdział szósty zawiera zastosowanie wprowadzonej poprawki do obliczeń innych własności jąder atomowych. Człony funkcjonu DFT łamiące symetrię izospinową mają wpływ również na wartości stanów



wzbudzonych jąder. W dublecie izospinowym $A=45$ uzyskano dobrą zgodność z danymi doświadczalnymi różnicy energii stanów wzbudzonych dla spinów do $15/2 \hbar$ przy rachunkach uwzględniających nawet tylko 4 konfiguracje wzbudzeń typu $1p-1h$. Pokazano zostało też wpływ łamania symetrii izospinowej na wartości elementów macierzowych rozpadu β . Ostatni 7 rozdział zawiera podsumowanie przeprowadzonych badań oraz perspektywy dalszych zastosowań i rozwoju modelu.

Praca doktorska zawiera niezwykle ciekawe wyniki z obszaru teoretycznej fizyki jądrowej. Mimo wielu lat badań, nie jest znany uniwersalny funkcjonal DFT opisujący dobrze wszystkie własności jąder atomowych. W dotychczasowych badaniach wielu autorów podejmowało liczne próby opisu różnorodnych zjawisk fizycznych przy pomocy modelu średniego pola poprzez modyfikację parametrów lub dodawanie kolejnych członów do funkcjonału. Praca doktorska mgra Bączyka zawiera efekty wieloletniej pracy nad uwzględnieniem możliwości łamania symetrii izospinowej w funkcjonale DFT. Wyniki uzyskane znacząco poprawiają zgodność z danymi doświadczalnymi jąder z obszaru $N \approx Z$. Wyprowadzone zostały nowe człony w siłach typu Skyrme'a mające charakter izowektorowy i izotensorowy, a następnie wyznaczone zostały parametry tego typu oddziaływań. Nowe człony funkcjonału zostały zaimplementowane przez autora do kodu numerycznego HFODD. Poprawki uwzględnione w pracy są bardzo dobrze umotywowane teoretycznie i kompleksowo przeanalizowane. Przede wszystkim, przebadano ich wpływ na wyniki obliczeń dla jąder MDE i TDE w świetle ich zgodności z danymi doświadczalnymi i innymi modelami teoretycznymi. Uwzględnienie członów oddziaływań łamiących symetrię izospinową daje znakomitą poprawę zgodności wyników obliczeń z doświadczeniem, niemożliwą do osiągnięcia przy zastosowaniu dotychczas używanych parametryzacji sił Skyrme'a. Wykazany został spójny charakter opisu oddziaływań łamiących symetrię izospinową poprzez porównanie z wynikami teorii bazujących na oddziaływaniach typu nukleon-nukleon. Przedstawione zostały też przykłady zastosowania nowego funkcjonału do obliczeń innych własności jąder atomowych (stany wzbudzone, przemiana β). Uzyskane wyniki pozwalają na lepsze zrozumienie natury oddziaływań jądrowych.

Praca nie ogranicza się jedynie do zaproponowania modelu teoretycznego i przedstawienia wyników obliczeń. Przeprowadzone badania mają charakter kompleksowy, a modyfikacje funkcjonału gęstości zostały wszechstronnie przeanalizowane. Autor przedstawił swoje wyniki w świetle najnowszej literatury z dziedziny dający dowód, że jest on ekspertem w swojej specjalności.

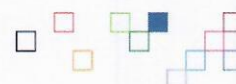


W pracy da się zauważyć dbałość autora o staranne przygotowanie rozprawy. Praca jest napisana w przejrzystym stylu. Wszystkie rozważania są wyczerpująco przedstawione, nie ma skrótów myślowych, a równania, tabele i rysunki są precyzyjnie opisane. Czytelnik znający podstawy mechaniki teoretycznej i teorii jądra atomowego nie powinien mieć problemów ze zrozumieniem treści bez częstego zaglądania do literatury, gdyż przedstawione rozważania są szczegółowe i dobrze umotywowane w aktualnym stanie wiedzy. W wielu miejscach przedstawiona jest terminologia angielska terminów. Ułatwia to odniesienie się do powszechnie używanej fachowej literatury.

Autor dołożył wiele starań o estetyczność pracy. Zachowane są standardy typograficzne (np. rodzaje czcionek, konsekwencja oznaczeń różnego typu wielkości fizycznych, zapis równań) charakteryzujące profesjonalne przygotowanie publikacji naukowej. Wykonane wykresy i rysunki poglądowe są w większości bardzo czytelne, choć mam dwie uwagi. Sugerowałbym dodawanie linii zera, zwłaszcza tam, gdzie jest ona istotna ze względu na znak wyrażenia lub bliskość zera niektórych danych (np. na wykresach 4.2, 4.3, 4.11, 5.1). Na rysunkach 4.5 i 4.6 autor przyjął wartość referencyjną dla 12 powłok, a nie dla najniższej prezentowanej wartości 10. Utrudnia to analizę przedstawionych wyników. Podobny błąd zauważyłem na rysunku 6.2.

Mimo świetnego wrażenia jaki zostawiła na mnie praca doktorska mgra Pawła Bączyka zauważyłem kilka uchybień. Po pierwsze, w kilku miejscach struktura rozdziałów nie jest spójna. Poszczególne podrozdziały, zawierające niewątpliwie istotne merytorycznie treści są czasami oderwane od reszty rozdziału nie tworząc uporządkowanego toku myślowego. Np. podrozdziały 1.3, 3.2, 4.8, 4.12 mogłyby być przesunięte w inne miejsce bez zmniejszenia wartości rozdziałów. Przydało by się czasami jedno zdanie wstępu do podrozdziału, aby zachować ciąg logiczny.

Definicja kluczowych w pracy wielkości MDE i TDE nie zawiera polskich nazw tych wielkości. Pomimo dobrego rysunku poglądowego 2.1 nie są też jawnie zdefiniowane dublet i tryplet izospinowy. W tym samym rozdziale podane jest pierwsze porównanie obliczeń z danymi doświadczalnymi. Nie jest wskazane jednak jak te dane zostały wybrane. Klucz doboru jest opisany częściowo podrozdziale 4.8 i w dodatku D. W pracy nigdzie nie ma nazw pierwiastków i izotopów uwzględnionych w badaniach. Można je łatwo wywnioskować na podstawie



liczby masowej A i izospinu, jednak do weryfikacji z innymi wynikami warto by uwzględnić tradycyjny opis izotopów wchodzących w skład dubletów i trypletów izospinowych. W podrozdziale 2.1.2 zauważyłem również stwierdzenie „izotony o liczbie masowej A ”. Oczywiście chodzi o izobary.

W podrozdziale 3.2 dokonano wyboru sił Skyrme'a użytych w pracy. Nie zostały w nim uwzględnione najnowsze parametryzacje funkcjonału energii zależnego od gęstości UNEDF-0 i UNEDF-1 rozpowszechnione m. in. przez warszawską grupę teorii jądra atomowego. Dlaczego nie użyto ich w obliczeniach, a nawet nie przedyskutowano tej możliwości?

W podrozdziale 3.3.1 i na rysunku 3.1 przedstawiono „schemat stanów podstawowych jąder”. Nie uwzględniono konfiguracji antyuszeregowania spinowego z $T_z = 0$ o najniższej energii w którym zarówno proton jak i neutron są sparowane z nukleonami rdzenia. Czy jest to celowe pominięcie?

Bayesowskie kryterium informacyjne przedstawione zostało w podrozdziale 4.12 zbyt skrótowo. Zaprezentowane wyniki uzyskane tą techniką wydają się być niezrozumiałe bez wcześniejszego zagłębienia się w różnice wyglądu histogramów dla różnych klas modeli teoretycznych.

W pracy brak jest odniesienia i omówienia rysunku 5.4.

Nie wiadomo dokładnie jak autor dokonał wyboru elementów zbioru A spośród konfiguracji ze zbioru B w podrozdziale 6.1.1. Opis zawarty w przypisie 5 na stronie 74 jest nieprecyzyjny, a nazwy „zbiór A ” i „zbiór B ” mało mówiące. Wolałbym użycie w tym miejscu nazw opisowych.

Dodatek C zawierający opis implementacji nowych członów funkcjonału w kodzie numerycznym HFODD przedstawia raczej instrukcję wprowadzenia danych do pliku wejściowego i może być niezrozumiałą dla osób niekorzystających w swojej pracy z tego programu.

Przedstawione powyżej uchybienia i wątpliwości nie zmieniają jednak ogólnego wrażenia o znaczącym znaczeniu badań doktoranta, jego głębokiej wiedzy merytorycznej, znajomości literatury oraz dobrego stylu



przedstawionej rozprawy doktorskiej. Zarówno wyniki badań jak i sama praca mają bardzo profesjonalny charakter.

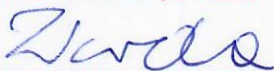
Wyniki uzyskane w tej pracy zostały opublikowane w serii artykułów w bardzo dobrych czasopismach naukowych (*Physics Letters B*, *Physical Review C*, *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, *Computer Physics Communications*, *Acta Physica Polonica B*) lub są przygotowane do publikacji. Ranga czasopism, ilość artykułów, a także ich cytowania (pozycje [2-4] są cytowane w sumie już 20 razy) potwierdzają ważność badań przeprowadzonych przez doktoranta. Mgr Paweł Bączyk prezentował swoje wyniki na wykładach podczas międzynarodowych konferencji naukowych, których kilkakrotnie miałem przyjemność wysłuchać. Uzyskał również granty Narodowego Centrum Badań Jądrowych PRELUDIUM-9 i ETIUDA-5 na finansowanie swoich badań.

Reasumując praca doktorska mgra Pawła Bączyka zawiera oryginalne wyniki badań naukowych i spełnia ustawowe wymogi stawiane kandydatom do stopnia doktora. Dlatego wnioskuję dopuszczenie jej do publicznej obrony.

Wyniki zaprezentowane w pracy mają istotne znaczenie dla poszerzenia wiedzy o budowie jąder atomowych. Mgr Paweł Bączyk w swojej pracy doktorskiej dogłębnie przeanalizował problem łamania symetrii izospinowej w teorii funkcjonału zależnego od gęstości. Model ten został poszerzony o człony łamiące tę symetrię. Wyniki uzyskane przed doktoranta znacząco poprawiają teoretyczny opis jąder atomowych w obszarze $N \approx Z$. Co więcej, przedstawione tu badania pozwalają lepiej zrozumieć naturę oddziaływań silnych i ich zależność od izospinu. **Dlatego też, wnioskuję o wyróżnienie rozprawy doktorskiej mgra Pawła Bączyka.**

Michał Warda

Kierownik Zakładu Teorii Jądra Atomu



Dr hab. Michał Warda, prof. nadzw.

