



Warszawa 05.09.2020

RECENZJA ROZPRAWY DOKTORSKIEJ

Tytuł: „Rozpad beta w uogólnionym modelu jądrowego funkcjonału gęstości”

Autor: mgr Maciej Konieczka

Promotor: prof. dr hab. Wojciech Satuła, Katedra Modelowania Układów Złożonych.
Wydział Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego.

Głównym celem pracy jest opis procesu rozpadu beta z użyciem technik rzutowania na poziomie funkcjonału gęstości jądrowego przywracającego złamane symetrie jądrowe a w konsekwencji poprawne liczby kwantowe. Zastosowana technika MRDFT („wielo-referencyjny funkcjonal gęstości”) pozwala wykonywać rachunki z dokładnością wymaganą przez jądrowe dane strukturalne. Użyte podejście nie jest trywialne, jako że z natury rzeczy tj. zastosowania metody wariacyjnej, funkcjonal gęstości dedykowany jest rachunkom globalnych własności jąder atomowych w ich stanach podstawowych (w najniższych minimach energii). Tu mamy do czynienia raz: z rachunkiem stanów wzbudzonych, dwa: z analizą subtelnych i trudnych do wyłuskania z gęstości jądrowych efektów powłokowych. Bez wątpienia opisana w pracy metoda, rozwijana w Warszawie, jest jednym z najbardziej obiecujących i wyrafinowanych współczesnych podejść do zrozumienia struktury jąder atomowych.

Recenzowana dysertacja zawiera 127 stron tekstu zasadniczego i składa się z 5 rozdziałów oraz podsumowania. Treść ułożona jest logicznie i chronologicznie. Rozdziały nie są przesadnie rozbudowane, jednocześnie są dostatecznie wysyczone treścią i analizą oryginalnych wyników doktoranta. Praca napisana jest bardzo starannie wręcz buchalteryjnie i właściwie nie zawiera błędów edytorskich. Użyty język jest klarowny a styl zwarty.

Po słowie wstępnym mamy rozdział pierwszy, w którym znajdujemy krótkie wprowadzenie do teorii grup i reprezentacji. W wielkim skrócie opisano w tym rozdziale symetrie: rotacyjną, translacyjną, izobaryczną, liczby cząstek oraz transformację Galileusza. Dobrze, że taki rozdział znalazł się w pracy ale dobrze też, że nie jest za długi ponieważ dotyczy rzeczy dobrze znanych.

Centralnym zagadnieniem fizycznym rozważanym w pracy jest rozpad beta. Rozdział drugi przedstawia podstawy teoretyczne zrozumienia tego procesu. Najpierw, w oparciu o teorię Fermiego (złotą regułę Fermiego) wyprowadza się czas połowicznego zaniku ze względu na ten rozpad. Rozważa się jedynie rozpady dozwolone. Następnie przedstawiony został zarys teorii elektro-słabych prądów w rozpadzie beta według: Glashowa, Salama i Weinberga - tak by ostatecznie móc podać, kluczowe z punktu

widzenie pracy, formuły na elementy macierzowe Fermiego i Gamowa-Tellera służące do wyznaczenia później stabilności układu jądrowego ze względu na omawiany rozpad beta. W rozdziale tym dalej omawiane są poszczególne elementy macierzowe i unitarność macierzy CKM po to by przejść do kluczowego i moim zdaniem najbardziej delikatnego problemu tj. wyznaczania elementu macierzy V_{ud} metodami jądrowymi.

Opis użytej metody Hartree'go-Focka znajdujemy w rozdziale trzecim. Lektura tego rozdziału przekonuje mnie, że doktorant znakomicie ją zrozumiał i „funkcjonalnie” opanował. Paragraf trzeci opisuje ogólnie użytą teorię funkcjonału gęstości, zwracając uwagę na trudności związane z nielokalnym charakterem członu wymiany Coulombowskiej oraz na problem prawidłowego uwzględnienia oddziaływań trójciałowych, które to w rzeczywistości symuluje się oddziaływaniem dwuciałowym. Na koniec tej części omówiony został warunek samozgodności i numerycznej stabilności rozwiązań wraz z jego implementacją w kodzie HFODD. Paragraf czwarty dotyczy opisu konkretnie już użytego w pracy funkcjonału typu Skyrme'a - niezależnego od gęstości tj. siły SV. Bez wątplenia nie jest to oddziaływanie dające najlepsze odtworzenie znanych danych doświadczalnych takich jak: masy jądrowe, promienie jądrowe czy też bariery rozszczepieniowe. Istnieje cały szereg o wiele bardziej wyrafinowanych i lepiej dopasowanych funkcjonałów jądrowych gwarantujących dużo lepszą zgodność z eksperymentem. Wybór ten należy więc rozumieć jako wybór z konieczności. Człony zależne od gęstości generują bowiem niestabilności numeryczne uniemożliwiające zastosowanie technik rzutowych przywracających złamane symetrie, co jest przecież kluczowe z punktu widzenia tej pracy. W odpowiednim paragrafie tego rozdziału uczciwie się pisze o problemie niskiej masy efektywnej i wynikających z tego konsekwencjach w postaci niestabilności rozwiązań nadprzewodzących. Wymusza to, jak napisał Autor, użycie technik rzutowania z wyznacznika zamiast zastosowania dużo prostszych rozwiązań nadprzewodnikowych.

Bardzo ciekawe i dobrze napisane są kolejne paragrafy tego rozdziału, w których krok po kroku opisuje się efekty związane z przywracaniem kolejnych symetrii po zaaplikowaniu odpowiedniej techniki rzutowej. Pokazano np.: że uwzględnienie członów klasy III (oddziaływanie izowektorowe łamiące symetrie ładunkową) zaraz w wiodącym rzędzie wyjaśnia zadowalająco (rys.3.1) anomalię Nolena-Shifera (duże wartości MDE). Bardzo przekonujący jest także wynik pokazany na rysunku 3.2, gdzie po przywróceniu symetrii rotacyjnej uzyskano zdecydowanie lepsze energie wiązania jądrowego. Następnie dyskutowane są efekty związane z przywróceniem symetrii izospinowej; gdzie tym razem posłużono się innym wolnym (w tym przypadku) od biegunów w hamiltonianie oddziaływaniem typu Sly4. Kolejne paragrafy to prezentacja formalizmu i przestrzeni konfiguracyjnej modelu DFT-NCCI, w którym mieszanie odpowiednich konfiguracji pozwala na opis jądrowych stanów wzbudzonych. Nie jest to proste rozszerzenie (MR-DFT) ale bardzo zaawansowane podejście wymagające poza zrozumieniem tematu dużych zasobów komputerowych. Jak widać Pan Maciek rozumiejąc znakomicie niełatwą metodę DFT-NCCI doskonale opanował także niezbędne narzędzia numeryczne by móc jej używać. Jako przykład zastosowania DFT-NCCI może posłużyć rysunek 3.8 na którym pokazano uzyskaną energię wzbudzenia multipletów izowektorowego i izoskalarne dla ^{42}Sc . Wobec zaangażowanych

olbrzymich środków wynik może nie satysfakcjonować, szczególnie w kanale $T=1$ dla dużych spinów. Dla mnie jednak, zawarta w tym kontekście krytyczna dyskusja wciąż istniejących niedostatków metody jest dużo bardziej wartościowa i pouczająca niż same niedoskonałości odtworzenia danych. W szczególności bardzo dużo informacji niosą ze sobą rysunki takie jak 3.10, szczęśliwie kilkukrotnie prezentowane w pracy, a obrazujące wkład procentowy różnych konfiguracji do funkcji falowych NCCI. Nauka o „aktywności” stanów jądrowych jaka z nich płynie jest bezcenna z punktu widzenia opisu własności wzburzeń jądrowych.

Rozdział czwarty dotyczy rozpadu beta typu Fermiego. Rozważa się przy tym jedynie rozpady (super)dozwolone zachodzące między stanami analogowymi z $T=1$. Oryginalnym wynikiem tej części pracy jest wyznaczenie poprawek izospinowych - δ_c dla dostępnych przejść superdozwolonych. Wartości wspomnianej poprawki uzyskano dzięki zmieszaniu konfiguracji wszystkich dostępnych reprezentacji stanu podstawowego używając w tym celu opisanego wcześniej podejścia DFT-NCCI. Wyniki poprawek izospinowych - δ_c , których źródłem jest jedynie oddziaływanie Coulomba zebrano w tabeli 4.1. Posłużyły one dalej do testów unitarności macierzy CKM. Suma kwadratów odpowiednich elementów macierzowych dała: 0.99892(65) co sugeruje jej unitarność na poziomie przedziału ufności równym 3σ . Dalej wyznacza się tę samą poprawkę ale tym razem z przywrócenia symetrii izospinowej δ_{ISB} . Okazało się, co dobitnie pokazuje rysunek 4.2, że wpływ rzutowania na izospin obniża wartość poprawki δ_{ISB} dwukrotnie w lekkich i kilkukrotnie w ciężkich jądrach. To wydaje mi się istotny wniosek tej części pracy. Dalej mamy analizę wpływu na tę poprawkę pochodzącą już od nieco bardziej subtelnych efektów tj. wpływu izowektorowego oddziaływania kontaktowego oraz wpływu struktury jądrowej. Autor zamyka tę cenną dyskusją błędu popełnianego przy wyznaczaniu poprawki izospinowej. Taka krytyczna analiza niepewności metody teoretycznej to dowód dużej dojrzałości naukowej doktoranta. Zdaje sobie On też doskonale sprawę, że trudny do oszacowania błąd natury systematycznej polega na zastosowaniu egzotycznej skądinąd siły - SV i niemożności sprawdzenia innego typu oddziaływania.

Rozdział piąty jest znakomity. Obfituje w wyniki nowe i ciekawe. Autor zawarł w nim analizę rozpadu beta typu Gamowa-Tellera (GT). Wyprowadzono (po wyrzutowaniu) odpowiedni element macierzowy, stosując ogólną i co należy podkreślić wolną od dodatkowych parametrów postać operatora - 5.3. Tak wyznaczony element macierzowy GT został następnie zaimplementowany w kodzie HFODD. Bardzo ważną częścią pracy jest zbadanie efektu „*quenchingu*” tj. redukcji wzmiankowanego elementu macierzowego w ośrodku jądrowym. Jednoznacznie pokazano (rys 5.2), że wyliczony w ramach rozwiniętego DFT-NCCI podejścia, element macierzowy typu GM dla przejść między jądrami zwierciadlanymi pokrywa się właściwie z wartościami wyznaczonym w ramach modelu powłokowego. To prowadzi to bardzo ważnego wniosku, iż za efekt „*quenchingu*” nie mogą odpowiadać ani korelacje ze wzbudzeniami rdzenia ani też ograniczenie przestrzeni konfiguracyjnej. Dalej Autor (inspirowany pracą [47]) zasugerował, że za efekt redukcji odpowiedniego elementu macierzowego GM mogą być odpowiedzialne dwu-ciałowe prądy naładowane. Następnie wyznaczono funkcje odpowiedzi na wymuszenie spinowo-izospinowe i przebadano niskoenergetyczną

strukturę jądrową wraz z rozkładami nasilenia rozpadu GT w jądrach o $A=8$. To wyjątkowo ciekawe, oryginalne i autorskie wyniki tej pracy. Dla przykładu bardzo informacyjny jest wykres rozkładu nasilenia GT dla stanów 1^+ w jądrze ^8Li (rysunek 5.6) czy stanu podstawowego 4^+ w jądrze ^{24}Mg (rysunek 5.15). Wyniki tego rozdziału pokazały, że przeprowadzone rachunki z użyciem DFT-NCCI są konkurencyjne do tych opartych o model powłokowy. Przedstawione rachunki dają możliwość interpretacji funkcji nasilenia GM w intuicyjnym języku wyznacznika Slatera i zdeformowanych orbitali nilssonowskich.

Uwagi krytyczne/pytania:

1. Dodanie kontaktowych oddziaływań trój- i cztero-ciałowego, o których autor pisze w rozdziale 3. §4 przy jednoczesnym utrzymaniu technik rzutowych jest moim zdaniem obecnie w dalekich powijakach. Chętnie usłyszę o perspektywie rozwoju tego kierunku badań.
2. Pytania dotyczące protokołu dopasowania stałych w kanale siły klasy III, a więc kanale kluczowym dla całości przedstawionej rozprawy:
 - Co sprawia, że wierzymy w to, iż można dopasować jedynie 4 parametry (3.55; 3.56) z funkcjonału nie dając swobody zmiany pozostałym?
 - Skąd wiadomo o niezależności/nieskorelowaniu tych parametrów z pozostałymi w oddziaływaniu?
 - Jak takie „usztynienie pozostałych parametrów funkcjonału” (ograniczenie wymiarów minimalizacji χ^2) wpływa na bądź co bądź bardzo subtelne efekty strukturalne badane w przedstawionej pracy?
3. Eksperymentalne wartości poprawek izospinowych (4.5) są w istocie zależne od najbardziej niepewnej poprawki wyznaczanej na gruncie modeli jądrowych - δ_{NS} . Jak oszacowano błąd wyznaczenia tej wielkości podawany w nawiasach w tabeli 4.1?
4. Podobna uwaga jak wyżej dotyczy „eksperymentalnych” wartości elementu macierzowego GT, który de facto wyznacza się używając raczej niepewnego teoretycznego elementu macierzowego typu Fermiego.
5. W przypadku jader ciężkich norma elementu macierzowego GM jest wciąż za duża. Wydaje mi się oszacowany w pracy błąd (1%) związany z zastosowaniem zbyt ubogiej liczby powłok oscylatorowych dla jader ciężkich jest zbyt optymistyczny. Czy Autor sprawdzał jak wyniki $|M_{\text{GT}}|$ dla jader ciężkich zmieniają się wraz ze wzrostem wymiaru bazy?
6. Chętnie dowiem się jak konkretnie zrozumienie efektu „*quenchingu*” pomoże w modelowaniu procesów astrofizycznych zachodzących w gwiazdach o czym doktorant napisał w §2 rozdziału 5 na stronie 98 ?

7. Wobec niedoboru masy (^8Be) przy prawidłowym odtwarzaniu stosunku przejść wewnątrz pasmowych (E_{4+}/E_{2+}) mam pytanie; jaką rolę odgrywają oddziaływania trójciałowe w tym jądrze? Brakuje mi tu konfrontacji z pracą P. Navratil, W. E. Ormand, PRL 88, 152502 (2002), gdzie na rys. 2 – w panelu środkowym pokazano wpływ efektów trójciałowych właśnie. Widać, że poprawiają one energie wiązania w omawianym ^8Be o $\sim 2\text{MeV}$. To jedyny brak literaturowy jaki zauważyłem!
Przy okazji we wspomnianej pracy dyskutuje się rolę stanu „intruderowego” 0^+ dla $V_{3\text{eff}}$. Czy Autor taki stan zaobserwował i badał jego znaczenie?
8. W przypadku jądra ^{24}Mg brakuje mi zbadania konfiguracji $2p-2h$ złożonej z aktywnych konfiguracji 3 i 4 (tabela 5.4). Widać np. że złożona z nieco mniej „aktywnych” stanów konfiguracja $4qp$ nr. 19 leży stosunkowo nisko w energii. Takie zachowanie (minimum metastabilne) może mieć znaczenie dla czasu życia tak uformowanego układu jądrowego.
9. Co oznacza istotna zmiana deformacji dla niektórych stanów pokazana w tabeli 5.4? Np. gs jest silnie zdeformowany kwadrupolowo podczas gdy wspomniane wyżej wzbudzenie $4qp$ daje rozwiązanie prawie sferyczne. Co z innymi więzami i miniami w innych kierunkach?
10. Ostatni paragraf 3.3 rozdziału 5 pozostawia spory niedosyt. Brakuje bardziej szczegółowej analizy uzyskanych wyników na wzór tych dla ^{24}Mg . Warto by było zobaczyć np.: wkłady różnych konfiguracji do funkcji falowej, funkcje nasilenia dla 1^+ , etc.

Dorobek publikacyjny Pana Macieja Konieczki stanowiący podstawę przedłożonego doktoratu to 7 artykułów opublikowanych w pismach o zasięgu międzynarodowym. Trzy prace opublikowano w *Physical Review C*, jedną w *Comp. Phys. Comm.*, dwie w *Acta Phys. Pol. B* a jedna wciąż oczekuje na opublikowanie i jest dostępna w *ArXiv*. Chcę też zauważyć, że oprócz wspomnianych prac w dorobku doktoranta znajduje się kilka współautorskich artykułów (5) opublikowanych także w znakomitych pismach a dotyczących nieco odmiennej tematyki. Na tym etapie kariery naukowej uznać należy ten dorobek za istotnie przekraczający przeciętny.

Doktorant doskonale opanował skomplikowane metody numeryczne niezbędne do przeprowadzenia zaprezentowanych tu badań. Wielokrotnie słyszałem też znakomite wykłady Pana Macieja Konieczki na międzynarodowych szkołach i konferencjach. Rysuje mi się więc jasny obraz osoby naukowo dojrzałej, krytycznej wobec własnych wyników z jednej strony a pełnej entuzjazmu do podejmowanych działań i pracowitości z drugiej.

Bez jakichkolwiek wątpliwości stwierdzam, że praca doktorska pt.: „Rozpad beta w uogólnionym modelu jądrowego funkcjonatu gęstości” spełnia wszelkie wymogi

stawiane rozprawom doktorskim i wnioskuje o dopuszczenie Pana Macieja Konieczki do jej publicznej obrony.

Pośród bardzo wielu ciekawych, intrygujących i nowatorskich spostrzeżeń i wniosków zawartych w recenzowanej dysertacji za bezsprzecznie wybitne uważam:

- Wykluczenie, znanego z literatury tematu wniosku, jakoby za przeszacowanie elementu macierzowego w rozpadzie beta miały odpowiadać: przybliżenie rdzenia oraz ograniczenie przestrzeni walencyjnej.
- Zastosowanie metody bezrdzeniowego mieszania dowolnych konfiguracji opartego o jądrowy funkcjonal gęstości w celu wyznaczenia, po raz pierwszy w literaturze, funkcji odpowiedzi Gamowa-Tellera w jądrach lekkich. Badanie to pozwala na dużo lepsze zrozumienie procesu rozpadu beta i nie mam wątpliwości będzie stanowiło inspirację dla przyszłych badań w tym kierunku.

W związku z powyższym zwracam się prośbą do Rady Wydziału Fizyki UW o **wyróżnienie** rozprawy doktorskiej napisanej przez Pana Macieja Konieczkę w Katedrze Modelowania Układów Złożonych pod kierunkiem Pana prof. dr hab. Wojciecha Satuły a zatytułowanej: „Rozpad beta w uogólnionym modelu jądrowego funkcjonału gęstości”.

KIEROWNIK ZAKŁADU
Fizyki Teoretycznej
Narodowego Centrum Badań Jądrowych

dr hab. Michał Kowal, prof. NCBJ