



Otwock-Świerk 17.08.2022 r.

Dr hab. Jacek Rządkiwicz, prof. NCBJ
Narodowe Centrum Badań Jądrowych
ul. Andrzeja Sołtana 7, 05-400 Otwock-Świerk

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Weroniki Biela-Nowaczyk „Rzadkie procesy atomowe w ciężkich jonach badane przy pomocy aparatury EBIT”.

Rozprawa doktorska mgr Weroniki Biela-Nowaczyk „Rzadkie procesy atomowe w ciężkich jonach badane przy pomocy aparatury EBIT” została przygotowana w Instytucie Fizyki (IF) Uniwersytetu Jagiellońskiego (UJ) w Krakowie pod kierunkiem promotora prof. dra hab. Andrzeja Warczaka. Rozprawa obejmuje zarówno eksperymentalne jak i teoretyczne badania procesów rekombinacyjnych zachodzących w jonach. Poznanie tych procesów jest niezwykle ważne dla rozwoju metod diagnostycznych plazmy astrofizycznej oraz plazmy wytwarzanej w laboratoriach. Badania eksperymentalne prowadzone były z wykorzystaniem pułapki jonów z wiązką elektronową (*ang. Electron Beam Ion Trap, UJ-EBIT*) zainstalowaną w Laboratorium Ciężkich Jonów w IF UJ. Wyniki eksperymentalne zostały porównane z obliczeniami teoretycznymi wykonanymi za pomocą programu *Flexible Atomic Code (FAC)*. Rozprawa ma formę opracowania liczącego 148 stron, podzielonego na sześć rozdziałów i wyczerpujący spis literatury zawierający odniesienia do 99 pozycji bibliografii. Praca zawiera streszczenie w języku polskim i angielskim, podsumowanie oraz dodatek opisujący obliczenia wykonane za pomocą kodu *FAC*.

Rozprawa doktorska rozpoczyna się od wstępu, w którym zdefiniowano cel naukowy przeprowadzonych badań, ich znaczenie oraz organizację pracy. Doktorantka jako cel pracy określiła uzyskanie wyników analiz procesu dwuelektronowej rekombinacji (*ang. dielectronic recombination*) oraz przeprowadzenie pierwszej udanej obserwacji trójelektronowej rekombinacji. W tym miejscu wydaje się, że cel związany z przeprowadzeniem pierwszej udanej obserwacji trójelektronowej rekombinacji powinien być określony bardziej szczegółowo. Obserwacja procesu trójelektronowej rekombinacji (TR) była już raportowana we wcześniejszych publikacjach, np. *Huang et al. ApJS 235, 2 (2018)*, *Schnell et al. Phys. Rev. Lett. 91, 043001 (2003)*. Przedstawione wyniki w pracy pokazują sygnaturę procesu TR z udziałem dwóch elektronów powłoki K (KK TR). A zatem celem pracy nie była pierwsza obserwacja ogólnego procesu TR ale specyficznego procesu KK TR. Przedstawione w rozdziale znaczenie badań w kontekście modelowania plazmy, lepszego poznania elektronowych procesów korelacyjnych a nawet testowania modeli jądrowych nie budzi zastrzeżeń.

W rozdziale drugim doktorantka omówiła metodykę prowadzonych badań, w szczególności zasadę działania i schemat pułapki jonów UJ-EBIT zainstalowaną w Laboratorium Ciężkich Jonów IF UJ, system detekcyjny promieniowania rentgenowskiego bazujący na detektorze krzemowym typu SDD o wysokiej czystości oraz system akwizycji danych umożliwiający rejestrację widm fotonowych w funkcji czasu jonizacji i energii elektronów. W rozdziale przedstawiono silne uzasadnienie dotyczące braku istotnej roli tzw. efektu typu pile-up (nakładania się sygnałów następujących w krótkich odstępach czasowych), dzięki czemu praktycznie wykluczono możliwość zniekształcania rejestrowanych widm rentgenowskich. Ponadto przeprowadzono dyskusję innych efektów aparaturowych takich jak wewnętrzne promieniowanie detektora czy występowanie tzw. pików ucieczki. Analiza ta pozwoliła na kalibrację energetyczną w oparciu o linie $K\alpha$ krzemu z dokładnością 2%, co odpowiada mniej więcej zdolności energetycznej używanego detektora (128 eV dla energii 5,4 keV).

W rozdziale przedstawiono również wpływ tzw. getteru cyrkonowego (używanego jako absorbera gazów resztkowych) na rejestrowane widma rentgenowskie. Podobnie jak w przypadku krzemu, promieniowanie Zr zostało wykorzystane do kalibracji. W tym miejscu wskazana byłaby bardziej szczegółowa informacja na temat przeprowadzonej kalibracji energetycznej, dotycząca zachowania (bądź nie) liniowości kalibracji z całym zakresie energetycznym oraz informacja o możliwych zmianach współczynników kalibracyjnych w czasie wielogodzinnych pomiarów. W dalszej części rozdziału przedstawiono parametry pracy katody. W szczególności, doktorantka starannie przedstawiła metodę oszacowania efektywnego promienia przekroju wiązki elektronowej (tzw. promień Herrmanna) oraz gęstości prądów elektronowych. Jak rozumiem stwierdzenie dotyczące oszacowania gęstości prądów w przeprowadzonych eksperymentach (200-800 A/cm²) odnosi się do oszacowania zakresu gęstości prądów. Ponieważ dokładność wyznaczenia gęstości prądu bezpośrednio determinuje dokładność uzyskiwanej gęstości elektronowej, która jest kluczowym parametrem plazmy wytwarzanej w urządzeniach typu EBIT, pojawia się pytanie o dokładność oszacowania gęstości prądu dla danej energii elektronowej (np. dla wartości brzegowych 200 i 800 A/cm²).

W kolejnej części rozdziału drugiego przedstawiono proces tworzenia się plazmy w warunkach pracy urządzenia EBIT. Przedstawione wyniki obliczeń przekrojów czynnych na radiacyjną rekombinację oraz na symulacje rozkładów ładunkowych wydają się rzetelne i spójne. Niemniej jednak w celu weryfikacji przedstawionych obliczeń, pożądane w tym miejscu byłoby porównanie uzyskanych danych teoretycznych z dostępnymi danymi eksperymentalnymi lub choćby z obliczeniami uzyskanymi innym kodem niż FAC. Doktorantka przedstawiła również w sposób ciekawy i przystępny proces tzw. chłodzenia plazmy (jonów) przez odparowanie. Stwierdzono, że dzięki technice chłodzenia przez odparowanie uzyskano dużą efektywność produkcji wysoko zjonizowanych jonów (uzyskano 100-krotny wzrost udziału jonów Ar¹⁶⁺ w mieszaninie jonów w stosunku do udziału jonów Ar¹⁺). Mimo, że uzyskanie wysokiej efektywności nie budzi żadnych wątpliwości, zasadnym wydaje się pytanie związane ze zgodnością uzyskanej efektywności ze wzorem 2.17, w szczególności dla jakiej temperatury jonowej uzyskano niniejszy wynik.

W rozdziale trzecim przedstawiono nierezonansowe procesy atomowe zachodzące w układach typu EBIT. Omówiono występujące promieniowanie charakterystyczne emitowane przez składniki stali, z której zbudowana jest aparatura EBIT oraz przez jony użytych gazów roboczych (Ar i Ne) i gazów resztkowych (Ir, La i Ce). W szczególności przy pomocy kodu FAC wyznaczono energie promieniowania K α i K^h α dla jonów Ar⁶⁺ do Ar¹⁷⁺, co pozwoliło na dekonwolucję zmierzonego widma na poszczególne składowe, w tym K^{s1} α i K^{s2} α odpowiadające przyczynom pochodzącym od niskich i wysokich stanów ładunkowych jonów argonu. Zaprezentowana metoda została wykorzystywana do wyznaczania rozkładów ładunkowych jonów w momencie emisji charakterystycznego promieniowania rentgenowskiego. Ciekawą strukturą, którą udało się zidentyfikować w ramach niniejszych rozważań jest również struktura hipersatelitarna.

Następnie w rozdziale przedstawiono pomiary widm rentgenowskich dla tarcz Ne i Ar dla identycznej energii elektronów zdefiniowanej przez potencjał przyspieszający U_e=5800 V. Dzięki obliczeniom średnich energii fotonów dla procesów RR dla poszczególnych stanów ładunkowych możliwa była precyzyjna identyfikacja poszczególnych składowych widm związanych z procesami K-RR, L-RR i M-RR. W ten sposób zaprezentowano w pracy wyraźne różnice w intensywności radiacyjnej rekombinacji do poszczególnych powłok atomowych dla jonów Ne i Ar. Tego typu analiza daje unikalną możliwość wyznaczania energii wiązania poszczególnych powłok atomowych w jonach wysoko zjonizowanych. W końcowej części rozdziału przedstawiono analizę promieniowania hamowania emitowanego w warunkach plazmy wytwarzanej w układach typu EBIT. Uzyskane

obliczenia teoretyczne wraz z analizą wybranych metod odejmowania tła promieniowania hamowania pozwoliły na uzyskanie 'czystych' widm promieniowania charakterystycznego.

W rozdziale czwartym omówiono analizę ewolucji czasowej rozkładu ładunkowego jonów Ar na podstawie profili linii promieniowania rentgenowskiego uzyskanych dla energii elektronów zdefiniowanej przez potencjał przyspieszający $U_e=6440V$. W celu sparametryzowania tego procesu, widmo rentgenowskie zarejestrowane dla pełnego czasu jonizacji podzielono na trzy okna czasowe (25-100 ms, 101-250 ms i 251-500 ms). Obliczenia przekrojów czynnych na jonizację i ekscytację powłoki K jonów Ar wraz z rozłożeniem linii rentgenowskich serii $K\alpha$ na składowe pochodzące od różnych stanów ładunkowych pozwoliły na uzyskanie rozkładów stanów ładunkowych w krótszym (101-250 ms) i dłuższym (251-500 ms) czasie jonizacji. Co więcej, analizy pozwoliły na uzyskanie cennej informacji o tym, że w dłuższym czasie jonizacji wytworzona plazma charakteryzuje się niemal jednorodną strukturą ładunkową. W tym miejscu wskazane byłoby dodanie przynajmniej ogólnej informacji o niepewności pomiarowej zaprezentowanej metody.

W kolejnej części rozdziału omówiono wyniki eksperymentalne uzyskane na podstawie obserwacji procesu radiacyjnej rekombinacji z udziałem powłoki K (K-RR). Na podstawie liniowej zależności energii fotonów K-RR oraz energii elektronów wyznaczono energie wiązania elektronu powłoki K dla jonów Ar^{16+} i Ar^{17+} z błędami odpowiednio 14 eV i 31 eV. Mimo, że przedstawiona analiza danych i same wyniki nie budzą zastrzeżeń, wskazane byłoby w tym miejscu porównanie uzyskanych wyników ze innymi danymi eksperymentalnymi. Na podstawie analizy widm rentgenowskich wyznaczono również stosunki intensywności promieniowania K-RR dla jonów Ar^{18+} i Ar^{17+} wraz z niepewnościami pomiarowymi. Wykonane przez doktorantkę obliczenia przekrojów czynnych na proces K-RR dla jonów Ar^{18+} i Ar^{17+} pokazały, że ich stosunek wynosi około 2, co pozwoliło na przypisanie obserwowanych eksperymentalnie zmian stosunków intensywności różnicom w gęstościach jonów Ar^{18+} i Ar^{17+} . Następnie stwierdzono, że wyniki przeprowadzonych symulacji stosunków intensywności promieniowania K-RR dla jonów Ar^{18+} i Ar^{17+} zgadzają się z wynikami eksperymentalnymi w badanym przedziale energii elektronów. Porównując jednak przedstawione wyniki eksperymentalne (rys. 4.16) dla energii elektronów powyżej energii 7 keV widać znaczący spadek stosunków intensywności promieniowania K-RR dla jonów Ar^{18+} i Ar^{17+} , co wydaje się nie być zgodne z odpowiednimi obliczeniami (rys. 4.18). Dlatego też wskazany byłby komentarz dotyczący niniejszej niezgodności.

W rozdziale zaprezentowana została również analiza rozkładu ładunkowego jonów Ar w plazmie wytwarzanej w urządzeniu UJ-EBIT na podstawie struktury linii rentgenowskich serii L-RR pochodzących z procesu radiacyjnej rekombinacji z udziałem powłoki L. Uzyskane rozkłady znacząco się różnią od analogicznych rozkładów uzyskanych na podstawie kształtu linii charakterystycznych $K\alpha$ (rys. 4.26). Mimo, że zgodnie z tym co zauważa mgr Weronika Biela-Nowaczyk w obu rozkładach widać istotny udział HCl, jednak uderzająca jest różnica w przypadku udziału jonów Ar^{16+} i Ar^{15+} dla obu prezentowanych metod. W związku z tym wskazany wydaje się komentarz na temat obserwowanych rozbieżności. Wyniki obliczeń średniej energii fotonu towarzyszącego radiacyjnej rekombinacji M-RR dla różnych stanów ładunkowych umożliwiło identyfikację położenia linii M-RR dla pełnego zakresu stanów ładunkowych jonów Ar. Jest to ważny wynik pokazujący staranność przeprowadzonych analiz i uzyskanie informacji o najsłabszym z obserwowanych procesów radiacyjnej rekombinacji.

Rozdział piąty omawia proces dwuelektronowej rekombinacji dla jonów Ar i Ne. Rozdział rozpoczyna się prezentacją ważnych obliczeń dotyczących parametrów rezonansowych procesów rekombinacji K-LL dla jonów Ar^{12+} , w szczególności obliczenia wartości sił

rezonansowych procesów DR, TR oraz QR dla poszczególnych konfiguracji elektronowych (tabela 5.1). W rozdziale zaprezentowano również szczegółową analizę danych eksperymentalnych dotyczących promieniowania K-LL indukowanego elektronami o energii w zakresie 2141-2601 eV. Zaobserwowano, że najintensywniejszą strukturą promieniowania K-LL charakteryzują się jony Ar^{14+} oraz Ar^{15+} , co jest zgodne z obliczeniami teoretycznymi wykonanymi przez mgr. Weronikę Biela-Nowaczyk. W dyskusji wyników doktorantka przywołuje pracę Beilmann'a et al., [24] w której wykazano że dla jonów Ar^{12+} wewnątrzpowłokowe procesy TR odgrywają ważniejszą rolę niż DR. Uważna analiza wartości teoretycznych sił rezonansowych procesów DR i TR przedstawionych w tabeli 5.1 potwierdza ważną rolę procesów TR. Niemniej jednak zaprezentowane wyniki teoretyczne wydają się być w odwrotnych proporcjach niż wartości eksperymentalne i teoretyczne przedstawione w pracy Beilmann'a et al., [24] (współczynnik sumy sił rezonansowych TR oraz DR przedstawionych w tabeli 5.1. nie przekracza wartości 0,8). Również zaprezentowany w dalszej części rozdziału rzut eksperymentalnego widma struktury promieniowania K-LL na oś energii elektronów (rys. 5.5.) dla jonów Ar^{12+} (w obszarze $E_e=2400$ eV) pokazuje odwróconą intensywność linii TR i DR. W związku z tym pojawia się pytanie o ewentualną możliwość modyfikacji opisu teoretycznego bazującego na obliczaniach kodu FAC, tak aby lepiej odtwarzać zaprezentowane dane eksperymentalne dla jonów Ar^{12+} .

W końcowej części rozdziału zaprezentowano obliczenia sił rezonansowych K-LL, K-LM oraz K-LN dla neonu. Obliczenia te pozwoliły na interpretację danych eksperymentalnych, w tym identyfikację sygnatury procesów rekombinacji dwuelektronowych K-LM oraz rezonansów wyższych powłok np. K-LN. W celu określenia występujących zanieczyszczeń plazmy gazami reszkowymi wykonano również pomiary w funkcji energii elektronów w przedziale od 2450 eV do 4450 eV. Pomiary wykazały obecność zanieczyszczeń La, Ce i Ir. Stwierdzono również, że zaprezentowane badania potencjalnie można wykorzystać do wyznaczenia ilościowego domieszek ciężkich pierwiastków w plazmie. W związku z tym, że wyznaczanie poziomu zanieczyszczeń jest bardzo ważnym zagadnieniem w przypadku badań spektroskopowych plazmy tokamakowej prosiłbym o rozwinięcie niniejszego punktu i przedstawienie choć ogólnej metody takiej analizy dla plazmy wytwarzanej w warunkach EBIT.

Rozdział szósty poświęcony został omówieniu wyników analizy procesu wielopowłokowej trójelektronowej rekombinacji (KK TR). W rozdziale zaprezentowano porównanie wyników obliczeń sił rezonansów procesów trójelektronowych KK TR do procesów dwuelektronowych K-LL dla jonów Ar^{15+} , które powinny dominować w analizowanych widmach rentgenowskich w funkcji energii elektronów i energii fotonów. W rozdziale omówiono pomiary widm rentgenowskich serii K w zakresie energii elektronów 5200-7500 eV. Analiza danych wykonana przez mgr. Weronikę Biela-Nowaczyk pozwoliła na dekompozycję mierzonych widm na składowe satelitarne, hipersatelitarne oraz serię K_β . W celu normalizacji intensywności promieniowania hipersatelitarnego przeprowadzono analizę intensywności promieniowania towarzyszącego procesowi radiacyjnej rekombinacji K-RR. Ponadto w procedurze normalizacyjnej uwzględniono czas pomiaru, gęstości elektronowe oraz procentowy udział jonów o poszczególnych stanach ładunkowych. Analiza pozwoliła na identyfikację rezonansowego wzmocnienia promieniowania hipersatelitarnego serii K w wyniku procesów trójelektronowej rekombinacji KK-LLL, KK-LLM, KK-LMM oraz KK-MMN. Dodatkowo przedstawiono analizę stosunków intensywności promieniowania hipersatelitarnego do satelitarnego, tak aby uniezależnić wyniki od czasu pomiaru, gęstości elektronowych oraz rozkładu gęstości jonów. Niniejsza analiza pozwoliła na wysnucie wniosku że sygnatura procesu KK TR w postaci wzmocnienia promieniowania hipersatelitarnego może być obserwowana tylko w przypadku gdy proces KK TR zachodzi dla jonów $q \geq 12$. Przedstawione analizy wskazują że w rozważanym zakresie energii elektronów występuje rezonansowe wzmocnienie promieniowania hipersatelitarnego.

Najsilniejsze wzmocnienie zaobserwowano dla energii około 6500 eV, co sugeruje, że w tym zakresie energii elektronów dominuje proces trójelektronowej rekombinacji K-LMM. Następnie zaprezentowano dodatkową serię pomiarów tak aby uzyskać widma serii K z większym udziałem jonów Ar o wyższych stanach ładunkowych. Dodatkowe wyniki ponownie wskazały na istnienie rezonansowego wzmocnienia promieniowania hipersatelitarne świadczącego o występowaniu procesów KK TR. Tym razem obserwowane struktury rezonansowe są przesunięte nieco w kierunku wyższych energii elektronów co odpowiada wyższym średnim stanom ładunkowym jonów Ar (w szczególności jonom Ar^{16+}). Wyniki niniejszych analiz należy z całą pewnością uznać za największy sukces naukowy zaprezentowanej rozprawy.

Jeżeli chodzi o część edytorską, należy stwierdzić, że praca przygotowana jest bardzo starannie, włącznie z niezwykle starannie przedstawionymi pozycjami bibliograficznymi, wzorami i rysunkami. Wskazując pewne niedoskonałości edytorskie należy stwierdzić, że niektóre rysunki powinny być opisane bardziej szczegółowo, np. w opisie rysunków 2.15, 2.16 i 4.25 powinna znaleźć się informacja o tym, że wyniki dotyczą jonów Ar. Na rysunkach 3.12 i 4.23 zaznaczone błędy wydają się dotyczyć stanów ładunkowych, gdy powinny - jak rozumiem - dotyczyć niepewności energii fotonów. Skala rzędnych na rysunkach 4.2 i 4.3 mogłaby być przedstawiona bardziej czytelnie.

Powyższe uwagi nie mają zasadniczego wpływu na zdecydowanie pozytywną ocenę pracy doktorskiej. Recenzowana rozprawa stanowi autorski wkład mgr Weroniki Biela-Nowaczyk w badania procesów rekombinacyjnych odgrywających ważną rolę w poznaniu struktur plazmowych powstających w warunkach astrofizycznych i laboratoryjnych. Przeprowadzone pomiary eksperymentalne rzadkich procesów atomowych były czasochłonne i wymagały zastosowania zaawansowanych metod analizy danych. Warto również podkreślić, że dane eksperymentalne zebrano przy pomocy aparatury EBIT zainstalowanej w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie. Wiedza zdobyta podczas przygotowywania niniejszej pracy z całą pewnością pozwoli na dalsze niezwykle ciekawe i ważne badania w dziedzinie fizyki atomowej z wykorzystaniem krajowej infrastruktury badawczej, co samo w sobie stanowi istotną wartość. Mgr Weronika Biela-Nowaczyk wykazała się również umiejętnością przeprowadzenia zaawansowanych obliczeń atomowych zarówno dotyczących struktury atomu jak i przekrojów czynnych na wiele omawianych w pracy procesów, w szczególności na obliczenia sił rezonansowych procesów KK TR. Wyniki prac, które stanowią część niniejszej rozprawy doktorskiej zostały opublikowane w recenzowanych czasopismach naukowych, w których doktorantka jest pierwszym autorem w kolejności niealfabetycznej. Praca zawiera elementy nowości i spełnia wymagania zarówno zwyczajowe, jak i formalne stawiane rozprawom doktorskim. Wnioskuje o dopuszczenie mgr Weroniki Biela-Nowaczyk do dalszych etapów postępowania doktorskiego.

Jacek Rzadkiewicz