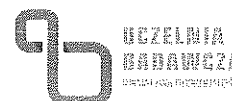




**POLITECHNIKA
GDAŃSKA**

WYDZIAŁ FIZYKI TECHNICZNEJ
I MATEMATYKI STOSOWANEJ



dr hab. Tomasz J. Wąsowicz, prof. PG
Zakład Spektroskopii Układów Złożonych
Instytut Fizyki i Informatyki Stosowanej
Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej
Politechnika Gdańska

Gdańsk, dnia 15.09.2021r.

Recenzja pracy doktorskiej magistra Patryka Kamińskiego
pt. **„Rozkład ładunku chmury elektronowej w atomie He powstałym w wyniku
przechwycenia elektronu przez jon He^+ w zakresie energii pośrednich”**

Zderzenia na poziomie atomowym i molekularnym stanowią najbardziej elementarne procesy, których poznanie decyduje o rozumieniu bardziej złożonych zjawisk zachodzących w atmosferach Ziemi i innych planet, w plazmie, czy też w procesach spalania. Reakcje inicjowane zderzeniami cząstek naładowanych odgrywają również ważną rolę w wielu dziedzinach inżynierii i technologii. Luminescencja wytwarzana w wyniku bombardowania wiązką jonów jest czułym narzędziem analitycznym służącym do pozyskiwania informacji o miejscach defektów i zanieczyszczeń materiałów izolacyjnych i półprzewodników. Ponadto ostatnie lata przyniosły rozwój nowej techniki wytrawiania, obróbki i wytwarzania materiałów oraz obrazowania próbek w mikroskopach jonowych przy użyciu skupionych wiązek jonów (z ang. Focused Ion Beam – FIB). Poza zastosowaniami, samo zrozumienie procesów zderzeniowych jest problemem o fundamentalnym znaczeniu dla oddziaływań atomów i cząsteczek w fazie gazowej.

I właśnie w problematykę badań podstawowych wpisuje się przedstawiona do recenzji praca magistra Patryka Kamińskiego, która została wykonana w Zakładzie

Fizyki Atomowej Instytutu Fizyki Doświadczalnej Uniwersytetu Gdańskiego pod kierunkiem dr. hab. Ryszarda Drozdowskiego, prof. UG. Rozprawa ta dostarcza nowych i szczegółowych danych dotyczących mechanizmu oddziaływania kationu helu z atomem helu.

Rozprawa mieści się na 154 stronach i składa się ze wstępu, pięciu rozdziałów, podsumowania, ośmiu uzupełnień i piśmiennictwa. W szczególności, praca zawiera 86 rysunków, 8 fotografii, 20 tabel i 96 odnośników literaturowych. Szata graficzna ilustracji nie budzi zastrzeżeń. Rysunki i fotografie wykonano starannie, a ich opisy są czytelne. Cytowane źródła dotyczą tematyki związanej z problemami poruszonymi w dysertacji. W czterech cytowanych publikacjach (pozycje [6, 10, 43, 44]) współautorem jest Autor recenzowanej rozprawy. Są to artykuły w bardzo dobrych (J. Phys. B [6, 43]), albo dobrych (Phys. Scr. [44], EPJ ST [10]) czasopismach międzynarodowych dla fizyków atomowych i molekularnych.

Rozprawę rozpoczyna „Wstęp” przybliżający czytelnikowi problematykę związaną ze zderzeniami naładowanych cząstek z atomem helu w zakresie energii pośrednich ($v_{pocisku} \sim v_B$). Na końcu tego rozdziału podane są cele, których stan realizacji jest omawiany w poszczególnych rozdziałach pracy. Nadrzędnym celem badań było wyznaczenie stanów wzbudzonych atomu helu powstałych w procesie transferu ładunku z neutralnej tarczy (He) do jonu pocisku (${}^4\text{He}^+$) w zakresie energii pośrednich. Cele szczegółowe to:

- 1) wykonanie obliczeń natężeń ww. linii widmowej z uwzględnieniem przyjętego modelu dynamiki siodłowej i parametrów odzwierciedlających warunki doświadczalne;
- 2) pomiar natężenia linii widmowej helu $\lambda = 447,2 \text{ nm}$ ($1s4l \text{ } {}^3\text{D}, {}^3\text{F} \rightarrow 1s2p \text{ } {}^3\text{P}$) w funkcji natężenia zewnętrznego pola elektrycznego oraz wybranych energii kinetycznych pocisków z zakresu 10-30 keV;
- 3) opis mechanizmu zderzenia;
- 4) wyznaczenie względnych przekrojów czynnych na wspomniany proces;
- 5) obliczenie elektrycznych momentów dipolowych wyznaczonych stanów wzbudzonych.

W rozdziale I skrupulatnie przedstawiono od strony teoretycznej metodę badawczą bazującą na idei promocji elektronu w atomowej pułapce Paula w powiązaniu z teorią dynamiki siodłowej oraz spektroskopią antykrzyżujących się poziomów. Teoretyczne modelowanie procesów zderzeniowych z przeniesieniem ładunku jest bardzo trudne. Wymaga znajomości krzywych energii potencjalnej dla stanów układu He^+He oraz powstałej nietrwałej pseudo-molekuły $[\text{He-He}]^+$, której to rozpad prowadzi do obserwowanych produktów. W zakresie energii pośrednich stany te są sprzężone przez efekty nieadiabatyczne, co dodatkowo utrudnia analizę problemu. W odróżnieniu od tradycyjnego podejścia, wyznaczenie natężenia obserwowanej linii wymagało od magistra Kamińskiego prześledzenia ewolucji stanu wzdłuż przeszło dwudziestomilimetrowego toru ruchu szybkiego wzbudzonego atomu helu. W czasochłonnych obliczeniach kwantowo-mechanicznych jako bazę Autor rozprawy wybrał paraboliczne stany atomu helu charakteryzujące się ściśle określonym elektrycznym momentem dipolowym oraz uwzględnił odpowiednie parametry związane z warunkami doświadczenia. Dla $|M_L| = 2$ w obliczeniach uwzględnił on również bazę stanów sferycznych. Umożliwiło mu to wyznaczenie teoretycznych profili linii widmowej helu $\lambda = 447,2 \text{ nm}$ ($1s4l \ ^3D, \ ^3F \rightarrow 1s2p \ ^3P$) w funkcji natężenia zewnętrznego pola elektrycznego (rysunki 42-46a) oraz dodatkowo dla wybranych energii kinetycznych pocisków z zakresu 10-30 keV (rysunek 46b oraz rysunki 81-86 w Dodatku U.7). Są to obliczenia niestandardowe, które wymagały od magistra Kamińskiego dogłębnego zrozumienia problemu fizycznego oraz ponadprzeciętnej znajomości programowania.

Opis układu doświadczalnego w rozdziale drugim dotyczy stosowanej aparatury, warunków formowania, monitorowania i skupiania wiązki jonów. W rozdziale trzecim Autor prezentuje drogę jaką przebył do otrzymania jak najbardziej optymalnych warunków pracy aparatury pomiarowej. W obu rozdziałach podano wiele istotnych szczegółów fizycznych i technicznych, często decydujących o powodzeniu eksperymentu. Informacje te są szczególnie ważne, jeśli weźmie się pod uwagę fakt, iż praktycznie nie występują one w przyjętym obecnie standardzie publikacji.

Kolejne dwa rozdziały poświęcone są przedstawieniu i analizie wyników doświadczalnych. Wykorzystując technikę spektroskopową antykrzyżujących się poziomów Autor przebadął natężenia linii widmowej $\lambda = 447,2 \text{ nm}$ ($1s4l \ ^3D, \ ^3F \rightarrow 1s2p$

³P) dla sześciu energii kinetycznych jonów He, tj. 10, 15, 20, 23, 26 i 29 keV. Uwzględniając obliczone wcześniej natężenia wybranej linii w kolejnym kroku mgr Kamiński wykonał szereg dopasowań konturów teoretycznych do całych zarejestrowanych krzywych luminescencji. W tym celu zastosował metodę najmniejszych kwadratów Lavenberga-Marquardta. Rezultaty dopasowań są bardzo dobre, co zilustrowano na rysunkach 75-79 oraz przy pomocy krzywych jakości dopasowania nie przekraczających 5%. W efekcie, analiza ta pozwoliła uzyskać elementy macierzy gęstości opisujące stany wzbudzone w procesie przechwyty elektronu, z niepewnościami odpowiednio 5 i 20% dla stanów trypletowych i singletowych. W tabelach 15 i 16 wylistowano względne przekroje czynne na badany proces, które są równe otrzymanym elementom macierzy wzbudzenia. Zsumowanie diagonalnych elementów macierzy gęstości daje ostatecznie wartości średniego elektrycznego momentu dipolowego stanów wzbudzonych, które przedstawiono w tabeli 17. Na bazie przeprowadzonych pomiarów, obliczeń i dopasowań Pan Patryk Kamiński zaproponował mechanizm reakcji $\text{He}^+ + \text{He}$. W wyniku zderzenia przechwytywany elektron może znaleźć się na siodle potencjału utworzonego przez pocisk i rdzeń atomu tarczy. Powstaje przejściowa pseudomolekuła, która rozpada się na $\text{He}^* + \text{He}^+$. Szybkie atomy helu powstałe w procesie przechwyty elektronu znajdują się w stanach wzbudzonych o niewielkich elektrycznych momentach dipolowych w stosunku do wzbudzonych termicznych atomów He. Przy czym stany sferyczne są efektywniej wzbudzane niż stany paraboliczne. Podobnie prawdopodobieństwo wzbudzenia stanów trypletowych jest większe niż stanów singletowych. W tym miejscu muszę podkreślić, że zastosowanie wyników samego pomiaru albo wyłącznie obliczeń nie pozwoliłoby na tak wnikliwy opis procesu zderzenia $\text{He}^+ + \text{He}$.

Podsumowując tę część recenzji należy stwierdzić, że cele pracy w pełni zostały zrealizowane.

Jednakże nasuwa mi się kilka pytań pomimo, że przedstawiony opis teorii i doświadczenia operuje na dużym poziomie szczegółowości i uwzględnia wiele kryteriów. Atomy helu powstałe w wyniku reakcji przechwyty ładunku posiadają elektryczny moment dipolowy. Potwierdza to asymetria natężenia linii i amplitud pików antykrzyżowania się poziomów. Od strony teoretycznej Autor rozprawy udowodnił,

że za tę asymetrię natężenia linii odpowiadają składowe natężenia pochodzące od wzbudzonych niekoherentnie stanów parabolicznych. Czy podjęto próbę uwzględnienia w obliczeniach stanów nie posiadających elektrycznego momentu dipolowego? Czy mogłyby one w jakiś sposób wpłynąć na dopasowania? Czy ze względu na zużycie katody, kryzy i antykatody nie było wahań natężenia prądu jonowego? Kierunek obserwacji ustawiono prostopadłe do kierunku wiązki jonów i atomów helu (str. 88). Czy rozważano ustawienie detektora pod tzw. kątem magicznym? Czy polaryzacja wyemitowanej luminescencji zmienia się i czy może to mieć wpływ na natężenie światła rejestrowanego przez detektor? Z wykresu natężenia luminescencji w funkcji ciśnienia w komorze zderzeń (rysunek 69) wynika, że granica liniowego przebiegu krzywej kończy się na wartości około $1,2 \times 10^{-5}$ mbara, którą w doświadczeniu przyjęto jako optymalną. Czy na pewno przy tej granicznej wartości udało uniknąć się wszelkich efektów ciśnieniowych? Czy nie byłoby lepiej ustawić ciśnienia poniżej tej maksymalnej wartości? Autor dyskutuje też dokładność metody i udowadnia, iż w szczególnie korzystnych warunkach przejścia kaskadowe nie wpływają na obsadzenia niższych poziomów energetycznych. Jednak przedyskutowania wymaga czy ruch jonu helu w polu magnetycznym Ziemi nie spowoduje zaindukowania dodatkowego pola elektrycznego wpływającego na mieszanie się wzbudzonych stanów i np. skrócenie czasów życia niektórych wyżej położonych poziomów energetycznych? I na koniec Autor przewiduje, że wprowadzenie modyfikacji w układzie doświadczalnym umożliwi pomiary zderzeń He z nieco większymi obiektami. Mnie jednak zastanawia, czy możliwa byłaby tego typu analiza dla zderzeń jeszcze większych obiektów, charakteryzujących się większą liczbą stopni swobody np. molekula-molekula? Odpowiedzi na powyższe pytania mam nadzieję uzyskać podczas obrony.

Nie mam jednak merytorycznych zastrzeżeń do wyników naukowych rozprawy. Co więcej, należy podkreślić, że są one bardzo cenne i nie są łatwe do przewidzenia bez zastosowania skomplikowanych metod badawczych zaproponowanych przez Autora. Są to rezultaty unikalne w skali światowej, gdyż pomiarów dokonano przy użyciu niekomercyjnego, specjalnie skonstruowanego spektrometru. Również program komputerowy jest unikatowy. Jednakże z obowiązku recenzenta muszę wymienić znalezione w tekście drobne błędy, niedociągnięcia i niefortunne sformułowania, które

nie zmieniają mojej pozytywnej opinii o rozprawie doktorskiej Pana mgr. Patryka Kamińskiego. Oto najważniejsze z nich: strona tytułowa – jest „Zakład Fizyki Atmowej”, a powinno być „Zakład Fizyki Atomowej”; str. 8, akapit 1 – niespójny zapis „p – He” w odniesieniu do procesów zdefiniowanych na str. 4, proponowałbym użyć „p + He”, albo jeszcze lepiej „H⁺ + He”; tego typu niekonsekwencja pojawia się też dalej w tekście (np. str. 9 „He – He”, str. 15, 17, 19, 21, 26, ... „He⁺ – He” itd.); str. 8, akapit 2 – niepełny opis stanów ³D i ³P linii helu o długości fali 447 nm; str. 9, akapit 1 – czytelnik chciałby wiedzieć w jakiej pracy Wignera pojawia się definicja zasady Wignera zachowania spinu; str. 11, akapit 1 – odwołano się do rysunku 18 z pominięciem piętnastu poprzednich; str. 11, akapit 2 i 3 – odwołano się najpierw do dodatku U.4 i następnie U.6 z pominięciem poprzedzających uzupełnień; str. 11, akapit 3 – niewłaściwe, zbyt kolokwialne sformułowanie „do opisu przekazywania ładunku i wyświecania kwantu światła”, może lepiej byłoby użyć frazy „do opisu procesu przekazu ładunku z jednoczesnym wzbudzeniem pocisku”; str. 11, akapit 4 punkt 1 – zamiast „w funkcji zewnętrznego pola elektrycznego” powinno być „w funkcji natężenia zewnętrznego pola elektrycznego” (analogiczna poprawka powinna się znaleźć w punkcie 2, str. 12) oraz zamiast „kilku energii” logiczniej napisać „wybranych energii”; str. 14, wzór (3) – matematycznie kropka zarezerwowana jest dla mnożenia dwóch liczb, zaś iloczyn skalarny wektorów oznaczamy otwartym kółkiem; uwaga dotyczy także wzorów: (57), (58); str. 19, akapit 2 – jest „Eck i inni zauważył”, a powinno być „Eck i inni zauważyli”; str. 22, akapit 1 – obiekty nie mogą „oddalać się do siebie”; str. 23, akapit 2 – czym są „stany drobinowe pseudomolekuły”?; str. 24, wzór 14 – symbole X i Y nie zostały objaśnione; str. 29, akapit 2 – zamiast „Jest to przyczyną, że” logiczniej brzmi „W rezultacie” lub „W efekcie”; str. 30, akapit 1 – niepełny opis poziomów energetycznych; str. 34, zdanie 1 – jest powtórzeniem kilkukrotnie pojawiającym się w tekście; str. 35, akapit 1 – fraza „W wiązce atomów (...) mamy mieszaninę stanów” jest kolokwializmem; str. 35, akapit 1 – dlaczego do normalizacji przyjęto 100 atomów na sekundę? str. 37, podrozdział I.8.1 – przeniósłbym do wstępu lub uzupełnienia; str. 43, akapit 1 – jest „podał Eck i Wieder”, a powinno być „podali Eck i Wieder”; str. 44, akapit 1 – jest „... trypletowymi (55)”, a powinno być „... trypletowymi zgodnie ze wzorem (55)”; str. 45, tabela 1 – oznaczenie punktów antykrzyżowania dla stanów

konfiguracji 1s4f jest inne niż na rysunku 23; str. 48, akapit 1 – po kropce pojawia się „m”; str. 66, akapit 2 – zdanie „Na rysunkach 42 – 43, w obliczeniach zakładano, że ...” jest nielogiczne; str. 76, pierwsze zdanie podaje czystość helu jako 5.0 – lepiej byłoby użyć czystości wyrażonej w procentach; str. 95, podrozdział III.2, drugie zdanie – „wartość natężenia rejestrowanej wiązki” – jest to nieprecyzyjne sformułowanie; podobnie na str. 100, akapit 2 – „największe natężenie na puszcze Faraday’a”; str. 114 – zbędnie powtórzono listę parametrów charakterystycznych układu doświadczalnego ze strony 66; w referencjach [40], [41], [73], [78] i [95] pojawiają się zagadkowi współautorzy „T. L. a.”, „W. M. a.”, „H. P. R. a.” oraz „R. S.”.

Podsumowując należy zauważyć, iż Autor pracy prawidłowo zdefiniował główny cel i przedmiot badań, a także twórczo rozwinął i zmodyfikował elementy aparatury pomiarowej oraz z powodzeniem zaimplementował technikę obliczeniową do realizacji wszystkich postawionych sobie zadań. W związku z powyższym stwierdzam, że przedstawiona mi do recenzji rozprawa doktorska Pana mgr. Patryka Kamińskiego pt. „Rozkład ładunku chmury elektronowej w atomie He powstałym w wyniku przechwycenia elektronu przez jon He^+ w zakresie energii pośrednich” spełnia wszystkie ustawowe i zwyczajowe wymogi stawiane pracom doktorskim i wnioskuję do Rady Dyscypliny Nauki fizyczne Wydziału Matematyki, Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Gdańskiego o dopuszczenie Pana mgr. Patryka Kamińskiego do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Tomasz J. Hęszcowski

