

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Ireneusza Bugańskiego pt.  
„Metody statystyczne w opisie nieporządku fazonowego i fononowego dla  
kwazikryształów”**

Rozprawa pt. „Metody statystyczne w opisie nieporządku fazonowego i fononowego dla kwazikryształów” wykonana została przez mgr Ireneusza Bugańskiego w Instytucie Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczej i Hutniczej w Krakowie pod opieką Prof. Dr hab. Janusza Wolnego.

**Wprowadzenie**

Od lat problem oznaczenia struktury atomowej i molekularnej dla monokryształów periodycznych jest w zasadzie rozwiązany. Zgodnie z teorią symetrii tylko 1, 2, 3, 4 i 6-krotne osie obrotu są realizowane w tych kryształach. Stwierdzono, że płaszczyzna może być ściśle pokryta tylko przez trzy wielokąty: trójkąt, kwadrat i sześciokąt tworzące komórkę elementarną. W związku z tym prawa symetrii wykluczają pięciokąty i dziesięciokąty. Dopiero odkrycie Dana Shechtmana w roku 1982, który podczas badań z użyciem mikroskopii elektronowej szybko chłodzonych stopów AlMn., otrzymał elektronowy obraz dyfrakcyjny z osią 10-krotną. Badania tych materiałów należących do klasy ” Kwazikryształów” pokazały, że występują one w naturze jako jedno-, dwu- i trój-wymiarowe układy aperiodyczne. Opis uporządkowania dalekiego zasięgu atomów w kwazikryształach jest bardzo skomplikowany. W przypadku tych materiałów dla D2 wymiarowego przypadku pełne pokrycie płaszczyzny wymaga dwóch wielokątów (np. w postaci dwóch rombów). W związku z występowaniem w sieci aperiodycznej dwóch elementów strukturalnych w sieci aperiodycznej występuje dowolność ich ułożenia, a zmiana ułożenia prowadzi do tak zwanego przeskoaku fazonowego. Uporządkowanie dalekiego zasięgu jest łamane przez ten efekt (nieporządek fazonowy). Rozprawa doktorska mgr Ireneusza Bugańskiego dotyczy zastosowania poprawek uwzględniających nieporządek fazonowy i fononowy w obliczeniach struktury atomowej

kwazikryształów, w szczególności kwazikryształów dedekagonalnych. Autor opracował dwa nowe modele teoretyczne uwzględniające nieporządek fazonowy. Pierwszy model dotyczy nowego opisu analitycznego formuły czynnika struktury zakładający mały wpływ nieporządku fazonowego. Drugi model bazuje na przybliżeniu rozkładu prawdopodobieństwa przez jego momenty.

Autor rozprawy w swoich pracach wykorzystał modele przestrzeni wielowymiarowych i wielu formuł matematycznych używanych do oznaczenia struktur niewspółmiernie modulowanych. W rozprawie autor podaje fundamentalne prace De Wolfa jak i Jannera a związane z opisem przestrzeni wielowymiarowej i super-grup przestrzennych (oraz opisem przestrzeni fizycznej równoległej jak i dodatkowej 3+d wymiarowej przestrzeni prostopadłej).

Dorobek naukowy mgr Ireneusza Bugańskiego to 21 publikacji w czasopismach o zasięgu międzynarodowym (w siedmiu publikacjach jest pierwszym autorem,  $h=5$ , liczba cytowań 52, najwyższe cytowania ma praca w Acta Cryst A vol 71 2015, 11 cytowań.). W dorobku należy podkreślić bardzo aktywny udział w konferencjach naukowych na których zaprezentował wyniki 27 prac, w tym 10 wystąpień ustnych

Autor rozprawy wybrał 6 publikacji które są podstawą rozprawy doktorskiej. Tematyka naukowa tego zbioru ujęta została w tytule rozprawy (w oświadczeniach współautorów podkreślono wiodącą rolę mgr. I. Bugańskiego):

„Metody statystyczne w opisie nieporządku fazonowego i fononowego dla kwazikryształów”

Rozprawa liczy 166 stron i podzielona została na następujące rozdziały:

- i. poświęcone wprowadzeniu do historii kwazikryształów oraz ich opisu matematycznego w przestrzeni wielowymiarowej;
- ii. prezentacji możliwych nieporządków w tych kryształach w tym związanych z fononami i fazonami.
- iii. dyskusji użytego oprogramowania.

Ostatnim rozdział 6-ty zawiera kserokopie publikacji i krótkie omówienia wyników. Końcowe rozdziały zawierają listę wystąpień konferencyjnych, listę wszystkich publikacji autora rozprawy oraz listę nagród i wyróżnień.

### **Lista publikacji autora .będące podstawą recenzowanej rozprawy doktorskiej.**

1 Model Refinement of Quasicrystals (Crystallography Reviews, 24, 22-64 (208)) .. 45

- 2 The estimation of the phason flips in 1D quasicrystal from the diffraction pattern (Physica Status Solidi B253, 450-457 (2016)) ... 89
- 3 The order-disorder evolution in quasicrystals through phason flips (Journal of Alloys and Compounds 710, 92-101 (2017)) .. 98
- 4 Atomic Structure of Decagonal Al-Cu-Rh Quasicrystal – Revisited: New Correction for Phonons (Crytals 9, 78 (2019)).... 109
- 5 The moments' series expansion of the tiling's distribution function for a decagonal quasicrystal (Scientific Reports (under review)) .120
- 6 Phason-flips refinement of and multiple-scattering correction fot the d-AlCuRh quasicrystal (Acta Crystallographica A75, 352-361 (2019))

### **Cele i wyniki.**

Tematyka rozprawy leży w nurcie prac naukowych związanych z oznaczeniem struktury kwazikrystalicznej w oparciu o pomiary dyfrakcyjne a realizowanych od szeregu lat w zespole Prof. Dr hab. J. Wolnego.

Cel jaki przyświecał autorowi rozprawy wiąże się z jednej strony z znalezieniem modelu opisującego strukturę atomową kwazikryształu, a następnie udokładnieniu tej struktury uwzględniając nieporządek wynikający z poprawek fononowych i fazonowych . Pierwsza poprawka dotyczy struktur periodycznych i aperiodycznych , a nieporządek fazonowy związany jest tylko z strukturami aperiodycznymi.

Następnym celem było opracowanie formuły czynnika struktury uwzględniającego poprawki nieporządku fazonowego ( w tym mających charakter funkcji Bessla ).

Kolejnym celem było sprawdzenie opracowanych modeli w oparciu o pomiary dyfrakcyjne dekadonalnego kwazikryształu stopu AlCuRh.

W swoich rozważaniach autor rozprawy korzystał nie tylko z opisu matematycznego struktury w przestrzeni wielowymiarowej, ale także z opisu przy użyciu „średniej komórki elementarnej”. Opis ten został opracowany i rozwinięty przez z Prof. Dr hab. J. Wolnego. Średnia komórka elementarna jest aktualnie wykorzystywana dla struktur zmodulowanych a także z sukcesem dla kwazikryształów dekadonalnych oraz ikosaedrycznych. Metoda ta jest bardzo uniwersalna. Analiza w średniej komórce elementarnej jest metodą statystycznych rozkładów prawdopodobieństw. Podstawą analizy statystycznej jest wybór periodycznej sieci referencyjnej.

W oznaczeniu struktury atomowej kwazikryształu istotną rolę odgrywa obliczenie czynnika struktury w przestrzeni wielowymiarowej lub w średniej komórce elementarnej. Aby uzyskać jak najlepsze udokładnienie struktury kwasikryształu należy w obliczeniach uwzględnić nieporządek fononowy i fazonowy. W tym celu autor opracował oprogramowanie pozwalające na udokładnienia struktur kwazikryształów dekadonalnych i ikoseadrycznych. Oprogramowanie to pozwala na uwzględnienie poprawki gaussowskiej dla fazonów oraz wykorzystanie modelu przeskoków fazonowych.

### **Krótkie podsumowanie wyników zamieszczonych w sześciu publikacjach**

**Publikacja 1** jest pracą przeglądową podsumowującą oznaczenia struktury kwazikryształów przy użyciu metody komórki średniej w zespole profesora Wolnego. Autor rozprawy brał udział w opracowaniu prezentacji wyników. Praca liczy 42 strony.

**Publikacja 2.** w której mgr I Bugański jest pierwszym autorem prezentuje obliczenia powiązania rozkładów prawdopodobieństwa w metodzie średniej komórki elementarnej z nieporządkiem fazonowym. Autor opracował nową poprawki na przeskoki fazonowe. Poprawki zastosowane dla struktury 1D-wymiarowej pokazują korelację pomiędzy wartościami momentów rozkładu a stopniem odkształcenia struktury przeskokami fazonowymi.

**Publikacja 3.** (I. Bugański - pierwszy autor) Praca ta wykazała, że wielokrotne przeskoki fazonowe w strukturze prowadzą do struktury amorficznej (z gaussowskim rozkładem prawdopodobieństwa w średniej komórce elementarnej).

**Publikacja 4,** Wyniki tej pracy wskazują, że czynnik struktury kwazikryształu powinien być skorygowany o czynnik temperaturowy dający wkład od drgań atomów w strukturze. (W kryształach periodycznych jest to czynnik Debye'a-Wallera -lub też „displacement factors”). Praca prezentuje wyniki z zastosowaniem funkcji Bessela I-rodzaju do opisu nieporządku fononowego oraz wyników udokładnienia struktury AlCuRh, które wykazują poprawę wskaźników rozbieżności.

**Publikacja 5.** (pierwszy autor). Artykuł złożony do druku zawiera dane udokładnia struktury kwazikryształu AlCuRh gdzie zastosowano przybliżenia czynnika struktury szeregiem Taylora z momentami rozkładu położenia atomów w średniej komórce elementarnej jako współczynnikami. Wyniki ukazują, że uwzględnienie drugiego momentu już w pełni odtwarza obraz dyfrakcyjny. W tej pracy przedstawiono wyniki symulacji struktury z nieporządkowaniem fazonowym metodą Monte Carlo.

**Publikacja 6.** (I, Bugański pierwszy autor), artykuł prezentuje wyniki obliczeń uwzględniający poprawkę do natężeń pików dyfrakcyjnych dla przeskoków fazonowych. Praca pokazuje wpływ fazonów na obraz dyfrakcyjny oraz poprawę udokładnienia struktury kwazikryształu stopu AlCuRh .

W podsumowaniu autor podkreśla, że metoda średniej komórki elementarnej daje bardzo dobre wyniki dla opisu nieporządku fononowego i fazonowego. Do tej pory autorzy prac uwzględniali nieporządek fazonowy przez zastosowanie gaussowskiego rozkładu fazonów w przestrzeni prostopadłej. W rozprawie pokazano, że nieporządek fononowy w kwazikryształach może być lepiej opisany przy użyciu funkcji Bessla.

### **Podsumowanie.**


Wyniki 6-ściu publikacji pokazują, że autor opanował w szerokim zakresie metody pomiarowe oraz obliczeniowe dla materiałów aperiodycznych. Jego prace wniosły nowe podejście do udokładnienia struktur kwazikryształów z uwzględnieniem poprawek na nieporządek fononowy jak i fazonowy. Autor oprócz wyników dotyczących poprawnego oznaczenia struktur materiałów aperiodycznych opracował nowe metody obliczeniowe udokładnienia.

Dorobek publikacyjny 21 prac w dobrych czasopismach naukowych wskazuje na wysoki poziom wiedzy i umiejętności, ale także na zapoznanie się z nietrywialnym opisem w przestrzeni wielowymiarowej dla struktur aperiodycznych.

Rozprawa napisana jest przejrzysto i mimo trudnego opisu matematycznego jest zrozumiała. Uzyskane wyniki zaprezentowane w 21 pracach, że autor jest już wybitnym specjalistą od kwazikryształów.

Rozprawa mgr Ireneusza Bugańskiego spełnia z wyróżnieniem wszystkie warunki dla uzyskania stopnia doktora nauk fizycznych.

Rozprawa spełnia także wszystkie kryteria ustawy o stopniach naukowych. W związku z powyższym wnoszę o dopuszczeniu mgr Ireneusza do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

  
Prof. Dr hab. Adam Pietraszko

Prof. Dr hab. Adam Pietraszko

2019.12.01

Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN

50-422 Wrocław ul. Okólna 2

Rada Naukowa

Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej

Akademii Górniczo Hutniczej w Krakowie

### **Wniosek o wyróżnienie rozprawy doktorskiej mgr Ireneusza Bugańskiego**

Rozprawa pt. „Metody statystyczne w opisie nieporządku fazonowego i fononowego dla kwazikryształów” wykonana została przez mgr Ireneusza Bugańskiego w Instytucie Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczej i Hutniczej w Krakowie pod opieką Prof. Dr hab. Janusza Wolnego.

Wyniki wybranych 6-ściu publikacji pokazują, że autor opanował w szerokim zakresie metody pomiarowe oraz obliczeniowe dla materiałów aperiodycznych. Jego prace wniosły nowe podejście do udokładnienia struktur kwazikryształów z uwzględnieniem poprawek na nieporządek fononowy jak i fazonowy. Autor oprócz wyników dotyczących poprawnego oznaczenia struktur materiałów aperiodycznych opracował nowe metody obliczeniowe udokładnienia struktury .

Dorobek publikacyjny 21 prac w dobrych czasopismach naukowych wskazuje na wysoki poziom wiedzy i umiejętności, ale także na zapoznanie się z nietrywialnym opisem w przestrzeni wielowymiarowej dla struktur aperiodycznych.

W związku z powyższym stawiam wniosek o wyróżnienie rozprawy doktorskiej Pana Ireneusza Bugańskiego.



Prof. Dr hab. Adam Pietraszko