

Dr hab. Włodzimierz Bogdanowicz

Chorzów, 25.11.2019

Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych

Uniwersytet Śląski w Katowicach

Instytut Inżynierii Materiałowej

41-500 Chorzów, ul. 75 Pułku Piechoty 1a

RECENZJA

rozprawy doktorskiej Pana magistra inżyniera Ireneusza Bugajskiego pt.: „Metody statystyczne w opisie nieporządku fazonowego i fononowego dla kwazikryształów” (promotor Pan Prof. dr hab. Janusz WOLNY) opracowana na prośbę Prodziekana ds. Nauki i Współpracy Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej im. Stanisława Stasica w Krakowie Pana Prof. dr hab. inż. Bartłomieja Szafrana (pismo z dnia 16.10.2019).

Przedstawiona mi do recenzji rozprawa doktorska autorstwa I. Bugajskiego pod wyżej wymienionym tytułem zawiera streszczenie oraz pięć rozdziałów tematycznych, podsumowujących wyniki sześciu artykułów, stanowiących integralną część rozprawy, z których pięć opublikowano w renomowanych czasopismach z „listy filadelfijskiej”, a jeden złożono do recenzji w czasopiśmie Scientific Reports. Praca obejmuje 166 tekstu. Pięć rozdziałów tematycznych napisano na 44 stronach zawierających szereg rysunków ponumerowanych podwójnymi indeksami odnoszącymi się do rozdziałów, co utrudnia określenie liczby wszystkich rysunków. Autor rozprawy podał także spis cytowanej literatury zawierający 79 pozycji, w trzech z których był współautorem. Łącznie doktorant opublikował 17 prac, z których dwie stanowią część jego następnego doktoratu prowadzonego na Uniwersytecie Hokkaido pod kierunkiem prof. Hirouyki Takakury. W rozprawie doktorant przedstawił listę swoich wystąpień konferencyjnych, składającą się z 27

pozycji, oraz uzyskane nagrody za najlepszą prezentację ustną (Grenoble, Francja) oraz najlepszy plakat (Wiedeń, Austria) na konferencjach międzynarodowych, jak i udział w grancie „Preludium 11” w latach 2016 -2019 oraz w grancie dziekańskim w latach 2016 – 2018.

W pierwszym rozdziale pracy doktorskiej autor przedstawił krótki szkic historyczny dotyczący rozwoju krystalografii struktur aperiodycznych. W drugim rozdziale przedstawił opis matematyczny struktur kwaziperiodycznych oparty o rzutowanie przestrzeni wielowymiarowej ze szczególnym uwzględnieniem rzutowania dla pokrycia Penrose’a. Omówiono również pojęcie średniej komórki elementarnej, wprowadzone przez prof. Janusza Wolnego. Opis kwazikryształów na podstawie koncepcji średniej komórki elementarnej jest oparty na statystycznym podejściu w opisie nieuporządkowania fononowego i fazonowego i jest alternatywą do metody wielowymiarowej. Dodatkowo doktorant szczegółowo przedstawił metodę średniej komórki elementarnej dla kwazikryształu dekalgonalnego, którego czynnik strukturalny został opisany w rozdziale trzecim. W rozdziale czwartym autor omówił dwa typy nieporządku w kwazikryształach - fononowy i fazonowy oraz i ich wpływ na czynnik strukturalny. Fazony, jako przeskoki atomów pomiędzy sąsiednimi pozycjami energetycznie równoważnymi, nie wprowadzają odkształceń w strukturze gdy stosujemy podejście czysto geometryczne. Można ich opisać jako fale zaburzenia rozprzestrzeniającą się w przestrzeni prostopadłej, która w przestrzeni fizycznej powoduje przeskok atomów pomiędzy pozycjami energetycznie równoważnymi. Możliwość takich przeskoków wiąże się ze stabilnością struktury kwazikrystalicznej. Kwazikrystaliczne fazy zazwyczaj są wtórnymi roztworami stałymi i przy niektórych składach chemicznych i temperaturach mogą być niestabilne. Przypadek taki ma miejsce na przykład dla dekalgonalnych kwazikryształów stopu AlCuCo. Niestabilność tego typu wiąże się z tak zwanymi odkształceniami fazonowymi, które mogą być opisane poprzez zmianę kierunku rzutowania struktury przestrzeni wyżej wymiarowej na przestrzeń fizyczną. Obecność takiego odkształcenia fazonowego manifestuje się poprzez liniową zależność szerokości refleksów dyfrakcyjnych od prostopadłej współrzędnej wektora falowego i dlatego ten typ odkształcenia jest nazywany liniowym odkształceniem fazonowym.

Doktorant podjął próbę opisu wpływu przeskoków fazonowych na obrazy dyfrakcyjne struktur kwazikrystalicznych. Istniejąca poprawka uwzględniająca nieporządek fazonowy jest oparta o rozszerzenie na przestrzeń prostopadłą podejścia opisującego statystykę przeskoków fazonowych, co praktycznie ma miejsce jedynie dla bardzo zdefektowanych kwazikryształów.

W tym przypadku rozkład prawdopodobieństwa położenia atomów może być przybliżony rozkładem Gaussa. Dla przypadku małego stopnia nieuporządkowania, gdy z założenia występują tylko jednokrotne przeskoki fazonowe, doktorant stosując podejście analityczne, zaproponował dla pokrycia Penrose'a model statystyczny bazujący na zliczaniu przeskoków fazonowych. W następnych krokach badań doktorant podjął bardzo ambitny cel – stworzenie modelu nieuporządkowania fazonowego dla pośredniego stopnia nieuporządkowania, często spotykanego w kwazikryształach. W ramach modelu doktorant zaproponował nową metodę nazwaną przez niego „metodą momentów” uwzględniającą w opisie czynnika struktury kolejne momenty rozkładu prawdopodobieństwa powiązanego z siecią kwazikrystaliczną. Dodatkowo doktorant opracował poprawkę do czynnika struktury opisującą związek pomiędzy amplitudą pików dyfrakcyjnych a drganiami fononowymi. Powyższe modele były zweryfikowane przez doktoranta dla dekahedralnych kwazikryształów AlCuRh. Obliczone przy ich pomocy obrazy dyfrakcyjne były bliższe do otrzymanych eksperymentalnie niż dyfraktogramy otrzymane przy zastosowaniu innych modeli. Stosowanie podejścia statystycznego do opisu obrazów dyfrakcji kwazikryształów wydaje się bardzo trafnym, gdyż refleksy dowolnego obrazu dyfrakcyjnego są efektem oddziaływania promieniowania z zespołem dużej liczby atomów.

W rozdziale piątym doktorant przedstawił schemat i możliwości autorskiego oprogramowania napisanego w środowisku Matlab, pozwalającego na udokładnienie struktury kwazikryształów dekahedralnych i ikosaedrycznych. Oprogramowanie autora pozwala dla struktur dekahedralnych na udokładnienie struktury z uwzględnieniem poprawki gaussowskiej na nieuporządkowanie fazonowe oraz zastosowanie poprawki na drgania fononowe jak i udokładnieniu struktury atomowej z wykorzystaniem metody momentów. Oprogramowanie to umożliwia również udokładnienie struktury atomowej z wykorzystaniem analitycznego modelu przeskoków fazonowych, w szczególności udokładnienie struktury z wykorzystaniem uogólnionego zbioru Penrose'a. Ponadto oprogramowanie pozwala na wizualizację danych, rysowania struktur, generowania map gęstości elektronowej. Stworzone przez doktoranta oprogramowanie zostało użyte po raz pierwszy do opisu struktury kwazikryształów ikosaedrycznych występujących w układzie ZnMgTm. Struktura ta została opisana w przestrzeni fizycznej bez stosowania metody przestrzeni wielowymiarowej. Autor planuje dopracowanie obecnie niezbyt przyjaznego interfejsu użytkownika i w przyszłości udostępnienie oprogramowania dla innych badaczy bez opłat licencyjnych.

Opracowane przez doktoranta koncepcje są bardzo istotnym wkładem w rozwój modelowania struktur kwaziperiodycznych. Przedstawiony w rozprawie model nieporządku struktury dekalgonalnej jest czysto geometryczny, związany ze zmianą ułożenia rombów w pokryciu Penrose'a i nie uwzględnia domen antyfazowych, często obecnych w dekalgonalnych kwazikryształach. Wydaje się jednak, że na podstawie tych modeli można w przyszłości uwzględnić także wpływ domen antyfazowych, na obrazy dyfrakcyjne. Modele zaproponowane w rozprawie mogą być bardzo przydatne do określenia wpływu nieuporządkowania fazonowego na przemiany kwazikryształów w ich aproksymanty. Nieuporządkowanie struktury kwazikryształów jako wtórnych roztworów stałych jest często związane z ich metastabilnością zależną od temperatury i składu chemicznego. Bardzo obiecującym byłoby podjęcie próby zastosowanie modeli nieporządku fazonowego i fononowego, zaproponowanych przez doktoranta, do określenia zakresów składu chemicznego określającego największą stabilności struktury.

Powyższe uwagi dotyczące rozprawy mają charakter dyskusyjny i nie wpływają na jej ocenę merytoryczną, którą można określić jako bardzo dobrą z wyróżnieniem. Zwarzywszy na dużą liczbę publikacji (17), nowe modele i nowe metody obliczeń komputerowych zaproponowane i zweryfikowane eksperymentalnie przez doktoranta, wnoszę o wyróżnienie pracy.

Reasumując stwierdzam, że praca doktorska Pana magistra inżyniera Ireneusza Bugajskiego pt.: „Metody statystyczne w opisie nieporządku fazonowego i fononowego dla kwazikryształów” spełnia wymagania dotyczące prac, dlatego wnoszę o dopuszczenie jej do publicznej obrony.



Włodzimierz Bogdanowicz