

Mgr inż. Ireneusz Bugański  
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH

Streszczenie rozprawy doktorskiej pt. „Metody statystyczne w opisie nieporządku fazonowego i fononowego dla kwazikryształów”.

Głównym celem rozprawy było stworzenie nowego modelu uwzględniania nieporządku fazonowego i fononowego dla kwazikryształów w procesie rozwiązywania struktury metodami dyfrakcyjnymi. W pracy skupiono się na kwazikryształach o punktowej grupie symetrii opisującej kwazikrystały dekalne.

W pracy zaproponowano dwa sposoby modelowania nieporządku fazonowego: metodę analityczną, dla małego odstępstwa struktury od idealnego pokrycia kwaziperiodycznego oraz model, w którym rozkład prawdopodobieństwa położenia atomowych jest przybliżony momentami tego rozkładu. Choć czynnik struktury opisywany jest w tym wypadku szeregiem potęgowym, to w zakresie mierzalnym eksperymentalnie błąd natężeń, wynikający z przybliżenia jest poniżej 4%.

W modelu statystycznym wykazano, że drgania fononowe mogą być modelowane funkcją Debye'a-Wallera, jednak z uwagi na mnogość modów lokalnych użyteczne może być zastąpienie funkcji wykładniczej funkcją Bessela.

Pomimo zastosowania nowych modeli obliczone natężenia dla słabych pików dyfrakcyjnych wciąż wykazywały wyraźne odstępstwo od danych eksperymentalnych. Dopiero redystrybucja natężeń przez zastosowanie poprawki na rozpraszanie wielokrotne pomogła rozwiązać problem.

Modele zostały przetestowane dla fazy  $\text{Al}_{61.9}\text{Cu}_{18.5}\text{Rh}_{19.6}$ .

Kraków, 20.09.2019r