

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Macieja Chodynia pt.:**

**„Uogólniony Zbiór Penrose’a w analizie strukturalnej kwazikryształów dekadagonalnych”**

Praca doktorska mgr Macieja Chodynia pt.: „Uogólniony Zbiór Penrose’a w analizie strukturalnej kwazikryształów dekadagonalnych” wykonana została na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH w Krakowie pod kierunkiem prof. dr hab. Janusza Wolnego. Opiekunem pomocniczym był dr inż. Paweł Kuczera.

Podjęta przez Autora tematyka badawcza jest bardzo ambitna, a problemy związane z kwazikryształami należą do najtrudniejszych zagadnień w krystalografii. Badania te są kontynuacją badań prowadzonych od wielu lat w grupie Prof. dr hab. Janusza Wolnego.

Odkrycie kwazikryształów w 1982 roku przez D. Shechtmana pokazało, że obraz dyfrakcyjny z ostrymi pikami dyfrakcyjnymi świadczącymi o dalekozasięgowym uporządkowaniu materii może posiadać pięciokrotną oś symetrii, zabronioną przez krystalografię klasyczną. Brak symetrii translacyjnej w kwazikryształach komplikuje jednak proces opisu struktury, w szczególności obliczenie i udokładnienia czynnika struktury.

Kwazikrystały można zasadniczo podzielić na dwie grupy: ikozaedryczne będące aperiodyczne we wszystkich trzech wymiarach oraz osiowe, będące aperiodyczne tylko w dwóch wymiarach. Stosując wyżej wymiarowy opis Wolffa oraz Janssena, kwazikryształom ikozaedrycznym można przywrócić periodyczność w 6-wymiarowej przestrzeni, natomiast kwazikryształom osiowym w 4- lub 5-wymiarowej przestrzeni. Inne możliwe podejście to zastosowanie metody średniej komórki elementarnej rozwijanej w grupie Prof. J. Wolnego.

Doktorant w swojej pracy koncentruje się na jednoosiowych kwazikryształach, tj. dekadagonalnym (Al-Cu-Rh) i stosuje metodę średniej komórki elementarnej, co umożliwia mu uwzględnienie poprawek na fonony i fazony.

Praca doktorska mgr Macieja Chodynia liczy 89 stron i składa się z dziewięciu rozdziałów.

We **wstępie** Doktorant przedstawia podstawowe problemy związane z kwazikryształami. Brak krystalograficznej komórki elementarnej skutkuje tym, że musimy założyć konkretny

tiling (parkietaż), który dekorujemy atomami, aby przeprowadzić obliczenie czynnika struktury koniecznego do udokładnienia modelu kwazikryształu. Głównym celem pracy było zastosowanie do udokładnienia kwazikryształów dekadonalnych uogólnionego zbioru Penrose'a zamiast stosowanego dotychczas „zwykłego” zbioru Penrose'a.

W **rozdziale pierwszym** Doktorant, na podstawie literatury, przedstawił podstawowe informacje o kwazikryształach rozpoczynając od opisu kwazikryształów 1D przy pomocy ciągów Fibonacciego poprzez metodę cut-and-project, tj. rzutowania odpowiedniego paska z wielowymiarowego układu regularnego, prowadzącego do aperiodyczności w przestrzeni fizycznej. Omawia również metodę statystyczną, tj. metodę średniej komórki elementarnej, czyli alternatywne podejście do kwazikryształów od wielu lat rozwijanej w grupie Prof. J. Wolnego.

**Rozdział drugi** dotyczy opisu kwazikryształów osiowych przy pomocy zbioru Penrose'a. R. Penrose już w 1974 roku pokazał, że do całkowitego pokrycia aperiodycznym wzorem płaszczyzny wystarczą dwa rodzaje figur, np. wąski i szeroki romb albo latawiec i strzałka. Aby wygenerować model kwazikryształu wystarczy odpowiednio udekorować atomami powyższe dwie komórki. Obraz dyfrakcyjny takiej powierzchni posiada 5- lub 10-krotną symetrię. Autor definiuje również podstawowe pojęcia używane w tym opisie, tj. przestrzeń prostą, przestrzeń odwrotną oraz komórkę średnią.

W **rozdziale 3** Doktorant koncentruje się na uogólnionym zbiorze Penrose'a który dotychczas nie był wykorzystywany do opisu struktury kwazikryształów dekadonalnych. Uogólniony zbiór Penrose'a różni się od rombowego zbioru Penrose'a tym, że chociaż zbudowany jest z tych samych jednostek strukturalnych, to zależy od dodatkowego parametru przesunięcia  $s$ , który wpływa na zmianę tilingów. Wprowadzenie parametru przesunięcia  $s$  pozwoliło Doktorantowi uwolnić się w procesie udokładnienia struktury od jednego konkretnego tilingu.

W **rozdziale 4** Autor wyprowadza czynnik struktury dla dowolnie udekorowanego uogólnionego zbioru Penrose'a, co zostało opublikowane w 2014 roku w Acta Physica Polonica (A126, 442-445; M.Chodyń, P.Kuczera, J.Wolny). Uzyskany analityczny wynik dla średniej komórki elementarnej pozwolił na napisanie niezbędnych algorytmów wykorzystanych w procesie udokładnienia, bez konieczności stosowania przybliżeń numerycznych. Poprawność wyprowadzonych wzorów i algorytmów Autor przetestował na wybranych pikach dyfrakcyjnych analizując zmianę natężenia ze zmianą parametru przesunięcia  $s$ . Pokazał również, że wyniki uzyskane dla uogólnionego zbioru Penrose'a, przy



założeniu że  $s=0$ , zgadzają się ze znanymi już wcześniej wynikami dla „zwykłego” zbioru Penrose’a.

W **rozdziale 6** autor przedstawia bogatą historię dotychczasowych badań kwazikryształów Al-Cu-Co w przestrzeniach wyżej wymiarowych, które rozpoczął W. Steurer w 1990 roku. W celu porównania wyników uzyskanych przy pomocy nowej metody oraz modeli z dotychczasowymi badaniami Doktorant wykorzystuje synchrotronowe dane pomiarowe wykonane i przeanalizowane wcześniej przez dr P. Kuczerę.

W **rozdziałach 5 oraz 7** Doktorant przedstawia swój wkład do analizy kwazikryształów dekalgonalnych, gdzie po raz pierwszy zastosował uogólniony zbiór Penrose’a w metodzie średniej komórki elementarnej.

Autor wykorzystał tutaj równoważność obliczeń wielowymiarowych oraz tych przeprowadzonych w przestrzeni fizycznej w ramach średniej komórki elementarnej. Pozwoliło to na obliczenie czynnika strukturalnego dla węzłów rombego pokrycia płaszczyzny (w tym wypadku obliczenia przeprowadzono w przestrzeni 5D). Dekorację rombów z kolei zapisał w 3-wymiarowej przestrzeni fizycznej. Dzięki takiemu połączeniu obu metod udokładnia dekorację rombów w przestrzeni fizycznej i jednocześnie wykorzystuje przejrzystość opisu wielowymiarowego. Dodatkowo ostateczna struktura zapisana jest w przestrzeni fizycznej i można uwzględniać poprawki fononowe oraz fazonowe. Sama analiza wielowymiarowa jest niestabilna w przypadku udokładniania fononów z powodu dużej korelacji pomiędzy parametrami. Jednak zapis struktury w przestrzeni fizycznej pozwala na pozbycie się tych niedogodności i umożliwia przeprowadzenie pełnego udokładniania struktury (wraz z poprawkami na fonony i fazony). Należy podkreślić, że główna różnica w porównaniu z klasycznymi kryształami polega na tym, że udokładniamy dekorację dwóch różnych rombów, a nie pojedynczej komórki elementarnej.

W **ostatnich rozdziałach** Autor podsumował najważniejsze swoje osiągnięcia oraz podał literaturę, na którą powołuje się w pracy.

Najważniejsze osiągnięcie Autora to wyprowadzenie wzoru na czynnik strukturalny dla dowolnie dekorowanego GPT (Uogólniony Zbiór Penrose’a). W celu sprawdzenia końcowych wyników doprowadził wzór na czynnik strukturalny do uproszczonej postaci analitycznej. Wyniki uzyskane z wyprowadzonego wzoru analitycznego, porównane z odpowiednimi wartościami numerycznymi dla ogólnego zapisu wielowymiarowego, potwierdziły pełną zgodność otrzymanych wartości. Następnie dostosował wyprowadzone wzory analityczne dla GPT do udokładniania struktury kwazikryształu dekalgonalnego (Al-

Cu-Rh). Przeprowadzone udokładnianie wykazało niewielkie przesunięcie powierzchni atomowej (ok.  $s=0.1$ ) oraz niewielkie obniżenie czynnika zgodności dopasowania struktury (R). Pojawiające się problemy z dekorowaniem dodatkowych typów rombów (wynikające z dodatkowej, piątej składowej powierzchni atomowej) nie zostały jednak rozwiązane do końca z powodu korelacji między udokładnianymi parametrami. Dlatego ostatecznie Autor założył taką samą dekorację dla wszystkich rombów, co pozwoliło na otrzymanie prawidłowej struktury bazującej na uogólnionym zbiorze Penrose'a, uzyskując końcowe wartości  $s=0.095$  oraz  $R=6.52\%$  (dla porównania przy  $s=0$ ,  $R=6.88\%$ ). W podsumowaniu brak jest jednak głębszej analizy i dyskusji uzyskanych wyników.

Należy podkreślić, że Doktorant napisał również kilka wartościowych i użytecznych programów (patrz rys. 1.18, rys.2.3.1-2.3.4), których jednak nie omawia. Moim zdaniem ich opis powinien znaleźć się w załącznikach do pracy.

Czytanie pracy utrudnia brak ścisłych definicji używanych pojęć i pewna niekonsekwencja w oznaczeniach. Brak jest czasami cytowań, a co za tym idzie wyraźnego podziału pomiędzy wynikami literaturowymi i własnymi. W rozprawie znalazłem kilka drobnych błędów drukarskich i językowych, jak np. str. 71 "grupy przestrzenie", str. 72 "próbka (...) została przegotowana" itp.

Błędy te, jak i zawarte w mojej recenzji uwagi nie obniżają pozytywnej oceny rozprawy.

### **Wnioski końcowe**

Doktorant jest współautorem 5 publikacji o zasięgu międzynarodowym w takich czasopismach jak: Acta Physica Polonica A (3 publikacje), Journal of Physics Conferences Series (1 publikacja) oraz Journal of Alloys and Compounds (1 publikacja), a wyniki badań prezentował na 15 konferencjach krajowych i zagranicznych. Odbił dwa staże naukowe: jednomiesięczny na ETH w Zurichu u Prof. W. Steuera we Szwajcarii oraz trzymiesięczny w Hokkaido University u Prof. H. Takakuro w Japonii. Brał również udział w International School on Aperiodic Crystals w Bayreuth oraz C-MAC Euroschool w Liverpoolu, Split i Bratysławie.

Wyniki rozprawy doktorskiej Pana mgr inż. Macieja Chodynia wnoszą ciekawy wkład w badania kwazikryształów dekalgonalnych i zasługują na uznanie. Uważam, że praca spełnia

warunki stawiane w ustawie o stopniach naukowych. Rozprawa doktorska wskazuje na dużą wiedzę w zakresie prowadzonych badań, jak również dobre przygotowanie w zakresie metod eksperymentalnych i obliczeniowych.

W związku z powyższym wnoszę o dopuszczenie mgr inż. Macieja Chodynia do dalszych etapów obrony pracy doktorskiej.

J. Kusz