

Mgr inż. Maciej Chodyń  
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

**Streszczenie pracy doktorskiej pt.  
„Uogólniony Zbiór Penrose’a w analizie strukturalnej kwazikryształów dekadagonalnych”**

Kwazikryształy są to złożone struktury międzymetaliczne o złamanej symetrii translacyjnej, nieposiadające komórki elementarnej. Ze względu na wymiar przestrzeni można podzielić kwazikryształy na ikozaedryczne, które są aperiodyczne we wszystkich trzech wymiarach, oraz osiowe, aperiodyczne tylko w dwóch wymiarach, a w trzecim wymiarze periodyczne.

Zbiór Penrose'a jest najpopularniejszym modelem używanym do opisu kwazikryształów dekadagonalnych. Jest on zbudowany z dwóch rodzajów rombów pokrywających płaszczyznę w sposób aperiodyczny. Dodatkowo zbiór ten ma lokalne symetrie 5-krotne, a jego obraz dyfrakcyjny posiada symetrię 10-krotną. Uogólniony zbiór Penrose'a jest rozszerzeniem zbioru Penrose'a. Jest on zbudowany z tych samych dwóch rodzajów rombów, jednak posiada dodatkowy parametr, który odpowiada za ułożenie rombów w tworzonym tilingu. Dzięki temu uogólniony Zbiór Penrose'a nie jest jednym ściśle określonym tilingiem, a nieskończoną rodziną tilingów o różnym uporządkowaniu dalekiego zasięgu.

Do wyznaczenia i udokładnienia struktury kwazikryształu potrzebne są dane z dyfrakcji rentgenowskiej, oraz odpowiedni model teoretyczny pozwalający na poprawny opis struktury. Jednym z takich modeli jest zbiór Penrose'a, pozwala on na udokładnienie struktur kwazikryształów dekadagonalnych z dobrymi rezultatami. Ponieważ zbiór Penrose'a jest jednym, szczególnym, przypadkiem uogólnionego zbioru Penrose'a, pojawiło się pytanie, czy nie dałoby się uzyskać lepszych wyników stosując uogólniony zbiór Penrose'a. Zastosowanie uogólnionego Zbioru Penrose'a pozwala na uniknięcie konieczności wyboru konkretnego tilingu, zamiast tego może zostać on dopasowany w procesie udokładniania struktury.

Własności uogólnionego zbioru Penrose'a były już wcześniej badane, nigdy jednak nie próbowano go wykorzystać jako modelu do opisu rzeczywistych struktur kwazikryształicznych. Celem pracy jest wyprowadzenie czynnika strukturalnego dla dowolnie dekorowanego uogólnionego zbioru Penrose'a, a następnie próba zastosowania go w procesie udokładniania struktury Al-Cu-Rh w oparciu o dane dyfrakcyjne. Zależność ułożenia tilingu od parametru pozwoli dopasować uporządkowanie dalekiego zasięgu w procesie udokładniania struktury, oraz sprawdzić czy zbiór Penrose'a jest rzeczywiście najlepszym modelem do opisu kwazikryształów dekadagonalnych.

Kraków, wrzesień 2018