

Streszczenie

Niniejsza rozprawa doktorska dotyczy analizy strukturalnej dekalgonalnych kwazikryształów. Kwazikryształy zostały odkryte przez Dana Shechtmana w 1982 r. Za to odkrycie został on uhonorowany Nagrodą Nobla z Chemii w 2011 r. Kwazikryształy są niezwykle ciekawymi obiektami. Ich obraz dyfrakcyjny składa się z ostrych pików braggowskich, co dowodzi ich uporządkowania dalekiego zasięgu. Jednocześnie ich obrazy dyfrakcyjne wykazują symetrie niezgodne z założeniem symetrii translacyjnej (np. dziesięciokrotne). Dlatego, typ uporządkowania dalekiego zasięgu w kwazikryształach musi być inny niż w przypadku klasycznych periodycznych kryształów, a pojęcie komórki elementarnej przestaje dla nich obowiązywać.

Struktura atomowa dekalgonalnych kwazikryształów może być geometrycznie rozumiana jako periodyczne ułożenie aperiodycznych warstw. Dlatego są one często nazywane dwuwymiarowymi kwazikryształami. Wyróżniamy dwa podstawowe ich typy, tzw. Al-based (na bazie Al) i Franka-Kaspera (na bazie Zn-Mg). Niniejsza rozprawa dotyczy analizy strukturalnej dekalgonalnych kwazikryształów na bazie Al.

Aperiodyczny parkietaż (ang. tiling) jest odpowiednikiem sieci krystalicznej dla kwazikryształów. Składa się on z dwóch (lub więcej) jednostek podstawowych, które ułożone w odpowiedni sposób tworzą doskonale uporządkowany i aperiodyczny zbiór. By opisać strukturę atomową kwazikryształu należy wybrać odpowiedni parkietaż (by ustalić uporządkowanie dalekiego zasięgu) i znaleźć pozycje atomów w jednostkach podstawowych. Najczęściej stosowanym modelem dla dekalgonalnych kwazikryształów jest tzw. rombowy parkietaż Penrose'a. Jego konstrukcja i wyprowadzenie czynnika strukturalnego są szczegółowo opisane w niniejszej rozprawie.

Struktura atomowa kilku dekalgonalnych faz kwazikryształowych została rozwiązana i udokładniona w oparciu o rombowy parkietaż Penrose'a. Nowatorska metoda Średniej Komórki Elementarnej została wykorzystana w wyprowadzeniu czynnika strukturalnego. W odróżnieniu od większości metod udokładnienia struktury kwazikryształów, opartych na podejściu wielowymiarowym, bazuje ona na trójwymiarowej przestrzeni fizycznej. Pozwala to na bezpośrednią kontrolę nad optymalizowaną strukturą bez konieczności rzutowania z przestrzeni wielowymiarowej.

Najpierw rozwiązane zostały dwie dekalonalne struktury w systemie Al-Ni-Co, tzw. "basic Ni-rich phase" i "Edagawa phase" (nazywana również nadstrukturą typu I). W ten sposób dowiedziona została skuteczność metody. Następnie, po raz pierwszy zostały wyhodowane monokryształy dekalonalnych kwazikryształów w systemach Al-Cu-Rh i Al-Cu-Ir o rozmiarach odpowiednich do eksperymentów dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego. Najważniejszym wynikiem pracy jest strukturalna analiza porównawcza całej rodziny dekalonalnych kwazikryształów Al-Cu-Me (Me = Co, Rh, Ir). Podstawową jednostką strukturalną wszystkich trzech faz jest dekalonalny klaster o średnicy $\sim 33 \text{ \AA}$. Klaster ten jest centrowany na wierzchołkach pentagonalnego parkietażu Penrose'a. Struktury atomowe faz Al-Cu-Rh i Al-Cu-Ir zostały rozwiązane jako stopy trójskładnikowe ponieważ duża różnica mas atomowych pierwiastków składowych pozwoliła na ich rozróżnienie na podstawie eksperymentów dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego. Należy podkreślić, że jest to pierwsze w literaturze udokładnienie struktury dekalonalnych kwazikryształów jako stopów trójskładnikowych.