

Prof. dr hab. Marian Surowiec
Uniwersytet Śląski
Instytut Nauki o Materiałach
41 500 Chorzów, ul. 75 Pułku Piechoty 1A
email: marian.surowiec@us.edu.pl

Katowice, 9 wrzesień 2015 r.

**Recenzja pracy doktorskiej mgr. inż. Radosława Strzałki
pt.: Zastosowanie metod statystycznych do opisu struktury
kwazikryształów ikosaedrycznych**

Recenzja opracowana na zlecenie Dziekana Wydziału
Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo – Hutniczej
im. Stanisława Staszica w Krakowie

1. Uwagi wstępne

Niniejsza recenzja stanowi analizę rozprawy doktorskiej mgr. inż. Radosława Strzałki i ma na celu ocenę wartości naukowej tej dysertacji w świetle kryteriów sprecyzowanych w Ustawie o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki z dnia 14 marca 2003 roku (Dz. U. RP z 2003 r., Nr 65, poz. 595, wraz z późniejszymi zmianami).

Przekazana do recenzji praca doktorska jest teoretycznym opracowaniem naukowym poświęconym stworzeniu modelu kwazikryształów ikosaedrycznych w oparciu o nowatorską metodę statystyczną, z wykorzystaniem koncepcji średniej komórki elementarnej rozwijanej w zespole prof. J. Wolnego.

Podjęta przez Autora tematyka badawcza dotyczy aktualnych problemów badawczych związanych ze stosunkowo nieodległym odkryciem nowego stanu materii, jaki stanowią kwazikryształy. Odkrycie kwazikryształów zostało uhonorowane nagrodą Nobla dla Dana Shechtmana (rok 2011). Unikalne właściwości kwazikryształów spowodowały, iż w wielu laboratoriach naukowych prowadzi się intensywne prace badawcze nad otrzymywaniem, badaniem właściwości oraz analizą ich struktury.

Praca doktorska Radosława Strzałki dotyczy ostatniego z tych zagadnień. Doktorant szczegółowo prezentuje wszelkie aspekty podejścia statystycznego opisu struktury kwazikryształów ikosaedrycznych modelowanych za pomocą pokrycia Ammanna. Analizuje właściwości średniej komórki elementarnej dla modelowego kwazikryształu ikosaedrycznego. Wprowadza czynnik strukturalny dla

dowolnej dekoracji atomowej jednostek strukturalnych w pokryciu Ammanna i potwierdza jego poprawność dla przypadku prostej dekoracji. Wykazuje pełną zgodność metody statystycznej z opisem wielowymiarowym w odniesieniu do dekoracji monoatomowej. Zaprezentowane w rozprawie podejście statystyczne pozwala na pełny opis struktury bez potrzeby odwoływania się do alternatywnych metod udokładniania struktury polegających na rzutowaniu z przestrzeni wielowymiarowej.

W przyjętym modelu Autor zamiast powierzchni atomowych wprowadza statystyczne rozkłady rzutów położenia atomowych na sieci referencyjne.

Przedstawiona dysertacja stanowi oryginalne, obszerne studium opisu statystycznego kwazikryształów ikosaedrycznych.

Dodatkowo, w dysertacji Autor weryfikuje istniejący już wielowymiarowy model oparty o podsieć Ammanna o 12-krotnym upakowaniu oraz o model Katza-Gratiasa, pod kątem rzeczywistej struktury atomowej.

Dysertacja w znaczącej części poświęcona jest także pogłębionej analizie rozwoju metody statystycznej do opisu kryształów aperiodycznych w tym struktur modułowanych.

Tematyka rozprawy doktorskiej dotyczy zagadnień fizyki ciała stałego co lokuje ją w dziedzinie nauk fizycznych. Treść pracy doktorskiej odpowiada tematowi określonemu w tytule.

Dysertacja napisana jest w języku polskim, przy czym zasadnicza część spisu treści zawiera punkty w języku angielskim, stanowiące tytuły siedmiu publikacji opracowanych we współautorstwie z grupą kierowaną przez prof. J. Wolnego. Praca zawiera głównie aspekty teoretyczne odniesione jednak do konkretnych struktur kwazikryształów ikosaedrycznych Cd-Yb, Al-Cu-Fe oraz Al-Pd-Mn. Część wyników rozprawy doktorskiej Autor uzyskał podczas pobytu w zagranicznych ośrodkach naukowych w Instytucie Fizyki Słowackiej Akademii Nauk w Bratysławie oraz na Uniwersytecie Hokkaido w Sapporo.

Większość treści prezentowanych w pracy doktorskiej została zweryfikowana poprzez ich publikacje w artykułach naukowych w czasopiśmie o zasięgu międzynarodowym: *Acta Crystallographica* (dwa artykuły), *Applied Physics Letters*, *Israel Journal of Chemistry*, *Acta Physica Polonica*.

Dotychczasowy dorobek naukowy Doktoranta stanowi 11 publikacji i aż 33 wystąpienia konferencyjne.

2. Formalny opis pracy

Recenzowana praca zawiera 59 stron oraz dodatkowo w formie załączników kopie siedmiu artykułów ze współautorstwem Autora dysertacji. Autor dołączył oświadczenia wszystkich współautorów, którzy określili swój udział w poszczególnych publikacjach.

Praca doktorska zawarta jest w pięciu rozdziałach i zawiera 12 rysunków oraz 10 równań matematycznych.

Rozdział 5 stanowiący podsumowanie zawiera opis najistotniejszych osiągnięć dysertacji. Pracę kończy obszerna bibliografia przytoczona w porządku alfabetycznym licząca 138 pozycji. Pozycje bibliograficzne są trafnie dobrane a wśród nich znajdują się najbardziej aktualne, z roku 2015.

Dokonana analiza stanu wiedzy w zakresie tematu pracy doktorskiej zawiera wartościowe informacje stanowiące studium kluczowych pozycji literaturowych dotyczących modeli ikosaedrycznych struktur kwazikrystalicznych.

Rozprawa dowodzi, że Autor wykorzystując dotychczasową, dobrze rozpoznaną wiedzę, dokonał wnikliwej analizy zespołu ciekawych i istotnych zagadnień z zakresu fizyki ciała stałego i krystalografii.

3. Oryginalności pracy

Przedstawiona rozprawa doktorska stanowi oryginalne osiągnięcie naukowe wzbogacające dotychczasową wiedzę o nowy udokładniony model struktur kwazikryształów ikosaedrycznych o szerokich możliwościach aplikacyjnych do struktur aperiodycznych, w tym do struktur modulowanych i aproksymant.

Autor wykazał zdolność do samodzielnego prowadzenia badań w zakresie rozwiązywania struktur aperiodycznych.

Istotnym i oryginalnym wkładem Autora jest:

- stworzenie modelu struktury ikosaedrycznej w przestrzeni fizycznej,
- wykorzystanie stworzonego modelu do opisu struktur niewspółmiernie modulowanych,
- dokonanie analizy otoczenia klastrów w modelach Takakury oraz Katza-Gratiasa.

Obszar naukowych dociekań Autora należy traktować jako źródło inspiracji do dokładnej weryfikacji modelu struktury poprzez

połączenia schematu udokładniania w oparciu o pomiary dyfrakcyjne z metodami obliczeń energetycznych.

Podsumowując stwierdzam, że:

- 1) treść rozprawy odpowiada tematowi określönemu w tytule,
- 2) zamierzony cel pracy został osiągnięty,
- 3) rozprawa stanowi oryginalne ujęcie problemu,
- 4) literatura została właściwie dobrana i wykorzystana.

4. Uwagi krytyczne

Praca stanowi staranne studium literatury jak też wzorowe opracowanie rezultatów stworzonego modelu, stąd ta część recenzji jest wyjątkowo skromna.

1. Zawarte na str. 2 zdanie:

Możliwe są dwie grupy punktowe 3D: 235 oraz 2/m35 (35z kreskam) o odpowiednio 60 i 120 elementach symetrii jest niezrozumiałe. Grupa punktowa 235 zawiera 15 osi dwukrotnych, 10 osi trójrotnych oraz 6 osi pięciokrotnych co daje 31 elementów symetrii łącznie. Następna grupa punktowa zawiera dodatkowo 15 płaszczyzn symetrii oraz środek symetrii co w sumie czyni 47 elementów symetrii.

2. Na tejże stronie:

Aproksymanty to fazy periodyczne o zazwyczaj prostej komórce elementarnej, Fazy kwazikrystaliczne jak i aproksymanty określa się powszechnie jako complex metallic alloys o złożonej (complex) komórce elementarnej, w skład której wchodzi duża liczba atomów.

3. Proponuję zamiast *dokładna stechiometria* zapis *dokładny skład chemiczny*.

5. Ocena wartości merytorycznej pracy i wniosek końcowy

Praca doktorska mgr. inż. Radosław Strzałki stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego. Dowodzi, że Autor opanował warsztat pracy naukowej i niezbędny zasób wiedzy z zakresu aktualnych problemów fizyki ciała stałego. Porusza się swobodnie w zagadnieniach dotyczących modeli rozwiązywania ikosaedrycznych struktur kwazikrystalicznych, dyfrakcji promieni rentgenowskich oraz w zakresie metod udokładniania struktury kwazikryształów.

Wykazując umiejętność wykorzystywania nowoczesnych metod badań oraz zaawansowanych programów komputerowych, Autor stworzył model struktury ikosaedrycznej w przestrzeni fizycznej i zweryfikował ten model w odniesieniu do struktur aperiodycznych.

Rezultaty uzyskane w recenzowanej pracy doktorskiej są przedmiotem kilku publikacji w renomowanych czasopismach z listy filadelfijskiej.

W związku z powyższym stwierdzam, że praca doktorska Pana Radosław Strzałki spełnia warunki Ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki z dnia 14 marca 2003 roku (Dz. U. RP z 2003 r., Nr 65, poz. 595, wraz z późniejszymi zmianami). Wnioskuje o dopuszczenie mgr. inż. Radosław Strzałki do dalszych etapów przewodu doktorskiego i do publicznej obrony.

6. Wniosek o wyróżnienie pracy doktorskiej

Rozprawa doktorska mgr. inż. Radosława Strzałki stanowi wzorowy przykład pracy naukowej realizowanej w ramach owocnej współpracy z wybitnymi specjalistami zagranicznymi. W rezultacie, wielkiej wagi wyniki badań naukowych były przedmiotem publikacji w czasopismach o najwyższym prestiżu naukowym: *Acta Crystallographica*, *Applied Physics Letters*, *Israel Journal of Chemistry*, *Acta Physica Polonica*, a także wyjątkowo licznych wystąpień na konferencjach międzynarodowych. Dokonana wielostronna aplikacja metody statystycznej a w szczególności stworzenie modelu struktury ikosaedrycznej potwierdza wybitne zdolności Doktoranta. Autora dysertacji postrzegam jako dobrego Kandydata do samodzielnej pracy naukowej. Wnioskuje o wyróżnienie pracy doktorskiej Radosława Strzałki.



Marian Surowiec