

Kwazikryształy zostały odkryte przez prof. Dana Shechtmana w 1982 r. podczas standardowych pomiarów wykonywanych na stopie AlMn. Najprościej rzecz ujmując kwazikryształy są to struktury pozbawione symetrii translacyjnej. Odkrycie to zostało uhonorowane Nagrodą Nobla z dziedziny chemii w 2011 r. Od momentu odkrycia struktur aperiodycznych środowisko naukowców zmieniło podejście do definicji porządku w kryształach. Symetria translacyjna nie jest więc warunkiem koniecznym, aby dany materiał stały nazywany był kryształem.

Od dnia odkrycia środowisko badaczy zmagają się z opisem struktury kwazikrystalicznej. Z uwagi na złożoność rozmieszczenia atomów wiedza na temat struktury, a przede wszystkim warunków formowania fazy kwazikrystalicznej jest nieznana. Dotychczasowa wiedza pozwala jednak wysunąć wniosek, że nieporządek fazonowy jest głównym czynnikiem formowania fazy kwazikrystalicznej.

Fazon jest to zmiana rozmieszczenia atomów w strukturze, występująca lokalnie i nie wpływająca na rozmieszczenie atomów w pozostałej części struktury. Reorganizacja atomów wpływa na mierzone intensywności pików dyfrakcyjnych. Zakłada się, że zmiana wartości natężenia odbywa się zgodnie z zależnością znaną jako czynnik Debye'a-Wallera. Ostatnie obliczenia wskazują jednak, że jego zastosowanie jest nieadekwatne. Czynnikiem ten działa w dwóch przypadkach: dla pików o dużej intensywności albo w odniesieniu do struktury, której jednostki strukturalne są ułożone w sposób przypadkowy.

Nowe podejście do problemu nieporządku fazonowego może przynieść doskonałe rezultaty. W statystycznym modelu kwazikryształów wyprowadza się rozkład położenia atomów. Flip fazonowy jest widoczny jako zmiana kształtu tego rozkładu i może zostać uwzględniony w obliczeniach. To podejście, bazując na obliczeniach teoretycznych, pokazało znaczną poprawę otrzymanych wyników w stosunku do zastosowania czynnika Debye'a-Wallera. Co więcej, nowa metoda pozwala wyznaczyć prawdopodobieństwo flipu fazonowego, czego nie potrafiła poprzednia poprawka, co wydaje się być niedozwolone w celu zrozumienia procesów stabilizacji kwazikryształów.

Projekt jest ukierunkowany na wyprowadzenie korekty fazonowej dla kwazikryształów o symetrii ikozaedrycznej i dekadonalnej oraz zastosowania jej do rozwiązania struktury wybranych stopów kwazikrystalicznych. Oczekuje się, że nowa metoda przyniesie poprawę otrzymywanych modeli struktur i dostarczy informacji o strukturze flipów fazonowych.