

Kwazikryształy są to struktury krystaliczne o aperiodycznym ułożeniu atomów w przestrzeni. Oznacza to, że nie da się opisać ich budowy atomowej za pomocą pojedynczej grupy atomów w postaci tzw. komórki elementarnej, powielonej i regularnie ułożonej w całej przestrzeni. Poprawny opis struktury atomowej kwazikryształów jest więc ciągle wyzwaniem, mimo upływu ponad 30 lat od odkrycia tej nowej rodziny materiałów. Metody znane do opisu klasycznych kryształów (periodycznych kryształów) zawodzą i muszą być stosowane nowe podejścia. W ostatnim czasie zespół opracował nowatorską metodę udokładniania struktur na podstawie zmierzonego obrazu dyfrakcyjnego. Metoda ta zasadniczo różni się od klasycznego podejścia opartego na warunkach Bragga lub Lauego i wykorzystuje rozkłady prawdopodobieństwa położenia atomów względem hipotetycznej sieci referencyjnej, zwane „średnią komórką elementarną”. Modelowanie struktury kwazikryształów sprowadza się do modelowania tej właśnie „średniej komórki elementarnej”. Jest to podejście nowe i niestosowane powszechnie, i ma zalety, które czynią je wyjątkowo interesującym. Celem projektu jest zastosowanie tego podejścia do opisu struktury wybranych kwazikryształów dekalgonalnych (o aperiodycznym ułożeniu atomów w dwuwymiarowych warstwach) i ikozaedrycznych (o aperiodycznym ułożeniu atomów w trzech kierunkach przestrzeni) – ściślej, stworzenie modeli oraz udokładnienie ich w oparciu o zebrane dane doświadczalne. Metoda statystyczna pozwala na skuteczne uwzględnienie wszelkich niedoskonałości struktury atomowej. Chodzi tu przede wszystkim o rozmycie położenia atomów wokół pozycji idealnych wskutek drgań termicznych (fonony) i przeskoki atomów między takimi pozycjami (fazony). Ważnym aspektem naszego projektu jest także poprawne uwzględnienie tzw. rozpraszania wielokrotnego wiązki promieniowania, użytego do badań dyfrakcyjnych próbek krystalicznych. Celem projektu jest zastosowanie tej teorii do przypadków rzeczywistych struktur oraz zbadanie zależności nieporządku strukturalnego od temperatury. Na tej podstawie odpowiemy na pytanie, jaki mechanizm sprawia, że układy aperiodyczne są tak złożone. Nasze badania będą dotyczyły dekalgonalnego kwazikryształu Al-Cu-Rh.

W przypadku analizy struktury atomowej kwazikryształów trójwymiarowych odpowiemy na pytanie o rolę klastra atomowego (zgrupowanie atomów w postaci wielowarstwowych powłok o kształtach wielościanów, typu dwudziestościan, trzydziestościan itp.) w formowaniu się struktury. Udało nam się wyhodować unikalne próbki kryształów, które pozwolą na wysokiej jakości badania strukturalne. Bardzo ciekawym zagadnieniem (i wciąż niedostatecznie zbadanym) jest związek struktury atomowej kwazikryształów z własnościami fizycznymi tych materiałów. Nasze podejście pozwala na stworzenie modelu struktury w przestrzeni rzeczywistej, co można wprost wykorzystać do dyskusji własności fizycznych kwazikryształów. W przypadku układów ikozaedrycznych zbadamy związek budowy klastrowej z nadprzewodnictwem, które zupełnie niedawno zostało odkryte w tej klasie związków. Naszą uwagę skupimy szczególnie na układach z rodziny $ZnMg\{Hf,Tm\}$ oraz $AlZnMg$.

Współpraca w ramach projektu będzie odbywać się z najlepszymi specjalistami z ośrodków zagranicznych i krajowych. Hodowla monokryształów i wstępne pomiary dyfrakcyjne dla kwazikryształu ikozaedrycznego $ZnMgHf$ zostały wykonane w ścisłej współpracy z grupą Prof. H. Takakury z Hokkaido University, Sapporo, Japonia. Wynik modelowania struktury i procesu udokładnienia uzyskany przez nas będzie dyskutowany ze współpracownikami z Japonii. Obliczenia energetyczne stabilności klastrów zostaną przeprowadzone przy udziale Dr. M. Mihalkovica z Instytutu Fizyki, Słowackiej Akademii Nauk. Wstępne badania są przeprowadzone i dają duże nadzieje na pomyślną realizację projektu. Projekt ma bardzo duże znaczenie poznawcze w dziedzinie badań strukturalnych. Doprowadzi on do rozwoju nowych metod dopasowania struktury do zmierzonego obrazu dyfrakcyjnego. Nasze podejście umożliwi szukanie rozwiązania w szerszej klasie struktur o złożonej budowie krystalicznej, zarówno periodycznych, jak i nieperiodycznych, takich jak unikalne kwazikryształy ikozaedryczne i dekalgonalne.